**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS**

**VERIFICAÇÃO EXPERIMENTAL DE UM
MODELO DE SIMULAÇÃO DO MOVIMENTO
DE SOLUTOS EM UM MEIO POROSO NATURAL.**

Autor : Antonio Donizetti Giuliano

**Dissertação apresentada ao Instituto de
Física de São Carlos para obtenção do
Título de Mestre em Física Aplicada**

Orientador : Dr. Silvio Crestana

**DEPARTAMENTO DE FÍSICA E CIÊNCIA DOS MATERIAIS
SÃO CARLOS, AGOSTO DE 1995.**

IFSC UNIVERSIDADE
DE SÃO PAULO
Instituto de Física de São Carlos

Av. Dr. Carlos Botelho, 1465
CEP 13560-250 - São Carlos - SP
Brasil

Fone (0162) 72-6222
Fax (0162) 72-2218

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE
ANTONIO DONIZETTI GULLANO APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO
CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 29 DE AGOSTO DE 1995.

COMISSÃO JULGADORA:

Silvio Crestana
Dr. Silvio Crestana

Roberto Nicolau Onody
Prof. Dr. Roberto Nicolau Onody

Roberto de Alencar Lotufo
Prof. Dr. Roberto de Alencar Lotufo

Se o Senhor não edificar a casa, em vão trabalham os que a edificam;

Se o Senhor não guardar a cidade, em vão vigia a sentinela.

Inútil vos será levantar de madrugada, repousar tarde, comer o pão que penosamente granjeaste;

Aos seus amados Ele o dá enquanto dormem.

Quem é sábio atente para essas cousas, e considere as misericórdias do Senhor, pois:

Bem-aventurado aquele que teme ao Senhor e anda nos seus caminhos !

Extraído do Livro dos Salmos

Agradecimentos

À Cristo Jesus que me capacitou, me auxiliou nos momentos difíceis, sempre esteve ao meu lado com Seu braço forte, e me ama do jeito que eu sou.

À meu pai Nicola e minha mãe Edinê (já falecida), que lutaram com todas as suas forças, para que seus filhos "fossem doutores".

À minha tia Alaide, minha tia-mãe, que sempre prepara aquela comidinha caseira, pois segundo ela: -" Você emagreceu, Toninho..." , toda vez que eu chego em Tambaú-SP.

Aos meus irmãos, Chico e Andréa: um dia eles crescem...

À Rosana, que em tão pouco tempo juntos soube me entender em todos os momentos.

À Dona Vanda e Seu Betune: Vocês são minha família aqui !!!

À moçada da minha igreja, o "meu povo": O carinho de vocês é muito importante para mim...

A você Silvio, o "chefe", por acreditar em mim, pelos conselhos, diretrizes e puxões de orelha...

À Ana e a Érita, secretarias do "chefe": Obrigado pelas folhas, cheques, computadores, impressoras, endereços, cafezinhos, resfriados, entre outras coisas...

Ao Paulo "xerox" pelas cópias, colas, tesouras, estiletes mas principalmente os "causos"...

Ao André Torre. "Tu sei molto ma che un' amico...io te voglio molto bene !!!".

Ao Lucio, pela sua amizade e pelos cursos intensivos de "passar vontade", quando você começava a falar dos sorvetes giovanella...

Ao Juca pelas críticas sempre construtivas, pelas canções e pelo sorriso sempre carinhoso...

Ao Alvaro, pelas autorizações, assinaturas e claro pelo tempo que você ficava esperando, eu sair da frente do computador...

Ao Carlos Vaz, pelas idas e vindas de Campinas e também obviamente ao "Pizza Fone"...

A dupla dinâmica Renê e Godoy, pelas construções e "brigas" mais engraçadas que eu já vi...

À Vera e a Janis, da Biblioteca do CNPDIA, pelo carinho, compreensão e competência.

À todo o pessoal do **CNPDIA**, que sempre foram muito prestativos comigo: "Carma o churrasco tá quase saindo..." + =

Ao professor Lotufo que me acolheu na Unicamp colocando toda a estrutura do seu departamento a minha disposição, pelos programas desenvolvidos, pela amizade, pelos conselhos, pelos cafezinhos e principalmente por não ficar nervoso quando eu dormia na frente da tela do computador, logo após o almoço...

Ao Posadas e ao Sander Eskes, pelas orientações, auxílios em traduções, pelas boas risadas entre outras coisas...

À Rosângela e todo o pessoal do laboratório de resíduos do CNPMA-EMBRAPA em Jaguariúna-SP, que deram livre acesso, ao "menino", em todas as dependências do laboratório.

Ao Lombardi, ao Sidney, à Sônia, à Isabella da Seção de Conservação de Solos do IAC, em Campinas-SP, que permitiram a utilização dos lisímetros além de prontamente se disporem a solucionar os problemas que apareciam.

À Vladeres, à Beth e todo o pessoal da secretaria de pós-graduação do IFSC, pelo sorriso sempre constante e a eficiência invejável...

Às "meninas da biblioteca da física", pela compreensão e competência.

Ao CENA, pelos dados experimentais das curvas de retenção.

À FAPESP, através do projeto temático de equipes 90-3773/7, pelo suporte financeiro.

À EMBRAPA, através do CNPDIA, pelo suporte técnico e institucional.

Ao IFSC, através do DFCM, pelo suporte institucional.

SUMÁRIO

	Página
LISTA DE FIGURAS	i
LISTA DE TABELAS	v
RESUMO	vii
ABSTRACT	ix
1 - INTRODUÇÃO	
1.1 - IDENTIFICAÇÃO DO PROBLEMA;	1
1.2 - A FÍSICA E OS PROCESSOS DO SOLO;	2
1.3 - MODELOS;	3
1.4 - OBJETIVOS PROPOSTOS NESTA DISSERTAÇÃO;	7
1.5 - RESUMO DOS CAPÍTULOS;	8
2 - ALGUNS CONCEITOS BÁSICOS DE FÍSICA DE SOLOS E EQUIPAMENTOS UTILIZADOS NESTE TRABALHO	
2.1 - SOLO;	10
2.2 - LISÍMETROS;	11
2.3 - TENSÍÔMETROS;	12
2.4 - CARACTERÍSTICAS FÍSICA-HÍDRICAS DO SOLO;	15
2.4.1 - Equação de Darcy;	15
2.4.2 - Fluxo em Solo Não-Saturado;	17
2.4.3 - Difusividade Hidráulica	19
2.4.4 - Teoria de Infiltração Aplicada ao Solo	20
2.4.5 - Condutividade e Retentividade Hidráulica	22
2.4.6 - Condução de Calor no Solo	23
2.4.7 - Balanço de Energia e Balanço de Massa	25

2.5 - CARACTERÍSTICAS FÍSICO-QUÍMICAS DO SOLO;	
2.5.1 - Transporte de Solutos Dissolvidos no Solo;	26
3 - BREVE DESCRIÇÃO DO MODELO LEACHM-P	
3.1 - INTRODUÇÃO;	31
3.2. - APRESENTAÇÃO DO MODELO LEACHM-P;	32
3.3 - SUBROTINAS UTILIZADASPELO MODELO;	34
3.4 - ADAPTAÇÕES INTRODUZIDAS NO MODELO;	38
3.5 - CALIBRAÇÃO DO MODELO;	39
3.6 - LIMITAÇÕES DO MODELO;	40
4 - MATERIAIS E MÉTODOS	
4.1 - LEVANTAMENTO E PREPARAÇÃO DAS CONDIÇÕES DO EXPERIMENTO;	41
4.1.1 - Lisímetro;	41
4.1.2 - Proteção dos Lisímetros;	44
4.1.3 - Tensiômetro;	45
4.1.4 - Manômetro;	48
4.2 - MEDIDAS EXPERIMENTAIS REALIZADAS;	49
4.2.1 -Temperatura no Interior do Solo e da Cobertura de Plástico;	49
4.2.2-Condutividade Hidráulica Saturada;	51
4.2.3 - Potencial Matricial de Água no Solo	54
4.2.4 - Solução de Solo	55
5 - RESULTADOS E DISCUSSÃO	
5.1 - OBTENÇÃO DAS CURVAS DE RETENÇÃO E AJUSTES DE PARÂMETROS;	58
5.2 - CURVA DE POTENCIAL DE ÁGUA NO SOLO EM FUNÇÃO DO TEMPO;	67
5.3 - CURVA DE CONCENTRAÇÃO DE PESTICIDA EM FUNÇÃO DA PROFUNDIDADE E DO TEMPO;	73

6 - CONCLUSÃO E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	
6.1 - CONCLUSÕES;	78
6.2 - SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS;	79
7 - REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	81
GLOSSÁRIO	90
APÊNDICES	
A.1 - EXEMPLO DE ARQUIVO DE ENTRADA;	93
A.2 - EXEMPLO DE ARQUIVO DE SAÍDA;	98
A.3 - TABELA DE DADOS DE TENSÍOMETRO;	100
A.4 - TABELAS DE DADOS CROMATOGRÁFICOS;	102
A.5 - TABELAS DE DADOS DE ENTRADA DO MODELO	103
A.6 - GRÁFICOS COMPLEMENTARES	106

LISTA DE FIGURAS

	Página
<hr/>	
Figura 2-1: Tipo de Lisímetro utilizado neste trabalho;	11
Figura 2-2: Desenho esquemático de tensiômetro utilizado neste trabalho;	12
Figura 2-3: Método utilizado para o calculo do potencial matricial de água no solo;	14
Figura 2-4: Fluxo através de uma coluna horizontal de solo saturado;	16
Figura 2-5: Perfil típico de solo durante um processo de infiltração uniforme de água;	21
Figura 4-1: Disposição dos 30 lisímetros na Estação experimental do IAC, em Campinas-SP;	42
Figura 4-2: Chapa de zinco colocada dentro dos lisímetros com o intuito de restringir o efeito de borda;	44
Figura 4-3: Cobertura de plástico colocada sobre a área experimental com os lisímetros protegidos de chuvas naturais;	45
Figura 4-4: Posição em que foram instalados os tensiômetros nos lisímetros;	47
Figura 4-5: Pedaco de borracha adaptado a parede de um tensiômetro para evitar a utilização pela água de caminhos preferenciais;	47
Figura 4-6: Detalhe da bucha de vedação plástica, montada na boca da proveta, para evitar perda de mercúrio por derramamento do manômetro;	48
Figura 4-7: Visão geral da montagem contendo o tensiômetro, o manômetro de mercúrio e os tubinhos utilizados para conecta-los;	49
Figura 4-8: Vedação, através de uma cinta de chapa galvanizada, da saída do condutor superior utilizado para a captação de água de escoamento superficial;	52
Figura 4-9: Frasco de Mariotte;	52

Figura 4-10: Caminho percorrido pela solução de solo. Após atravessar o equipamento a solução de solo é direcionada através de condutores até recipientes coletores do efluente;	55
Figura 4-11: Frascos de 250 ml, instalados nos condutores, utilizados para a captação da solução de solo, para as três profundidades descritas;	56
Figura 5-1: Gráfico que permite comparar a curva de retenção simulada pelo modelo com os valores obtidos experimentalmente, à profundidade de 30 cm, para o solo de Pindorama-SP;	63
Figura 5-2: Gráfico que permite comparar a curva de retenção simulada pelo modelo com os valores obtidos experimentalmente, à profundidade de 60 cm, para o solo de Pindorama-SP;	64
Figura 5-3: Gráfico que permite comparar a curva de retenção simulada pelo modelo com os valores obtidos experimentalmente, à profundidade de 30 cm, para o solo de Monte Alegre do Sul-SP;	64
Figura 5-4: Gráfico que permite comparar a curva de retenção simulada pelo modelo com os valores obtidos experimentalmente, à profundidade de 70 cm, para o solo de Monte Alegre do Sul-SP;	65
Figura 5-5: Gráfico que permite comparar a curva de retenção simulada pelo modelo com os valores obtidos experimentalmente, à profundidade de 160 cm, para o solo de Monte Alegre do Sul-SP;	65
Figura 5-6: Gráfico que permite comparar a curva de retenção simulada pelo modelo com os valores obtidos experimentalmente, à profundidade de 30 cm, para o solo de Ribeirão Preto-SP;	66
Figura 5-7 Gráfico que permite comparar a curva de retenção simulada pelo modelo com os valores obtidos experimentalmente, à profundidade de 70 cm, para o solo de Ribeirão Preto-SP;	66
Figura 5-8 Gráfico que permite comparar a curva de retenção simulada pelo modelo com os valores obtidos experimentalmente, à profundidade de 160 cm, para o solo de Ribeirão Preto-SP;	67
Figura 5-9: Gráfico de potencial matricial em função do tempo, que permite comparar os pontos obtidos experimentalmente com a curva simulada pelo modelo, para a profundidade de 15 cm, para o solo de Pindorama-SP;	68

Figura 5-10: Gráfico de potencial matricial em função do tempo, que permite comparar os pontos obtidos experimentalmente com a curva simulada pelo modelo, para a profundidade de 70 cm, para o solo de Pindorama-SP;	69
Figura 5-11: Gráfico de potencial matricial em função do tempo, que permite comparar os pontos obtidos experimentalmente com a curva simulada pelo modelo, para a profundidade de 15 cm, para o solo de Monte Alegre do Sul-SP;	70
Figura 5-12: Gráfico de potencial matricial em função do tempo, que permite comparar os pontos obtidos experimentalmente com a curva simulada pelo modelo, para a profundidade de 70 cm, para o solo de Monte Alegre do Sul-SP;	70
Figura 5-13: Gráfico de potencial matricial em função do tempo, que permite comparar os pontos obtidos experimentalmente com a curva simulada pelo modelo, para a profundidade de 15 cm, para o solo de Ribeirão Preto-SP;	71
Figura 5-14: Gráfico de potencial matricial em função do tempo, que permite comparar os pontos obtidos experimentalmente com a curva simulada pelo modelo, para a profundidade de 70 cm, para o solo de Ribeirão Preto-SP;	72
Figura 5-15: Gráfico que permite comparar os valores para a concentração da atrazina em função do tempo, obtidos experimentalmente, com a curva simulada pelo modelo para a profundidade de 90 cm, para o solo de Monte Alegre do Sul;	74
Figura 5-16: Concentração de pesticida em função da profundidade, 23 dias após a aplicação do herbicida para o solo de Pindorama-SP;	75
Figura 5-17: Concentração de pesticida em função da profundidade, 14 dias após a aplicação do herbicida para o solo de Monte Alegre do Sul-SP;	76
Figura 5-18: Concentração de pesticida em função da profundidade, 47 dias após a aplicação do herbicida para o solo de Monte Alegre do Sul-SP;	76
Figura A.6-1: Gráfico de potencial matricial em função do tempo, que compara os pontos obtidos experimentalmente com a curva simulada pelo modelo, à profundidade de 30 cm, para o solo de Pindorama-SP;	106

