**Universidade de São Paulo
Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”**

**Teores de água e solutos no solo:
desempenho e sensibilidade do modelo Hydrus-1D**

Roque Emmanuel da Costa de Pinho

**Dissertação apresentada para obtenção do título de
Mestre em Ciências. Área de concentração: Física
do Ambiente Agrícola**

**Piracicaba
2009**

Roque Emmanuel da Costa de Pinho
Engenheiro Agrônomo

**Teores de água e solutos no solo:
desempenho e sensibilidade do modelo Hydrus-1D**

Orientador:
Prof. Dr. **JARBAS HONORIO DE MIRANDA**

**Dissertação apresentada para obtenção do título de
Mestre em Ciências. Área de concentração: Física
do Ambiente Agrícola**

Piracicaba
2009

**Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
DIVISÃO DE BIBLIOTECA E DOCUMENTAÇÃO - ESALQ/USP**

Pinho, Roque Emmanuel da Costa de

Teores de água e solutos no solo: desempenho e sensibilidade do modelo Hydrus-1D /
Roque Emmanuel da Costa de Pinho. - - Piracicaba, 2009.
81 p. : il.

Dissertação (Mestrado) - - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", 2009.
Bibliografia.

1. Água no solo 2. Lixiviação no solo 3. Modelagem computacional 4. Nitrato 5. Potássio 6. Química do solo 7. Solutos I. Título

CDD 631.41
P654t

"Permitida a cópia total ou parcial deste documento, desde que citada a fonte – O autor"

Dedico

Aos meus pais, Josuel Costa de Pinho e Lélia Baraúna Pinna da Costa de Pinho, pela confiança, amor e apoio incondicional desde sempre;

Aos meus irmãos, Mário Jorge da Costa de Pinho e Mariana da Costa de Pinho, pela companhia e pelo brilho eterno e incomensurável desse nosso laço; e

A todos os familiares e amigos que participaram da edificação de minha personalidade e conduta, e a todos que contribuíram de alguma maneira para o meu crescimento.

AGRADECIMENTOS

Aos meus familiares;

Ao meu orientador Jarbas Honorio de Miranda pela amizade, orientação e apoio desde o primeiro contato;

À Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz” (ESALQ/USP) e ao Programa de Pós-graduação em Física do Ambiente Agrícola, pela oportunidade de aprendizado;

À Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) pela concessão da bolsa.

Aos professores Luiz Roberto Angelocci, Paulo Leonel Libardi, Quirijn de Jong van Lier e Sergio Oliveira Moraes, pelo conhecimento transmitido, pelos esclarecimentos prestados e pela companhia inspiradora;

Ao professor do Departamento de Ciências Exatas Marcelo Eduardo Alves, e aos funcionários Ana Maria da Silva Maia Michelin e Felipe Gabriel Andino, pela solicitude e auxílio em laboratório;

Aos funcionários do Departamento de Engenharia Rural Angela Márcia Derigi Silva, Francisco Bernardo Dias (Chiquilito), Gilmar Batista Grigolon (Gil) e Luiz Fernando Novello, pelo apoio, amizade e atenção; e

Em especial, por tantos momentos de alegria, aos amigos Adriano Dicesar Martins de Araujo Gonçalves (Presunto), Alexsandro dos Santos Brito (Brito), Alisson Jadavi Pereira da Silva (Perereca), Anderson Luiz de Souza, Angelica Durigon, Elenilson Moreira Franco (Pipira), Gerane Celly Dias Bezerra, Hugo Mota Ferreira Leite, Jaedson Cláudio Anunciato Mota (Jajá), João Alberto Lelis Neto, João Batista Ribeiro da Silva Reis (Espião), Lucas Melo Vellame (Cocão), Luciano Roberto da Silveira (Bonner), Luzimario Lima Pereira (Marujo), Márcio Alves Silva, Marinaldo Ferreira Pinto (Excelência), Neilo Bergamin Moreira (Latorraca), Pablo Javier Ghiberto (Bigo), Renata Araújo Simões (Rê), Rosylaine Aparecida Pereira (Rosy) e Valéria Cristina Rodrigues (Val).

Epígrafe

“Uma mente que se abre para uma nova ideia jamais retorna ao seu tamanho original”.

(Albert Einstein)

SUMÁRIO

RESUMO.....	11
ABSTRACT	13
LISTA DE FIGURAS	15
LISTA DE TABELAS	17
1 INTRODUÇÃO	19
2 DESENVOLVIMENTO	21
2.1 Modelos computacionais.....	21
2.1.2 Informações gerais sobre o modelo Hydrus-1D	22
2.1.2.1 Rotina para dinâmica da água.....	22
2.1.2.2 Rotina para dinâmica de solutos	26
2.1.3 Potássio: importância agronômica e dinâmica no solo.....	28
2.1.4 Nitrato: importância agronômica e dinâmica no solo	29
2.1.5 Estimativa dos parâmetros de transporte dos solutos	32
2.1.6 Índices de avaliação de desempenho do modelo.....	33
2.2 Material e Métodos.....	35
2.2.1 Coleta e caracterização dos solos.....	35
2.2.2 Curvas de distribuição de efluentes	37
2.2.3 Análise química dos efluentes e ajuste dos dados.....	41
2.2.4 Ensaio experimental em coluna segmentada.....	42
2.2.5 Informações computacionais para as simulações	45
2.2.6 Comparação entre valores simulados e observados.....	47
2.2.7 Análise de sensibilidade	48
2.3 Resultados e Discussão	50
2.3.1 Curvas de distribuição de efluentes	50
2.3.2 Teores de potássio e água em coluna segmentada.....	52
2.3.3 Teores de nitrato e água em coluna segmentada	54
2.3.4 Simulações para o deslocamento de potássio e água	56
2.3.5 Simulações para o deslocamento de nitrato e água.....	58
2.3.6 Desempenho do modelo	60

2.3.7 Análise de sensibilidade do modelo.....	62
3 CONCLUSÕES.....	65
REFERÊNCIAS	67
ANEXOS.....	75

RESUMO

Teores de água e solutos no solo: desempenho e sensibilidade do modelo Hydrus-1D

A preocupação com o destino de produtos químicos e água, aplicados ao solo, tem motivado vários pesquisadores a desenvolverem e aplicarem modelos teóricos, objetivando descrever os processos físicos envolvidos no transporte desses produtos no perfil do solo. Nesse sentido, a presente pesquisa teve como objetivo a aplicação do modelo Hydrus-1D para simulação do movimento da água e dos íons nitrato e potássio, em condições de laboratório, utilizando-se para tal colunas segmentadas preenchidas com dois tipos de solo não-saturado (Latossolo Vermelho Amarelo e Nitossolo Vermelho), bem como avaliar o desempenho e sensibilidade do referido modelo. Para a obtenção dos parâmetros de transporte de cada soluto, foram elaboradas as curvas de distribuição de efluentes (Breakthrough Curves – BTC). Os parâmetros de transporte obtidos e as condições de contorno de cada ensaio foram inseridos no modelo Hydrus-1D para realização das simulações. O desempenho do modelo foi avaliado com base nos parâmetros estatísticos: erro máximo, erro absoluto médio, raiz quadrada do erro médio normalizado, coeficiente de massa residual, coeficiente de determinação, eficiência e índice de concordância de Willmott. A sensibilidade do modelo foi avaliada conforme o método proposto por McCuen e Snyder (1986) e a análise foi aplicada aos parâmetros: fluxo de entrada, condutividade hidráulica do solo saturado, teor de água na saturação, alfa e n (parâmetros de ajuste da curva de retenção), coeficiente de distribuição e dispersividade. Os resultados experimentais mostraram que o deslocamento do íon nitrato acompanhou a frente de molhamento e em relação ao potássio, observou-se uma maior retenção nas camadas superficiais da coluna de solo, para ambos os solos. Pôde-se concluir que o modelo Hydrus-1D foi eficiente para simulações de deslocamento de potássio e água para ambos os solos estudados e mediante a utilização do modelo de equilíbrio para o transporte de solutos no solo, o modelo Hydrus-1D não foi eficiente para simular o deslocamento de nitrato, para ambos os solos. Os procedimentos experimentais para estimativa de parâmetros de transporte, como as curvas de distribuição de efluentes, foram suficientes para descrever a movimentação de potássio no solo, gerando informações de entrada precisas para os modelos de simulação. Para a simulação do deslocamento do íon nitrato, concluiu-se que o modelo Hydrus-1D requer um processo experimental mais detalhado, sendo necessária a estimativa de um maior número de parâmetros de transporte. Em relação à análise de sensibilidade, ao simular os teores de potássio e água no solo, o modelo apresentou maior sensibilidade aos parâmetros teor de água na saturação e fluxo de entrada da solução. Tais parâmetros, portanto, precisam ser determinados com maior precisão. Houve baixa sensibilidade aos parâmetros condutividade hidráulica do solo saturado e dispersividade, para ambos os solos estudados.

Palavras-chave: Dinâmica de nitrato e potássio; Deslocamento miscível; Lixiviação; Modelagem computacional

ABSTRACT

Water and solutes contents in soil: performance and sensitivity of Hydrus-1D model

The concern about the fate of chemical products and water, applied to the soil, has been motivating several researchers to develop and apply theoretical models, aiming to describe the physical processes involved in the transport of those products in soil profile. The present research had as objective the application of the model Hydrus-1D for water and solute (nitrate and potassium) simulation profile, in laboratory conditions, using soil columns filled with two types of unsaturated soil (Oxisol (Haplustox) and Hapludox), as well to evaluate the acting and sensitivity of the model. The transport parameters were obtained for each solute by breakthrough curves (BTC's). The transport parameters obtained and the boundary conditions were inserted in the Hydrus-1D model to realize the simulations. The acting of the Hydrus-1D model was evaluated using the statistical indicators: maximum error, mean absolute error, normalized root mean-square error, coefficient of residual mass, determination coefficient, efficiency and Willmott concordance index. The model sensitivity was evaluated by the method proposed by McCuen and Snyder (1986) and applied to the parameters: input flow, soil saturated hydraulic conductivity, water content (saturation point), alpha and n (soil water retention curve parameters), distribution coefficient and dispersivity. The obtained results, experimentally, showed the nitrate displacement following the wetting front and, in relation to the potassium ion, a larger retention was observed at the superficial soil columns layers. Therefore, was possible to conclude that Hydrus-1D model was efficient for both water and potassium displacement simulations, for both studied soils and by the balance model for solute transport in soil, the Hydrus-1D model was not efficient to simulate the nitrate displacement in both soils. The experimental procedures to estimate transport parameters, by the BTC's, were enough to describe the potassium movement in soil, generating input information necessary to the model simulation. To the simulation of the nitrate displacement, was possible to conclude that the model Hydrus-1D requests a more detailed experimental process, being necessary the estimate of a larger number of transport parameters. In relation to the sensitivity analysis of the Hydrus-1D model, when simulated the content of potassium and water at the soil columns, was observed that the model shows more sensitivity about to the parameters: water content (saturation point) and input flow. This parameters need to be estimated with more precision. There was a low sensitivity to the parameters soil saturated hydraulic conductivity and dispersivity for both studied soils.

Keywords: Nitrate and potassium displacement; Miscible displacement; Leaching; Computational modeling

LISTA DE FIGURAS

Figura 1	– Procedimento de saturação ascendente do solo para elaboração das curvas de distribuição de efluentes	38
Figura 2	– Esquema montado em laboratório para “lavagem” dos solos (a) e elaboração das curvas de distribuição de efluentes (b), para a obtenção dos parâmetros de transporte de cada soluto.....	39
Figura 3	– Coleta de efluentes para os dois tipos de solo (a) e sequência de amostras coletadas (b)	40
Figura 4	– Interface gráfica do modelo DISP para os dados de entrada (a) e saída (b)	41
Figura 5	– Esquema ilustrativo montado em laboratório para elaboração dos perfis de teores de água e solutos em coluna segmentada	43
Figura 6	– Detalhes do preenchimento e da montagem da coluna segmentada.....	44
Figura 7	– Curvas de distribuição de efluentes para nitrato (a) e potássio (b), referentes ao LVA.....	50
Figura 8	– Curvas de distribuição de efluentes para nitrato (a) e potássio (b), referentes ao NV	51
Figura 9	– Teores de potássio e água, em três repetições, para o LVA (a) e (b) e para o NV (c) e (d).....	53
Figura 10	– Teores de nitrato e água, em três repetições, para o LVA (a) e (b) e para o NV (c) e (d).....	55
Figura 11	– Simulação dos teores de potássio e água, comparada com a média das três repetições, para o LVA (a) e (b) e para o NV (c) e (d)	57

Figura 12 – Simulação dos teores de nitrato (a) e água (b), comparada com a média das três repetições para o LVA	59
---	----

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 –	Caracterização química dos solos estudados, Latossolo Vermelho Amarelo (LVA) e Nitossolo Vermelho (NV).....	36
Tabela 2 –	Caracterização física dos solos estudados, Latossolo Vermelho Amarelo (LVA) e Nitossolo Vermelho (NV).....	36
Tabela 3 –	Parâmetros da curva de retenção de água para os dois solos estudados, Latossolo Vermelho Amarelo (LVA) e Nitossolo Vermelho (NV)	37
Tabela 4 –	Valores médios de tempo, vazão e fluxo, para as três repetições, utilizados nas simulações de nitrato e potássio, para o Latossolo Vermelho Amarelo (LVA) e para o Nitossolo Vermelho (NV)	46
Tabela 5 –	Parâmetros de transporte do potássio: número de Peclet (P), velocidade da solução nos poros em função de P (v), dispersividade em função de P (λ), coeficiente dispersivo-difusivo (D) e fator de retardamento (R), para os dois solos estudados	51
Tabela 6 –	Parâmetros de transporte do nitrato: número de Peclet (P), velocidade da solução nos poros em função de P (v), dispersividade em função de P (λ), coeficiente dispersivo-difusivo (D) e fator de retardamento (R), para os dois solos estudados	52
Tabela 7 –	Índices estatísticos para comparação entre os valores de teor de água e solutos simulados pelo modelo Hydrus-1D e obtidos experimentalmente, para o Latossolo Vermelho Amarelo (LVA) e para o Nitossolo Vermelho (NV)	61
Tabela 8 –	Sensibilidade relativa do modelo Hydrus-1D aos parâmetros: fluxo de entrada (q), condutividade hidráulica (Ko), teor volumétrico de água	

na saturação (θ_s), e parâmetros de ajuste da curva de retenção (n) e (α), em relação ao teor de água às profundidades de 0,20 m e 0,45 m . 63

Tabela 9 – Sensibilidade relativa do modelo Hydrus-1D aos parâmetros: fluxo de entrada (q), condutividade hidráulica (K_o), teor volumétrico de água na saturação (θ_s), coeficiente de distribuição (K_d) e dispersividade (λ), em relação ao teor de potássio às profundidades de 0,20 m e 0,45 m..... 64

1 INTRODUÇÃO

A conexão entre agricultura irrigada, recursos hídricos e meio ambiente pode ser verificada pela magnitude dos processos de infiltração abaixo do sistema radicular, como é o caso de nitratos, pesticidas e outros elementos químicos tóxicos solúveis, que produzem, ao longo dos anos, a contaminação dos reservatórios de água subterrânea e a salinização gradual resultante do incremento de lâminas de irrigação onde não existe drenagem adequada (WARKENTIN, 2008).

No Brasil, ainda são escassas as pesquisas que avaliam o impacto da atividade agrícola sobre a qualidade das águas subterrâneas, considerando a presença de fertilizantes e agrotóxicos em áreas de agricultura e, em especial, nas áreas de recarga, onde os aquíferos tendem a ser mais vulneráveis. A preocupação com o destino destes produtos químicos aplicados ao solo tem motivado vários pesquisadores a desenvolverem modelos teóricos, objetivando descrever os processos físicos envolvidos no transporte desses produtos no perfil do solo. De acordo com Miranda (2001), em função do grande número de variáveis que envolvem o transporte de solutos no solo, a utilização de modelos de simulação torna-se desejável pela rapidez, precisão e por permitir que um grande número de fatores e efeitos seja contabilizado.

Diante disso, tem sido consenso entre os pesquisadores que o método mais adequado para a utilização dessa técnica de modelagem, seria o ajustamento dos modelos teóricos a dados experimentais de laboratório e de campo, empregando-se programas computacionais. Segundo Van Genuchten e Šimůnek (2004), nas últimas décadas, tem-se observado um considerável progresso na compreensão e descrição de processos matemáticos que regem os fenômenos do movimento da água e transporte de solutos na região não saturada do solo. Surgiu, assim, uma grande variedade de modelos analíticos e numéricos para prever os processos de transferência da água e solutos entre a superfície do solo e o lençol freático. Dentre eles, é possível citar: UNSATCHEM (ŠIMŮNEK et al., 1996), HYDRUS-1D (ŠIMŮNEK et al., 2005) etc. Esses modelos baseiam-se na equação de Richards para o fluxo saturado / não-saturado da água no solo e na equação de convecção-dispersão para o transporte de solutos.