Figura A.6-2: Gráfico de potencial matricial em função do tempo, que compara os pontos obtidos experimentalmente com a curva simulada pelo modelo, à profundidade de 160 cm, para o solo de Pindorama-SP;	106
Figura A.6-3: Gráfico de potencial matricial em função do tempo, que compara os pontos obtidos experimentalmente com a curva simulada pelo modelo, à profundidade de 30 cm, para o solo de Monte Alegre do Sul-SP;	107
Figura A.6-4: Gráfico de potencial matricial em função do tempo, que compara os pontos obtidos experimentalmente com a curva simulada pelo modelo, à profundidade de 160 cm, para o solo de Monte Alegre do Sul-SP;	107
Figura A.6-5: Gráfico de potencial matricial em função do tempo, que compara os pontos obtidos experimentalmente com a curva simulada pelo modelo, à profundidade de 30 cm, para o solo de Ribeirão Preto-SP;	108
Figura A.6-6: Gráfico de potencial matricial em função do tempo, que compara os pontos obtidos experimentalmente com a curva simulada pelo modelo, à profundidade de 160 cm, para o solo de Ribeirão Preto-SP;	108
Figura A.6-7 - Concentração de atrazina em função da profundidade, 06 dias após a aplicação do herbicida para o solo de Pindorama-SP;	109
Figura A.6-8 - Concentração de atrazina em função da profundidade, 07 dias após a aplicação do herbicida para o solo de Pindorama-SP;	109
Figura A.6-9 - Concentração de atrazina em função da profundidade, 03 dias após a aplicação do herbicida para o solo de Monte Alegre do Sul-SP;	110
Figura A.6-10 - Concentração de atrazina em função da profundidade, 35 dias após a aplicação do herbicida para o solo de Monte Alegre do Sul-SP;	110
Figura A.6-11 - Concentração de atrazina em função da profundidade, 62 dias após a aplicação do herbicida para o solo de Monte Alegre do Sul-SP;	111

LISTA DE TABELAS

Página

Tabela 4.1 - Profundidades de instalação dos tensiômetros em cada um dos lisímetros utilizados;	46
Tabela 4.2 - Valores médios da temperatura, no interior e na superfície dos lisímetros, para cada um dos solos;	50
Tabela 4.3 - Temperaturas médias obtidas no interior da cobertura a um metro de altura do solo;	51
Tabela 4.4 - Medidas de condutividade hidráulica saturada obtidas através do experimento de saturação;	53
Tabela 4.5 - Quantidade correspondente de chuva simulada em cada um dos nove lisímetros utilizados;	54
Tabela 4.6 - Número total de frascos, contendo solução de solo, coletados nos lisímetros utilizados;	57
Tabela 5.1 - Valores do potencial de água no solo e de umidade à base de volume obtidos, através da Panela de Richard, para o solo de Pindorama-SP;	59
Tabela 5.2 - Valores do potencial de água no solo e de umidade à base de volume obtidos, através da Panela de Richard, para o solo de Monte Alegre do Sul-SP;	60
Tabela 5.3 - Valores do potencial de água no solo e de umidade à base de volume obtidos, através da Panela de Richard, para o solo de Ribeirão Preto-SP;	61
Tabela 5.4 - Valores obtidos, para cada um dos três parâmetros estudados, para o solo de Pindorama para duas profundidades e para os solos de Monte Alegre do Sul e Ribeirão Preto para três profundidades;	62
Tabela A.3 - Valores de Potencial Matricial obtidos através dos tensiômetros colocados nos lisímetros do IAC. Os valores são negativos. Estes dados foram obtidos de 12/04/94 a 24/06/94;	100
Tabela A.4 - Valores obtidos através de Cromatografia Líquida para as amostras coletadas nos lisímetros do IAC;	102

Tabela A.5.1 - Quantidade de chuva simulada aplicada, em cada um dos nove lisímetros;	103
Tabela A.5.2 - Características físico-químicas do pesticida aplicado (USEPA-ODW, 1991);	103
Tabela A.5.3 - Distribuição de partículas através do perfil para o lisímetro com o solo de Pindorama-SP (Lepsch & Valadares, 1976);	103
Tabela A.5.4 - Condutividade hidráulica saturada (média dos valores obtidos experimentalmente), para os lisímetros com solo de Pindorama-SP;	104
Tabela A.5.5 - Potencial matricial experimental, obtido no primeiro dia de experimento, para os lisímetros com solo de Pindorama-SP;	104
Tabela A.5.6 - Distribuição de partículas através do perfil para o lisímetro com o solo de Monte Alegre do Sul-SP (Rotta et al., 1971);	104
Tabela A.5.7 - Condutividade hidráulica saturada (média dos valores obtidos experimentalmente), para os lisímetros com solo de Monte Alegre do Sul-SP;	104
Tabela A.5.8 - Potencial matricial experimental, obtido no primeiro dia de experimento, para os lisímetros com solo de Monte Alegre do Sul-SP;	104
Tabela A.5.9 - Distribuição de partículas através do perfil para o lisímetro com o solo de Ribeirão Preto-SP (Oliveira & Moniz., 1975);	105
Tabela A.5.10 - Condutividade hidráulica saturada (média dos valores obtidos experimentalmente), para os lisímetros com solo de Ribeirão Preto-SP;	105
Tabela A.5.11 - Potencial matricial experimental, obtido no primeiro dia de experimento, para os lisímetros com solo de Ribeirão Preto-SP;	105

RESUMO

A necessidade de se prever o destino de produtos químicos nos recursos naturais, especificamente no solo e na água, tem levado muitos pesquisadores a conceberem e utilizarem modelos de simulação do movimento de solutos. Neste trabalho utilizou-se o modelo determinístico LEACHM-P (Leaching Estimation and Chemistry Model - Pesticide) para simular o movimento de solutos no solo. O modelo foi calibrado para as condições edafo-ambientais brasileiras, adaptando-se parâmetros, visto que o mesmo não foi originalmente desenvolvido para estas condições. Para os experimentos realizados foram utilizados nove lisímetros, expostos a algumas condições ambientais controladas, constituídos de blocos de solo envolvidos por caixas apropriadas. Foram divididos em conjuntos de três, tendo cada conjunto, lisímetros de um metro de diâmetro por 45, 90 e 180 cm de profundidade. Cada um dos conjuntos continha um solo característico do Estado de São Paulo: Pindorama, Monte Alegre do Sul e Ribeirão Preto. Para a caracterização do potencial de água do solo em função da umidade foram coletadas amostras dos três solos, utilizando-se cilindros de ferro de 4 cm de diâmetro e 3 cm de altura, que foram introduzidos longitudinalmente nas profundidades desejadas. O monitoramento do potencial de água no solo foi feito através de dois tensiômetros instalados em cada lisímetro estudado. A partir dos dados obtidos, foi obtida a curva de potencial matricial em função do tempo, para cada solo. Na parte inferior de cada lisímetro existe uma tubulação que permite coletar o efluente para as profundidades de 45, 90 e 180 cm. Utilizando-se esta facilidade foram obtidas, para cada uma das três profundidades, soluções de solo para cada solo estudado, com regularidade pré-estabelecida. Os resultados obtidos da comparação dos dados experimentais com aqueles obtidos das simulações com o modelo LEACHM-P, após calibrado para as condições tropicais brasileiras, permitiu ajustar, adequadamente, as curvas de retenção e de potencial matricial em função da profundidade para os solos de Pindorama e Monte Alegre do Sul. Além disto, o modelo permitiu ajustar, para estes dois solos, os valores da concentração da atrazina (herbicida largamente utilizado nas plantações de milho e trigo), em função do tempo e da profundidade, obtidos experimentalmente. Para o solo de Ribeirão Preto, o ajuste não proporcionou bons resultados.

ABSTRACT

The necessity to predict the fate of chemical products in the environment, particularly in soil and water, has led many researchers to the use of models for the simulation of solute transport. In this work, the deterministic model LEACHM-P (Leaching Estimation and Chemistry Model - Pesticide) is used to simulate the movement of solutes in soil. Because the model was not originally developed for Brazilian environmental conditions, it was first calibrated through the adaptation of various parameters. Experiments were carried out using nine lysimeters under controlled environmental conditions. The lysimeters were divided into three groups with in each group one lysimeter of 45, 90 and 180 cm depth. Each lysimeter group contained a different soil, typical of the state of São Paulo: Pindorama, monte Alegre do Sul and Ribeirão Preto. In order to determine the relationship between the water potencial and the soil moisture content, samples were collected of all three soil types, using iron cylinders with a diameter of 4 cm and a height of 3 cm, which were inserted horizontally, at the desired depths. The water potential was measured with tensiometers, of which two were installed in each lysimeter. From resultants measurements the matric potencial was obtained as a function of time. A drainpipe underneath each lysimeter enabled the collection of effluent at 45, 90 and 180 cm depth. Using this facility, the soil solution could be sampled at each of these three depths, at regular time intervals. A comparison between the measured data and the data simulated with LEACHM-P model adapted for the tropical conditions found in Brasil, enabled the adjustment of retention curves and matric potencial curves as a function of depth, for the soils of Pindorama and Monte Alegre do Sul. Moreover, the model was able to simulate, for these two soils, the concentration of Atrazine (the most used pesticide in corn and wheat culture) as a function of time and depth, in accordance with the measured concentration values. For Ribeirão Preto soil, the adjustment of retention curves and matric potencial curves as a function of depth, were not sufficient to a good calibration.

1 - INTRODUÇÃO

1.1 - IDENTIFICAÇÃO DO PROBLEMA

No universo da física, o planeta Terra é, em si, meramente um objeto especial de estudo. Contudo as atividades do ser humano enquanto espécie, no planeta, estão limitadas pelo meio-ambiente de forma complexa e sutil. Esta complexidade começou a ser compreendida, pela ciência, somente a poucas décadas (Socolow, 1994).

Nos últimos anos, tem-se agravado o quadro de demanda e distribuição de alimentos, visto que há um limite de terras cultiváveis, no planeta. Em contrapartida, a população mundial cresce e exige produtos de alta qualidade, intensificando as práticas agrícolas que levam ao uso também crescente de fertilizantes e defensivos químicos.

A busca desenfreada por aumento de produtividade, a qualquer custo, tem acelerado a degradação dos recursos naturais, visto que o uso constante e inadequado de produtos químicos no solo, mecanização pesada e intensa, entre outros fatores, significam riscos potenciais aos próprios recursos do solo e da água. Desta maneira, a descrição e o modelamento do transporte de solutos, em meios porosos, é assunto de mais alta relevância e atualidade da pesquisa científica tanto básica como aplicada (Crestana, 1991)

Enormes dificuldades metodológicas tanto do ponto de vista teórico como experimental ainda persistem, por melhores que tenham sido as contribuições dos cientistas nesta área. Desafios existem principalmente na descrição física dos processos de transporte envolvidos (Sposito & Reginato, 1992 ;Crestana, 1994).

1.2 - A FÍSICA E OS PROCESSOS DO SOLO

A diferença básica entre a física de solos e algumas outras áreas da física, está no fato do solo ser um meio heterogêneo e estar vivo. Consequentemente, a obtenção de medidas físicas quantitativas e a descrição de processos através de modelos torna-se, muitas vezes, extremamente complicado.

Estudar o sistema solo do ponto de vista da física, quer básica, quer aplicada, significa direcionar as pesquisas para, no mínimo, três objetivos específicos (Sposito & Reginato, 1992):

a) *Solução de problemas práticos relacionados às necessidades sociais.* A pressão social por uma agricultura eficiente e que torne mínima a contaminação ambiental, resulta na necessidade do conhecimento dos diferentes mecanismos envolvidos nos variados fenômenos físicos, químicos e biológicos presentes no sistema solo;

b) *Busca de conhecimento fundamental.* (I) desenvolvimento de uma relação funcional entre a umidade e a energia contida no sistema água-solo, através de modelos empíricos ou teóricos, (II) descrição quantitativa do movimento de solução de solo sob condições variáveis de temperatura e pressão, utilizando-se modelos de transporte, (III) compreensão das interrelações entre a água e o sistema solo, que levam à deformações da matriz do solo, (IV) descrição do transporte de solutos, calor e água devido ao metabolismo da população microbiana do solo e (V) o comportamento de líquidos voláteis em solos não saturados e

c) *Adaptação de novas técnicas de medida e análise de dados ao sistema solo,* tais como: teoria de fractais, espectroscopia por ressonância magnética nuclear (RMN), espectroscopia por ressonância de spin eletrônico (RSE), tomografia por raio X, tecnologia de sensoramento remoto por satélite, entre outros.

Em outras palavras, pesquisar a física envolvida no sistema solo significa compreender os mecanismos que governam o comportamento do solo e sua atuação na

biosfera, incluindo tanto os processos de interrelação como as trocas de energia, os ciclos da água e o transporte de materiais (Hillel, 1982 ;Crestana, 1994).

1.3 - MODELOS

A necessidade de uma descrição dos fenômenos relacionados com a física de solos, tem nos últimos anos, levado muitos pesquisadores a envolverem-se com o desafio de criar e adaptar modelos capazes de simular, por exemplo, o movimento de solutos no sistema solo.

Glymph e Holtan, 1969, desenvolveram um modelo hidrológico baseado na infiltração de solutos, conhecido por USDAHL (U.S. Department of Agriculture Hydrograph Laboratory). Este modelo estima o fluxo de solutos em córregos e rios. Modelos baseados na infiltração de solutos foram, de certa forma, os precursores dos modelos de transporte químico, especialmente para áreas de geografia plana, apesar de modelos de difusão terem sido aplicados em sistemas de canais e rios em áreas de geografia irregular. Como a água pode ser vista como um elemento que carrega sedimentos e produtos químicos, muitos modelos de qualidade de água foram desenvolvidos a partir dos modelos hidrológicos.

Sob o orientação da Agencia de Proteção Ambiental dos Estados Unidos (EPA), foi desenvolvido um modelo para o transporte de pesticidas, chamado Pesticide Transport and Runoff (PTR) (Crawford e Donigian, 1973). A simulação de pesticidas, neste modelo inclui processos de absorção e dessorção pelo solo. A volatilização do pesticida é considerada como um tipo de degradação, representada por uma equação de primeira ordem com decaimento expresso em função do tempo. Este modelo não considera os nutrientes absorvidos pelas plantas.

Frere et al., 1975, desenvolveram um modelo de transporte químico voltado à agricultura (ACTMO) baseado no modelo USDAHL. A componente de transporte por

erosão/sedimentação, reflete a erosão por escoamento superficial, tanto devido à irrigação como devido à chuva. A componente de transporte químico do modelo, inclui duas opções: pesticidas e nitratos. A opção pesticidas considera adsorção, decomposição química e os processos de movimento no solo. A opção nitrato considera a mineralização, crescimento de plantas e os processos de movimento.

Donigian & Crawford, 1976, modificaram, testaram e desenvolveram um modelo baseado no PTR, onde incluíram uma componente referente aos nutrientes absorvidos pelas plantas. Este modelo ficou conhecido como ARM (Agricultural Runoff Management).

Williams e Hann, 1978, desenvolveram um modelo que considera o escoamento superficial, a sedimentação e os nutrientes das plantas. A componente de nutrientes das plantas, considera tanto a nitrogenização orgânica como a inorgânica. Considera também a denitrificação, a imobilização e a mineralização.

Knisel, 1979, após dois anos de desenvolvimento, publicou um novo modelo, muito utilizado até os dias de hoje, com o nome CREAMS. Este modelo, baseado em conceitos de física de solo, faz modelagens diárias que estimam o escoamento superficial, transporte de sedimentos por erosão, absorção de nutrientes pelas plantas e a concentração de pesticidas. A componente de concentração de pesticida, considera a interceptação foliar, degradação e lavagem do solo, tanto como adsorção e dessorção. Este modelo também estima o crescimento de plantas e a percolação de nitratos fora da região das raízes.

Já no início da década de oitenta, devido ao crescimento dos problemas de contaminação de lençóis freáticos por pesticidas, houve a necessidade de adaptação, do modelo CREAMS, para que o mesmo considerasse o impacto do manejo de práticas agrícolas, sobre a infiltração de pesticidas na zona das raízes. A primeira documentação, que resultou desta nova preocupação "ecológica", foi proposta por Leonard et al., 1985. Deste trabalho nasceu um novo modelo, que na verdade é um desenvolvimento do CREAMS, que foi chamado de GREAMS (Leonard et al., 1986).

Com a mesma preocupação o U.S. Environmental Protection Agency (Carsel et al., 1984), através do laboratório de pesquisas ambientais em Athens, GA, iniciou um trabalho no início de 1982, que resultou em um modelo que simula o movimento vertical de pesticidas em um solo não saturado, acima e abaixo da zona das raízes até o lençol freático. Este modelo recebeu o nome de PRZM (The Pesticide Root Zone Model).