O aumento da utilização dos modelos desenvolvidos, em condições variadas de laboratório e de campo, além de possibilitar melhorias para as rotinas computacionais,

fornece informações acerca dos processos para os quais os modelos podem ser aplicados com confiança. Nesse contexto, a presente pesquisa teve como objetivo a aplicação do modelo Hydrus-1D para simulação dos teores de água, nitrato e potássio, em Latossolo Vermelho Amarelo e Nitossolo Vermelho, acondicionados em colunas preparadas em laboratório, bem como realizar uma análise de desempenho e sensibilidade do referido modelo.

2 DESENVOLVIMENTO

2.1 Modelos computacionais

Agências governamentais e instituições de pesquisa de diferentes países têm conduzido estudos de impacto ambiental e investigações de campo, com o objetivo de determinar os níveis de concentração de resíduos químicos em vários ecossistemas, além de avaliar práticas de manejo que possibilitem minimizar os problemas associados ao uso de substâncias químicas na agricultura; entretanto, por causa do alto custo, tempo e esforço humano envolvidos nesses estudos, torna-se necessária uma alternativa economicamente viável. Dessa forma, considerando-se os avanços computacionais dos últimos anos, os modelos matemáticos surgem também como uma possibilidade viável na avaliação do destino e do comportamento de determinadas substâncias químicas em ambientes geo-hidrológicos.

Países como os Estados Unidos, Canadá, Japão, México, Alemanha, Bélgica e outros, têm desenvolvido vários modelos visando estudar a contaminação do solo e da água subterrânea. Alguns merecem destaque: PRZM (CARSEL et al., 1984), SOLUTE (BELJIN, 1985), GLEAMS (LEONARD et al., 1987), LEACHM (WAGENET e HUTSON, 1989), PESTAFATE (CLEMENTE, 1993), CXTFIT (PARKER e VAN GENUCHTEN, 1984) e WAVE (VANCLOOSTER et al., 1994).

Contudo, apenas alguns modelos mais específicos têm a capacidade de simular o transporte individual dos íons existentes na solução do solo. Os mais populares têm sido os modelos LEACHM (WAGENET e HUTSON, 1989) e UNSATCHEM (ŠIMŮNEK et al., 1996). Mais recentemente foi incorporado este último modelo ao programa HYDRUS-1D (ŠIMŮNEK et al., 2005) pretendendo tornar este modelo numa poderosa ferramenta na previsão das concentrações dos íons no solo, dos efeitos da qualidade de água de rega nos aquíferos e na quantificação do volume de água necessário para recuperar solos sódicos e salinos para níveis mais reduzidos de salinidade e de percentagem de sódio de troca (ŠIMŮNEK; VALOCCHI, 2002 apud GONÇALVES et al., 2005).

Alguns trabalhos científicos já foram desenvolvidos utilizando o programa HYDRUS-1D para simular a dinâmica de água e solutos no solo, como Gonçalves et al. (2005), Rubio et al. (2005), entre outros.

Gonçalves et al. (2006) utilizaram o modelo Hydrus-1D para avaliar o risco de salinização e alcalinização em três lisímetros irrigados com água de diferentes qualidades em um Fluvisso solo eutrófico em Alentejo (Portugal). Com isso, puderam verificar a eficiência do modelo computacional por meio dos resultados, pois as estimativas para o fluxo de água e transporte de solutos permitiram prever valores de condutividade elétrica da água de irrigação que poderiam levar risco de salinização aos solos estudados. Os resultados mostraram a eficiência do *software* na previsão do teor individual de solutos e de água, porém ainda é preciso testá-lo em outras condições.

2.1.2 Informações gerais sobre o modelo Hydrus-1D

O modelo HYDRUS-1D, versão 3.0, desenvolvido por J. Šimunek, M. Th. van Genuchten e M. Sejna, do Departamento de Ciências Ambientais da Universidade de Riverside California, Califórnia, é um pacote de *softwares* para simular o movimento unidimensional de água, calor e solutos em um meio saturado variável. Apesar de ter sua eficiência verificada por diversos casos-teste, seu desempenho ainda precisa ser avaliado em condições específicas de campo e de laboratório.

2.1.2.1 Rotina para dinâmica da água

O movimento uniforme de água, unidimensional, em um meio poroso, parcialmente saturado é descrito por uma forma modificada da Equação de Richards, pela qual não se considera, no fluxo do líquido, os efeitos da fase gasosa e também desconsidera-se o efeito do gradiente térmico no fluxo da água (eq. 1):

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[K \left(\frac{\partial h}{\partial x} + \cos \alpha \right) \right] - S \quad (1)$$

em que:

h = potencial mátrico da água no solo, L;

θ = teor volumétrico de água, $L^3 L^{-3}$;

t = tempo, T;

x = coordenada espacial, L;

S = termo de sumidouro, $L^3 L^{-3} T^{-1}$;

α = ângulo entre a direção do fluxo e o eixo vertical (ou seja, $\alpha = 0^\circ$ para fluxo vertical, 90° para fluxo horizontal e $0^\circ < \alpha < 90^\circ$ para fluxo inclinado);

K = condutividade hidráulica do solo não-saturado, $L T^{-1}$, obtida pela eq. (2):

$$K(h, x) = K_0(x) K_r(h, x) \quad (2)$$

em que:

K_0 = condutividade hidráulica do solo saturado, $L T^{-1}$;

K_r = condutividade hidráulica relativa do solo não-saturado, $L T^{-1}$.

As propriedades hídras de um solo não-saturado, $\theta(h)$ e $K(h)$, da eq.1, são de maneira geral funções não lineares do potencial mátrico. O modelo HYDRUS-1D permite o uso de 5 modelos analíticos para as propriedades hídras: Brooks e Corey (1966); Van Genuchten (1980); Vogel e Císlerová (1988); Kosugi (1996); e Durner (1994).

As funções de retenção de água no solo, $\theta(h)$ e a condutividade hidráulica $K(h)$, estão de acordo com Brooks e Corey (1966) e são dadas pelas eqs. 3 e 4, respectivamente:

$$S_e = \begin{cases} |\alpha h|^{-n} & h < -1/\alpha \\ 1 & h \geq -1/\alpha \end{cases} \quad (3)$$

$$K = K_0 \left(\frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right)^{2/n+2} \quad (4)$$

em que:

θ_r e θ_s = umidade residual e de saturação, respectivamente, $L^3 L^{-3}$;

K_0 = condutividade hidráulica do solo saturado, $L T^{-1}$;

α = valor inverso da entrada de ar, L^{-1} ;

- n = índice de distribuição de tamanho de poros;
 ℓ = parâmetro de conectividade do poro, assumido com valor “2” no estudo original de Brooks e Corey (1966).

Os parâmetros α , n e ℓ no modelo HYDRUS-1D são considerados coeficientes empíricos afetando o formato das funções físico-hídricas. O modelo HYDRUS-1D também implementa uma função físico-hídrica de Van Genuchten (1980), que utilizou o modelo estatístico de distribuição de tamanho de poros de Mualem (1976) para obter uma predição por meio de uma função de condutividade hidráulica não-saturada em termos dos parâmetros de retenção de água no solo (eqs. 5, 6 e 7):

$$\theta(h) = \begin{cases} \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{[1 + (\alpha h)^n]^m} & h < 0 \\ \theta_s & h \geq 0 \end{cases} \quad (5)$$

$$(6)$$

$$K(h) = K_0 Se^\ell \left[1 - \left(1 - Se^{\frac{1}{m}} \right)^m \right]^2 \quad (7)$$

em que, $Se = \left(\frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right)$ e $m = 1 - \frac{1}{n}, n > 1$

Um terceiro grupo de equações implementadas pelo modelo HYDRUS-1D, diz respeito a Vogel e Císlerová (1988) que modificaram as equações de Van Genuchten (1980) para adicionar flexibilidade nas descrições das propriedades físico-hídricas próximas da saturação. A retenção de água no solo $\theta(h)$ e a condutividade hidráulica do solo não-saturado $K(h)$, das funções de Vogel e Císlerová (1988), são dadas pelas eqs. 8 e 9:

$$\theta(h) = \begin{cases} \theta_a + \frac{\theta_m - \theta_a}{\left[1 + (\alpha h)^n\right]^m} & h < h_s \\ \theta_s & h \geq h_s \end{cases} \quad (8)$$

$$K(h) = \begin{cases} K_0 K_r(h) & h \leq h_k \\ K_k + \frac{(h - h_k)(K_s - K_k)}{h_s - h_k} & h_k < h < h_s \\ K_s & h \geq h_s \end{cases} \quad (9)$$

em que, respectivamente, são:

$$K_r = \frac{K_k}{K_s} \left(\frac{S_e}{S_{eK}} \right) \left[\frac{F(\theta_r) - F(\theta)}{F(\theta_r) - F(\theta_{Kr})} \right]^2$$

$$F(\theta) = \left[1 - \left(\frac{\theta - \theta_a}{\theta_m - \theta_a} \right)^{\frac{1}{m}} \right]^m$$

$$S_{eK} = \frac{\theta_K - \theta_r}{\theta_s - \theta_r}$$

As equações acima permitem, para um valor mínimo de capilaridade, não igual a zero, h_s , trocar o parâmetro θ_s da função de Van Genuchten (1980) por um parâmetro fictício e extrapolado, denominado de θ_m , o qual é um pouco superior a θ_s . Enquanto essa mudança de θ_s para θ_m tem pouco ou nenhum efeito na curva de retenção de água no solo, o efeito no formato e valor da função da condutividade hidráulica pode ser considerável, especialmente para solos de textura fina quando o valor de “n” é muito pequeno.

Para aumentar a flexibilidade da expressão analítica, o parâmetro θ_r da função de retenção é substituído por outro parâmetro fictício e extrapolado denominado de θ_a , do qual se pode dizer que: $\theta_a \leq \theta_r$. A aproximação mantém o significado físico de que θ_r e θ_s são quantidades mensuráveis.

A equação assume que a função prevista para condutividade hidráulica é acertada para um valor medido de condutividade hidráulica, $K_k = K(\theta_k)$, para alguns valores de umidade volumétrica, θ_k , menor ou igual ao valor de saturação, ou seja, $\theta_k \leq \theta_s$ e $K_k \leq K_s$ (VOGEL; CÍSLEROVÁ, 1988; LUCKNER et al., 1989).

A versão 3.0 do modelo HYDRUS-1D permite que as propriedades físico-hídricas do solo também possam ser definidas de acordo com Kosugi (1996), que sugere a seguinte distribuição lognormal (eq. 10):

$$S_e = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} = \begin{cases} \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left\{ \frac{\ln(h/\alpha)}{\sqrt{2n}} \right\} & h < 0 \\ 1 & h \geq 0 \end{cases} \quad (10)$$

2.1.2.2 Rotina para dinâmica de solutos

Assume-se que os solutos podem existir em 3 fases: líquida, sólida e gasosa e que os processos de produção e “transformação” podem ser diferentes em cada fase. Assume-se que os solutos são transportados por convecção e dispersão na fase líquida, bem como por difusão na fase gasosa. As equações diferenciais parciais governam o transporte químico em situação de não-equilíbrio dos solutos e envolvem uma sequência de primeira ordem durante o fluxo transiente de água em um meio poroso com conteúdo de água variável, conforme eq. 11:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \theta_{ck}}{\partial t} + \frac{\partial \rho_{sk}}{\partial t} + \frac{\partial a_v g_k}{\partial t} = & \frac{\partial}{\partial x} \left(\theta D_k^w \frac{\partial c_k}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(a_v D_k^g \frac{\partial g_k}{\partial x} \right) - \frac{\partial q c_k}{\partial x} - \\ & - (\mu_{w,k} + \mu'_{w,k}) \theta_{ck} - (\mu_{s,k} + \mu'_{s,k}) \rho_{sk} - (\mu_{g,k} + \mu'_{g,k}) a_v g_k + \mu'_{w,k-1} \theta_{c_{k-1}} \\ & + \mu'_{s,k-1} + \mu'_{g,k-1} a_v g_{k-1} + \gamma_{w,k} \theta + \gamma_{s,k} \rho + \gamma_{g,k} a_v - S c_{r,k} \quad k \in (2, n_s) \end{aligned} \quad (11)$$

A formulação unidimensional é utilizada para simplicidade. Na equação acima, tem-se que: c , s e g são concentrações do soluto nas fases líquida, sólida e gasosa, respectivamente; q é a densidade de fluxo; μ_w , μ_s e μ_g são constantes de primeira ordem para solutos nas fases líquida, sólida e gasosa, respectivamente; μ'_w , μ'_s e μ'_g são similarmente constantes de primeira ordem, promovendo conexões entre reações de espécies de solutos; γ_w , γ_s e γ_g são constantes de ordem zero para as fases líquida, sólida e gasosa, respectivamente; ρ é a densidade do solo; a_v é o volume de ar; S é o termo de sumidouro da equação de fluxo; c_r é a concentração do termo sumidouro; D^w é o coeficiente de dispersão para a fase líquida e D^g é o coeficiente de difusão para a fase gasosa. Os subscritos w , s e g correspondem às fases líquida, sólida e gasosa, respectivamente. O subscrito k representa o número de reações e o n_s , o número de solutos envolvidos nas reações.

O modelo Hydrus-1D pode ser utilizado para simular interações em situações de não-equilíbrio entre a solução (c) e a concentração adsorvida (s), e interações de equilíbrio entre a solução (c) e concentrações de gás (g) do soluto no solo.

A isoterma de equilíbrio de adsorção relacionando “ s ” e “ c ” é descrita por uma equação geral não-linear, da seguinte forma (eq. 12):

$$s = \frac{K_s c^\beta}{1 + \eta c^\beta} \quad (12)$$

em que, K_s , β e η são coeficientes empíricos.

As concentrações “ g ” e “ c ” são expressas por uma equação da forma (eq. 13):

$$g = k_g c \quad (13)$$

em que, K_g é uma constante empírica, geralmente conhecida como constante de Henry.

2.1.3 Potássio: importância agronômica e dinâmica no solo

Dentre os macronutrientes, depois do nitrogênio, o potássio é o elemento requerido em maiores quantidades pelas espécies de plantas cultivadas (NACHTIGALL e VAN RAIJ, 2005). Na planta, está envolvido no metabolismo do nitrogênio, transporte de açúcar, extração, transporte e uso da água e resistência ao estresse (KRAUSS, 2005).

Em razão da elevada demanda por esse nutriente em cultivos agrícolas, estudos sobre o comportamento dele no solo têm se tornado frequentes (ARAUJO et al., 2000; 2007; MIRANDA et al., 2005; KOLAHCHI; JALALI, 2006; MELO et al., 2006; RIVERA et al., 2006). Para Kolahchi e Jalali (2006), uma das justificativas para se estudar a dinâmica do potássio no solo está na sua implicação em relação à eficiência do uso do fertilizante. Além disso, as concentrações do elemento podem aumentar substancialmente no lençol freático pelo processo de lixiviação em áreas usadas para fins agrícolas. Para Gonçalves et al. (2008) a importância que se dá ao nutriente é função da expressividade econômica, visto que o potássio está presente na fertirrigação da maioria das culturas.

Por seu caráter catiônico, o potássio é tanto mais facilmente adsorvido à matriz do solo quanto maior for a capacidade de troca de cátions desse solo (MELO et al., 2006). Quanto à sua mobilidade no solo, via de regra, o potássio se desloca por processo de difusão. No entanto, segundo Malavolta (2005), pode haver fluxo de massa se forem aplicadas doses elevadas do elemento no solo (neste caso, alguma fração imobilizada do elemento é devida à adsorção à matriz do solo).

Em que pese as propriedades químicas do solo serem importantes para determinar a mobilidade do potássio, Rivera et al. (2008) observaram que a distribuição do elemento é significativamente afetada pelas propriedades físico-hídricas do meio e pela taxa de aplicação de água no solo. Alfaro et al. (2004), ao estudarem os fatores que afetam a lixiviação de potássio em diferentes solos, encontraram que as perdas eram dependentes das quantidades do elemento disponível no solo e que, embora estivessem relacionadas ao tipo de solo, a química não era tão importante em controlar a dinâmica da liberação do potássio tanto quanto as propriedades hidráulicas.