O modelo consiste na simulação do transporte de componentes químicos, escoamento superficial, erosão, crescimento de plantas, percolação, lavagem do solo, volatilização do pesticida, entre outros. As simulações podem ser diárias, mensais ou anuais. Este modelo simula a performance dinâmica do potencial tóxico dos produtos químicos, particularmente os pesticidas, que são aplicados no solo ou nas folhagens das plantas.

Com a intenção de criar um modelo capaz de realizar o balanço de massa de uma cultura, incluindo a possibilidade do cálculo do rendimento econômico da produção, foi desenvolvido por Belmans et al., 1983, o modelo SWACROP.

Nofziger & Hornsby, 1987, desenvolveram um modelo conhecido por CMLS, para o movimento de substâncias químicas orgânicas em solos uniformes (homogêneos). Este modelo pode simular solos com mais de 20 camadas ou horizontes distintos. O CMLS permite também entrar com os coeficientes de partição para cada camada do solo, permite especificar o valor de meia-vida do pesticida, para cada horizonte ou um valor para todas as profundidades, sendo também capaz de simular o movimento de um produto químico em um solo qualquer, durante um intervalo de tempo superior a 15 anos.

Steenhuis et al., 1987, desenvolveram um modelo de nome MOUSE. Este modelo simula apenas os compostos simples, não trabalhando com os produtos de degradação dos pesticidas utilizados. O sistema calcula a condutividade hidráulica não-saturada utilizando uma função exponencial. O modelo MOUSE considera as raízes como estando uniformemente distribuídas.

Wagenet et al, 1989, desenvolveram o Leaching Estimation and Chemistry Model-Pesticide - LEACHM-P. O LEACHM-P será melhor explicado no capítulo 3, pois foi o modelo empregado neste trabalho. Em linhas gerais, é um modelo determinístico que descreve o transporte e a química de solutos, bem como sua absorção pelas plantas, na região não-saturada do solo. Segundo Pennell et al., 1990, o "LEACHM-P é o mais complexo dos cinco modelos considerados (LEACHM-P, PRZM, GREAMS, MOUSE e CMLS) e foi o mais difícil de ser executado, devido o mesmo requerer um número considerável de dados de entrada". O mesmo autor termina o artigo afirmando que o "LEACHM-P, que utiliza a solução dada pela equação de Richard e pela equação de convecção-dispersão de transporte de solutos, é recomendado para cientistas que desejam uma simulação com todos os componentes do pesticida contemplados".

Boesten e van der Linden, 1991, desenvolveram um modelo para transporte de pesticida que também inclui crescimento de plantas, adsorção e degradação de produtos químicos. Este modelo utiliza o coeficiente de Freundlich, para calcular o ponto de equilíbrio da adsorção. O fator de tortuosidade para a difusão é assumido como sendo uma função da umidade do solo que esta sendo simulado. Este modelo foi combinado com o SWACROP (Belmans et al., 1983), com o propósito de se obter um sistema mais completo para trabalhar com pesticidas. Mais recentemente o SWACROP evoluiu para o modelo SWATRE, que associado ao modelo PESTLA (Boesten e Van der Linder, 1991), tem sido utilizado pelo Ministério do Meio-Ambiente da Holanda para prever o impacto de pesticidas usados naquele país, no meio-ambiente.

Desta forma, devido a existência de vários modelos disponíveis, capazes de simular os possíveis impactos ambientais causados por produtos químicos, particularmente aqueles de origem orgânica, tem-se enfatizado na comunidade científica mundial, a necessidade de validá-los.

Como exemplo atual deste enfoque de pesquisa, está em fase de conclusão o projeto temático de equipes, financiado pela FAPESP (Proc. 90/3773-7), envolvendo a EMBRAPA, a USP e o IAC (Crestana, S.,1991), que tem como um de seus objetivos

verificar experimentalmente a validade do modelo determinístico LEACHM-P, para simular a dependência da concentração de pesticidas em função da profundidade e do tempo.

Este projeto também tem como um de seus objetivos específicos a verificação dos resultados previstos pelo modelo, através de experimentos com lisímetros, procurando, se possível, validá-lo nas condições ambientais brasileiras. A proposta de trabalho desta dissertação se insere neste contexto.

1.4 - OBJETIVOS PROPOSTOS NESTA DISSERTAÇÃO

Foram propostos quatro objetivos para este trabalho.

- 1) Desenvolver um modelo de simulação do destino de solutos orgânicos apropriado a partir do modelo LEACHM-P desenvolvido na Universidade de Cornell, Ithaca - NY por Wagenet & Hutson, 1989. Os valores dos parâmetros físicos requisitados pelo modelo serão medidos no laboratório ou estimados a partir de equações empíricas já validadas para condições tropicais;
- 2) Construir ou adaptar uma coluna de solo com condições ambientais controladas com solo não perturbado através da extração de monolitos de solo (blocos de solo intactos) do campo (Lisímetro);
- 3) Validar, se possível, o modelo desenvolvido em (1) através de experimentos com solutos orgânicos aplicados nos lisímetros descritos em (2) sob diversas condições de amostragem e tratamentos experimentais (frequência de molhamento e aplicação, solos e outros), e

4) Medir o fluxo de água, de solutos e monitorar o movimento do soluto aplicado ao longo do perfil vertical do lisímetro em função do tempo.

1.5 - RESUMO DOS CAPÍTULOS

No capítulo 2, é apresentada de forma sucinta uma descrição de conceitos usuais de física dos solos utilizados neste trabalho. A partir da Lei de Darcy é obtida a equação do fluxo da água em um meio poroso. Também são definidas algumas variáveis como a condutividade e a retentividade hidráulica. Discute-se a condução de calor e os balanços de energia e massa do sistema solo. Por fim, a partir da Lei de Fick e utilizando-se a equação da continuidade, chega-se a equação geral do transporte de produtos químicos no solo. Faz-se também, uma breve discussão acerca da degradação de pesticidas.

No capítulo 3, inicialmente discute-se, de forma breve, alguns tipos de modelos utilizados no sistema solo. Apresenta-se então, de forma coesa, o modelo LEACHM-P, seus arquivos de entrada e saída. Finalmente discute-se, de forma também breve, as sub-rotinas utilizadas pelo modelo nas simulações apresentadas nesta dissertação e comenta-se suas limitações.

No capítulo 4, inicialmente discute-se o desenvolvimento das condições experimentais necessárias para a obtenção dos dados utilizados nas comparações. Depois são apresentados os métodos utilizados nas medidas experimentais da condutividade hidráulica, do potencial matricial, da temperatura do solo e do ar e da concentração de pesticidas.

No capítulo 5, são apresentados e discutidos os resultados obtidos. Inicialmente são mostrados os gráficos que comparam os dados experimentais e os simulados, para o potencial matricial e a retenção utilizados na calibração do modelo. Posteriormente são apresentadas as curvas que comparam os dados experimentais com

aqueles simulados pelo modelo, para a concentração de pesticida em função do tempo e da profundidade.

No capítulo 6, são apresentadas as conclusões e são feitas algumas sugestões para trabalhos futuros. Após o capítulo 6 encontram-se as referências bibliográficas, além de um pequeno glossário. Por último tem-se o apêndice. No apêndice é mostrado um exemplo típico de um arquivo de entrada e de um arquivo de saída. Também encontram-se no apêndice, as tabelas dos dados utilizados para a confecção dos gráficos do capítulo 5, além de outros gráficos complementares que comparam as curvas de retenção em função do tempo e da profundidade, de potencial matricial em função do tempo e da profundidade e a concentração do pesticida em função do tempo e da profundidade, obtidas experimentalmente com aquelas simuladas.

Alguns termos técnicos de origem estrangeira foram mantidos, pois não foram encontradas traduções convenientes para os mesmos. Quando este recurso se fez necessário, a palavra foi escrita em *itálico*.

2 - ALGUNS CONCEITOS BÁSICOS DE FÍSICA DE SOLOS E EQUIPAMENTOS UTILIZADOS NESTE TRABALHO

2.1 - Solo

A palavra solo é derivada do Latim *solum*, que quer dizer chão, terra ou terreno. Pode-se definir solo como sendo uma matéria mineral não consolidada, na superfície da terra, que foi sujeita e influenciada por fatores genéticos e ambientais do material de origem, clima (incluindo efeitos de umidade e temperatura), macro e microrganismos e topografia. Todos estes fatores atuando, durante um período de tempo, produzirão um produto-solo, o qual difere do material do qual é derivado em muitas propriedades e características físicas, químicas, mineralógicas, biológicas e morfológicas (Curi, 1993).

Uma definição mais concisa, torna-se difícil devido a grande diversidade de solos no mundo (Foth, 1978). Neste trabalho deu-se ênfase aos aspectos físicos do solo. Desta forma podemos entender o solo como um sistema dispersivo, polifásico, heterogêneo, particulado e poroso (Hillel, 1982). A natureza dispersiva do solo e sua consequente atividade interfacial demonstra-se em fenômenos como adsorção de água e elementos químicos, trocas iônicas, adesão, inclusão, dispersão e capilaridade.

As três principais fases da natureza do solo são representadas pelas fases sólida, líquida e gasosa. A fase sólida é representada pela matriz de solo, constituída pelas partículas de matéria orgânica e mineral. A fase líquida é representada pela solução de solo, constituída pela água e as substâncias dissolvidas na água. A fase gasosa é representada pela atmosfera do solo, constituída pelos gases dissolvidos no solo.

A heterogeneidade do solo demonstra-se através da grande quantidade e variedade de substâncias orgânicas e minerais encontradas em geral em uma amostra de solo. A organização dos componentes sólidos do solo determinam características

geométricas de poros, pelos quais a água, os solutos e o ar são transmitidos ou retidos (Hillel, 1982).

2.2 - Lisímetro

Lisímetros são blocos de solo envolvidos por caixas apropriadas e expostos ou não às condições atmosféricas (McIlroy e Angus, 1963). Este tipo de equipamento pode ter diferentes formatos e tamanhos, dependendo da aplicação a que ele se destina. Na figura 2-1 apresenta-se um desenho esquemático do tipo de lisímetro utilizado neste trabalho. Os solos, que são colocados nos lisímetros, podem ser de dois tipos distintos: perturbados e não-perturbados.

Figura 2-1 - Tipo de lisímetro utilizado neste trabalho

Solo perturbado é aquele que teve sua composição original alterada, através de algum tipo de tratamento. Como exemplo de tratamento, pode-se citar o uso de várias peneiras de diâmetros de partícula sucessivamente menores com o objetivo de obter um solo de tamanho de partícula homogêneo. Solo não-perturbado, ao contrário, é retirado do local de origem e colocado no equipamento, sem nenhum tipo de tratamento. Neste trabalho foram utilizados solos não-perturbados.

2.3 - Tensiômetro

Tensiômetros são equipamentos utilizados para medir o potencial matricial de água no solo. Um tensiômetro consiste de uma cápsula porosa, acoplada a um tubo com água, em contato com um sistema de medida. Neste trabalho o instrumento de medida utilizado foi o manômetro de mercúrio que será apresentado na próxima seção. Na Figura 2-2 apresenta-se um desenho esquemático de um tensiômetro.

Figura 2-2 - Desenho esquemático de tensiômetro utilizado neste trabalho.

Na literatura, o potencial matricial de água no solo ψ_s , é definido em função da temperatura T , da pressão externa (atmosférica) P_e , da umidade θ , da concentração C e da profundidade z . Uma das maneiras de se medir este potencial, é a utilização de tensiômetros (Hanks e Ashcroft, 1986).

Quando o tensiômetro é instalado no solo, a água que se encontra dentro do tubo entra em contato com o solo, através da cápsula porosa. Esta água, que se

encontra dentro do tubo, irá migrar através da capsula para o solo até que seja atingida uma situação de equilíbrio dinâmico entre o tensiômetro e o solo.

Quando o equilíbrio entre o sistema tensiômetro-solo for estabelecido, o potencial de água no solo ψ_s , será igual ao potencial de água dentro do tensiômetro ψ_t . O potencial de água ψ_t medido pelo tensiômetro, é função da temperatura T , da profundidade z (cm), da concentração C , e da pressão (ou tensão) dentro do tensiômetro P_t (Hanks e Ashcroft, 1986). Assim, no equilíbrio tem-se que:

$$\psi_s = f(T, P_e, C, \theta, z) = \psi_t = f(T, P_t, C, z) \quad (2.1)$$

Da termodinâmica (Callen, 1985), tem-se que o potencial total de água no solo pode ser dado por:

$$d\psi = -sdT + vdP + gdz + \omega d\theta + \mu dn \quad (2.2)$$

Derivando-se e substituindo-se em (2.1) a equação (2.2), chega-se a:

$$gdz - sdT + vdP_e + mdn + wdq = -sdT + vdP_t + mdn + gdz \quad (2.3)$$

Simplificando-se os termos, tem-se que:

$$\underline{wdq = vdP_t - vdP_e} \quad (2.4)$$

Como a pressão atmosférica é considerada constante, então $dP_e = 0$. Assim a equação (2.4) é simplificada e tem-se que:

$$\omega d\theta = vdP_t \quad (2.5)$$

onde $\omega d\theta$, é definido como sendo o potencial matricial ψ_m (Hanks e Ashcroft, 1986), que é uma propriedade dinâmica do solo. Assim obtem-se, integrando-se ambos os membros:

$$\psi_m = \nu P_t. \quad (2.6)$$

Como mostrado na Figura 2-3, define-se a distância z , como a distância do topo da coluna de mercúrio até o centro da cápsula. A segunda distância z_{Hg} , é definida como a distância do topo da coluna de mercúrio até a superfície do reservatório de mercúrio e z_0 é a distância da superfície do reservatório de mercúrio até o centro da cápsula. Assim o potencial matricial, no centro da cápsula (Hanks e Ashcroft, 1986), é dado por:

$$\psi_m = -12,6z_{Hg} + z_0 \quad (2.7)$$

Figura 2-3 - Método utilizado para o calculo do potencial matricial de água no solo.

A medida do potencial matricial de água no solo, através de tensiômetros acoplados a manômetros de mercúrio, geralmente está limitada a valores menores que uma atmosfera (1,0 atm), devido a impossibilidade de se manter uma coluna macroscópica de água, sob tensões maiores que 1 atm, ao ar livre. Devido a essa dificuldade costuma-se trabalhar com um intervalo de pressão que varia de 0 à 0,8 atm.

2.4 - CARACTERÍSTICAS FÍSICO-HÍDRICAS DO SOLO

2.4.1 - Equação de Darcy

O solo é um meio poroso. Desta forma poderia-se pensar em utilizar a equação de Poiseuille (Trefil, 1975), para descrever o fluxo de água através do solo. Contudo os poros do solo não são uniformes ou regulares mas sim altamente irregulares, tortuosos e intrincados. O fluxo através dos poros do solo é limitado por numerosas “gargantas”, e ocasionalmente por “túneis” sem saída. A velocidade deste fluxo varia drasticamente ponto a ponto, ao longo da mesma passagem. Por estas razões o fluxo em meios porosos é geralmente descrito em termos de um Vetor de Fluxo de Velocidade Macroscópico (Hillel, 1982).

Pode-se entender melhor este conceito analisando-se o fluxo de água através de um bloco de solo saturado e uniforme (macroscopicamente). A Figura 2-4, mostra uma coluna horizontal de solo, através da qual, ocorre fluxo de água da esquerda para a direita. Experiências mostraram que a razão da vazão (Q , cm³/s), sendo (V , cm³) o volume que flui através da coluna por unidade de tempo, é diretamente proporcional a área da secção do bloco (A , cm²) e a variação da pressão hidráulica (ΔH , cm), e inversamente proporcional ao comprimento da coluna (L , cm). Desta forma temos:

$$Q = V/t \propto A \Delta H/L \quad (2.8)$$

Figura 2-4 - Fluxo através de uma coluna horizontal de solo saturado.