Ao avaliarem a dinâmica do potássio em três solos de texturas distintas e em diferentes níveis de umidade, Costa et al. (2009) observaram que o fluxo difusivo foi influenciado pela umidade, aumentando com o acréscimo do conteúdo de água. Ocorre que, segundo estes autores, o aumento do conteúdo volumétrico de água no solo diminui a tortuosidade do caminho de difusão, aumenta a espessura do filme de água no interior dos poros, aumenta o fator de impedância e, conseqüentemente, o fluxo difusivo. De acordo com Oliveira et al. (2004), sempre que o solo seca, a difusão do potássio é diminuída.

Em experimento de deslocamento miscível em um Latossolo Vermelho, Rivera et al. (2006) concluíram que há interação do potássio com a matriz do solo, uma vez que a distribuição do elemento ficou restrita às camadas superficiais do bulbo úmido, fato confirmado pelo elevado coeficiente de retardamento ($R = 4,73$). Resultados obtidos por outros autores, também em Latossolo, corroboram a tese da interação potássio-micela do solo (MIRANDA et al., 2005; MELO et al., 2006; ARAÚJO et al., 2007; GONÇALVES et al., 2008).

2.1.4 Nitrato: importância agronômica e dinâmica no solo

O nitrogênio, nutriente essencial à produção vegetal, representa o elemento mineral requerido em maiores quantidades pelas plantas, sendo a sua disponibilidade frequentemente limitante ao crescimento. Além disso, faz parte da estrutura de um grande número de moléculas importantes para as células, como aminoácidos, proteínas estruturais e enzimáticas, ácidos nucleicos (DNA, RNA) e clorofilas. O processo pelo qual o elemento é capturado da atmosfera em estado gasoso (N_2) e convertido em formas úteis para outros processos químicos, pode conduzir a alguns compostos, dentre eles o nitrato (NO_3^-). Embora seja útil, o nitrato sobressai dentre os componentes solúveis que podem levar à contaminação das águas subterrâneas e, assim, apresentar riscos à saúde humana. O potencial de poluição é devido, segundo Hillel (2004), à sua alta solubilidade e baixa retenção pelo complexo de troca do solo.

Por se tratar de uma fonte com potencial elevado de poluição, o entendimento quanto à dinâmica do nitrato no solo tornou-se objeto de pesquisa tanto no Brasil quanto em outras regiões do mundo (COSTA et al., 1999; DYNIA; CAMARGO, 1999;

DINYA, 2000; OLIVEIRA et al., 2000; RASIAH et al., 2003; ARAÚJO et al., 2004; ALCÂNTARA; CAMARGO, 2005; ROSSI et al., 2007; ANAMI et al., 2008; CHESNAUX; ALLEN, 2008; PIOVESAN et al., 2009).

Sabe-se que a mobilidade de um íon no solo depende, além de suas propriedades físicas e químicas, das propriedades inerentes à fração coloidal do solo (FERREIRA et al., 2006). Do ponto de vista físico, Chesnaux e Allen (2008), ao simularem o perfil de lixiviação de nitrato em uma zona vadoza altamente permeável, concluíram que, para o mesmo solo e mesma posição do lençol freático, a concentração máxima do elemento ao atingir o lençol freático depende das propriedades do aquífero, ou seja, a heterogeneidade do solo e a distribuição de suas partículas por tamanho têm um impacto significativo sobre o comportamento da lixiviação do nitrato na zona aerada acima do lençol freático.

Assim, por exemplo, quanto mais fino for o material constituinte do solo, maior será sua capacidade de retenção de água e, por conseguinte, maior a diluição do nitrato na infiltração quando encontrar água capilar durante o processo de lixiviação. Portanto, pelo fato de o conteúdo de água no equilíbrio ser menor quando o lençol freático é mais profundo, a diluição do nitrato torna-se menos importante. É por essa razão que os valores máximos de teor de nitrato são obtidos quando o lençol freático é mais profundo (CHESNAUX; ALLEN, 2008).

Quimicamente, por se tratar de um ânion, o nitrato é fortemente repellido pelas cargas negativas dos coloides do solo, daí a lixiviação ser o principal processo envolvido na perda de NO_3^- na maioria dos solos (PIOVESAN et al., 2009). Alcântara e Camargo (2005) relatam que há diferença entre a adsorção de nitrato ao solo em relação à adsorção de outros ânions pois, para o nitrato, não há adsorção específica, ou seja, a adsorção é eletrostática e, portanto, dependente exclusivamente das cargas do solo.

A propósito, as cargas elétricas nos coloides do solo podem ter duas origens: 1) na estrutura do mineral, em que se desenvolvem na superfície sólida da matriz do solo quando há, na formação do mineral, substituição isomórfica, o que confere a estas cargas caráter permanente e independente das condições do meio; 2) nas extremidades dos bordos do mineral e grupos funcionais, em que os grupos OH podem

dissociar-se em meio básico, gerando carga negativa na superfície do mineral ou, por outro lado, unir-se a íons H^+ em meio ácido para dar origem a cargas positivas. Portanto, nestas circunstâncias, as cargas podem mudar dependendo das variações do pH do meio em que a matriz do solo está inserida (AMARO FILHO et al., 2008).

Weber et al. (2005) estimaram as cargas elétricas dos horizontes A e B de Latossolos e de Nitossolo da região norte do Estado de São Paulo e concluíram que, em todos os solos, na superfície (0-0,2 m), predominam cargas negativas. Em subsuperfície, somente os Latossolos apresentam carga líquida positiva. Com base nestes resultados e na teoria exposta anteriormente, pode-se inferir que o nitrato seja facilmente deslocado na camada superficial de ambas as classes de solo e retido na camada subsuperficial dos Latossolos.

Entretanto, em que pesem as informações anteriores, Oliveira et al. (2001) encontraram perdas razoáveis de nitrato em Latossolo. Araújo et al. (2004), em um Latossolo muito argiloso, com teores elevados de óxidos de ferro e gibbsita, ao aplicarem dose normal de adubo nitrogenado (200 kg de ureia ha^{-1}) constataram lixiviação do elemento, fato que os levou a sugerirem cuidados no manejo da adubação nitrogenada em função das implicações econômicas e ambientais envolvidas. Potencial de lixiviação de nitrato, também em Latossolo argiloso com predomínio de caulinita e gibbsita na fração argila, foi confirmado por Piovesan et al. (2009).

Pelo exposto, o entendimento do processo de transporte de nitrato é fundamental para o estabelecimento de práticas de manejo que controlem o seu movimento no solo. Para Nielsen e Biggar (1961), o conhecimento da dinâmica de solutos não permite apenas a determinação de como eles se deslocam no solo, mas também fornece uma explicação física para o fenômeno que ocorre na lixiviação, na troca e na adsorção de íons à medida que se deslocam no solo.

Para que haja uma melhor compreensão de como ocorre a relação solo-soluto, é necessário estimar alguns parâmetros de transporte, a saber: velocidade da água nos poros, fator de retardo, coeficiente de dispersão e dispersividade (Miranda et al., 2005; Rossi et al., 2007). Anami et al. (2008) deram uma interpretação para o deslocamento do nitrato em um Latossolo Vermelho a partir do baixo coeficiente de dispersão (0,11168) e fator de retardo 0,87372 ($R^2 = 0,9742$). Segundo Corrêa et al. (1999),

valores para o coeficiente de retardo próximos à unidade indicam baixa interação solo-soluto.

2.1.5 Estimativa dos parâmetros de transporte dos solutos

A água, ao se mover no perfil de solo, leva consigo parte dos solutos que compõem a solução do solo. Outra parte deles é deixada para trás, na medida em que os sais são adsorvidos à micela do solo ou absorvidos pelas plantas. Ao mesmo tempo, os solutos reagem entre si e interagem com a matriz sólida, envolvendo uma série de processos físicos e químicos interrelacionados. Tais interações são fortemente influenciadas pela acidez, temperatura, potencial de oxidação-redução e composição e concentração da solução do solo (HILLEL, 2004).

O movimento de solutos no solo não acontece somente por fluxo de massa. Pode haver deslocamento por difusão, em resposta a gradientes de concentração. Embora o fluxo de água no solo seja descrito na maioria das vezes pela equação de Darcy, essa descrição se torna inadequada quando o interesse está em definir os processos químicos dos solutos dissolvidos sob regime transiente, já que, neste caso, em virtude das diferenças no fluxo de massa, na difusão e nos processos químicos que ocorrem em distintas sequências de poros, os caminhos que cada íon irá percorrer não são os mesmos (NIELSEN; BIGGAR, 1961).

Para melhor compreensão de como se comportam os solutos no solo, no que tange à sua dinâmica, é necessário que alguns parâmetros de transporte sejam devidamente estabelecidos. Há alguns trabalhos que discorrem sobre os procedimentos experimentais de como obtê-los e a interpretação que deve ser dada para tais parâmetros. Uma série de artigos de Donald Rodney Nielsen e James Wellington Biggar (NIELSEN; BIGGAR, 1961; 1963; BIGGAR; NIELSEN, 1962a; 1962b; 1963) é clássica no que concerne aos estudos de deslocamento miscível em solos.

Como a interface entre dois fluidos que se deslocam no solo não pode ser visualizada, Nielsen e Biggar (1961) abordam que a mudança na concentração do fluido deslocador (fluido adicionado para deslocar outro pré-existente no meio poroso), medida no efluente, deve ser considerada como sendo a interface entre os dois fluidos emergentes do solo. A partir de como ocorre a mudança de concentração, é possível

obter informações sobre as características do meio poroso e sobre o comportamento do fluido que nele se move. Neste mesmo trabalho, os autores propuseram uma curva que relaciona C/C_0 em função de VP (em que C é a concentração do soluto no efluente, C_0 é a concentração do soluto no fluido deslocador e VP o número de volume de poros). Esta curva é conhecida como “*Breakthrough Curve*” (NIELSEN; BIGGAR, 1962a).

A relação C/C_0 no efluente tem valor zero no tempo inicial da adição do fluido deslocador. Com o passar do tempo, pode alcançar valor unitário, o que indica completa remoção do fluido deslocado. Segundo Nielsen e Biggar (1961), para a maioria dos casos, e para íons que não são adsorvidos à micela do solo, essa relação atinge o valor unitário após terem passado dois volumes de poros na coluna de eluição.

Os parâmetros usualmente obtidos para a compreensão dos processos envolvidos no deslocamento de um íon no solo são: a velocidade da água nos poros, o fator de retardamento, o coeficiente de dispersão e a dispersividade. De acordo com Rossi et al. (2007), o método mais comum de calculá-los é por meio do ajuste dos modelos teóricos aos dados experimentais obtidos em laboratório; para o ajuste são empregados programas computacionais. Conhecidos estes parâmetros para o soluto e o meio poroso, podem ser estimados os valores da relação C/C_0 para distintos valores de VP e, então, construída a curva teórica de eluição.

2.1.6 Índices de avaliação de desempenho do modelo

Quando se pretende substituir um dado sistema de avaliação convencional por outro que promova melhoria em relação ao substituído, tem-se a confiabilidade no novo sistema como um aspecto de grande importância (SENTELHAS et al., 1997). Esse é um ponto fundamental a ser observado, uma vez que os dados obtidos no novo modelo devem ser semelhantes aos gerados pelo substituído.

No caso da avaliação de um modelo de simulação, Kolahchi e Jalali (2006) comentam que, embora a resposta dele possa ser visualmente quantificada, algumas ferramentas devem ser utilizadas para análise do desempenho.

De acordo com Legates e McCabe Jr. (1999), as avaliações de desempenho de modelos usam uma quantidade de estatísticas e técnicas. Geralmente a qualidade do ajuste das medidas de erro, para avaliar a capacidade de um modelo em simular a

realidade, é incluída nestas ferramentas, cujos índices, que variam de zero à unidade, são os coeficientes de correlação (r) e de determinação (R^2). Estes dois parâmetros descrevem o grau de colinearidade entre as variáveis observadas experimentalmente e as simuladas pelo modelo e são frequentemente apresentados em textos básicos de estatística e, por conseguinte, são bastante conhecidos por todos os cientistas. Em que pese o uso difundido do r e R^2 , como índices de avaliação, estes apresentam muitas limitações que os tornam medidas “pobres” como avaliadores, ou seja, fornecem apenas uma visão parcial da eficácia de um modelo.

O coeficiente de determinação é limitado na medida em que padroniza as diferenças entre as médias observadas e os desvios previstos e avalia apenas as relações lineares entre as variáveis. Desse modo, o R^2 não é sensível às diferenças aditivas e proporcionais entre as observações experimentais e as simulações do modelo. Em adição a estas limitações, há também o fato de o R^2 ser mais sensível aos “outliers” do que às observações próximas ao valor médio (LEGATES; McCABE JR., 1999).

Dadas às limitações expostas para os índices tradicionalmente utilizados, alguns índices estatísticos, calculados por modelos que não exigem distribuição normal de probabilidade para os resultados das medições, foram utilizados para evidenciar o comportamento de instrumentos, modelos de predição ou coisa que o valha. Os mais comuns são: índice de concordância de Willmott (d); erro máximo (E_{max}); erro absoluto médio (EAM); raiz quadrada do erro médio normalizado ($RQEM$); coeficiente de determinação (CD); coeficiente de massa residual (CMR) e eficiência (E). Os índices citados são considerados robustos, com exceção para o índice d de Willmott, que não se enquadra nessa classificação. Informações sobre estes índices e suas aplicações podem ser encontradas em Willmott et al. (1985), Zacharias et al. (1996), Sentelhas et al. (1997), Legates e McCabe Jr. (1999), Kolahchi e Jalali (2006), Pereira et al. (2008) e Brito et al. (2009).

Para a análise do desempenho de um modelo de simulação em relação aos dados obtidos experimentalmente, o índice de Willmott, que varia de zero a um, indica que quanto mais próximo seu valor esteja da unidade melhor é a concordância entre os dados observados e simulados (LEGATES; McCABE JR., 1999). Segundo Kolahchi e

Jalali (2006), o valor de “RQEM” mostra o quanto a simulação subestima ou superestima a medida em relação ao valor obtido experimentalmente. O “CD” demonstra a relação entre a dispersão dos valores simulados e o valor médio das medições. O valor “E” compara os valores simulados com o valor médio das medidas experimentais. Um valor negativo para “E” indica que o valor médio obtido experimentalmente dá uma melhor estimativa para a variável do que o valor simulado. O “CMR” é uma medida da tendência do modelo em subestimar ou superestimar as medidas. Valores positivos de “CMR” indicam que o modelo subestima as medidas e, por outro lado, quando negativos, o modelo as superestima. Brito et al. (2009) informam que quando há uma perfeita concordância entre os pares de valores obtidos por dois modos distintos tem-se que $d = CD = E = 1$ e $E_{max} = EAM = RQEM = CMR = 0$.

2.2 Material e Métodos

O trabalho foi desenvolvido no Laboratório de Física do Solo, do Departamento de Engenharia Rural, da Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz” - ESALQ/USP, em três etapas: 1) coleta de dados relativos aos solos em laboratório: parâmetros de entrada do modelo, elaboração das curvas de distribuição de efluentes e aplicação das soluções de nitrato e potássio em colunas segmentadas; 2) realização das simulações dos teores de solutos e água no modelo Hydrus-1D; e 3) realização da análise de sensibilidade do modelo.

2.2.1 Coleta e caracterização dos solos

Os solos foram coletados na camada de 0 a 0,30 m de profundidade, no município de Piracicaba-SP, em um Latossolo Vermelho Amarelo (LVA) e em um Nitossolo Vermelho (NV), classificados conforme EMBRAPA (2006). Em seguida, foram destorroados, secos ao ar e peneirados em uma malha de 2 mm, para realização das análises granulométricas. Amostras de cada tipo de solo foram coletadas para a realização de uma análise química, a fim de se prover informações sobre as condições iniciais do solo, como, por exemplo, valor do pH e das concentrações de alguns íons (Tabela 1).

Tabela 1 – Caracterização química dos solos estudados, Latossolo Vermelho Amarelo (LVA) e Nitossolo Vermelho (NV)

Parâmetros	LVA	NV
pH (CaCl ₂)	4,6	5,3
M.O. (g dm ⁻³)	11	15
P (mg dm ⁻³)	16	8
K (mmol _c dm ⁻³)	1	4,4
Ca (mmol _c dm ⁻³)	17	42
Mg (mmol _c dm ⁻³)	9	20
H+Al (mmol _c dm ⁻³)	25	28
Al (mmol _c dm ⁻³)	2	0
SB (mmol _c dm ⁻³)	27	66
CTC (mmol _c dm ⁻³)	52	94
Sat. Bases (V %)	52	70
Sat. Alumínio (m %)	7	0
S-SO ₄ (mg dm ⁻³)	4	12

A determinação inicial dos elementos químicos é fundamental, em função da movimentação conjunta dos íons que já estavam presentes no solo e dos que foram aplicados em cada solução.

Tabela 2 – Caracterização física dos solos estudados, Latossolo Vermelho Amarelo (LVA) e Nitossolo Vermelho (NV)

Características	LVA	NV
Granulometria (g kg ⁻¹)		
Areia grossa	290	90
Areia fina	520	190
Silte	27	318
Argila	163	402
Classe Textural*	Franco Arenosa	Argilosa
Densidade do solo (kg dm ⁻³)	1,50	1,35
Densidade de partículas (kg dm ⁻³)	2,60	2,73
Porosidade (dm ³ dm ⁻³)	42,3	50,5
K _o (cm h ⁻¹)	9,522	7,814

*Classificação segundo USDA

Como esperado, por meio da análise granulométrica, foram encontradas texturas distintas, contrastantes e representativas para cada tipo de solo (Tabela 2). Essa distinção se faz necessária para a percepção das diferentes movimentações de cada soluto aplicado, causadas pela variação textural do solo e pela atividade de sua matriz.

Amostras de solos com estrutura deformada foram levadas ao laboratório para elaboração das curvas de retenção de água. No total, foram estabelecidos nove pontos para cada curva, sendo os valores de umidade gravimétrica para as tensões de 1, 2, 4, e 10 kPa obtidos na mesa de tensão, e os valores para as tensões de 30, 50, 100, 500 e 1500 kPa nas câmaras de Richards (KLUTE, 1986). Os dados foram ajustados ao modelo de Van Genuchten (1980), assumindo a restrição de que o parâmetro $m = 1 - 1/n$, $n > 1$ (Tabela 3).

Tabela 3 – Parâmetros da curva de retenção de água para os dois solos estudados, Latossolo Vermelho Amarelo (LVA) e Nitossolo Vermelho (NV)

Tipo de solo	Parâmetros da curva de retenção (Van Genuchten, 1980)*				
	θ_r	θ_s	α	n	r^2
	$(m^3 m^{-3})$				
LVA	0,025	0,423	0,0343	1,4634	0,964
NV	0,068	0,505	0,0301	1,1763	0,960

* $m = 1 - 1/n$, $n > 1$

2.2.2 Curvas de distribuição de efluentes

Para a obtenção dos parâmetros de transporte dos solutos para cada tipo de solo, foram feitas em laboratório as curvas de distribuição de efluentes, conhecidas como “*Breakthrough Curves*”, que fornecem informações aos modelos teóricos, permitindo as simulações do movimento de solutos no solo. Os parâmetros de transporte determinados foram: número de Peclet (P), coeficiente de dispersão (D), dispersividade em função de P (λ), velocidade da água nos poros em função do P (v) e fator de retardamento (R).

Para esta determinação, foi feito o preenchimento de colunas de PVC com o material dos solos, em camadas constantes, equivalentes e homogêneas, com o

objetivo de proporcionar uniformidade e homogeneidade ao longo da coluna, tentando-se evitar a compactação da massa de solo ou a formação de canais preferenciais. A coluna utilizada tem as seguintes dimensões: 0,23 m de altura e 0,049 m de diâmetro, o que corresponde a um volume de $4,337 \times 10^{-4} \text{ m}^3$. Entretanto, o preenchimento com solo é feito somente até a altura de 0,20 m da coluna, gerando um volume de solo de $3,771 \times 10^{-4} \text{ m}^3$. Em sua parte superior, foi colocado um dreno para que se mantivesse, ao longo do processo, uma carga hidráulica constante de 0,01 m, e em sua parte inferior foram colocados um círculo de manta sintética e uma grade metálica, fixados por um “cap”.

Para o início do teste, as colunas foram saturadas com água deionizada de maneira lenta e ascendente, por capilaridade (Figura 1). As colunas foram colocadas inicialmente inclinadas dentro de um balde, onde se adicionou água deionizada por gotejamento, junto às suas paredes. Este procedimento teve por objetivo evitar a formação e permanência de bolhas de ar no solo, o que impossibilitaria sua saturação. Depois de um tempo, as colunas foram então posicionadas verticalmente e o gotejamento continuado até que o nível da água no balde atingisse cerca de 2/3 da altura da coluna de solo. Depois disso, o conjunto permaneceu em repouso por cerca de 24 horas para a saturação.

Figura 1 – Procedimento de saturação ascendente do solo para elaboração das curvas de distribuição de efluentes

Após esse período, iniciou-se o processo de “lavagem” do solo, o qual consiste na passagem de água deionizada através da coluna durante um período mínimo de 24 horas para que a maioria dos íons, presentes no complexo de troca e facilmente solúveis, seja dissolvida e removida pela água percolante. Este processo demanda

intervalos de tempo distintos para cada tipo de solo. Em geral, os solos de textura argilosa permanecem mais tempo sob lavagem que os solos de textura arenosa. Em razão desta variação, o processo era conduzido, para cada solo, com o acompanhamento frequente da condutividade elétrica (CE). Desta forma, o final da “lavagem” era sinalizado pela igualdade entre os valores de CE da água deionizada aplicada na superfície do solo e da amostra coletada abaixo da coluna (Figura 2).

(a)

(b)

Figura 2 – Esquema montado em laboratório para “lavagem” dos solos (a) e elaboração das curvas de distribuição de efluentes (b), para a obtenção dos parâmetros de transporte de cada soluto

Com o esquema montado dessa maneira, as colunas se comportaram como permeâmetros de carga constante, sendo possível, portanto, determinar a condutividade hidráulica dos solos saturados (K_0), por meio da equação de Darcy (eq. 14):

$$q = - K_0 \cdot \text{grad } \Psi \quad (14)$$

em que:

q = densidade de fluxo, $L^3 L^{-2} T^{-1}$;

K_0 = condutividade hidráulica na saturação, $L T^{-1}$; e

$\text{grad } \Psi$ = gradiente de potencial total, $L L^{-1}$.

Em seguida, foi dado início à passagem das soluções de nitrato (50 mg L^{-1}) e potássio (2000 mg L^{-1}) através das colunas. A partir desse instante, os efluentes foram coletados sequencialmente em frascos de acrílico (Figura 3).

(a)

(b)

Figura 3 – Coleta de efluentes para os dois tipos de solo (a) e sequência de amostras coletadas (b)

Cada frasco coletado representa uma pequena fração do volume total de poros do solo na coluna (VP). Os volumes de poros foram calculados em função do volume da coluna preenchido por solo ($3,771 \times 10^{-4} \text{ m}^3$) e da porosidade de cada solo utilizado, em média 52% para o NV e 46% para LVA (eq. 15). O volume coletado de efluente em cada frasco foi de 15 mL, que representava uma fração de 0,076 e 0,086 VP para o NV e LVA, respectivamente.

$$1 \text{ VP} = \alpha V \quad (15)$$

em que:

VP = volume de poros, L^3 ;

α = porosidade do solo, decimal; e

V = volume da coluna preenchido por solo, L^3 .

Para o acompanhamento das concentrações coletadas em cada ensaio e sinalização do momento em que a concentração relativa atingisse o seu máximo, foram utilizados equipamentos compactos de leitura rápida dos íons nitrato e potássio do modelo Horiba.

2.2.3 Análise química dos efluentes e ajuste dos dados

As análises químicas dos efluentes coletados foram realizadas no Laboratório de Química do Departamento de Ciências Exatas, da Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”. As determinações de potássio foram realizadas por espectrofotometria de chama e as de nitrato por colorimetria.

A obtenção dos parâmetros de transporte dos solutos, referentes às curvas de distribuição de efluentes, foi feita por meio do ajuste dos dados obtidos em laboratório, utilizando-se o modelo DISP, versão 1.1 (BORGES JÚNIOR; FERREIRA, 2002). O modelo permite a entrada dos valores obtidos em laboratório: concentração relativa (ce) em função do volume de poros (VP), umidade volumétrica ($\text{cm}^3 \text{cm}^{-3}$), densidade do solo (g cm^{-3}), densidade de fluxo (cm h^{-1}) e comprimento da coluna de solo (cm).

Os parâmetros de saída do modelo são: número de Peclet (P), fator de retardamento (R), difusividade (D), soma dos quadrados dos resíduos (Rs) e o coeficiente de determinação (R^2).

Figura 4 – Interface gráfica do modelo DISP para os dados de entrada (a) e saída (b)

O primeiro deles, número de Peclet (P), é adimensional e relaciona a velocidade de advecção de um fluxo com sua velocidade de difusão, considerando o comprimento da coluna de solo, por meio da eq. 16:

$$P = \frac{v L}{D} \quad (16)$$

em que:

v = velocidade da água nos poros, $L T^{-1}$;

L = comprimento da coluna de solo, L ; e

D = difusividade da solução, $L^2 T^{-1}$.

O fator de retardamento (R), segundo Valocchi (1984), representa a defasagem entre a velocidade de avanço do soluto e a velocidade de avanço da frente de molhamento da solução percolante, representando, portanto, a interação entre o soluto e a fase sólida do solo. Este processo é descrito pela eq. 17:

$$R = 1 + \frac{\rho k}{\theta} \quad (17)$$

em que:

R = fator de retardamento, adimensional;

ρ = densidade do solo, $M L^{-3}$;

k = coeficiente empírico de distribuição (igual a zero quando não há interação entre o soluto e o solo), adimensional; e

θ = conteúdo volumétrico de água, $L^3 L^{-3}$.

2.2.4 Ensaio experimental em coluna segmentada

Um ensaio experimental foi montado em laboratório a fim de representar a situação simulada pelo programa, em que a vazão de entrada e a concentração de aplicação de solutos fossem conhecidas e se pudesse analisar cada camada de solo separadamente em determinado instante. Para tanto, foi utilizada uma coluna segmentada de acrílico (Figura 5), que recebeu, em seu interior, um tratamento com areia, com o objetivo de aumentar sua rugosidade e evitar possíveis fluxos preferenciais durante os ensaios.

Figura 5 – Esquema ilustrativo montado em laboratório para elaboração dos perfis de teores de água e solutos em coluna segmentada

A coluna utilizada apresenta as seguintes dimensões: 0,75 m de altura e 0,05 m de diâmetro, estando dividida em 11 anéis, 10 com 0,07 m de altura e o anel superior com apenas 0,05 m. Este anel superior tem a função de proteção no momento da aplicação e também de auxiliar na verificação da formação de uma possível lâmina da solução aplicada. Ocorre formação de lâmina, principalmente, se a vazão estiver alta ou por causa de variações da densidade global do solo ao longo da coluna, que podem estar relacionadas à forma inadequada de preenchimento com solo ou à própria disposição vertical dos anéis. Quando constatada a formação de lâmina, o ensaio era interrompido e a coluna desmontada, sendo realizado outro ensaio em substituição.

A coluna foi preenchida de forma homogênea e uniforme, do décimo ao primeiro anel, e uma fita adesiva foi utilizada para vedar e unir um anel ao outro. Sobre a superfície do solo, no primeiro anel, foi colocada uma manta acrílica de forma circular, de área igual a área da seção interna da coluna, para que não ocorresse selamento da camada superficial, devido ao gotejamento da solução, e para melhorar a distribuição de aplicação sobre a superfície do solo (Figura 6). Todo o material (coluna vazia, manta acrílica e as fitas adesivas) foi pesado antes e depois do preenchimento da coluna, para obtenção da densidade do solo.

Foram utilizadas soluções de 50 mg L^{-1} de NO_3^- e 2000 mg L^{-1} de K^+ . A vazão de aplicação das soluções esteve em torno de $150 \text{ cm}^3 \text{ h}^{-1}$, para o LVA, e de $100 \text{ cm}^3 \text{ h}^{-1}$, para o NV (Tabela 4). Estes valores demonstraram-se satisfatórios porque, para as condições de densidade dos solos nas colunas, não ocasionaram formação de lâmina de água e nem prolongaram em demasia o tempo dos ensaios. O tempo total de aplicação compreende desde o início do gotejamento com cada solução até a chegada da frente de molhamento à metade do oitavo anel. Esta medida foi adotada com a finalidade de que a solução não chegasse ao final da coluna e de que houvesse três condições distintas de umidade.

Figura 6 – Detalhes do preenchimento e da montagem da coluna segmentada

O tempo total de aplicação compreende desde o início do gotejamento com cada solução até a chegada da frente de molhamento à metade do oitavo anel. Esta medida foi adotada com a finalidade de que a solução não chegasse ao final da coluna e de que houvesse três condições distintas de umidade. Em geral, estas condições estavam distribuídas da seguinte forma: solo saturado, nos primeiros anéis; fase de transição, sétimo e oitavo anéis; e solo seco, nono e décimo anéis. Depois de decorrido esse tempo de aplicação, relativo para cada tipo de solo, os anéis foram desmontados rapidamente e separados em recipientes numerados. Em seguida, de cada recipiente, foi retirada uma pequena amostra de solo para determinação do conteúdo de água e foi feita a pasta de saturação, determinando-se novamente o conteúdo de água. Por fim,

foi determinado o teor dos solutos para cada anel, permitindo a elaboração de perfis desses valores ao longo de toda a coluna de solo.

O teor de água foi obtido pelo método gravimétrico, pesando as amostras de solo de cada anel, secando-as em estufa a 110 °C por 24 horas e pesando-as novamente. Para obtenção das concentrações de cada soluto, foram analisadas as soluções provenientes da pasta de saturação de cada anel, retiradas por sucção. As análises foram realizadas no Laboratório de Química do Departamento de Ciências Exatas da ESALQ/USP. Os valores encontrados foram então corrigidos, por meio do fator de diluição da pasta, para que ficassem em função do conteúdo de água após o término da aplicação da solução, conforme a eq. (18):

$$C_{\text{ion corrigida}} = \frac{U_{\text{pasta}} \cdot C_{\text{ion}}}{U_{\text{anel}}} \quad (18)$$

em que:

$C_{\text{ion corrigida}}$ - concentração corrigida dos íons nitrato ou potássio, em função do conteúdo de água após o término da aplicação da solução, mg L^{-1} ;

U_{pasta} - conteúdo de água, com base em massa, da pasta utilizada para a extração da solução do solo, kg kg^{-1} ;

C_{ion} - concentração dos íons nitrato ou potássio, determinado na extração da solução, mg L^{-1} ; e

U_{anel} - teor de água do solo, com base em massa, em cada anel da coluna, após o término da aplicação da solução, kg kg^{-1} .

2.2.5 Informações computacionais para as simulações

Para a realização das simulações, foram inseridos no programa os dados relativos a cada ensaio e todos os parâmetros obtidos experimentalmente, a partir das curvas de distribuição de efluentes. Assume-se, portanto, que por meio desses parâmetros é possível realizar as simulações no modelo para os dois solutos, nos dois tipos de solo estudados. Apesar da subdivisão da coluna em dez anéis, de 0,07 m cada, optou-se por aumentar o detalhamento espacial no modelo, adotando-se variações de

0,01 m para os cálculos. Em relação ao tempo, foram mantidos valores iguais para todas as simulações: passo de tempo inicial de 0,0024 h, com mínimo de 0,000024 h e máximo de 24 h. O tempo inicial foi considerado como tempo zero e o tempo final como o tempo decorrido até a finalização de cada ensaio, indicado pela chegada da frente de molhamento à metade do oitavo anel (Tabela 4). Considerando a área da seção da coluna ($1,963 \times 10^{-3} \text{ m}^2$), e sabendo-se a vazão de aplicação das soluções, pôde-se determinar o fluxo de entrada para cada simulação.

Tabela 4 – Valores médios de tempo, vazão e fluxo, para as três repetições, utilizados nas simulações de nitrato e potássio, para o Latossolo Vermelho Amarelo (LVA) e para o Nitossolo Vermelho (NV)

Íon	Solo	T (h)	Q ($\text{cm}^3 \text{ h}^{-1}$)	q (cm h^{-1})
K^+	LVA	2,41	163	8,3
	NV	3,87	100	5,1
NO_3^-	LVA	2,99	135	6,9
	NV	4,17	100	5,1

O modelo das propriedades hidráulicas adotado foi o de Van Genuchten (1980), sem considerar o fenômeno de histerese. Para as condições de contorno das colunas, foi adotado fluxo constante como condição superior e frente de infiltração ($h = 0$) como inferior, estando as condições iniciais do solo determinadas pelos conteúdos de água. O valor do fluxo na superfície do solo variou de acordo com cada ensaio e foi utilizado o valor médio das três repetições, para cada soluto aplicado e para cada solo utilizado. Para o transporte de solutos, o modelo de equilíbrio foi adotado em todas as simulações, considerando uma duração de pulso sempre superior ao tempo total de aplicação dos solutos, o que representa aplicação contínua da mesma concentração durante todo o ensaio. As condições de contorno para o transporte de solutos foram: superior, concentração do fluxo de entrada; inferior, gradiente de concentração zero; e condições iniciais baseadas nas concentrações tomadas na fase líquida.