A maneira usual de determinar a variação da pressão hidráulica de um sistema consiste em medir o valor da pressão no reservatório superior H_i e o valor da pressão no reservatório inferior H_o , e depois calcular a diferença entre os valores obtidos, relativo a algum nível de referência. Está claro que, na ausência de diferença de pressão hidráulica (ΔH , cm), não ocorre fluxo no bloco de solo. Assim esta diferença pode ser representada por:

$$\Delta H = H_i - H_o \quad (2.9)$$

A queda de pressão por unidade de distância na direção do fluxo ($\Delta H/L$), é chamada de gradiente hidráulico. A razão de vazão específica (Q/A , cm/s), isto é, o volume de água que flui através da secção de área do bloco (A , cm²) por unidade de tempo (t , s), é chamado de densidade de fluxo (ou simplesmente fluxo) e é indicado por q . O fluxo é proporcional ao gradiente hidráulico. Portanto:

$$q = Q/A = V/At \propto \Delta H/L \quad (2.10)$$

O fator de proporcionalidade K (cm/s), é geralmente designado, em meio poroso, como condutividade hidráulica. Desta forma tem-se:

$$q = -K\Delta H/L \quad (2.11)$$

A equação (2.4) é conhecida como Lei de Darcy. O sinal de subtração (-), indica que o movimento dá-se no sentido do decréscimo da pressão hidráulica (H , cm). Generalizando-se a lei de Darcy, para um meio poroso saturado em três dimensões, obtém-se a forma diferencial da equação (2.11).

$$\mathbf{q} = -K\nabla H \quad (2.12)$$

onde ∇H é o gradiente da pressão hidráulica no espaço de três dimensões. Consequentemente o fluxo $\mathbf{q}$ é um vetor, cuja direção é determinada por ∇H .

Para uma dimensão, por exemplo na direção do eixo x , a equação (2.12) toma a forma:

$$q = -K dH/dx \quad (2.13)$$

Matematicamente a lei de Darcy é similar as equações de transporte linear da física clássica, como a lei de Ohm, a lei de Fourier e a lei de Fick (Hillel, 1982).

2.4.2. - Fluxo em Solo Não-Saturado

A lei de Darcy foi concebida para o estudo do fluxo de solutos em meios saturados. Contudo, a maioria dos processos envolvendo as interações do sistema solo-água, ocorrem enquanto o solo se encontra em uma condição não saturada (Hillel, 1982).

A equação de Darcy, foi então estendida para o fluxo de água em sistemas não-saturados. Para isso a condutividade hidráulica K (cm/s), foi modificada, deixando de ter um valor constante, de forma a contemplar uma dependência em relação a pressão de sucção matricial ($K = K(\Psi)$) (Hillel, 1982). Desta forma a equação (2.12), toma a forma de:

$$\mathbf{q} = -K(\Psi) \nabla H \quad (2.15)$$

onde ∇H é o gradiente de pressão hidráulico, que pode incluir tanto os componentes de sucção como os gravitacionais.

Partindo-se da equação da continuidade, que envolve a lei de conservação de massas, é possível obter a equação geral de fluxo:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \nabla \cdot [K(\Psi) \nabla H] \quad (2.16)$$

Lembrando que a pressão hidráulica é, em geral, a soma do potencial de pressão e da pressão gravitacional, pode-se escrever que:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\nabla \cdot [K(\Psi) \nabla (\Psi - z)] \quad (2.17)$$

O sinal de subtração (-), indica que o movimento dá-se no sentido do decréscimo da pressão gravitacional. Como o ∇z tem valor unitário para o fluxo vertical, a equação (2.17) pode ser escrita como:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\nabla \cdot (K(\Psi) \nabla \Psi) + \frac{\partial K(\Psi)}{\partial z} \quad (2.18)$$

2.4.3 - Difusividade Hidráulica

Através de métodos matemáticos pode-se simplificar tanto o tratamento experimental como o matemático, em processos de fluxo em meios não-saturados, utilizando-se para isso uma expansão através da regra da cadeia. Assim tem-se que:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial x} \quad (2.19)$$

onde $\partial \theta / \partial x$ é o gradiente de umidade e $\frac{\partial \theta}{\partial \Psi}$ define-se como a capacidade de água específica $c(\theta)$ (Hillel, 1982). Desta forma tem-se que :

$$c(\theta) = \frac{d\theta}{d\Psi} \quad (2.20)$$

que é a declividade da curva característica de umidade do solo, para um particular valor de θ . Utilizando-se esta definição a equação de Darcy toma a forma de:

$$q = -K(\theta) \frac{\partial \Psi}{\partial x} = -\frac{K(\theta)}{c(\theta)} \frac{\partial \theta}{\partial x} \quad (2.21)$$

A equação de Darcy escrita desta forma (2.21), é análoga a lei de difusão de Fick, que utiliza a função chamada de difusividade D , que é dada por:

$$D(\theta) = \frac{K(\theta)}{c(\theta)} = K(\theta) \frac{d\Psi}{d\theta} \quad (2.22)$$

Assim, D é definida como a razão entre a condutividade hidráulica K e a capacidade de água específica c . Como tanto a condutividade hidráulica, como a capacidade de água específica, são funções da umidade, tem-se que a difusividade D , também o será. Este termo D , passou então a ser chamado de difusividade hidráulica.

A equação (2.33) pode ser ainda escrita na forma vetorial.

$$\mathbf{q} = -D(\theta)\nabla\theta \quad (2.23)$$

ou ainda em uma dimensão, tem-se que:

$$q = -D(\theta) \frac{\partial\theta}{\partial z} \quad (2.24)$$

Introduzindo-se a difusividade hidráulica na equação (2.18), temos que o fluxo de água em um meio não-saturado, toma a forma de:

$$\frac{\partial\theta}{\partial t} = -\nabla \cdot (D(\theta)\nabla\theta) + \frac{\partial K(\theta)}{\partial z} \quad (2.25)$$

2.4.4 - Teoria de Infiltração Aplicada ao Solo

Infiltração é o termo aplicado ao processo de entrada de água no solo, geralmente por fluxo descendente, através da superfície. Conhecer os processos de infiltração, e como eles afetam as propriedades do solo e suas condições transientes, é um dos pré-requisitos básicos, para se entender os mecanismos que governam o comportamento do meio poroso, chamado solo (Hillel, 1982).

A Figura 2-5 mostra um perfil típico de solo durante um processo de infiltração uniforme de água. A zona de saturação ocorre, provavelmente, devido à instabilidades estruturais da superfície ou expansão do solo nas proximidades da superfície. Na zona de transmissão, o perfil de solo é considerado saturado com umidade uniforme. A zona de molhamento é aquela cuja umidade decresce com a profundidade, até a frente de molhamento que é a fronteira entre o solo seco e o umido.

Figura 2-5 - Perfil típico de solo durante um processo de infiltração uniforme de água

A equação de Darcy para uma dimensão (2.15) pode ser escrita como:

$$q = -K \frac{dH}{dz} = -K \frac{d}{dz} (H_p - z) \quad (2.26)$$

onde H_p é o potencial de pressão e z é a profundidade. Em um solo não-saturado, H_p é negativo e pode ser expresso como função da pressão de sucção ψ .

$$q = K \frac{d\psi}{dz} + K \quad (2.27)$$

Combinando-se as equações (2.26) e (2.27), juntamente com a equação da continuidade, chega-se a uma equação geral de fluxo:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K \frac{\partial H}{\partial z} \right) = - \frac{\partial}{\partial z} \left(K \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) - \frac{\partial K}{\partial z} \quad (2.28)$$

A umidade θ e a pressão de sucção ψ estão relacionadas através da equação (2.20). Substituindo o lado esquerdo da equação (2.28), pela relação encontrada em (2.20), tem-se que a equação de infiltração toma a forma de :

$$C \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right) + \frac{\partial K}{\partial z} \quad (2.29)$$

Outra alternativa é transformar o lado direito da equação (2.28), utilizando-se a regra da cadeia e depois substituindo em (2.28), tem-se que:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(D \frac{\partial \theta}{\partial z} \right) - \frac{\partial K}{\partial z} \quad (2.30)$$

A equação (2.30) é uma das formas possíveis da equação de Richard (Swartzendruber, 1969).

2.4.5 - Condutividade e Retentividade Hidráulica

A condutividade hidráulica K , de um meio poroso, depende das propriedades do fluido e das propriedades do material que compõem o meio poroso. Devido a essas dependências, muitos modelos matemáticos tem sido propostos para equacionar a condutividade hidráulica (Hillel, 1982). O modelo escolhido para equacionar a condutividade hidráulica, neste trabalho, foi o proposto por Campbell (1974):

$$K = K_0 \left(\theta / \theta_0 \right)^{2b+2+p} \quad (2.31)$$

onde θ é a umidade, θ_0 é a umidade na saturação, K é a condutividade hidráulica (mm/d), K_0 é a condutividade hidráulica na saturação (mm/d), e p é um parâmetro de interação dos poros.

Da mesma forma, muitos modelos matemáticos tem sido criados para equacionar a retentividade hidráulica (h). A retentividade hidráulica é um coeficiente que mede a capacidade de retenção de água pelo solo. O modelo utilizado neste trabalho, para a equação da retentividade, também é o proposto por Campbell (1974):

$$h = a \left(\frac{\theta}{\theta_s} \right)^{-b} \quad (2.32)$$

para θ menor que θ_c , onde θ_s é a umidade na saturação e a e b são parâmetros e θ_c é definido como (Hutson e Cass, 1987):

$$\theta_c = 2b \left(\frac{\theta_s}{1 + 2b} \right) \quad (2.32a)$$

2.4.6 - Condução de Calor no Solo

A condução de calor em sólidos foi analisada primeiramente por Fourier, em 1822, cujo nome está associado com a equação de transporte linear que tem sido usada para descrever a condução de calor. A equação de condução de fluidos em meios porosos (lei de Darcy) e a equação de difusão (Lei de Fick) são matematicamente análogas as equações de difusão da Lei de Fourier.

A primeira lei de condução de calor, conhecida como lei de Fourier, permite dizer que o fluxo de calor em um corpo homogêneo é proporcional ao gradiente de temperatura e está na direção deste gradiente. Matematicamente tem-se:

$$\mathbf{q}_h = -\kappa \nabla T \quad (2.33)$$

onde $\mathbf{q}_h$ é o fluxo térmico (i.e., a quantidade de calor conduzido através de uma unidade de área em uma unidade de tempo, $\text{cal/cm}^2 \text{ s}$), κ é a condutividade térmica, e ∇T o gradiente espacial de temperatura T .

A equação (2.33) é suficiente para descrever a condução de calor, no estado estacionário. Contudo, quando há variação do fluxo ou da temperatura, a equação (2.33), não permite descrever o sistema. Assim é necessário obter a segunda lei da condução de calor.

Para a obtenção da segunda lei da condução de calor utiliza-se o princípio da conservação da energia, através da equação da continuidade. Para este caso, tem-se que, quando da falta de qualquer tipo de fonte ou reservatório de calor, a variação temporal de troca de calor de um elemento de volume em um meio condutor (neste caso, o solo), será igual a variação do fluxo no espaço. Matematicamente, tem-se que:

$$\rho c_m \frac{\partial T}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{q}_h \quad (2.34)$$

onde ρ (g/cm^3) é a densidade de massa e c_m , o calor específico por unidade de massa, (chamado simplesmente de calor específico). Substituindo a equação (2.33) na equação (2.34), obtêm-se a segunda lei da condução de calor:

$$\rho c_m \frac{\partial T}{\partial t} = -\nabla \cdot (-\kappa \nabla T) \quad (2.35)$$

que escrita para uma dimensão toma a forma:

$$\rho c_m \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (2.36)$$

O solo pode apresentar, em algumas situações fontes ou sumidouros de calor, por exemplo, na forma de matéria orgânica em decomposição ou vapor de água condensado. Estas fontes e reservatórios podem ser incluídos no equacionamento

matemático, simplesmente adicionando-se a equação (2.36) o termo S . Desta forma tem-se que:

$$\rho c_m \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial x} \right) \pm S(x, t) \quad (2.37)$$

em que o termo de fonte ou sumidouro de calor apresenta-se como uma função do tempo e do espaço.

A razão da condutividade térmica κ pela capacidade volumétrica de calor C ($=\rho c_m$), é chamada de difusividade térmica e é designada por D_T . Assim tem-se que:

$$D_T = \kappa / C \quad (2.38)$$

Substituindo a equação (2.38) na equação (2.33) e (2.36), obtem-se o fluxo de calor através de um meio poroso e a segunda lei da condução de calor, utilizadas pelo modelo. Assim tem-se respectivamente:

$$q_h = -D_T C (dT/dx) \quad (2.39) \quad e$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_T \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (2.40)$$

2.4.7 - Balanço de Energia e Balanço de Massa

A energia emitida na forma de ondas eletromagnéticas pelo Sol é a maior componente do balanço de energia. Por exemplo, as plantas convertem esta radiação em energia química, através dos processos de fotossíntese, e o solo é aquecido através do calor, gerado pela vibração das moléculas do sistema.

O balanço de energia em um meio poroso, como o solo, pode ser dado matematicamente através da expressão (Hille, 1982):

$$J_n = LE + A + SL + M \quad (2.41)$$

onde LE é a energia utilizada na evapotranspiração (o produto da evaporação de água E e do calor latente de vaporização L), A é o fluxo de energia que aquece o ar (chamado de calor sensível), SL é a quantidade de calor armazenada no solo, água e vegetação, e M representa outras energias ligadas a fotossíntese e a respiração (Tanner, 1960).

Para se descrever o transporte e a transformação de um componente do solo, é necessário conhecer-se o balanço de massa do sistema solo. Desta forma deve-se levar em conta o princípio de conservação de massa. Segundo este princípio, a quantidade de massa que penetra em um volume constante (m_i), menos a quantidade de massa que sai deste volume (m_o) é igual a massa perdida por reações (m_L) mais o incremento de massa no volume (Δm) (Hillel, 1982):

$$m_i + m_o = m_L + \Delta m \quad (2.42)$$

2.5 - CARACTERÍSTICAS FÍSICO-QUÍMICAS DO SOLO

2.5.1 - Transporte de Solutos Dissolvidos no Solo

O movimento de elementos químicos, presentes em solução de solo, pode-se dar através de três processos (Sawney e Brown, 1989):

(a) Difusão química na fase líquida: em resposta a um gradiente de concentração aquoso (J_{DL});

(b) Se o elemento químico for volátil: haverá difusão na fase gasosa em resposta a um gradiente de concentração de gás (J_{CL});

(c) Convecção ou fluxo de massa de um elemento químico: pode ocorrer como resultado do movimento da água em que o elemento está dissolvido (J_{DG}).

Matematicamente, pode-se expressar o transporte de solutos no solo, através da equação:

$$J_S = J_{DL} + J_{CL} + J_{DG} \quad (2.43)$$

onde J_S é o fluxo total de soluto ($\text{mg/m}^2 \text{ dia}$), J_{DL} é o fluxo de difusão na fase líquida (a), J_{CL} é o fluxo de convecção na fase líquida (c), e J_{DG} é o fluxo de difusão na fase gasosa (b).

Matematicamente a difusão é representada, em termos gerais, pela Lei de Fick

$$J_D = -D_o \frac{dc}{dz} \quad (2.44)$$

onde D_o é o coeficiente de difusão molecular (mm^2/d), em uma solução pura (de ar ou água), e c é a concentração do elemento químico (mg/dm^3).

Para o caso específico da difusão na fase líquida, em um meio poroso qualquer (a), a equação (2.44) toma a forma (Sawhney e Brown, 1989):

$$J_{DL} = -D_p(\theta) \frac{dc_L}{dz} \quad (2.45)$$

onde $D_p(\theta)$, é o coeficiente de difusão efetivo, para a difusão na fase líquida, e c_L , é a concentração na fase líquida (Wagenet, 1984).

Para a difusão na fase gasosa, em um meio poroso, (b) a equação (2.44), toma a forma de:

$$J_{DG} = -D_{OG} \frac{dc_G}{dz} \quad (2.46)$$

onde D_{OG} , é o coeficiente de difusão gasoso (mm^2/d), que pode ser estimado, segundo a literatura, como sendo (Jury et al, 1983):

$$D_{OG}(\varepsilon) = D_o T(\varepsilon) \quad (2.47)$$

onde D_o é o coeficiente de difusão do pesticida no ar e $T(\varepsilon)$ é o fator de tortuosidade.

O fluxo convectivo (c), do soluto, é usualmente representado através da equação (Wagenet, 1984):

$$J_{CL} = -\theta D_M(q) \frac{dc_L}{dz} + qc_L \quad (2.48)$$

onde q é o fluxo macroscópico de água, e $D_M(q)$ é o coeficiente de dispersão mecânico que descreve a combinação entre os tamanhos dos poros (grandes e pequenos), como resultado da variação da velocidade do fluxo de água.

Substituindo-se as equações (2.45), (2.46) e (2.48) na equação (2.43) obtêm-se:

$$J_S = -D_P(\theta) \frac{dc_L}{dz} - \theta D_M(q) \frac{dc_L}{dz} + qc_L - D_{OG} \frac{dc_G}{dz} \quad (2.49)$$

Os dois primeiros termos do lado direito da equação (2.49), são usualmente combinados obtendo-se:

$$D(\theta, q) = \frac{D_P(\theta)}{\theta} + D_M(q) \quad (2.50)$$

onde $D(\theta, q)$ é chamado de coeficiente de difusão aparente (mm^2/d), que inclui os efeitos da dispersão e da difusão química sobre o movimento de solutos na fase líquida.

Desta maneira a equação (2.49) toma a forma:

$$J_S = -\theta D(\theta, q) \frac{dc_L}{dz} + qc_L - D_{OG} \frac{dc_G}{dz} \quad (2.51)$$

Para quase todas as situações o transporte de elementos químicos no solo ocorre em situação de estado não-estacionário ou transiente. Sobre tais condições a umidade (θ), e o fluxo de água (q), variam com a profundidade e o tempo, resultando em concentrações de soluto e fluxo, que variam com o tempo e a profundidade. Pode-se expressar estas variações através da equação da continuidade, aplicada a este sistema:

$$\frac{\partial c_T}{\partial t} = -\frac{\partial J_S}{\partial z} \pm \phi \quad (2.52)$$

A concentração total (c_T), de pesticida em solos é dada pela equação (Hutson et al., 1989):

$$c_T = \rho c_s + \theta c_L + \varepsilon c_G \quad (2.53)$$

onde ρ é a densidade volumétrica do solo, c_s é a concentração de pesticida absorvido pelo solo, θ é a umidade, c_L é a concentração de pesticida em solução de solo, ε é a quantidade de poros do solo ocupado com gás, e c_G é a concentração de pesticida na fase gasosa.

Para a concentração de pesticida em solução de solo (c_s), supõe-se, que na saturação a absorção é instantânea e reversível, sendo desta forma descrita como sendo:

$$c_s = K_d c_L \quad (2.54)$$

onde K_d é o coeficiente de distribuição do pesticida (dm^3/Kg), que varia com a profundidade e certamente depende do tipo específico de pesticida. Adicionado a isto,

assume-se que toda degradação, química ou microbiológica, de pesticida ocorre na solução de solo.

A concentração de pesticida na fase gasosa, pode ser representada pela forma modificada da Lei de Henry (Jury et al., 1983):

$$c_G = K_H^* c_L \quad (2.55)$$

onde:

$$K_H^* = c_G^* / c_L^* \quad (2.56)$$

e K_H^* é a constante modificada da Lei de Henry e é aqui definida como a densidade de vapor saturado do pesticida (c_G^*) dividida pela solubilidade na fase aquosa (c_L^*), ambas em unidade de massa por volume. Isto se faz necessário na estimativa do valor de D_{OG} , o coeficiente de difusão na fase de vapor.

Substituindo-se as equações (2.51), (2.53), (2.54), (2.55) na equação da continuidade, aplicada ao sistema solo (2.52), obtêm-se a equação geral do transporte de solutos no solo:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho K_d + \theta + \varepsilon K_H^*) = \frac{\partial}{\partial z} \left[\left\{ \theta D(\theta, q) + \varepsilon K_H^* \right\} \frac{\partial c}{\partial z} - qc \right] \pm \phi \quad (2.57)$$

onde todas as concentrações (c), são concentrações de pesticida em solução de solo, e ϕ representa as fontes de criação e degradação das substâncias químicas.

3 - BREVE DESCRIÇÃO DO MODELO LEACHM-P

3.1 - INTRODUÇÃO

Os modelos publicados até a presente data usam representações de processos e princípios envolvidos, de formas similares. No entanto, eles diferem quanto às suas complexidades e tipos de aplicação. Os modelos em geral, podem ser classificados em 3 grupos, tomando-se como base o tipo de aplicação: modelos de manejo, de simulação e “screening”.

O modelo de manejo é um conjunto qualitativo ou quantitativo de indicações para aplicações práticas, ou seja, simples correlações estabelecidas entre transporte de elementos e práticas de manejo do solo.

O modelo de simulação representa o transporte e transformações com leis quantitativas dos processos envolvidos e utiliza o modelo para fazer projeções do comportamento de um particular composto químico numa dada condição de solo.

Nos modelos “screening”, um grande número de compostos químicos são avaliados, do ponto de vista do transporte e transformação numa mesma condição de solo, e seus resultados comparados para produzir uma descrição relativa do seu destino no solo.

O modelo determinístico LEACHM-P (Leaching Estimation and Chemistry Model-Pesticide), desenvolvido na Universidade de Cornell (Wagenet e Hutson, 1987), utilizado neste trabalho, é apresentado como um modelo de simulação, sofisticado e complexo, capaz de realizar para condições específicas, estimativas do destino de pesticidas no solo (Pennell et al., 1990).

3.2. - APRESENTAÇÃO DO MODELO LEACHM-P

O modelo LEACHM-P consiste de várias sub-rotinas que estimam, entre outros parâmetros, o fluxo de água no solo, o transporte de pesticida e solutos, a degradação de pesticidas e a evapotranspiração potencial. A linguagem utilizada para a confecção do modelo LEACHM-P foi o Fortran 77.

O arquivo de entrada, do modelo LEACHM-P, está organizado na forma de uma planilha, de fácil leitura e compreensão. Os dados de entrada necessários para a execução do programa podem ser divididos em quatro grupos.

(1) Propriedades gerais do solo e as condições gerais (as dimensões apropriadas são especificadas no arquivo de entrada)

- a) Data do início e término do experimento;
- b) Número de pesticidas aplicados;
- c) Número de aplicações de água;
- d) Número de aplicações de pesticidas;
- e) Número de culturas na área estudada;
- f) Número de cultivos por ano;
- g) Condutividade hidráulica;
- h) Data e quantidade de cada pesticida aplicado;
- i) Data, intervalo de duração e intensidade de cada chuva ou irrigação;
- j) Quantidade (semanais) de água evaporada;
- k) Profundidade do perfil do solo estudado;
- l) Profundidade que se encontra o lençol freático;
- m) Tipo de perfil: homogêneo ou heterogêneo. Se heterogêneo, comprimento de cada perfil;
- n) Presença de plantas (sim ou não);
- o) Ponto de murcha permanente (PMP);

- p) Potencial mínimo e máximo de água na raiz;
- q) Termo de resistência da raiz;
- r) Situação das raízes: Em crescimento ou constantes;
- s) Datas de plantio, emergência, maturidade (raiz e planta) e colheita;
- t) Densidade de plantio e cobertura vegetal;

(2) Propriedades Físicas e Químicas

- a) Parâmetros a e b do modelo de condutividade e resistividade hidráulica de Campbell e condutividade hidráulica saturada;
- b) Fator de degradação ou meia-vida de cada pesticida e seus produtos de degradação;
- c) Coeficiente de difusão aparente (mm^2/dia), calculado através da medida da dispersividade (mm), e do coeficiente de difusão da substância na fase gasosa (mm^2/dia) (Bresler, 1973).;
- d) Coeficiente de partição ou distribuição (isoterma de adsorção);
- e) Solubilidade do pesticida em água;
- f) Densidade de vapor do pesticida;
- g) Densidade de massa;

(3) Dados de Temperatura.

- a) Temperatura média e amplitude de variação da temperatura da superfície do solo;
- b) Condutividade térmica da areia, argila, matéria orgânica, água e ar;
- c) Fatores de geometria para a areia, argila e matéria orgânica;

(4) Condições de Contorno Iniciais.

- a) Concentração inicial das substâncias químicas no perfil;
- b) Distribuição granulométrica no perfil;
- c) Quantidade de matéria orgânica no perfil;

- d) Potencial de água no solo ou umidade no perfil;
- e) Densidade média das partículas;
- f) Densidade de raízes no perfil;
- g) Temperatura no perfil;
- h) Quantidade de resíduos na água de chuva ou irrigação;

Um exemplo típico de arquivo de entrada do modelo LEACHM-P está apresentado na seção A1 do apêndice.

Os arquivos de saída são, facilmente interpretáveis, tendo a forma de tabelas ordenadas e auto-explicativas. O modelo apresenta quatro tabelas:

Tabela 1 - Condutividade hidráulica e umidade para cada camada do solo, (escolhida previamente no arquivo de entrada), e o potencial matricial para 0, -3, -10, -30, -100, -500, e -1500 Kpa;

Tabela 2 - Total acumulado e balanço de massa para a água e para todos os solutos utilizados;

Tabela 3 - Um resumo conciso da umidade, potencial matricial, fluxo de água por camada, evapotranspiração, concentração de cada soluto por camada e temperatura;

Tabela 4 - Um resumo da densidade de raízes por camada no perfil, quantidade de água e soluto transportados pelas raízes;

Um exemplo do tipo de saída de dados, utilizado pelo modelo, está apresentado na seção A2 do apêndice.

3.3 - SUBROTINAS UTILIZADAS PELO MODELO

O modelo LEACHM-P, é composto de um programa principal e de várias subrotinas. O programa principal (MAIN), lê os dados, inicializa as variáveis, chama as

subrotinas, efetua o balanço de massa e imprimir as tabelas de saída. As subrotinas calculam o tempo, evapotranspiração, fluxo de água, movimento de solutos, absorção, degradação, crescimento de raízes, absorção de solutos pelas plantas, entre outros. A seguir são descritas, de forma sucinta, as subrotinas utilizadas neste trabalho:

a) WATDAT: Calcula a relação entre o potencial, a umidade e a condutividade hidráulica no solo. Para efetuar o cálculo, da relação entre o potencial e a umidade, utiliza-se da equação de Darcy (descrita na seção 2.4.1.) e da equação geral de fluxo de água (descrita na seção 2.4.4.). A equação utilizada para o cálculo da condutividade hidráulica foi a proposta por Campbell (1974), descrita na seção 2.4.5.;

b) TSTEP: Calcula o intervalo de tempo, partindo das interações no modelo de diferenças finitas. Este cálculo é feito através de uma série de intervalos de tempo discretos Δt (DELT no programa). O valor de Δt é calculado, no início de cada *looping* de intervalo de tempo. O valor máximo de Δt , especificado na entrada de dados, pode variar entre 0,05 e 0,1 dias;

c) WATFLO: Calcula a solução, através do método de diferenças finitas, da equação de fluxo de água no solo (descrita na seção 2.4.2.), e simula a mudança de umidade e do potencial matricial durante o intervalo de tempo Δt ;

d) TEMP: Calcula o fluxo de calor, através do solo, utilizando o método de diferenças finitas aplicado às equações de condução de calor (descritas na seção 2.4.6.). A utilização deste método, permite considerar as variações da temperatura do solo como sendo senoidais, durante um período compreendido de 24 horas (Kirkham & Powers, 1972);

e) RRATE: Ajusta as taxas de transformações dos pesticidas através da dependência com a temperatura e outras variações ambientais simuladas no modelo;

f) PSINK: Calcula as perdas e ganhos, de cada espécie de pesticida analisada, por transformação, degradação e/ou por absorção pelas plantas;

g) SOLUTE: Calcula a solução, através do método de diferenças finitas, da equação de transporte de elementos químicos (solutos), descrita na seção 2.5.1.. Os

dados de fluxo de água, utilizados nesta subrotina, são gerados na subrotina WATFLO;

h) ETRANS: Calcula a transpiração potencial para o intervalo de tempo de interação estabelecido Δt , assumindo uma variação senoidal durante o dia (Chids & Hanks, 1975) e

i) RETPRED: Calcula, utilizando a equação de regressão apropriada, a umidade, a densidade de volume e a densidade de massa. Estão disponíveis, na subrotina, cinco equações de regressão diferentes.

A estrutura do fluxograma do modelo LEACHMP, está apresentada na Figura 3-1.

Figura 3-1 - Estrutura do fluxograma do modelo LEACHM-P

3.4 - ADAPTAÇÕES INTRODUZIDAS NO MODELO

Foram introduzidas adaptações no modelo com o intuito de facilitar sua calibração às condições tropicais brasileiras e facilitar a visualização dos resultados gerados.

Inicialmente, introduziu-se no arquivo de entrada de dados, a possibilidade de escolha da equação de regressão apropriada para o cálculo do valor da umidade (θ) e da densidade de volume (ρ). Como já visto na seção 3.3., o modelo tem a disposição na subrotina RETPRED, cinco equações de regressão.

Originalmente o modelo definia automaticamente a utilização de uma das cinco equações, não permitindo possibilidade de escolha ao usuário do programa. Para modificar a equação de regressão a ser utilizada na simulação, era necessário alterar o valor da constante que definia a equação, dentro da subrotina RETPRED. Modificado o valor da constante na subrotina, era necessário recompilar o programa.

Com o intuito de evitar todo este procedimento, o modelo foi adaptado substituindo-se a constante, pré-estabelecida no modelo, por uma variável inteira, de forma a permitir ao usuário a escolha da equação de regressão que melhor se adaptasse a sua simulação. Neste trabalho foi utilizada a equação de regressão, proposta por Hutson e Cass, 1987, para solos da África do Sul.

Outra modificação diz respeito as saídas de dados. As saídas de dados do programa eram fornecidas na forma de tabelas auto-explicativas, exigindo assim a utilização de um outro aplicativo apropriado para a confecção de gráficos.

Utilizando-se de um ambiente de desenvolvimento, composto de uma estação de trabalho Silicon Graphics e do *software* Khoros (Donohoe, 1992) de domínio público, as saídas de dados foram modificadas, obtendo-se além das tabelas auto-explicativas, gráficos bi e tridimensionais.

3.5 - CALIBRAÇÃO DO MODELO

Sendo um dos objetivos deste trabalho verificar a validade do modelo LEACHM-P para uma dada condição ambiental brasileira buscou-se, inicialmente, conhecer quais os fatores, no caso parâmetros físico-hídricos, que refletiam mudanças significativas aos resultados finais de simulação. Após várias tentativas chegou-se a três parâmetros que, quando alterados, influenciavam de forma relevante os valores de concentração de pesticida em função do tempo e da profundidade obtidos através do modelo:

- a) Condutividade hidráulica saturada;
- b) Quantidade e distribuição de chuvas e;
- c) Um parâmetro que está associado a meia-vida do herbicida empregado.