Por meio do editor gráfico, foram atribuídos valores iniciais de temperatura, conteúdo de água e teor de solutos na coluna. A temperatura foi fixada em 25°C para

todas as simulações. Para a umidade inicial, foi considerado o valor de umidade volumétrica residual das colunas, exceto em um caso, para o NV, em que um valor ligeiramente superior precisou ser utilizado para a simulação. A concentração inicial de solutos foi adotada como igual ao valor obtido pela análise química dos solos para potássio e igual a zero para o nitrato, pois o primeiro é determinado diretamente nas análises e o segundo se relaciona com o teor de matéria orgânica, mas não possui determinação direta.

2.2.6 Comparação entre valores simulados e observados

Para a comparação dos dados, foram utilizados os seguintes índices: índice de concordância de Willmott (d); erro máximo (Emax); erro absoluto médio (EAM); raiz quadrada do erro médio normalizado (RQEM); coeficiente de determinação (CD); coeficiente de massa residual (CMR); e eficiência (E). Esses indicadores foram obtidos a partir das equações 19 a 25:

$$d = 1 - \left[\frac{\sum_{i=1}^n (P_i - O_i)^2}{\sum_{i=1}^n (|P_i - \bar{O}| + |O_i - \bar{O}|)^2} \right] \quad (19)$$

$$Emax = \max(|O_i - P_i|)_{i=1}^n \quad (20)$$

$$EAM = \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (O_i - P_i) \right] \quad (21)$$

$$RQEM = \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (O_i - P_i)^2 \right]^{0,5} \times \left(\frac{100}{\bar{O}} \right) \quad (22)$$

$$CD = \frac{\sum_{i=1}^n (O_i - \bar{O})^2}{\sum_{i=1}^n (P_i - \bar{O})^2} \quad (23)$$

$$CMR = \left[\sum_{i=1}^n O_i - \sum_{i=1}^n P_i \right] / \sum_{i=1}^n O_i \quad (24)$$

$$E = \left[\sum_{i=1}^n (O_i - \bar{O})^2 - \sum_{i=1}^n (O_i - P_i)^2 \right] / \sum_{i=1}^n (O_i - \bar{O})^2 \quad (25)$$

em que:

P_i = dados padrão, obtidos nos ensaios experimentais;

O_i = dados simulados pelo modelo Hydrus-1D;

n = número de observações; e

$\bar{O}$ = média dos valores simulados.

Como o nível de detalhamento espacial adotado teve intervalos de 0,01 m visando maior precisão nas simulações, os dez pontos experimentais, representativos das profundidades de 0,07 m, 0,14 m, 0,21 m, 0,28 m, 0,35 m, 0,42 m, 0,49 m, 0,56 m, 0,63 m e 0,70 m, foram comparados com as médias dos valores simulados pelo modelo para as seguintes camadas: 0 – 0,07 m; 0,07 – 0,14 m; 0,14 – 0,21 m; 0,21 – 0,35 m; 0,35 – 0,42 m; 0,42 – 0,49 m; 0,49 – 0,56 m; 0,56 – 0,63 m; 0,63 – 0,70 m.

2.2.7 Análise de sensibilidade

A análise de sensibilidade tem aplicação em diversas áreas do conhecimento e foi desenvolvida, inicialmente, com o objetivo de avaliar o comportamento dos modelos físicos e matemáticos, em que os dados de entrada estivessem incertos ou errôneos. Segundo Goldenfum et al. (1991) apud Evangelista e Ferreira (2006), para modelos simples é possível obter expressões das saídas em função dos dados de entrada, expressando a sensibilidade do modelo como funções explícitas. No entanto, à medida que os modelos tornam-se mais complexos, a sensibilidade é expressa mais facilmente

na forma de mudanças relativas, gráficos e tabelas, em vez de funções. Essa análise permite que o usuário saiba quais parâmetros devem ser medidos com maior precisão.

Para que seja possível a comparação entre as sensibilidades do modelo a cada parâmetro, segundo McCuen e Snyder (1986) apud Chaves (2009), torna-se necessária a utilização da sensibilidade relativa (S_r), que é definida como a razão entre a taxa de variação da resposta do modelo (ΔS) a uma pequena variação de entrada (ΔE), normalizada pelos valores iniciais da saída (S_i) e da entrada (E_i), conforme a eq. 26:

$$S_r = \frac{(\Delta S / S_i)}{(\Delta E / E_i)} \quad (26)$$

em que:

S_r = sensibilidade relativa;

ΔS = taxa de variação da resposta do modelo;

S_i = valor inicial de saída;

ΔE = taxa de variação da entrada dos dados; e

E_i = valor inicial de entrada.

Para a análise de sensibilidade, foram avaliados como parâmetros de saída os teores de água e soluto às profundidades de 0,20 m e 0,45 m, a fim de que houvesse representação do perfil destas variáveis ao longo da coluna.

A variação aplicada a cada parâmetro de entrada, para avaliação dos teores de água, foi de 0,05 %, sendo eles: fluxo de entrada da solução, condutividade hidráulica do solo saturado, teor volumétrico de água na saturação e os parâmetros “n” e “ α ” do ajuste da curva de retenção.

Para a avaliação dos teores de potássio, os parâmetros de entrada variados foram os mesmos para os teores de água, porém, em lugar dos parâmetros de ajuste da curva de retenção, foram utilizados o coeficiente de distribuição do soluto e a dispersividade. Conforme Chaves (2009), valores de sensibilidade entre 0,5 e 1,5 são considerados intermediários, acima de 1,5 são altos e abaixo de 0,5 são baixos. Valores negativos indicam que o modelo é correlacionado negativamente com o parâmetro.

Para considerar a sensibilidade relativa média para as duas profundidades, são comparados os módulos dos valores de sensibilidade, obtidos separadamente para cada uma.

2.3 Resultados e Discussão

2.3.1 Curvas de distribuição de efluentes

As curvas de distribuição de efluentes, para os dois tipos de solo, foram ajustadas ($r^2 > 0,99$ em todos os casos) e representaram de forma satisfatória o comportamento dos íons nitrato e potássio.

Figura 7 – Curvas de distribuição de efluentes para nitrato (a) e potássio (b), referentes ao LVA

Em comparação com o nitrato, o íon potássio necessitou de maior número de volumes de poro (VP) para atingir a máxima concentração relativa; 3,5 VP para o LVA (Figura 7) e 6,6 VP para o NV (Figura 8). Isto indica que houve maior interação deste íon com a matriz de ambos os solos.

O íon nitrato, por sua vez, atingiu a concentração relativa máxima aos 2,5 VP e 2,1 VP para os solos LVA e NV, respectivamente, indicando maior repulsão deste íon em relação ao potássio (Figuras 7 e 8). Como o material dos dois solos foi coletado na camada de 0 a 0,30 m, esta repulsão entre o solo e o nitrato está relacionada possivelmente com a predominância de cargas negativas, que ocorre nas camadas

superficiais dos solos, em virtude da maior quantidade de matéria orgânica, como relatado por Dynia (2000) em um experimento com nitrato para três diferentes tipos de solo do Estado de São Paulo.

Figura 8 – Curvas de distribuição de efluentes para nitrato (a) e potássio (b), referentes ao NV

Enquanto as curvas de distribuição de efluentes caracterizam o deslocamento miscível das soluções, os parâmetros de transporte, obtidos por meio de seus ajustes, quantificam esta movimentação (Tabelas 5 e 6). Os valores obtidos de número de Peclet (P) para o LVA foram maiores do que para o NV o que confirma a maior velocidade de advecção no primeiro caso, devida à predominância de macroporos, responsáveis diretos pela condução da água no solo durante os processos de infiltração, conforme Libardi (2005).

Tabela 5 – Parâmetros de transporte do potássio: número de Peclet (P), velocidade da solução nos poros em função de P (v), dispersividade em função de P (λ), coeficiente dispersivo-difusivo (D) e fator de retardamento (R), para os dois solos estudados

Tipos de Solo	Parâmetros de transporte de potássio				
	P	$v(P)$ (cm h^{-1})	$\lambda(P)$ (cm)	D ($\text{cm}^2 \text{h}^{-1}$)	R
LVA	12,31	21,341	1,625	34,673	1,640
NV	3,970	15,808	5,038	79,636	2,476

Os valores obtidos para o fator de retardamento (R) confirmam este efeito da seguinte forma: o maior valor ocorreu para o potássio em relação ao NV, indicando forte interação entre o cátion e as cargas negativas do solo; em seguida, tem-se o valor de R para potássio no LVA, indicando menor interação (Tabela 5); e, por último, os valores de R do nitrato, para os solos LVA e NV, respectivamente, indicando a repulsão crescente entre o ânion e as cargas negativas presentes nos dois solos (Tabela 6).

Tabela 6 – Parâmetros de transporte do nitrato: número de Peclet (P), velocidade da solução nos poros em função de P (v), dispersividade em função de P (λ), coeficiente dispersivo-difusivo (D) e fator de retardamento (R), para os dois solos estudados

Tipos de Solo	Parâmetros de transporte de nitrato				
	P	v (P) (cm h ⁻¹)	λ (P) (cm)	D (cm ² h ⁻¹)	R
LVA	8,80	19,922	2,273	45,277	1,060
NV	3,01	14,252	6,645	94,697	0,659

2.3.2 Teores de potássio e água em coluna segmentada

Dos 2000 mg L⁻¹ aplicados de potássio, os valores máximos encontrados para os dois solos foram semelhantes e se mantiveram próximos a 1600 mg L⁻¹. A maior diferença entre as curvas do LVA e do NV é notada por meio dos valores de concentração relativos aos cinco primeiros anéis, demonstrando que a textura dos solos diferenciou os perfis de potássio principalmente quanto à sua profundidade de alcance na coluna. Influência da textura no deslocamento de íons também foi observada por Melo et al. (2006). A distribuição de potássio ao longo da coluna apresentou uma tendência típica em todas as repetições para cada tipo de solo. No LVA, o íon alcançou maiores profundidades ao longo da coluna. No NV grande parte do soluto aplicado ficou retida nos primeiros anéis da coluna e, do restante, muito pouco chegou ao final dela. Esse efeito está diretamente relacionado à interação do potássio, um cátion, com as cargas negativas existentes no solo, fazendo com que o mesmo fique eletrostaticamente retido à sua micela. Foram observadas, para as profundidades de 0,07 m, 0,14 m e 0,21 m, respectivamente, concentrações médias aproximadas de 1622, 1586 e 1484 mg L⁻¹, para o LVA, e de 1552, 828 e 408 mg L⁻¹, para o NV. Este

comportamento reflete o retardamento ocorrido para o potássio em relação à frente de molhamento, em concordância com os parâmetros estimados por meio das curvas de distribuição de efluentes.

Figura 9 – Teores de potássio e água, em três repetições, para o LVA (a) e (b) e para o NV (c) e (d)

Para as mesmas profundidades, no LVA, foram observadas umidades volumétricas médias de 41,2 %, 39,9 % e 39,4 %, respectivamente; e para o NV, 51,4 %, 50,0 % e 50,2 %. O conteúdo de água em cada profundidade, considerando as três repetições, foi mais uniforme no NV do que no LVA. Apesar do critério estabelecido para preenchimento das colunas, em que se manteve densidade do solo semelhante entre as repetições, é possível que tenham ocorrido maiores variações de densidade ao longo dos anéis, provocando as diferenças pontuais de porosidade que resultaram, consequentemente, nos diferentes conteúdos de água observados. Este efeito pode ainda ter sido potencializado por outro fator, a menor capacidade de retenção de água, típica dos solos de textura arenosa.

Nos dois últimos anéis da coluna, nota-se um sensível aumento das concentrações de potássio em relação aos anéis suprajacentes. Isto aconteceu, provavelmente, por causa da diluição no momento do preparo da pasta de saturação. Nestes anéis, em que não há presença dos íons aplicados, o ponto correto da pasta de saturação é mais difícil de ser obtido, fazendo com que se superestime o fator de multiplicação, utilizado para correção das concentrações à umidade ao final do ensaio experimental. Certamente, os valores reais de potássio relativos às profundidades de 0,63 m e 0,70 m são menores do que os mostrados nos gráficos e devem se aproximar da concentração inicial deste íon para cada tipo de solo, como consta na análise química (Tabela 1). Nota-se, portanto, a importância do preparo correto da pasta de saturação neste tipo de ensaio, já que dela dependem as concentrações finais de cada soluto aplicado.

2.3.3 Teores de nitrato e água em coluna segmentada

De maneira inversa ao comportamento do potássio, os valores das concentrações de nitrato foram mais altos do sexto ao oitavo anél, coincidindo com a posição da frente de molhamento ao término do ensaio para os dois solos. Este efeito é atribuído à alta solubilidade do íon e à sua fraca interação com a matriz do solo, de acordo com Muchovej e Rechcigl (1994). Para esses anéis, representativos das profundidades de 0,42 m, 0,49 m e 0,56 m, respectivamente, foram encontrados valores médios de 46, 176 e 189 mg L⁻¹ para o LVA e de 61, 324 e 616 mg L⁻¹ para o NV. Considerando tais valores médios, no NV ocorreram concentrações de nitrato cerca de 32, 84 e 225 % superiores às encontradas no LVA para as mesmas profundidades.

As concentrações observadas nos primeiros anéis, às profundidades de 0,07 m, 0,14 m e 0,21 m, foram consideravelmente menores em relação aos últimos, alcançando valores médios aproximados de 8, 6 e 6 mg L⁻¹ para o LVA e de 3, 3 e 7 mg L⁻¹ para o NV. Este efeito de lixiviação do nitrato foi constatado em diversos experimentos de campo e de laboratório. Miranda (2001), também em experimentos com colunas de solo em laboratório, encontrou comportamento semelhante para a movimentação de nitrato, considerando três diferentes tipos de solo, dos quais dois eram Latossolos Vermelho Amarelos. Payet et al. (2009), avaliando a lixiviação de

nitrogênio em um solo ândico tropical, observaram que quantidades significativas de nitrato foram deslocadas a partir da superfície do solo para a camada de 0,4 a 0,8 m.

Figura 10 – Teores de nitrato e água, em três repetições, para o LVA (a) e (b) e para o NV (c) e (d)

Nota-se também, por meio dos gráficos, que os perfis dos teores de nitrato para o NV se apresentaram mais uniformes em comparação com o LVA. A maior capacidade de retenção de água, característica dos solos argilosos, ocasionou perfis de umidade mais homogêneos em cada repetição. Este fato pode ter contribuído significativamente para a uniformidade das concentrações de nitrato, porque a movimentação quantitativamente predominante do íon no solo é principalmente devida ao fluxo de massa, conforme Barber (1984).

Além de estarem mais uniformes em cada repetição, os perfis de umidade para o NV se mantiveram também mais uniformes ao longo da coluna. Os valores médios de umidade volumétrica, para as três repetições, estiveram em torno de 50 %, com máximo de 51,4 %, à 0,07 m, e mínimo de 48,2 %, à 0,49 m. Os perfis foram mais

heterogêneos para o LVA. A essas mesmas profundidades, seus valores médios variaram entre o máximo de 37,5 % e o mínimo de 32,5 %, respectivamente. Os valores médios observados de umidade volumétrica residual foram de 2,3 % para o LVA e de 6,6 % para o NV. Os valores observados dos teores de nitrato para os dois últimos anéis da coluna, assim como os de potássio, também sofreram influência do fator de multiplicação da pasta de saturação. Como explicado anteriormente, apesar dos cuidados tomados, é provável que esses valores tenham sido superestimados na correção das concentrações à umidade ao final do ensaio.

2.3.4 Simulações para o deslocamento de potássio e água

Em geral, todos os perfis foram bem representados pelas simulações, tanto para o LVA quanto para o NV. Diferenças maiores, porém, foram observadas na simulação do perfil de umidade volumétrica para o LVA, em que os valores simulados foram superiores àqueles observados até a profundidade de 0,49 m. A média da umidade volumétrica, simulada até essa profundidade, foi de 42 %, enquanto o valor médio observado foi de 38 %. Para o NV, o valor médio simulado foi de 50 % e o observado de 49 %, considerando a camada de 0 – 0,42 m, para a qual houve superioridade dos valores simulados. A maior proximidade entre os valores observados e simulados para o NV, em relação ao LVA, pode ser explicada pela sua maior capacidade de retenção de água, que oferece melhores condições para a saturação da camada de solo considerada. Nota-se por meio dos gráficos que, durante as simulações, o modelo assume que a frente de molhamento avança, ao passo que satura todos os poros da camada onde se encontra, o que pode não ocorrer no caso do LVA, pois a solução aplicada pode avançar ao longo da coluna, mesmo ainda não tendo saturado a camada em que está, em razão da maior quantidade de macroporos em relação ao NV. Verifica-se, de acordo com os valores observados, em relação à porosidade total, que foram saturados aproximadamente 90 % dos poros do LVA e 98 % dos poros do NV.

O fluxo descendente de solução, por gotejamento, e o fato de não haver lâmina acima da superfície do solo contribuem significativamente para a formação e o aprisionamento de bolhas de ar ao longo da coluna, o que torna a saturação das camadas ainda mais difícil. Uma frente de molhamento mais uniforme e valores de

umidade próximos ao da saturação ocorreriam se houvesse um fluxo maior de solução, devido ao incremento do potencial de pressão, relacionado a uma lâmina de água, no potencial total na superfície do solo.

Figura 11 – Simulação dos teores de potássio e água, comparada com a média das três repetições, para o LVA (a) e (b) e para o NV (c) e (d)

Esta condição possivelmente faria com que as simulações para o deslocamento de água ao longo da coluna fossem mais precisas, já que o processo experimental se aproximaria das considerações feitas pelo modelo para a dinâmica da água. Entretanto, dentre tantas restrições e simplificações que se fazem nos ensaios em laboratório, preferiu-se manter o processo de infiltração o mais próximo possível das condições encontradas em campo.

As concentrações de potássio simuladas distanciaram-se das observadas mais acentuadamente no início e no final das curvas para o LVA, e no meio e final da curva para o NV. Considerando-se o erro experimental que ocasionou o aumento de

concentrações ao final das curvas, a diferença entre os valores simulados e observados fica sensivelmente reduzida, restando basicamente a discrepância ocorrida nas concentrações relativas ao primeiro anel, para o LVA, e ao terceiro, quarto e quinto anéis, para o NV. A tendência de interação do potássio com a matriz do solo pôde ser observada também nas simulações, em que houve maior deslocamento do íon ao longo da coluna para o LVA, em relação ao NV.

2.3.5 Simulações para o deslocamento de nitrato e água

A simulação para o LVA teve baixíssima concordância com o processo físico experimental (Tabela 7), apresentando tendências de deslocamento quase opostas às observadas. O modelo não descreveu o processo de movimentação característica do íon nitrato, que tende a acompanhar a frente de molhamento ao longo do solo, embora tenha simulado bem o perfil de umidade volumétrica (Figura 12). Isto se deve ao fato de os cálculos, mesmo conectados entre si, serem realizados separadamente nas rotinas do modelo. Apesar de mais uniforme ao longo da coluna, o perfil de umidade volumétrica média, obtido para as aplicações de nitrato, também se manteve distante do perfil simulado. Até a profundidade de 0,49 m, a umidade volumétrica média observada foi de aproximadamente 36 %, enquanto que a simulada foi de 42 %. Novamente, é possível observar que para o LVA não houve saturação de todos os poros nesta camada, permanecendo os valores observados mais distantes desta condição, se comparados com os mesmos valores relativos à aplicação de potássio. Relacionando esta umidade volumétrica média para o perfil com a respectiva porosidade do solo, nota-se que foram saturados 85 % dos poros para o LVA.

A partir dos dados de entrada, referentes às curvas de distribuição de efluentes, não foi possível simular o perfil dos teores de nitrato para o NV utilizando o modelo de equilíbrio para o transporte de solutos, ocorrendo erro nas tentativas de simulação. Isto indica que este modelo, adotado com êxito para as simulações de deslocamento de potássio, não pode ser utilizado nas simulações para o íon nitrato sob essas condições. Em razão disso, apesar de haver a simulação do nitrato para o LVA, ocorreram discrepâncias entre todos os valores ao longo da coluna. Segundo Šimunek et al. (2008), o software Hydrus, assim como outros modelos, simulando fluxos de água e

transporte de solutos em solos com teor de água variável, não consideram processos de transporte e fluxos sob condições de não-equilíbrio, ou os consideram separadamente.

Figura 12 – Simulação dos teores de nitrato (a) e água (b), comparada com a média das três repetições para o LVA

Tais resultados podem ser atribuídos possivelmente ao estado duplo da água no solo, em que, a partir do conceito de “Mobilidade - Imobilidade”, presume-se que a água esteja dividida em água móvel (θ_m) e água imóvel (θ_{im}). A fração θ_m , que flui entre os agregados do solo, é ativa no transporte de soluto e θ_{im} , que fica retida dentro dos agregados, é uma fração complementar que parece ser imóvel (CASEY et al., 1997; ŠIMUNEK et al., 2008). Para Milfont et al. (2008), o não-equilíbrio relacionado ao transporte de solutos é geralmente conhecido como não-equilíbrio físico, resultado de um domínio heterogêneo das duas regiões de água (móvel e imóvel). Alletto et al. (2006) ressaltam que em função dessa heterogeneidade, os parâmetros de “Mobilidade - Imobilidade” para a superfície e subsuperfície do solo devem ser utilizados em modelos para melhor predição dos riscos de contaminação do lençol freático.

Oliver e Smettem (2003) relatam que em solos arenosos a fração imóvel da água pode chegar a 40%. Estes autores encontraram em um solo arenoso, usando quatro métodos de determinação, que a fração imóvel da água correspondeu a 10% e que a taxa de troca entre as regiões móvel e imóvel foi estimada com o método experimental usando um traçador seqüencial. Também concluíram que, pelas análises a partir da “Breakthrough Curve”, não era possível definir esta taxa de troca, por causa da

insensibilidade do parâmetro do coeficiente de troca no processo. Além disso, Payet et al. (2009) afirmam que os parâmetros de transporte relativos ao nitrato precisam ser determinados com maior precisão para que simulações mais seguras possam ser feitas nos estudos ambientais.

Neste caso, um modelo de transporte mais detalhado se faz necessário para a descrição da dinâmica do nitrato. Como opção para as simulações, outros modelos de transporte de solutos são apresentados nas rotinas do Hydrus-1D, os quais consideram diferentes condições de equilíbrio químico entre o soluto e o solo. A restrição prática, porém, ocorre pelo fato de esses outros modelos requererem mais alguns parâmetros de entrada, além dos que foram determinados em laboratório a partir das curvas de distribuição de efluentes. Com a entrada destes parâmetros, é possível que o processo de lixiviação característico para este íon possa ser descrito satisfatoriamente nas simulações.

2.3.6 Desempenho do modelo

A avaliação adequada do desempenho de modelos de simulação precisa estar amparada pela análise conjunta de diversos índices, pois um modelo pode concordar ou se ajustar bem a dados experimentais, sem que com isso o processo real em questão seja bem representado. Para o modelo Hydrus-1D, as simulações realizadas para a dinâmica de água e de potássio no solo apresentaram altos índices de concordância e eficiência (Tabela 7).

Comparando-se o desempenho do modelo em todas as simulações realizadas, observa-se que somente para o íon nitrato em LVA não houve boa concordância, ocorrendo valores negativos de “E” e “EAM”, e o maior valor observado de “RQME”, 140%. É importante ressaltar que, para os índices “E_{max}” e “EAM”, que têm a unidade da variável analisada, os valores para nitrato e potássio só podem ser comparados entre si, se forem contabilizados percentualmente, uma vez que foram aplicadas concentrações distintas para os mesmos, 50 mg L⁻¹ e 2000 mg L⁻¹, respectivamente. Justifica-se, portanto, o menor valor de “E_{max}” para a simulação de nitrato em LVA, em comparação com os valores encontrados para potássio nos dois solos. Assim, o maior valor de “E_{max}”, em relação ao valor de aplicação, representa um erro de 340 % para a

simulação de nitrato e de apenas 15,25 % e 19,05 % para potássio em LVA e NV, respectivamente.

Tabela 7 – Índices estatísticos para comparação entre os valores de teor de água e solutos simulados pelo modelo Hydrus-1D e obtidos experimentalmente, para o Latossolo Vermelho Amarelo (LVA) e para o Nitossolo Vermelho (NV)

Solo	Teor	Índice de comparação*						
		E _{max} mg L ⁻¹	EAM	RQEM %	CMR	CD	E	d
LVA	K ⁺	305	49,8	20,9	-0,070	1,243	0,958	0,999
	NO ₃ ⁻	170	-26,4	140	0,444	0,066	-18,96	0,856
NV	K ⁺	381	87,1	59,3	-0,255	1,10	0,832	0,994
	NO ₃ ⁻	-	-	-	-	-	-	-
(m ³ m ⁻³)								
LVA	água (K ⁺)	0,158	0,011	20,579	-0,036	1,478	0,869	0,995
	água (NO ₃ ⁻)	0,081	0,044	19,178	-0,160	1,276	0,894	0,995
NV	água (K ⁺)	0,207	-0,027	20,36	0,069	1,19	0,827	0,994
	água (NO ₃ ⁻)	-	-	-	-	-	-	-

* E_{max} = Erro máximo; EAM = Erro absoluto médio; RQEM = Raiz quadrada do erro médio; CMR = Coeficiente de massa residual; CD = Coeficiente de determinação; E = Eficiência; e d = Índice de concordância de Willmott.

Uma ideia desse efeito de proporcionalidade entre os diferentes valores analisados é dada pelo índice “RQME”. Segundo este mesmo índice, todas as simulações para os teores de água, nos dois solos, se mantiveram muito próximas entre si e, em relação aos solutos, o maior valor ocorreu para a simulação de nitrato no LVA, 140 %.

Os valores negativos de “EAM”, ocorridos para as simulações de água (NO₃⁻), água (K⁺) e nitrato no LVA, indicam que o modelo superestimou os valores obtidos experimentalmente. Inversamente, os valores positivos deste parâmetro indicam que os dados experimentais foram subestimados. O valor negativo de “E” para a simulação de nitrato no LVA indica que um valor médio dos dados experimentais representa melhor o teor do soluto do que os valores simulados, confirmando a inadequação na escolha do

modelo de equilíbrio para o transporte de solutos. Para as outras simulações, o índice “E” se aproximou da unidade, indicando pouca diferença entre os valores simulados e observados. Por meio dos valores negativos de “CMR”, é possível notar que o modelo superestimou os valores observados de teor de potássio na maioria das simulações, com exceção para água (K^+) no NV. Para os teores de nitrato e de água (NO_3^-), com valores positivos de “CMR”, o modelo subestimou os dados observados.

O índice “d” demonstrou boa concordância entre os valores simulados e observados em todas as simulações: para o LVA, água (K^+) e água (NO_3^-) 0,995; para o NV, água (K^+), 0,994. O mesmo ocorreu para o potássio nos dois solos; 0,999 e 0,994, para os solos LVA e NV, respectivamente. A simulação para o nitrato, no LVA, teve o menor valor de d, 0,856, evidenciando a dificuldade de predição do movimento deste íon, utilizando o modelo de equilíbrio para o transporte de solutos.

2.3.7 Análise de sensibilidade do modelo

Como as simulações para os teores de água e de soluto, referentes à aplicação de nitrato, não foram realizadas para o NV e tiveram baixíssima concordância para o LVA, a análise de sensibilidade foi realizada somente para as simulações de água e soluto referentes à aplicação de potássio.

As variações dos teores de água à profundidade de 0,20 m, causadas pela variação de entrada de cada parâmetro, resultaram em menores sensibilidades relativas, quando comparadas com os mesmos valores para a profundidade de 0,45 m, nos dois tipos de solo (Tabela 8). Esse resultado pode ser explicado pela situação da coluna ao término dos ensaios, já que, a essa profundidade, o solo esteve sempre próximo da saturação. Para a profundidade de 0,45 m, havia uma condição intermediária do conteúdo de água, entre a saturação e o teor de água residual. Sob condições menos uniformes, essa profundidade possui maior instabilidade, já que coincide com a posição da frente de molhamento, e por isso é mais afetada pelas variações de entrada.

Comparando-se as médias, maiores valores de sensibilidade relativa (S_r) ocorreram para o NV em relação ao LVA, demonstrando a influência da textura do solo na sensibilidade do modelo. Para os dois solos, avaliando as variações dos teores de

água, o modelo é mais sensível ao parâmetro θ_s , com S_r médias de 0,67 para o LVA e 3,29 para o NV. O parâmetro que exerceu menos influência nos teores de água foi o α , com S_r médias de 0,4 e 0,0 para o LVA e para o NV. Todos os valores de S_r média para o LVA estiveram abaixo de 0,5, indicando insensibilidade do modelo para os mesmos, com exceção do θ_s , que teve valor intermediário de 0,67.

Tabela 8 – Sensibilidade relativa do modelo Hydrus-1D aos parâmetros: fluxo de entrada (q), condutividade hidráulica (K_o), teor volumétrico de água na saturação (θ_s), e parâmetros de ajuste da curva de retenção (n) e (α), em relação ao teor de água às profundidades de 0,20 m e 0,45 m

Parâmetros	LVA			NV		
	0,20 m	0,45 m	Média	0,20 m	0,45 m	Média
Q	-0,05	0,58	0,31	0,00	4,69	2,34
K_o	0,05	-0,05	0,05	0,00	-0,04	0,02
θ_s	1,04	0,29	0,67	1,15	-5,44	3,29
N	-0,05	-0,19	0,12	0,00	-4,42	2,21
α	0,00	0,08	0,04	0,00	0,00	0,00

Para valores médios no NV, houve alta sensibilidade aos parâmetros n , θ_s e q ; baixa sensibilidade para K_o e insensibilidade para α . Observa-se que o teor de água a 0,20 m para o NV não foi afetado pelas variações de entrada, tendo valores de nulos de sensibilidade relativa, exceto para a variação do teor volumétrico de água na saturação, para a qual a S_r foi de 1,15.

Comparando-se as duas profundidades analisadas, os teores de potássio foram mais afetados a 0,45 m para as mesmas variações de entrada, assim como ocorrido para os teores de água. Analogamente, a essa profundidade, esperam-se maiores variações, em decorrência da zona de instabilidade caracterizada pela posição da frente de molhamento. O modelo teve alta S_r para as variações do fluxo, sendo este o parâmetro que mais influenciou os teores de potássio às duas profundidades, para os dois solos.

A S_r média a este parâmetro foi de 3,95 para o LVA e de 4,06 para o NV (Tabela 9). Para os dois solos, o modelo foi pouco sensível às variações de K_o , com valores de

S_r média de 0,32 e 0,12, para o LVA e o NV, respectivamente. Baixa sensibilidade ao parâmetro λ também foi observada nos dois solos, com valores médios de 0,54 e para o LVA e de 0,55 para o NV. Para os teores de potássio, houve correlação negativa do modelo com maior quantidade de parâmetros, em comparação com os teores de água.

Tabela 9 – Sensibilidade relativa do modelo Hydrus-1D aos parâmetros: fluxo de entrada (q), condutividade hidráulica (K_o), teor volumétrico de água na saturação (θ_s), coeficiente de distribuição (K_d) e dispersividade (λ), em relação ao teor de potássio às profundidades de 0,20 m e 0,45 m

Parâmetros	LVA			NV		
	0,20 m	0,45 m	Média	0,20 m	0,45 m	Média
q	1,36	6,55	3,95	1,03	7,09	4,06
K_o	0,27	-0,37	0,32	-0,20	0,04	0,12
θ_s	-0,41	-4,86	2,64	-0,55	-4,68	2,61
K_d	-0,41	-2,99	1,70	-0,98	-2,77	1,87
λ	-0,14	0,94	0,54	-0,11	0,98	0,55

O segundo maior valor de S_r do modelo foi em relação ao parâmetro θ_s , que teve para os dois solos valores médios de aproximadamente 2,6. Isto confirma a ligação entre o teor de água em cada camada e os teores de solutos, que são deslocados com o fluxo de massa. A influência do coeficiente de distribuição (K_d) nos teores de potássio também foi alta, com valores médios de S_r de 1,70 para o LVA e 1,87 para o NV, ressaltando-se porém que, à profundidade de 0,45 m, os valores de S_r foram consideravelmente maiores do que à 0,20 m para os dois solos.

3 CONCLUSÕES

Pelos resultados obtidos nas condições de desenvolvimento da pesquisa, pôde-se concluir que:

- 1) O *software* Hydrus-1D foi eficiente para simulações de deslocamento de potássio e água para ambos os solos estudados;
- 2) Utilizando o modelo de equilíbrio para o transporte de solutos no solo, o *software* Hydrus-1D não foi eficiente para simular o deslocamento de nitrato em Latossolo Vermelho Amarelo e em Nitossolo Vermelho;
- 3) Os procedimentos experimentais para estimativa de parâmetros de transporte, como as curvas de distribuição de efluentes, são suficientes para descrever a movimentação de potássio no solo, gerando informações de entrada precisas para os modelos de simulação;
- 4) Para simulação do deslocamento do íon nitrato, o *software* Hydrus-1D requer um processo experimental mais detalhado, sendo necessária a estimativa de um maior número de parâmetros de transporte; e
- 5) Simulando os teores de potássio e água no solo, o *software* apresentou maior sensibilidade aos parâmetros de transporte teor de água na saturação (θ_s) e fluxo de entrada da solução (q), indicando que estes precisam ser determinados com precisão. Houve baixa sensibilidade aos parâmetros condutividade hidráulica do solo saturado (K_0) e dispersividade (λ) para os dois solos estudados.