Uma primeira tentativa de calibrar o modelo consistiu em substituir a equação da condutividade hidráulica saturada usada no modelo (Campbell, 1974), equação (2.31), por outra, desenvolvida para solos brasileiros (Libardi, 1980).

Esta mudança, que inicialmente aparentava ser simples, exigiria uma alteração profunda no código do modelo. O modelo LEACHM-P, como já exposto, é constituído de várias subrotinas. Estas subrotinas foram desenvolvidas separadamente para depois serem agrupadas e então comporem o modelo. Devido a isso surgiram alguns problemas, como por exemplo: (I) muitas constantes que trocam de nome, várias vezes, durante a execução do programa; (II) termos ou parâmetros que utilizam o mesmo nome mas que tem funções diferentes durante a execução do programa, entre outras, que veio a complicar em muito a manipulação do programa.

Com uma primeira versão do modelo “adaptado” (após a troca da equação e algumas alterações que se fizeram necessárias), comparou-se os resultados das simulações obtidas para cada equação. Apesar de haver uma diferença entre os resultados, estes não foram tão significativos de forma a justificar o tempo,

relativamente grande, que seria necessário para se fazer as mudanças necessárias e outras que poderiam advir.

Assim decidiu-se trabalhar com parâmetros do modelo que pudessem ser substituídos, sem necessidade de alteração do programa. Seguindo este raciocínio a calibração do modelo LEACHM-P foi obtida trabalhando-se com os parâmetros α , b e RHO . Os dois primeiros parâmetros (α e b) referem-se a equação da retentividade, proposta por Campbell (1974) e discutida no parágrafo 2.4.5. O terceiro parâmetro (RHO) que diz respeito a densidade de massa é utilizado para o cálculo da umidade na saturação.

3.6 - LIMITAÇÕES DO MODELO

Apesar de toda a sua complexidade, quantidade de recursos oferecidos e ser recomendado para cientistas e modelistas (Pennell et al, 1990), o modelo LEACHMP contem algumas limitações. Segundo seus autores o modelo LEACHMP, não é recomendado para:

- (1) Descrever o fluxo de água através de macroporos;
- (2) Prever quantitativamente ou qualitativamente a perda de água por escoamento superficial, e
- (3) Trabalhar com incrementos desiguais de profundidade.

O fato do modelo não prever a perda de água por escoamento superficial e não trabalhar com incrementos desiguais de profundidade, não limitou nem comprometeu os resultados visto que os experimentos desenvolvidos nesta dissertação não apresentaram tais situações.

Da mesma forma, para dois solos utilizados neste trabalho, apesar de se ter alguma evidência de fluxo de água através de macroporos (fluxo preferencial), os resultados mostraram que se houve alguma influência, esta não afetou de forma significativa as simulações.

4 - MATERIAIS E MÉTODOS

4.1 - LEVANTAMENTO E PREPARAÇÃO DAS CONDIÇÕES DO EXPERIMENTO

4.1.1 - Lisímetros

Os lisímetros utilizados neste trabalho fazem parte de um complexo montado em 1943, na Estação Experimental do IAC, em Campinas-SP. Este complexo compõe-se de 60 equipamentos preenchidos com solos não perturbado (monolitos), divididos em dois grupos de 30 lisímetros. Cada grupo de 30 equipamentos está dividido em três séries (Pindorama, Ribeirão Preto e Monte Alegre do Sul) onde cada série contém 10 equipamentos com três profundidades diferentes de 45, 90 e 180 cm. A figura 4-1 mostra a distribuição destes equipamentos.

Na primeira coluna, da esquerda para a direita descrita como F, estão os lisímetros preenchidos com o solo de Pindorama - SP, classificado como podzólico Lins e Marília, variação Marília. Na coluna do meio, descrita como E, estão os lisímetros preenchidos com o solo de Ribeirão Preto-SP, denominado de latossolo roxo. Na última coluna, descrita como D, estão os lisímetros preenchidos com o solo da cidade de Monte Alegre do Sul-SP. Este solo é classificado como podzólico vermelho-amarelo. As definições, das denominações dos solos, utilizadas neste trabalho encontram-se no glossário.

Além da divisão por tipos de solos, os equipamentos também estão divididos por profundidade. As linhas 1 e 2 contêm lisímetros com 45 cm de profundidade. As linhas de 3 a 8 contêm lisímetros com 90 cm de profundidade e as linhas 9 e 10 contêm os lisímetros de 180 cm de profundidade. Todos os lisímetros possuem um metro de diâmetro externo.

Figura 4-1 - Disposição dos 30 lisímetros na Estação experimental do IAC, em Campinas-SP.

Procurou-se trabalhar com os lisímetros que apresentaram uniformidade de condições físicas. Assim buscou-se obter a maior quantidade possível de dados sobre cada lisímetro. Com esta finalidade, foi feita uma pesquisa junto ao banco de dados do IAC, em Campinas-SP, referente a quantidade de chuva infiltrada, para os últimos três anos, dia a dia, em cada um dos 30 lisímetros.

Após a compilação e estudo do material obtido, deduziu-se que alguns equipamentos não apresentavam condições de uniformidade, para um manuseio seguro durante o experimento. Os lisímetros que se encontravam nestas condições foram descartados. Foi feita também, uma visita técnica ao local, para uma análise mais rigorosa das condições de trabalho de cada lisímetro.

Decidiu-se por escolher 3 (três) baterias de equipamentos, divididos da seguinte forma, segundo a classificação que se encontra no local:

Uma bateria para 45 cm: lisímetros 2D, 2E e 2F;

Uma bateria para 90 cm: lisímetros 6D, 6E e 6F, e

Uma bateria para 180 cm: lisímetros 9D, 9E e 9F.

Ao iniciar o experimento para obtenção da condutividade hidráulica saturada K_0 , percebeu-se que o lisímetro 2E não se encontrava em condições ideais de trabalho. Assim o mesmo foi abandonado e substituído pelo lisímetro 1E.

De modo a restringir o efeito de borda com percolação preferencial da água ao longo das paredes dos lisímetros, foram colocados à profundidade de 5 cm, anéis de chapa galvanizada com 75 cm² de área interna, em cada um dos equipamentos utilizados. Esta montagem está representada na Figura 4-2.

Figura 4-2 - Chapa de zinco colocada dentro dos lisímetros com o intuito de restringir o efeito de borda.

4.1.2 - Proteção dos Lisímetros

Com o objetivo de impedir que chuvas naturais interferissem no experimento, foi montada uma cobertura sobre a área experimental. A estrutura tem a forma conhecida por "duas águas", tendo no seu centro 180 cm de altura e nas suas bordas 100 cm. Esta estrutura foi recoberta com plástico transparente. A Figura 4-3 mostra o local do experimento com os lisímetros protegidos pela cobertura de plástico.

Figura 4-3 - Cobertura de plástico colocada sobre a área experimental com os lisímetros protegidos de chuvas naturais.

4.1.3 - Tensiômetros

Os tensiômetros utilizados neste trabalho foram instalados antes da cobertura ser colocada sobre a área experimental. Este procedimento se fez necessário, pois 3 tensiômetros possuíam 170 cm de altura enquanto a cobertura possuía, no seu centro, uma altura máxima de 180 cm.

Os buracos para a instalação dos equipamentos foram abertos com trados a 30 cm e a 70 cm de distância, a partir de um ponto pré-estabelecido na circunferência do lisímetro (Figura 4-4). Inicialmente os tensiômetros seriam instalados a: 15 cm e 35 cm para os lisímetros de 45 cm de profundidade, 15 cm e 80 cm para os lisímetros de 90 cm de profundidade e 15 cm e 170 cm para os lisímetros de 180 cm de profundidade.

Contudo, durante a realização dos furos, nos lisímetros de 90 cm, foi observada a presença de pedregulho e areia a 80 cm de profundidade, material este utilizado para a confecção da base do lisímetro. O mesmo ocorreu para os lisímetros de 180 cm de profundidade. Desta maneira a proposta inicial foi modificada.

Assim, para os lisímetros de 90 cm de profundidade os tensiômetros foram instalados a 15 cm e 70 cm de profundidade. Para os lisímetros de 180 cm de profundidade, os tensiômetros foram instalados a 15 cm e 160 cm de profundidade.

Para os lisímetros de 45 cm de profundidade, este problema não foi observado. A Tabela 4.1 apresenta a configuração final de instalação dos tensiômetros, nos lisímetros utilizados.

Tabela 4.1 - Profundidades de instalação dos tensiômetros em cada um dos lisímetros utilizados.

Profundidade dos lisímetros (cm)	Profundidades de instalação dos tensiômetros (cm)
45	15 e 35
90	15 e 70
180	15 e 160

Figura 4-4 - Posição em que foram instalados os tensiômetros nos lisímetros.

Com o intuito de evitar que a água aplicada na superfície dos lisímetros, utilizasse as paredes dos tensiômetros como um caminho preferencial, de infiltração no solo, pedaços circulares de borracha foram presos aos tensiômetros conforme esquematizado na Figura 4-5.

Figura 4-5 - Pedaço de borracha adaptado a parede de um tensiômetro para evitar a utilização pela água de caminhos preferenciais.

4.1.4 - Manômetros

Neste trabalho foram utilizados manômetros de mercúrio conforme esquematizado na figura 4-6. Também foi utilizada uma bucha de vedação de plástico, na boca da proveta, para evitar perda de mercúrio por derramamento (Figura 4-6).

Os manômetros de mercúrio, foram colocados em placas de compensado ao lado dos lisímetros seguindo as recomendações da literatura (Klute, 1991). Foram utilizados tubinhos de plástico, para a conexão dos manômetros aos tensiômetros (Figura 4-7).

Figura 4-6 - Detalhe da bucha de vedação plástica, montada na boca da proveta, para evitar perda de mercúrio por derramamento do manômetro.

Figura 4-7 - Visão geral da montagem contendo o tensiômetro, o manômetro de mercúrio e os tubinhos utilizados para conecta-los.

4.2 - MEDIDAS EXPERIMENTAIS REALIZADAS

4.2.1 - Temperatura no Interior do Solo e da Cobertura de Plástico

A temperatura do solo foi obtida utilizando-se um equipamento eletrônico digital, composto de sensores de profundidade (com a forma de varetas) e sensores de

superfície. As varetas foram introduzidas no interior dos lisímetros até a profundidade desejada, e após alguns segundos o equipamento registrava o valor na tela. Os sensores de superfície eram apoiados sobre o solo, e da mesma forma, após alguns segundos o equipamento registrava o valor na tela. Os valores obtidos foram processados de forma a se ter os valores médios para cada profundidade de cada solo. Estes valores estão representados na Tabela 4.2.

Tabela 4.2 - Valores médios da temperatura, no interior e na superfície dos lisímetros, para cada um dos solos.

<i>Profundidade (cm)</i>	<i>Solos</i>		
	Pindorama	Ribeirão Preto	Monte Alegre do Sul
Superfície	25,0	26,8	25,1
5	22,4	22,5	20,5
10	20,3	20,8	18,7
15	19,9	20,3	18,8
20	20,4	21,4	19,5

A temperatura na cobertura foi tomada através de termômetro instalado a um metro de altura, acima da superfície. Os valores de temperatura foram tomados de dez em dez dias, de hora em hora, entre 8:00 h e 19:00 h, durante a realização do experimento: de 12 de abril a 24 de junho. Os valores obtidos foram processados de forma a se ter os valores médios para cada intervalo de tempo. Os valores médios obtidos estão representados na Tabela 4.3.

Tabela 4.3 - Temperaturas médias obtidas no interior da cobertura a um metro de altura do solo.

Hora do Dia	Temperatura (°C)	Hora do Dia	Temperatura (°C)
8:00	24,1	14:00	35,2
9:00	25,3	15:00	32,1
10:00	29,2	16:00	30,6
11:00	30,6	17:00	28,4
12:00	32,0	18:00	25,2
13:00	34,1	19:00	23,1

4.2.2- Condutividade Hidráulica Saturada

Para obtenção da condutividade hidráulica saturada de cada lisímetro (Klute, 1991), inicialmente tentou-se saturar toda a superfície de cada um deles. Desta forma, para que não escorresse água pelo condutor superior, foram vedadas estas saídas com cintas de chapa galvanizada de 50 x 5 cm² de área (Figura 4-8).

Figura 4-8 - Vedação, através de uma cinta de chapa galvanizada, da saída do condutor superior utilizado para a captação de água de escoimento superficial.

Para a saturação dos lisímetros, foi utilizada inicialmente a técnica proposta na literatura (Klute, 1991), utilizando-se de um Frasco de Mariotte (Figura 4-9).

Figura 4-9 - Frasco de Mariotte.

Com o decorrer do experimento observou-se, que para o caso específico deste experimento, tornava-se mais simples através de um regador completar a quantidade de água no lisímetro, mantendo-se assim o nível da lâmina de água constante. Posteriormente, notou-se também que a água estava utilizando caminhos preferenciais, principalmente pelas paredes do equipamento, para chegar até ao condutor de coleta de solução.

Após a instalação das lâminas de chapa galvanizada de 15 cm de altura por 75 cm de diâmetro na superfície dos lisímetros, praticamente foi eliminado o problema de infiltração preferencial pelas laterais.

Os valores de condutividade hidráulica saturada obtidos para cada um dos lisímetros, estão apresentados na Tabela 4.4.

Tabela 4.4 - Medidas de condutividade hidráulica saturada obtidas através do experimento de saturação.

<i>Lisímetros com solo de Pindorama - SP</i>	<i>K₀(mm / dia)</i>	<i>Profundidade(cm)</i>
2D	2419,2	45
6D	1296,0	90
9D	452,0	180
<i>Lisímetros com solo de Ribeirão Preto - SP</i>		
1E	880,2	45
6E	544,3	90
9E	522,6	180
<i>Lisímetros com solo de Monte Alegre do Sul - SP</i>		
2F	561,6	45
6F	224,6	90
9F	334,5	180

4.2.3 - Potencial Matricial de Água no Solo

Para a obtenção do potencial matricial, foram utilizados tensiômetros conforme descrito na seção 2.3. Em cada um dos nove lisímetros utilizados foram aplicados manualmente água numa quantidade corresponde a uma chuva de intensidade igual a 31,8 mm/h.

A chuva simulada foi aplicada em três datas específicas: um, dois e trinta e quatro dias após a aplicação do herbicida atrazina (Tabela 4.5). O método de aplicação da chuva simulada seguiu o mesmo procedimento descrito na seção 4.2.2.

Tabela 4.5 - Quantidade correspondente de chuva simulada em cada um dos nove lisímetros utilizados.

Tempo decorrido após a aplicação do herbicida atrazina (dias)	Quantidade correspondente de chuva simulada (mm/h)
01	31,8
02	31,8
34	31,8

Os valores de Z_{Hg} , para cada um dos nove lisímetros (Figura 2-3), foram coletados diariamente entre 8:00 h e 9:00 h. Utilizou-se para a coleta destes valores uma régua com graduação em milímetros. O erro de leitura adotado foi igual a metade da menor escala da regua utilizada (0,5 mm).

Para se obter o potencial matricial, em cada uma das profundidades, descritas na seção 4.1.3., utilizou-se a equação (2.7), descrita na seção 2.3. Os valores de z_0

(Figura 2-3), utilizados para os lisímetros de 45, 90 e 180 cm de profundidade foram respectivamente: 75, 110 e 200 cm.

Todos os valores obtidos para Ψ , utilizando a equação (2.8), estão apresentados na forma de uma tabela na seção A.3 apêndice.

4.2.4 - Solução de Solo

A partir do uso dos lisímetros descritos na seção 2.2, foram obtidas as amostras de solução de solo para as profundidades de 45, 90 e 180 cm. A Figura 4-10 mostra o sistema de captação de solução de solo, dos lisímetros utilizados.

Figura 4-10 -Caminho percorrido pela solução de solo. Após atravessar o equipamento a solução de solo é direcionada através de condutores até recipientes coletores do efluente.

Utilizou-se para a coleta de solução de solo, frascos com capacidade de 250 ml. Os frascos foram instalados, utilizando-se fita adesiva, junto as saídas dos condutores (Figura 4-11). Para que não surgissem problemas com vácuo, agulhas

farmacêuticas foram instaladas entre as paredes dos condutores e dos frascos. A função destas agulhas foi permitir a saída do ar que se encontrava dentro dos frascos.

Figura 4-11 - Frascos de 250 ml, instalados nos condutores, utilizados para a captação da solução de solo, para as três profundidades descritas.

Deste modo foram coletados, para cada lisímetro, frascos contendo solução de solo. A duração do experimento foi de 72 dias. A Tabela 4.6 apresenta o número total de frascos obtidos para cada lisímetro. A frequência de coleta dos frascos, contendo solução de solo, está apresentada na seção A.4 do apêndice.

Tabela 4.6 - Número total de frascos, contendo solução de solo, coletados nos lisímetros utilizados.

<i>Lisímetros</i>	2D	1E	2F	6D	6E	6F	9D	9E	9F
<i>Quantidade de frascos</i>	3	0	3	19	3	6	48	13	11

Através da Tabela 4.6 observa-se que, apesar de ter sido aplicada a mesma quantidade de água em todos os lisímetros (três chuvas de 31,8 mm), a resposta quanto a quantidade de solução de solo captada foi diferente.

O lisímetro 1E (Ribeirão Preto, 45 cm), provavelmente estava com algum tipo de vazamento não detectado quando do processo de saturação para a obtenção da condutividade hidráulica saturada.

Em outros lisímetros como o 2D, 2F, 6E, 6F, e 9F observou-se solução de solo, chegando até o local de captação em quantidade superior ao esperado, no segundo e terceiro dias após a aplicação das chuvas simuladas. Nestes lisímetros, provavelmente, pode ter ocorrido a formação de fluxos preferenciais.

5 - RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1 - OBTENÇÃO DAS CURVAS DE RETENÇÃO E AJUSTES DE PARÂMETROS

As amostras de solo empregadas com o fim de confecção das curvas de retenção de água no solo foram obtidas em duas etapas. Inicialmente, em novembro de 1992, foram coletadas amostras a 15, 30 e 60 cm de profundidade para o solo da Estação Experimental do IAC, em Pindorama-SP. Posteriormente, em abril de 1994, foram coletadas amostras a 15, 30, 70 e 160 cm de profundidade para os solos das Estações Experimentais do IAC, em Ribeirão Preto-SP e em Monte Alegre do Sul-SP. As análises das amostras foram realizadas nos laboratórios do CENA, em Piracicaba-SP.

Os valores de umidade e de potencial matricial obtidos, para as amostras analisadas do solo de Pindorama-SP, estão respectivamente apresentados na tabela 5.1.

Tabela 5.1 - Valores do potencial de água no solo e de umidade à base de volume obtidos, através da Panela de Richard, para o solo de Pindorama-SP.

PINDORAMA-SP	Profundidades (cm)		
	15	30	60
Potencial (Kpa)	Umidade à base de Volume (cm ³ /cm ³)		
0,0	32,97	34,41	36,9
6,9	32,12	33,66	36,51
27,6	31,05	32,22	34,87
68,3	28,94	28,22	28,21
82,7	27,13	26,74	26,63
137,7	24,66	22,96	23,12
413,3	13,53	11,19	13,31
963,9	10,70	8,49	10,63
1377,2	10,26	8,05	10,15
4133	8,82	6,85	8,94

Da mesma forma, os valores de umidade e de potencial matricial obtidos, para as amostras analisadas do solo de Monte alegre do Sul-SP, estão apresentados na tabela 5.2.

Tabela 5.2 - Valores do potencial de água no solo e de umidade à base de volume obtidos, através da Panela de Richard, para o solo de Monte Alegre do Sul-SP.

MONTE ALEGRE DO SUL-SP	Profundidades (cm)			
	15	30	70	160
Potencial (Kpa)	Umidade à base de Volume (cm ³ /cm ³)			
0,0	51,85	46,56	50,57	55,37
79,9	40,20	35,63	40,84	34,83
119,9	39,14	34,75	40,04	32,44
399,9	37,95	32,49	38,68	29,44
1333,22	36,97	31,04	36,28	26,35
6666,1	32,32	27,59	32,92	22,11

Por último, os valores de umidade e de potencial matricial obtidos, para as amostras analisadas do solo de Ribeirão Preto-SP, estão apresentados na tabela 5.3.

Tabela 5.3 - Valores do potencial de água no solo e de umidade à base de volume obtidos, através da Panela de Richard, para o solo de Ribeirão Preto-SP.

RIBEIRÃO PRETO- SP	Profundidades (cm)			
	15	30	70	160
Potencial (Kpa)	Umidade à base de Volume (cm ³ /cm ³)			
0,0	66,61	61,00	58,50	60,24
79,9	39,07	43,83	43,39	43,87
119,9	36,35	40,98	41,06	39,27
399,9	35,27	39,73	39,79	37,43
1333,2	32,70	32,70	37,47	34,51
6666,1	29,35	32,18	34,86	29,24

Estes dados, obtidos através da análise das amostras, foram comparados com aqueles obtidos através da simulação do modelo LEACHM-P. Os valores simulados utilizados para a confecção das curvas de retenção, de Pindorama-SP, Monte Alegre do Sul-SP e Ribeirão Preto-SP, foram obtidos trabalhando-se com três parâmetros. Dois destes parâmetros referem-se a equação da retentividade, proposta por Campbell (1974) e discutida no parágrafo 2.4.5. O Outro parâmetro diz respeito a densidade de massa. Este valor é utilizado para o calculo da umidade na saturação. No modelo este parâmetro, referente a densidade de massa, é chamado de RHO. Assim, após várias tentativas e ajustes chegou-se aos valores finais para cada um desses

parâmetros, para cada um dos solos estudados, considerando-se os dados de entrada discutidos no seção 4.4.

Os valores obtidos, para cada um dos três solos, estão apresentados na tabela 5.4.

Tabela 5.4 - Valores obtidos, para cada um dos três parâmetros estudados, para o solo de Pindorama para duas profundidades e para os solos de Monte Alegre do Sul e Ribeirão Preto para três profundidades.

<i>Solo de Pindorama-SP</i>	<i>Parâmetros</i>		
<i>Profundidade (cm)</i>	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>RHO</i>
30	-0,450E+02	2,75	1,7204
60	-0,250E+02	3,50	1,6546
<i>Solo de Monte Alegre do Sul-SP</i>	<i>Parâmetros</i>		
<i>Profundidade (cm)</i>	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>RHO</i>
30	-0,050E+01	19,0	1,4508
70	-0,035E+02	15,95	1,3703
160	-0,015E+02	8,50	1,2208
<i>Solo de Ribeirão Preto-SP</i>	<i>Parâmetros</i>		
<i>Profundidade (cm)</i>	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>RHO</i>
30	-0,040E+01	15,50	1,0867
70	-0,010E+02	14,60	1,1741
160	-0,060E+02	8,50	1,1192

Os gráficos que comparam os valores experimentais com os valores simulados, para o solo de Pindorama-SP, podem ser vistos nas figuras 5-1 e 5-2, respectivamente. Os gráficos que comparam os valores experimentais com os valores simulados, para o solo de Monte Alegre do Sul-SP, podem ser vistos nas figuras 5-3, 5-4 e 5-5, respectivamente. Os gráficos que comparam os valores experimentais com os valores simulados, para o solo de Ribeirão Preto-SP, podem ser vistos nas figuras 5-6, 5-7 e 5-8, respectivamente. As lacunas de pontos experimentais, encontradas em alguns gráficos, deve-se a impossibilidade de obtenção dos mesmos, através da metodologia utilizada pelo laboratório responsável.

Figura 5-1- Gráfico que permite comparar a curva de retenção simulada pelo modelo com os valores obtidos experimentalmente, à profundidade de 30 cm, para o solo de Pindorama-SP.

Figura 5-2 - Gráfico que permite comparar a curva de retenção simulada pelo modelo com os valores obtidos experimentalmente, à profundidade de 60 cm, para o solo de Pindorama-SP.

Figura 5-3 - Gráfico que permite comparar a curva de retenção simulada pelo modelo com os valores obtidos experimentalmente, à profundidade de 30 cm, para o solo de Monte Alegre do Sul-SP.

Figura 5-4 - Gráfico que permite comparar a curva de retenção simulada pelo modelo com os valores obtidos experimentalmente, à profundidade de 70 cm, para o solo de Monte Alegre do Sul-SP.

Figura 5-5 - Gráfico que permite comparar a curva de retenção simulada pelo modelo com os valores obtidos experimentalmente, à profundidade de 160 cm, para o solo de Monte Alegre do Sul-SP.

Figura 5-6 - Gráfico que permite comparar a curva de retenção simulada pelo modelo com os valores obtidos experimentalmente, à profundidade de 30 cm, para o solo de Ribeirão Preto-SP.

Figura 5-7 - Gráfico que permite comparar a curva de retenção simulada pelo modelo com os valores obtidos experimentalmente, à profundidade de 70 cm, para o solo de Ribeirão Preto-SP.

Figura 5-8 - Gráfico que permite comparar a curva de retenção simulada pelo modelo com os valores obtidos experimentalmente, à profundidade de 160 cm, para o solo de Ribeirão Preto-SP.

5.2 - CURVAS DE POTENCIAL DE ÁGUA NO SOLO EM FUNÇÃO DO TEMPO

Utilizando-se o conjunto de lisímetros situados na Estação Experimental do IAC, em Campinas-SP, foi realizado o monitoramento do potencial matricial em função do tempo, em quatro profundidades distintas, através de tensiômetros instalados em cada lisímetro. A instalação dos tensiômetros nos lisímetros estudados seguiu as diretrizes descritas na tabela 4.1. Nos lisímetros de 45 cm foram instalados dois tensiômetros: um à 15 cm e outro à 30 cm. Para os lisímetros de 90 cm foram instalados dois tensiômetros: um à 15 cm e outro à 70 cm e para os lisímetros de 180 cm, foram instalados dois tensiômetros: um à 15 cm e outro à 160 cm de profundidade.

Todos os valores obtidos para os 72 dias de monitoramento estão apresentados na seção A.3, do apêndice. A descrição da metodologia utilizada está apresentada na seção 4.2.4. Todas as medidas do potencial matricial, de cada lisímetro, foram realizadas entre 8:00 e 9:00 horas da manhã, de cada dia, no período de 12 de abril a 24 de junho de 1994.

Nas figuras 5-9 e 5-10 são apresentados os gráficos que comparam os dados experimentais obtidos, para os lisímetros com solo de Pindorama-SP, com as curvas obtidas através do modelo, para as profundidades de 15 e para 70 cm. No apêndice são apresentadas as figuras A.6-1, A.6-2, A.6-3, A.6-4, A.6-5 e A.6-6 correspondentes aos gráficos do potencial matricial em função do tempo para as profundidades de 30 e 160 cm, para os solos de Pindorama, Monte Alegre do Sul e Ribeirão Preto e respectivas simulações.

Figura 5-9 - Gráfico de potencial matricial em função do tempo, que permite comparar os pontos obtidos experimentalmente com a curva simulada pelo modelo, para a profundidade de 15 cm, para o solo de Pindorama-SP.

Figura 5-10 - Gráfico de potencial matricial em função do tempo, que permite comparar os pontos obtidos experimentalmente com a curva simulada pelo modelo, para a profundidade de 70 cm, para o solo de Pindorama-SP.

Nas figuras 5-11 e 5-12 são apresentados os gráficos que permitem comparar os dados experimentais obtidos, para os lisímetros com solo de Monte alegre do Sul-SP, com as curvas obtidas através do modelo, para as profundidades de 15 e para 70 cm.

Figura 5-11 - Gráfico de potencial matricial em função do tempo, que permite comparar os pontos obtidos experimentalmente com a curva simulada pelo modelo, para a profundidade de 15 cm, para o solo de Monte Alegre do Sul-SP.

Figura 5-12 - Gráfico de potencial matricial em função do tempo, que permite comparar os pontos obtidos experimentalmente com a curva simulada pelo modelo, para a profundidade de 70 cm, para o solo de Monte Alegre do Sul-SP.

Nas figuras 5-13 e 5-14 são apresentados os gráficos que permitem comparar os dados experimentais obtidos, para os lisímetros com solo de Ribeirão Preto-SP, com as curvas obtidas através do modelo, para as profundidades de 15 e para 70 cm.

Figura 5-13 - Gráfico de potencial matricial em função do tempo, que permite comparar os pontos obtidos experimentalmente com a curva simulada pelo modelo, para a profundidade de 15 cm, para o solo de Ribeirão Preto-SP.

Figura 5-14 - Gráfico de potencial matricial em função do tempo, que permite comparar os pontos obtidos experimentalmente com a curva simulada pelo modelo, para a profundidade de 70 cm, para o solo de Ribeirão Preto-SP.

Como pode-se observar através das figuras 5-1 à 5-8, o modelo LEACHM-P, após calibrado para as condições tropicais brasileiras, permitiu ajustar, as curvas de retenção de água, para os três solos descritos neste trabalho. Do mesmo modo pode-se observar, através das figuras 5-9 à 5-12, que o modelo, da mesma maneira, permitiu ajustar de forma satisfatória as curvas de potencial matricial em função do tempo para o solo de Pindorama e para o solo de Monte Alegre do Sul.

Observa-se contudo, através das figuras 5-13 e 5-14, que mesmo após a calibração, o ajuste das curvas de potencial em função do tempo para o solo de Ribeirão Preto, não

proporcionou bons resultados. Duas são as principais suspeitas para a discrepância verificada, entre os dados simulados e os experimentais, para o solo de Ribeirão Preto: (I) a equação de Campbell, desenvolvida inicialmente para solos não-tropicais, não ser apropriada para descrever a percolação de solutos neste tipo de solo e/ou (II) alguma falha no algoritmo do programa que, para o caso do solo de Ribeirão Preto, representou uma discordância significativa entre os valores simulados e experimentais.

Assim devido as comparações, entre os valores experimentais obtidos para o potencial matricial e aqueles simulados pelo modelo para o solo de Ribeirão Preto, não apresentam resultados satisfatórios para a calibração, a partir deste momento, irá se trabalhar apenas com os dados para os solos de Pindorama e Monte Alegre do Sul.

5.3 - CURVA DE CONCENTRAÇÃO DE PESTICIDA EM FUNÇÃO DA PROFUNDIDADE E DO TEMPO

As soluções de solo coletadas junto aos lisímetros, foram analisadas através de método cromatográfico, nos laboratórios do CNPMA-EMBRAPA, em Jaguariúna-SP. Os dados de concentração de pesticida, em ppm, estão apresentados na tabela A.4 do apêndice. Utilizando-se o modelo LEACHM-P devidamente calibrado, foi simulada a concentração da atrazina em função do tempo e da profundidade.

Os dados obtidos da simulação foram comparados com aqueles obtidos experimentalmente por análise cromatográfica. Na figura 5-15 é apresentado o gráfico que permite comparar os dados experimentais obtidos, para os lisímetros com solo de Monte Alegre do Sul-SP, para a concentração de atrazina em função do tempo com a curva simulada pelo modelo para a profundidade de 90 cm.

Figura 5-15 -Gráfico que permite comparar os valores para a concentração da atrazina em função do tempo, obtidos experimentalmente, com a curva simulada pelo modelo para a profundidade de 90 cm, para o solo de Monte Alegre do Sul-SP.