REFERÊNCIAS

- ALCÂNTARA, M.A.K.; CAMARGO, O.A. Adsorção de nitrato em solos com cargas variáveis. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, Brasília, v. 40, n. 4, p. 369-376, abr. 2005.
- ALFARO, M.A.; JARVIS, S.C.; GREGORY, P.J. Factors affecting potassium leaching in different soils. **Soil use and Management**, Denmark, v. 20, n. 2, p. 182-189, Jun. 2004.
- ALLETTO, L.; COQUET, Y.; VACHIER, P.; LABAT, C. Hydraulic conductivity, immobile water content, and exchange coefficient in three soil profiles. **Soil Science Society of American Journal**, Madison, v. 70, p. 1272-1280, Jul./Aug. 2006.
- AMARO FILHO, J.; ASSIS JÚNIOR, R.N.; MOTA, J.C.A. **Física do Solo: Conceitos e Aplicações**. Fortaleza: Imprensa Universitária, 2008. 290 p.
- ANAMI, M.H.; SAMPAIO, S.C.; SUSZEK, M.; GOMES, S.D.; QUEIROZ, M.M.F. Deslocamento miscível de nitrato e fosfato proveniente de água residuária da suinocultura em colunas de solo. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, Campina Grande, v. 12, n. 1, p. 75-80, jan./fev. 2008.
- ARAÚJO, A.R.; CARVALHO, J.L.N.; GUILHERME, L.R.G.; CURI, N.; MARQUES, J.J. Movimentação de nitrato e amônio em colunas de solo. **Ciência Agrotécnica**, Lavras, v. 28, n. 3, p. 537-541, maio/jun. 2004.
- ARAUJO, C.A.S.; RUIZ, H.A.; FERREIRA, P.A.; SILVA, D.J.; CARVALHO, M.A. Transporte de fósforo e de potássio em colunas com agregados de um Latossolo Vermelho distrófico. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, Viçosa, v. 24, n. 1, p. 259-268, 2000.
- ARAUJO, C.A.S.; SILVA, D.J.; DAMASCENO, F.C.; ANJOS, J.B. Determinação do fator de retardamento para potássio em solo cultivado com videira. In: CONGRESSO NACIONAL DE IRRIGAÇÃO E DRENAGEM, 17., 2007, Mossoró. **Resumos...** Mossoró: ABID, 2007. 1 CD-ROM.
- BARBER, S.A. **Soil nutrient bioavailability: a mechanist approach**. New York: John Wiley, 1984. 398 p.
- BELJIN, M.S. **Solute program package**. Indianapolis: International Ground Water Modeling Center, 1985. 163 p.
- BIGGAR, J.W. NIELSEN, D.R. Miscible displacement: II. Behavior of tracers. **Soil Science, Society of American Proceeding**, Madison, v. 26, n. 2, p. 125-128, 1962.
- BORGES JUNIOR, J.C.F.; FERREIRA, P. A. Equações e programa computacional para cálculo do transporte de solutos do solo. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, Campina Grande, v. 10, n. 3, p. 604-611, set. 2006.

BRITO, A.S.; LIBARDI, P.L.; MOTA, J.C.A.; MORAES, S.O. Desempenho do tensiômetro com diferentes sistemas de leitura. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, Viçosa, v. 33, n. 1, p. 17-24, 2009.

BROOKS, R.H.; COREY, A.T. Properties of porous media affecting fluid flow. **Journal of irrigation Drainage Division, Proceedings Society Civil Engineering**, New York, v. 92, n. IR2, p. 61-88, 1966.

CARSEL, R.F.; SMITH, C.N.; MULKEY, L.A.; DEAN, J.D.; JOWISE, P. **User's manual for the pesticide root zone model (PRZM)**. Release 1 EPA-600/3-84-109. Athens: U.S. EPA, 1984. 216 p.

CASEY, F.X.M.; LOGSDON, S.D.; HORTON, R.; JAYNES, D.B. Immobile water content and mass exchange coefficient of a field soil. **Soil Science Society of American Journal**, Madison, v. 61, p. 1030-1036, Jul./Aug. 1997.

CHAVES, H.M.L. Sensibilidade do modelo *Hydrus* aos parâmetros hidráulicos do solo em diferentes texturas. **Revista Brasileira de Recursos Hídricos**, Porto Alegre, v. 14, n. 2, p. 33-37, abr./jun. 2009.

CHESNAUX, R.; ALLEN, M. Simulating nitrate leaching profiles in a highly permeable vadoze zone. **Environmental Modeling and Assessment**, Dordrecht, v. 13, n. 4, p. 527-539, Nov. 2008.

CLEMENTE, R.S.; PRASHER, S.O.; BARRINGTON, S.F. Pestfade, a new pesticide fate and transport model: model development and verification. **Transaction of the ASAE**, St. Joseph, v. 36, n. 2, p. 357-367, Mar./Apr. 1993.

CORREA, M.M. LIMA, L.A.; MARTINEZ, M.A. RIGITANO, R.L.O.; SAMPAIO, S.C. Deslocamento miscível de sulfona de aldicarbe em colunas de solo. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, Campina Grande, v. 3, n. 2, p.217-221, maio/ago. 1999.

COSTA, J.P.V.; BARROS, N.F.; BASTOS, A.L.; ALBUQUERQUE, A.W. Fluxo difusivo de potássio em solos sob diferentes níveis de umidade e de compactação. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, Campina Grande, v. 13, n. 1, p. 56-62, jan./fev. 2009.

COSTA, S.N.; MARTINEZ, M.A.; MATOS, A.T.; RAMOS, V.B.N. Mobilidade de nitrate em colunas de solo sob condições de escoamento não permanente. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, Campina Grande, v. 3, n. 2, p. 190-194, maio/ago. 1999.

DURNER, W. Hydraulic conductivity estimation for soils with heterogeneous pore structure. **Water Resource Research**, Washington, v. 30, n. 1, p. 211-223, 1994.

DYNIA, J.F.; CAMARGO, O.A. Retenção de nitrato num solo de carga variável, influenciada por adubação fosfatada e calagem. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, Brasília, v. 34, n. 1, p. 141-144, jan. 1999.

DYNIA, J.F. Nitrate retention and leaching in variable charge soils of a watershed in São Paulo state, Brazil. **Communications in Soil Science and Plant Analysis**, New York, v. 31, n. 5-6, p. 777-791, Mar. 2000.

EMPRESA BRASILEIRA DE PESQUISA AGROPECUÁRIA - EMBRAPA. **Sistema Brasileiro de Classificação de Solos**. 2.ed. Rio de Janeiro: Embrapa Solos, Brasília: Sistema de Produção de Informação, 2006. 306 p.

EVANGELISTA, A.W.P.; FERREIRA, P.A. Análise de sensibilidade do sistema de drenagem agrícola-SDA mediante variação dos parâmetros de entrada. **Ciência Agrotécnica**, Lavras, v. 30, n. 1, p. 133-139, jan./fev. 2006.

FERREIRA, P.A.; GARCIA, G.O.; MATOS, A.T.; RUIZ, H.A.; BORGES JUNIOR, J.C.F. Transporte no solo de solutos presentes na água residuária de café conilon. **Acta Scientia Agronômica**, Maringá, v. 28, n. 1, p. 29-35, Jan./Mar. 2006.

GONÇALVES, A.D.M.A.; MIRANDA, J.H.; ROSSI, P.; SABADIN, J.F.G.; KAMOGAWA, M.Y. Temperature effect in potassium and nitrate ions in soil transport. **Engenharia Agrícola**, Jaboticabal, v. 28, n. 3, p. 438-447, jul..set. 2008.

GONÇALVES, M.C.; RAMOS, T.B.; NEVES, M.J.; MARTINS, J.C.; PIRES, F.P.; LEITÃO, P. Modelação da dinâmica da água e dos sais num Aluviossolo do Alentejo. In: 1º CONGRESSO NACIONAL DE REGA E DRENAGEM, 2005, Beja. Beja: COTR, 2005. 1 CD-ROM.

GONÇALVES, M.C.; ŠIMŮNEK J.; RAMOS T.B.; MARTINS J.C.; NEVES, M.J.; PIRES, F.P. Multicomponent solute transport in soil lysimeters irrigated with waters of different quality. **Water Resources Research**, Washington, v. 42, n. 8, W08401, doi:10.1029/2005WR004802, Aug. 2006.

HILLEL, D. **Introduction to environmental soil physics**. San Diego: Elsevier Academic Press, 2004. 494 p.

KLUTE, A. Water retention: laboratory methods. In: KLUTE, A. (Ed.) **Methods of soil analysis**. 2. ed. Madison: American Society of Agronomy, Soil Science Society of America, 1986. pt. 1, p. 635-662. (Agronomy Monography, 9).

KOLAHCHI, Z.; JALALI, M. Simulating leaching of potassium in a sandy soil using simple and complex models. **Agricultural Water Management**, Amsterdam, v. 85, n. 1-2, p. 85-94, 2006.

KOSUGI, K. Lognormal distribution model for unsaturated soil hydraulic properties. **Water Resources Research**, Washington, v. 32, n. 9, p. 2697-2703, Sept. 1996.

KRAUSS, A. Potassium effects on yield quality. In: YAMADA, T.; ROBERTS, T.L. (Eds.). **Potássio na agricultura brasileira**. Piracicaba: Associação Brasileira para Pesquisa da Potassa e do Fosfato, 2005, cap. 11, p. 281-299.

LEGATES, D.R.; McCABE JR., G.J. Evaluating the use of "goodness-of-fit" measures in hydrologic and hydroclimatic model validation. **Water Resources Research**, Washington, v. 35, n. 1, p. 233-241, jan. 1999.

LEONARD, R.A.; KNISEL, W.G.; STILL, D.A. GLEAMS: Groundwater Loading Effects of Agricultural Management Systems. **Transaction of the ASAE**, St. Joseph, v. 30, n. 5, p. 1403-1418, Sept./Oct. 1987.

LIBARDI, P.L. **Dinâmica da água no solo**. São Paulo: EDUSP, 2005. 329 p.

LUCKNER, L., VAN GENUCHTEN, M.Th; NIELSEN, D.R. A consistent set of parametric models for the two-phase flow of immiscible fluids in the subsurface, **Water Resources Research**, Washington, v. 25, n. 10, p. 2187-2193, 1989.

MALAVOLTA, E. Potássio – absorção, transporte e redistribuição na planta. In: YAMADA, T.; ROBERTS, T.L. (Eds.). **Potássio na agricultura brasileira**. Piracicaba: Associação Brasileira para Pesquisa da Potassa e do Fosfato, 2005, cap. 8, p.179-238.

MELO, R.F.; FERREIRA, P.A.; MATOS, A.T.; RUIZ, H.A.; OLIVEIRA, L.B. Deslocamento miscível de cátions básicos provenientes da água residuária de mandioca em colunas de solo. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, Campina Grande, v. 10, n. 2, p. 456-465, abr./jun. 2006.

MILFONT, M.L.; ANTONINO, A.C.D.; MARTINS, J.M.F.; MACIEL NETTO, A.; GOUVEIA, E.R.; CORREA, M.M. Transporte de paclobutrazol em colunas de solos. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, Viçosa, v. 32, n. 5, p. 2165-2175, set./out. 2008.

MIRANDA, J.H. **Modelo para simulação da dinâmica de nitrato em colunas verticais de solo não saturado**. 2001. 79 f. Tese (Doutorado em Irrigação e Drenagem) - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", Universidade de São Paulo, Piracicaba, 2001.

MIRANDA, J.H.; DUARTE, S.N.; LIBARDI, P.L.; FOLEGATTI, M.V. Simulação do deslocamento de potássio em colunas verticais de solo não-saturado. **Engenharia Agrícola**, Jaboticabal, v. 25, n. 3, p. 677-685, set./dez. 2005.

MUALEM, Y. A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media, **Water Resources Research**, Washington, v. 12, n. 3, p. 513-522, 1976.

MUCHOVEJ, R.M.C.; RECHCIGL, J.E. Impacts of nitrogen fertilization of pastures and turfgrasses on water quality. In: LAL, R.; STEWART, B.A. (Ed). **Soil processes and water quality**. Boca Raton: Lewis Publ., 1994. p. 91-135.

NACHTIGALL, G.R.; VAN RAIJ, B. Análise e interpretação do potássio no solo. In: YAMADA, T.; ROBERTS, T.L. (Eds.). **Potássio na agricultura brasileira**. Piracicaba: Associação Brasileira para Pesquisa da Potassa e do Fosfato, 2005, cap. 5, p.93-118.

NIELSEN, D.R.; BIGGAR, J.W. Miscible displacement in soils: I. Experimental information. **Soil Science, Society of American Proceeding**, Madison, v. 25, n. 2, p. 1-5, 1961.

_____. Miscible displacement: III. Theoretical considerations. **Soil Science, Society of America Proceedings**, Madison, v. 26, p. 216-221, 1962a.

_____. Miscible displacement: V. Exchange processes. **Soil Science Society of America Proceedings**, Madison, v. 27, p. 623-627, 1962b.

_____. Miscible displacement: IV. Mixing in glass beads. **Soil Science Society of America Proceedings**, Madison, v. 27, p. 10-13, 1963.

OLIVEIRA, F.C.; MATTIAZZO, M.E.; MARCIANO, C.R.; MORAES, S.O. Lixiviação de nitrato em um Latossolo Amarelo distrófico tratado com lodo de esgoto de cultivado com cana-de-açúcar. **Scientia Agrícola**, v. 58, n. 1, p. 171-180, jan./mar. 2001.

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

OLIVEIRA, R.H.; ROSOLEM, C.A.; TRIGUEIRO, R.M. Importância do fluxo de massa e difusão no suprimento de potássio ao algodoeiro como variável de água e potássio no solo. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, Viçosa, v. 28, n. 1, p. 439-445, 2004.

OLIVER, Y.M.; SMETTEM, K.R.J. Parameterisation of physically based solute transport models in sandy soils. **Australian Journal of Soil Research**, Sidney, v. 41, n. 4, p. 771-788, 2003.

PAYET, N.; FINDELING, A.; CHOPART, J.; FEDER, F.; NICOLINI, E.; MACARY, H.S.; VAUCLIN, M. Modelling the fate of nitrogen following pig slurry application on a tropical cropped acid soil on the island of Réunion (France). **Agriculture, Ecosystems and Environment**, Dordrecht, v. 134, p. 218-233, 2009

PARKER, J.C.; VAN GENUCHTEN, M.Th. **Determining transport parameters from laboratory and field tracer experiments**. Virginia: Virginia Agricultural Experiment Station, 1984. 96 p. (Bulletin 84-3).

PEREIRA, L.M.P.; CARAMORI, P.H.; RICCE, W.S.; CAVIGLIONE, J.H. Análise comparativa de dados meteorológicos obtidos por estação convencional e automática em Londrina – PR. **Semina: Ciências Agrárias**, Londrina, v. 29, n. 2, p. 299-306, abr./jun. 2008.

PIOVESAN, R.P.; FAVARETTO, N.; PAULETTI, V.; MOTTA, A.C.V.; REISSMAN, C.B. Perdas de nutrientes via subsuperfície em colunas de solo sob fertilização mineral e orgânica. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, Viçosa, v. 33, n. 1, p. 757-766, 2009.

RASIAH, V.; ARMOUR, J.D.; MENZIES, N.W.; HEINER, D.H.; DONN, M.J.; MAHENDRARAJAH, S. Nitrate retention under sugarcane in wet tropical Queensland deep soil profiles. **Australian Journal of Soil Research**, Sidney, v. 41, n.6, p. 1145-1161, 2003.

RIVERA, R.N.C.; DUARTE, S.N.; MIRANDA, J.H.; BOTREL, T.A. Modelagem da dinâmica do potássio no solo sob irrigação por gotejamento: validação do modelo. **Engenharia Agrícola**, Jaboticabal, v. 26, n. 2, p. 388-394, maio/ago. 2006.

RIVERA, R.N.C.; MIRANDA, J.H.; DUARTE, S.N.; BOTREL, T.A. Modelo aplicado à dinâmica da água e do potássio no solo sob irrigação por gotejamento – Análise de sensibilidade. **Engenharia Agrícola**, Jaboticabal, v. 28, n. 3, p. 448-459, jul./set. 2008.

ROSSI, P.; MIRANDA, J.H.; DUARTE, S.N. Curvas de distribuição de efluentes do íon nitrato em amostras de solo deformadas e indeformadas. **Engenharia Agrícola**, Jaboticabal, v. 27, n. 3, p. 675-682, set. 2007.

RUBIO, C.; LLORENS, P.; VAN GENUCHTEN, M. Th. Modelización del flujo transitorio en suelos franco-limosos utilizando Hydrus-1D. In: SAMPER CALVETE, F.J.; PAZ GONZÁLEZ, A. (Ed.). **Estudios de la zona no saturada del suelo**. A Coruña: Universidade da Coruña, 2005. v. 7, p. 257-261.

SENTELHAS, P.C.; MORAES, S.O.; PIEDADE, S.M.S.; PEREIRA, A.R.; ANGELOCCI, L.R.; MARIN, F.R. Análise comparativa de dados meteorológicos obtidos por estações convencional e automática. **Revista Brasileira de Agrometeorologia**, Piracicaba, v. 5, n. 2, p. 215-221, 1997.

ŠIMŮNEK, J.; SUAREZ, D.L.; ŠEJNA, M. The UNSATCHEM software package for simulating the one-dimensional variably saturated water flow, heat transport, carbon dioxide production and transport, and multicomponent solute transport with major ion equilibrium and kinetic chemistry, Version 2.0. **Research Report**, Riverside, n. 141, U.S. Salinity Laboratory, USDA, ARS, 1996. 186 p.

ŠIMŮNEK, J.; VAN GENUCHTEN, M.Th.; ŠEJNA, M. **The HYDRUS-1D Software Package for Simulating the Movement of Water, Heat, and Multiple Solutes in Variably Saturated Media, Version 3.0, HYDRUS Software Series 1**. Riverside: Department of Environmental Sciences, University of California Riverside, 2005.

ŠIMŮNEK, J.; KÖHNE, J.N.; KODEŠOVÁ, R.; ŠEJNA, M. Simulating nonequilibrium movement of water, solutes and particles using HYDRUS – A review of recent applications. **Soil and Water Resources**, Athens, v. 3, p. 42-51, 2008 (Special Edition 1).

VALOCCHI, A.J. Describing the transport of ion-exchanging contaminants using an effective K_d approach. **Water Resources Research**, Washington, v. 20, n. 4, p. 499-503, 1984.

VANCLOOSTER, M.; VIAENE, P.; CHRISTIAENS, K. **A mathematical model for simulating water and agrochemicals in the soil and vadose environment**. Leuven: Institute for Land and Water Management Leuven; Ktholieke Universiteit Leuven, 1994. 145 p.

VAN GENUCHTEN, M.Th. A closed-form equation for predicting the conductivity of unsaturated soils. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v. 44, p. 892-897, Sept./Oct. 1980.

VAN GENUCHTEN, M.Th.; IMNEK, J. Integrated modeling of vadose zone flow and transport processes. In: FEDDES, R.A.; ROOIJ, G.H.; VAN DAM, J.C. (Ed.). **Unsaturated zone modeling: progress, challenges and applications**. Dordrecht: Kluwer Academic, 2004. chap. 2, p. 37-69.

VOGEL, T.; CSLEROV, M. On the reliability of unsaturated hydraulic conductivity calculated from the moisture retention curve. **Transport in Porous Media**, Phoenix: v. 3, n. 1, p. 1-15, 1988.

WAGENET, R.J.; HUSTON, J.L. LEACHM: **Leaching estimation and chemistry model**: version 2. Ithaca: Cornell University, Center for Environmental Research, 1989. 148 p.

WARKENTIM, B.P. Proteccion de la calidad del agua subterranea a traves de un riego eficiente. In: _____. **Uso eficiente del agua**. Disponvel em: <www.unesco.org.uy/phi/libros/uso_eficiente/warkentim> Acesso em: 16 jan. 2008.

WEBER, O.L.S.; CHITOLINA, J.C.; CAMARGO, O.A.; ALLEONI, L.R.F. Cargas eltricas estruturais e variveis de solos tropicais altamente intemperizados. **Revista Brasileira de Cincia do Solo**, Viosa, v. 29, n. 1, p. 867-873, 2005.

WILLMOTT, C.J.; ACKLESON, S.G.; DAVIS, R.E.; FEDDEMA, J.J.; KLINK, K.M.; LEGATES, D.R.; O'DONNELL, J.; ROWE, C.M. Statistics for the evaluation and comparison of models. **Journal of Geophysical Research**, Washington, v. 90, n. C5, p. 8995-9005, Sept. 1985.

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

ANEXOS

Anexo A – Valores observados de teor de nitrato (mg L^{-1}) e ajustados pelo modelo DISP para a elaboração das curvas de distribuição de efluentes, em relação ao volume de poro, para o Latossolo Vermelho Amarelo (LVA) e Nitossolo Vermelho (NV)

LVA			NV		
VP	Obs.	Ajuste	VP	Obs.	Ajuste
0,09	0,00	0,00	0,08	0,03	0,00
0,17	0,00	0,00	0,15	0,03	0,04
0,26	0,00	0,00	0,23	0,12	0,14
0,34	0,00	0,01	0,31	0,25	0,25
0,43	0,03	0,04	0,38	0,36	0,36
0,51	0,09	0,09	0,46	0,45	0,45
0,60	0,17	0,15	0,54	0,55	0,54
0,68	0,24	0,23	0,61	0,61	0,61
0,77	0,32	0,32	0,69	0,67	0,66
0,86	0,39	0,41	0,76	0,72	0,71
0,94	0,48	0,49	0,84	0,76	0,75
1,03	0,54	0,56	0,92	0,81	0,79
1,11	0,62	0,63	0,99	0,81	0,82
1,20	0,69	0,69	1,07	0,85	0,84
1,28	0,73	0,74	1,15	0,87	0,86
1,37	0,81	0,78	1,22	0,88	0,88
1,45	0,85	0,82	1,30	0,90	0,90
1,54	0,88	0,85	1,38	0,90	0,91
1,63	0,92	0,88	1,45	0,91	0,92
1,71	0,94	0,90	1,53	0,92	0,93
1,80	0,92	0,92	1,61	0,93	0,94
1,88	0,92	0,93	1,68	0,94	0,95
1,97	0,92	0,94	1,76	0,94	0,95
2,05	0,94	0,95	1,83	0,95	0,96
2,14	0,92	0,96	1,91	0,96	0,96
2,22	0,89	0,97	1,99	0,97	0,97
2,32	0,95	0,97	2,06	0,97	0,97
2,41	0,95	0,98	2,14	0,98	0,98
2,49	0,96	0,98	2,22	0,97	0,98
2,58	0,97	0,99	2,29	0,98	0,98
2,66	0,97	0,99	-	-	-

Anexo B – Valores observados de teor de potássio (mg L^{-1}) e ajustados pelo modelo DISP para a elaboração das curvas de distribuição de efluentes, em relação ao volume de poro (VP), para o Latossolo Vermelho Amarelo (LVA) e Nitossolo Vermelho (NV)

(continua)

VP	LVA Obs.	Ajuste	VP	NV Obs.	Ajuste
0,09	0,00	0,00	0,08	0,00	0,00
0,17	0,00	0,00	0,15	0,00	0,00
0,26	0,00	0,00	0,23	0,00	0,00
0,34	0,00	0,00	0,30	0,01	0,00
0,43	0,00	0,00	0,38	0,01	0,00
0,52	0,00	0,00	0,45	0,01	0,01
0,60	0,00	0,01	0,53	0,02	0,01
0,69	0,01	0,02	0,61	0,03	0,03
0,77	0,04	0,04	0,68	0,04	0,04
0,86	0,09	0,07	0,76	0,04	0,06
0,95	0,13	0,11	0,83	0,08	0,08
1,03	0,18	0,16	0,91	0,11	0,11
1,12	0,23	0,22	0,98	0,14	0,14
1,20	0,28	0,28	1,06	0,17	0,16
1,29	0,33	0,34	1,14	0,20	0,19
1,38	0,39	0,40	1,21	0,19	0,22
1,46	0,45	0,46	1,29	0,25	0,25
1,55	0,51	0,52	1,36	0,28	0,28
1,63	0,58	0,57	1,44	0,29	0,31
1,72	0,62	0,62	1,51	0,33	0,34
1,80	0,66	0,67	1,59	0,37	0,37
1,89	0,70	0,71	1,67	0,39	0,39
1,98	0,73	0,75	1,74	0,42	0,42
2,06	0,76	0,78	1,82	0,45	0,45
2,15	0,81	0,81	1,89	0,47	0,47
2,23	0,83	0,84	1,97	0,49	0,49
2,32	0,86	0,86	2,04	0,52	0,52
2,41	0,88	0,88	2,12	0,54	0,54
2,49	0,92	0,90	2,20	0,57	0,56
2,58	0,94	0,91	2,27	0,59	0,58
2,66	0,96	0,92	2,35	0,60	0,60
2,75	0,95	0,94	2,42	0,63	0,62
2,84	0,96	0,94	2,50	0,64	0,63
2,92	0,97	0,95	2,57	0,66	0,65
3,01	0,96	0,96	2,65	0,69	0,67
3,09	0,98	0,97	2,73	0,69	0,68
3,18	0,97	0,97	2,80	0,71	0,69
3,27	0,98	0,98	2,88	0,72	0,71
3,35	0,96	0,98	2,95	0,72	0,72
3,44	0,95	0,98	3,03	0,75	0,73
3,52	0,99	0,98	3,10	0,76	0,75
3,61	0,99	0,99	3,18	0,78	0,76
3,70	0,99	0,99	3,26	0,78	0,77
3,78	0,99	0,99	3,33	0,78	0,78
3,87	1,00	0,99	3,41	0,79	0,79
3,95	1,00	0,99	3,48	0,79	0,80
4,04	0,96	0,99	3,56	0,80	0,81
4,12	1,00	1,00	3,63	0,82	0,82
4,21	0,99	1,00	3,71	0,81	0,82
4,30	1,00	1,00	3,79	0,82	0,83

Anexo B – Valores observados de teor de potássio (mg L^{-1}) e ajustados pelo modelo DISP para a elaboração das curvas de distribuição de efluentes, em relação ao volume de poro (VP), para o Latossolo Vermelho Amarelo (LVA) e Nitossolo Vermelho (NV)

(conclusão)

VP	LVA Obs.	Ajuste	VP	NV Obs.	Ajuste
-	-	-	3,86	0,82	0,84
-	-	-	3,94	0,83	0,85
-	-	-	4,01	0,84	0,85
-	-	-	4,09	0,85	0,86
-	-	-	4,16	0,86	0,87
-	-	-	4,24	0,87	0,87
-	-	-	4,32	0,86	0,88
-	-	-	4,39	0,86	0,88
-	-	-	4,47	0,87	0,89
-	-	-	4,54	0,89	0,89
-	-	-	4,62	0,89	0,90
-	-	-	4,69	0,90	0,90
-	-	-	4,77	0,91	0,91
-	-	-	4,85	0,91	0,91
-	-	-	4,92	0,91	0,91
-	-	-	5,00	0,91	0,92
-	-	-	5,07	0,93	0,92
-	-	-	5,15	0,92	0,92
-	-	-	5,22	0,91	0,93
-	-	-	5,30	0,93	0,93
-	-	-	5,38	0,93	0,93
-	-	-	5,45	0,92	0,94
-	-	-	5,53	0,92	0,94
-	-	-	5,60	0,92	0,94
-	-	-	5,68	0,93	0,94
-	-	-	5,75	0,93	0,95
-	-	-	5,83	0,94	0,95
-	-	-	5,91	0,96	0,95
-	-	-	5,98	0,96	0,95
-	-	-	6,06	0,95	0,95
-	-	-	6,13	0,95	0,96
-	-	-	6,21	0,96	0,96
-	-	-	6,28	0,98	0,96
-	-	-	6,36	0,98	0,96
-	-	-	6,44	0,98	0,96
-	-	-	6,51	0,98	0,96
-	-	-	6,59	0,98	0,97
-	-	-	6,66	0,99	0,97

Anexo C – Coeficientes de determinação (r^2) e soma dos quadrados dos desvios (R_s) para os ajustes das curvas de distribuição de efluentes

Parâmetros estatísticos	LVA		NV	
	K ⁺	NO ₃ ⁻	K ⁺	NO ₃ ⁻
r^2	0,999	0,996	0,999	0,999
R_s	0,009	0,019	0,012	0,003

Anexo D – Valores observados de teor de potássio e água, em coluna segmentada, para cada repetição em Latossolo Vermelho Amarelo (LVA) e Nitossolo Vermelho (NV)

Repetição	Prof. (m)	LVA		NV	
		K ⁺ (mg L ⁻¹)	θ (m ³ m ⁻³)	K ⁺ (mg L ⁻¹)	θ (m ³ m ⁻³)
Rep. 1	-0,07	1555,5	0,434	1662,9	0,493
	-0,14	1530,4	0,406	750,8	0,489
	-0,21	1526,8	0,396	409,4	0,488
	-0,28	1286,1	0,395	157,9	0,487
	-0,35	767,0	0,368	84,1	0,485
	-0,42	193,0	0,375	73,6	0,470
	-0,49	97,0	0,349	60,1	0,447
	-0,56	72,4	0,294	38,0	0,294
	-0,63	129,7	0,026	108,5	0,063
	-0,70	133,7	0,027	95,8	0,061
Rep. 2	-0,07	1647,6	0,429	1468,7	0,531
	-0,14	1587,1	0,423	903,4	0,506
	-0,21	1484,1	0,412	477,7	0,504
	-0,28	1164,6	0,423	182,0	0,503
	-0,35	504,8	0,405	107,4	0,490
	-0,42	93,9	0,392	81,2	0,483
	-0,49	66,1	0,361	70,8	0,481
	-0,56	75,0	0,266	68,3	0,309
	-0,63	148,5	0,044	119,1	0,067
	-0,70	72,5	0,034	90,0	0,067
Rep. 3	-0,07	1663,5	0,372	1524,4	0,518
	-0,14	1641,4	0,369	830,6	0,504
	-0,21	1440,9	0,375	336,7	0,513
	-0,28	1227,5	0,359	126,3	0,512
	-0,35	665,7	0,332	74,5	0,502
	-0,42	232,5	0,337	73,2	0,481
	-0,49	80,9	0,313	58,4	0,458
	-0,56	76,6	0,197	53,9	0,265
	-0,63	101,8	0,027	93,4	0,074
	-0,70	117,0	0,024	78,2	0,075

Anexo E – Valores observados de teor de nitrato e água, em coluna segmentada, para cada repetição em Latossolo Vermelho Amarelo (LVA) e Nitossolo Vermelho (NV)

Repetição	Prof. (m)	LVA		NV	
		NO ₃ ⁻ (mg L ⁻¹)	θ (m ³ m ⁻³)	NO ₃ ⁻ (mg L ⁻¹)	θ (m ³ m ⁻³)
Rep. 1	-0,07	16,2	0,372	2,8	0,517
	-0,14	11,6	0,373	2,0	0,501
	-0,21	12,3	0,374	2,9	0,503
	-0,28	4,6	0,371	3,6	0,512
	-0,35	6,5	0,362	4,1	0,501
	-0,42	59,5	0,347	91,8	0,492
	-0,49	193,0	0,325	388,6	0,479
	-0,56	159,8	0,173	607,6	0,265
	-0,63	128,0	0,022	148,5	0,076
	-0,70	62,1	0,023	161,5	0,071
Rep. 2	-0,07	1,6	0,383	1,6	0,511
	-0,14	1,7	0,382	2,6	0,504
	-0,21	2,4	0,379	6,9	0,506
	-0,28	3,2	0,372	4,6	0,499
	-0,35	5,1	0,364	12,1	0,498
	-0,42	8,2	0,353	72,4	0,505
	-0,49	116,0	0,335	284,6	0,495
	-0,56	161,4	0,205	585,2	0,377
	-0,63	74,6	0,032	205,9	0,067
	-0,70	77,1	0,028	250,2	0,061
Rep. 3	-0,07	6,3	0,369	4,6	0,514
	-0,14	4,6	0,361	3,7	0,494
	-0,21	4,0	0,352	7,2	0,493
	-0,28	2,7	0,349	3,9	0,485
	-0,35	4,6	0,345	27,7	0,481
	-0,42	72,4	0,340	38,3	0,478
	-0,49	219,4	0,315	402,7	0,472
	-0,56	246,0	0,179	680,2	0,240
	-0,63	59,2	0,018	138,5	0,060
	-0,70	61,2	0,014	74,8	0,060