Na figura 5-16 é apresentado o gráfico que permite comparar os dados experimentais obtidos, para os lisímetros com solo de Pindorama-SP, com a curva simulada pelo modelo, para o vigésimo terceiro dia após a aplicação do herbicida atrazina na superfície dos lisímetros.

A existência de apenas três pontos experimentais amostrados (Tabela A.4, do apêndice), deve-se a impossibilidade de instalar-se extratores de solução nos lisímetros. A instalação destes equipamentos acarretaria, nos lisímetros, a abertura de mais buracos que poderia vir a perturbar o fluxo do pesticida no interior dos mesmos além de poder vir a danificá-los, prejudicando futuros trabalhos.

Figura 5-16 - Concentração de pesticida em função da profundidade, 23 dias após a aplicação do herbicida para o solo de Pindorama-SP.

Nas figuras 5-17 e 5-18 são apresentados os gráficos que permitem comparar os dados experimentais obtidos, para os lisímetros com solo de Monte Alegre do Sul-SP, com as curvas simuladas pelo modelo, após 14 e 47 dias de aplicação do herbicida atrazina na superfície dos lisímetros. As figuras A.6-7, A.6-7, A.6-8, A.6-9, A.6-10 e A.6-11, do apêndice apresentam os gráficos, que permitem comparar os valores obtidos experimentalmente com aqueles simulados, para 06 e 07 dias após a aplicação do herbicida atrazina para o solo de Pindorama e para 03, 35 e 62 dias após a aplicação do herbicida atrazina para o solo de Monte Alegre do Sul.

Figura 5-17 - Concentração de pesticida em função da profundidade, 14 dias após a aplicação do herbicida para o solo de Monte Alegre do Sul-SP.

Figura 5-18 - Concentração de pesticida em função da profundidade, 47 dias após a aplicação do herbicida para o solo de Monte Alegre do Sul-SP.

Através das figuras de 5-1 à 5-14, pode-se observar que o modelo LEACHM-P, após calibrado para as condições tropicais brasileiras, permitiu ajustar as curvas de retenção e de potencial matricial em função da profundidade para o solo de Pindorama-SP e Monte Alegre do Sul. Para o solo de Ribeirão Preto-SP houve uma concordância parcial, mesmo após várias tentativas de ajustes e calibração do modelo.

Do mesmo modo pode-se observar através da figura 5-15, que o modelo permitiu simular os pontos experimentais de concentração do herbicida atrazina, para o solo Monte Alegre do Sul-SP, obtidos pelo método cromatográfico.

Como descrito anteriormente, a existência de apenas três pontos experimentais amostrados (Tabela A.4, do apêndice), deve-se a impossibilidade de instalar-se extratores de solução nos lisímetros. A instalação destes equipamentos acarretaria, nos lisímetros, a abertura de mais buracos que poderia vir a perturbar o fluxo do pesticida no interior dos mesmos além de poder vir a danificá-los, prejudicando futuros trabalhos.

Apesar desta dificuldade, pode-se observar, através das figuras de 5-16 à 5-18, que as curvas produzidas pelo modelo, após ter sido calibrado para as condições tropicais brasileiras, concordaram com os pontos experimentais no tempo e no espaço.

Assim, comparando-se os dados experimentais e as simulações obtidas, pode-se considerar que o modelo LEACHM-P foi capaz de simular, nas condições descritas neste trabalho, as curvas de potencial de água no solo e as curvas de concentração de atrazina em função do tempo e da profundidade, para o solo de Pindorama e Monte Alegre do Sul.

O mesmo não se pode afirmar para o caso dos lisímetros com solo de Ribeirão Preto. Os resultados obtidos, para o potencial de água no solo, mostraram que o modelo não foi capaz de simular o movimento de água, em função da profundidade e do tempo, ocorrido no experimento realizado.

6 - CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Neste capítulo são apresentadas as principais conclusões obtidas e as sugestões de trabalhos futuros, surgidas em função de questões e resultados originados desta dissertação.

6.1 - Conclusões

Os objetivos desta dissertação foram plenamente atingidos, pois:

1) - Conforme previsto, o modelo LEACHM-P foi calibrado para levar em conta as condições tropicais brasileiras e para monitorar o movimento de pesticidas ao longo do perfil em tempo real, permitindo ajustar, as curvas de retenção e de potencial matricial em função da profundidade e do tempo (seções 5.1 e 5.2);

2) - Os valores dos parâmetros físicos necessários para execução do modelo LEACHM-P, tais como: temperatura do solo em várias profundidades, condutividade hidráulica saturada, meia-vida do pesticida, entre outros, foram obtidos experimentalmente através de medidas realizadas em laboratório ou diretamente nos lisímetros do IAC utilizados neste trabalho. Alguns parâmetros físico-químicos, também requisitados pelo modelo, tais como solubilidade e densidade de vapor do pesticida, foram obtidos a partir da literatura;

3) - Após ter sido calibrado, o modelo LEACHM-P, simulou os pontos experimentais medidos de concentração do herbicida atrazina em função do tempo e da profundidade, obtidos pelo método cromatográfico para os solos de Pindorama-SP e Monte Alegre do Sul-SP. Assim, para as condições descritas neste trabalho (capítulo 4), para estes dois solos específicos, o modelo foi verificada experimentalmente (seção 5.3).

Para o solo de Ribeirão Preto-SP os valores simulados, de potencial matricial em função do tempo e da profundidade, apresentaram resultados insuficientes para

considerar-se o modelo como calibrado nas condições descritas neste trabalho (capítulo 4 e 5).

4) - O fluxo de água foi medido e monitorado, ao longo do perfil vertical de cada um dos lisímetros utilizados, em função do tempo (seção 5.2.1). Da mesma forma o fluxo de soluto, em cada um dos lisímetros utilizados, também foi medido e monitorado em função do tempo e da profundidade (seção 5.3.1). Utilizou-se o método cromatográfico para as análises dos efluentes coletados dos lisímetros coletados.

6.2 - Sugestões Para Trabalhos Futuros

Muitas são as oportunidades de pesquisa na área de ciência do solo, ou mais especificamente em física dos solos, no que tange ao movimento de solutos no interior do solo (Sposito & Reginato, 1992; Crestana, 1994). Nesta seção fazemos algumas sugestões específicas de continuidade de trabalho surgidas em função desta dissertação.

- (a) Comparar os resultados obtidos nos lisímetros com solo de Pindorama com aqueles produzidos em experimentos de campo com chuva simulada na Estação Experimental do IAC, em Pindorama-SP, respeitando as condições iniciais e de contorno respectivas (Crestana, 1991);
- (b) Incorporar ao modelo LEACHM-P a simulação do fluxo preferencial, motivo provável da significativa quantidade de efluente observada no local de captação, em alguns lisímetros, no segundo e terceiro dias após a aplicação das chuvas simuladas;
- (c) Repetir o experimento de simulação para o solo de Ribeirão Preto, modificando outros parâmetros ou adaptando outras equações, por exemplo para condutividade hidráulica e coeficiente de partição (Vaz et al., 1995), buscando melhorar a concordância dos resultados produzidos pelo modelo e pelo experimento com os lisímetros;

(d) Instalar e utilizar o sistema de coleta automatica de dados edafo-ambientais por telemetria (Torre et al., 1994) nos lisímetros do IAC, em Campinas-SP e alimentar o modelo LEACHM-P instalado no CNPDIA-EMBRAPA, para monitorar o movimento de pesticidas ao longo do perfil em tempo real.

7 - REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BELMANS, C.; FEDDES, R.A. & WESSELING, J.G. Simulation model of water balance of a cropped soil: SWATRE. **J. Hydrol.**, **63**: 271-286, 1983.
- BERGSTROM, L. Use of lysimeters to estimate leaching of pesticides in agricultural soils. **Environmental Pollution**, **67**: 325-347, 1990.
- BOESTEN, J.J.T.I. & VAN DER LINDEN, A.M.A. Modeling the influence of sorption and transformation on pesticide leaching and persistence. **J. Environ. Qual.**, **20**: 425-435, 1991.
- BRESLER, E. Simultaneous transport of solutes and water under transient unsaturated flow conditions. **Water Resour. Res.**, **9**: 965-968, 1973.
- CALLEN, H.B. **Thermodynamic and introduction to thermostatic**. 2. ed.. New York, John Wiley, 1985.
- CAMPBELL, G.S. A simple method for determining unsaturated conductivity from moisture retention data. **Soil Sci.**, **117**: 311-314, 1974.
- CARSEL, R.F.; SMITH, C.N.; MULKEY, L.A.; DEAN, J.D. & JOWISE, P. **Users manual for pesticide root zone model (PRZM), release 1**: EPA-600/3-84-109. Athens, U.S. Environmental Protection Agency, Athens Environmental Research Laboratory, 1984.
- CHILDS, S.W. & HANKS, R.J. Model of soil salinity effects on crop growth. **Soil Sci. Soc. Am. Proc.**, **39**: 617-622, 1975.

CRAWFORD, N.H. & DONIGIAN JR., A.S. **Pesticide transport and runoff model for agricultural lands**: EPA-660/2-74-013, Washington, U.S. Environmental Protection Agency, 1973.

CRAWFORD, N.H. & LINSLEY, R.K. **The synthesis of continuous streamflow hydrographs on a digital computer**. Stanford, Stanford University-Department of Civil Engineering, 1962. (Stanford University. Department of Civil Engineering. Technical Report, 12).

CRESTANA, S. **Transporte, previsão do destino e balanço de pesticidas no solo**. São Carlos, EMBRAPA-NPDIA, 1990. Projeto temático financiado pela FAPESP sob o número 90/3773-7.

CRESTANA, S. Técnicas recentes de determinação de características do solo. In: REUNIÃO BRASILEIRA DE MANEJO E CONSERVAÇÃO DO SOLO E DA ÁGUA: PEQUENA PROPRIEDADE X DESENVOLVIMENTO SUSTENTÁVEL, 10, **Resumos...**, Florianópolis-SC, jul. 1994. Sociedade Brasileira de Ciência do Solo, 1994. p.86-97. ref. 010.

COWAN, I. R. & MILTHORPE, F.L. Plant factors influencing the water status of plant tissues. In: KOZLOWSKI, T.T. ed. **Water deficits and plant growth**. New York, Academic Press, 1968. p. 137-193.

CURI, N., coord. **Vocabulário de ciência do solo**. Campinas, Sociedade Brasileira de Ciência do Solo, 1993.

DAVIDSON, J.M.; GRAETZ, P.S.; RAO, C. & SELIM, H.M. **Simulations of nitrogen movement, transformation, and uptake in plant root zone**: EPA-600/3-78-029. Washington, USPA, 1978.

- DONIGIAN JR., A.S. & CRAWFORD, N.H. **Modeling pesticides and nutrients on agricultural lands**: EPA-600/2-76-043, Washington, U.S. Environmental Protection Agency, 1976.
- DONOHUE, G.W. **Image processing**: short course with Khoros. Albuquerque, University of New Mexico, 1992.
- FOTH, H.D. **Fundamentals of soil science**. 6. ed. New York, John Wiley, 1978.
- FREEZE, R.A. & CHERRY, J.A. **Groundwater**. Englewood Cliffs, Prentice-Hall, 1979.
- FRERE, M.H.; ONSTAD, C.A. & HOLTAN, H.N. **ACTMO**: an agricultural chemical transport model. Headquarters, USDA, ARS, 1975. (USDA, ARS, ARS-H-3).
- GARDNER, W.R. Calculation of capillary conductivity from pressure plate outflow data. **Soil Sci. Soc. Am. Proc.**, 1956.
- GLYMPH, L.M. & HOLTAN, H.N. **Land treatment in agricultural watershed hydrology research**: effects of watershed changes on stream flow. Austin, University of Texas, 1969. p. 44-68. (University of Texas, Water Resources Symposium, 2).
- GOLD, H.J. **Mathematical modeling of biological systems**: an introductory guidebook. New York, John Wiley, 1977.
- HANKS, R.J. & ASHCROFT, G.L. **Applied soil physics**: soil water and temperature applications. New York, Springer-Verlag, 1986.

- HANKS, R.J. & BOWERS, S.A. Numerical solution of the moisture flow equation for infiltration into layered soils. **Soil Sci. Soc. Am. Proc.**, **26**: 530-534, 1962.
- HILLEL, D. **Applications of soil physics**. New York, Academic Press, 1980.
- HILLEL, D. **Introduction to soil physics**. London, Academic Press, 1982.
- HUTSON, J.L. & CASS, A. A retentivity function for use in soil-water simulation models. **J. Soil Sci.**, **38**, 105-113, 1987.
- JONES, T.W.; KEMP, W.M.; STEVENSON, J.C. & MEANS, J.C. Degradation of atrazine in estuarine/water/sediment systems and soils. **J. Environ. Qual.**, **11**: 1982.
- JURY, W.A.; SPENCER, W.F. & FARMER, W.J. Behavior assessment model for trace organics in soil. I. Model description. **J. Environ. Qual.**, **12**: 558-564, 1983.
- KEMPER, W.D. & VAN SCHAIK, J.C. Diffusion of salts in clay-water systems. **Soil Sci. Soc. Am. Proc.**, **30**: 534-540, 1966.
- KIRKHAM, D. & POWERS, W.L. **Advanced soil physics**. New York, John Wiley, 1972.
- KLUTE, A., ed. **Methods of soil analysis**. Part 1: physical and mineralogical methods. 2. ed. Madison, ASA/SSSA, 1991.
- KNISEL, W.G., ed. **CREAMS**: a field-scale model for chemicals, runoff, and erosion from agricultural management system. Washington, USDA, 1979. (USDA, Conservation Research Report, 26).

- LEONARD, R.A.; KNISEL, W.G.; STILL, D.A. & JOHNSON, A.W. **Modeling vertical flux of pesticides with CREAMS**: proceedings of the nonpoint pollution abatement symposium, Milwaukee, WI, April 23-25, 1985. Milwaukee, s. ed., 1985. p. T-I-D-1 - T-I-D-12.
- LEONARD, R.A.; KNISEL, W.G. & STILL, D.A. **GLEAMS**: groundwater loading effects of agricultural management systems: American Society of Agricultural Engineering, Winter meeting, Chicago, IL, Dec.16-19, 1986. Chicago, ASAE, 1986.
- LEPSCH, I.F. & VALADARES, J.M.A.S. Levantamento pedológico detalhado da Estação Experimental de Pindorama, Pindorama-SP. **Bragantia**, **35**: 13-40, 1976.
- LIBARDI, P.L; REICHARDT, K; NIESEN, D.R & BIGGAR, J.W. Simple field methods for estimating soil hydraulic conductivity. **Soil Sci. Soc. Am. J.**, **44**: 3-7, 1980.
- MCLLROY, I.C. & ANGUS. **The apendale multiple weighed lysimeter installation**. Camberra, CSIRO, 1963. (CSIRO. Division Meteorology Physics Paper, 14).
- NEGEV, M.A. **Sediment model on a digital computer**. Stanford, Stanford University-Depatment of Civil Engineering, 1967. (Stanford University. Department of Civil Engineering. Technical Report, 76).
- NIMAH, M.N. & HANKS, R.J. Model for estimation of soil water, plant, and atmospheric interrelations: I. Description and sensibility. **Soil. Sci. Soc. Amer. Proc.**, **37**: 522-527, 1973.

- NOFZIGER, D.L & HORNSBY, A.G. **Chemical movement in layered soils: user's manual**. s.l., University of Florida-Institute of Food and Agricultural Sciences, 1987.
- OLIVEIRA, J.B. & MONIZ, A.C. Levantamento pedológico detalhado da Estação Experimental de Ribeirão Preto. **Bragantia**, **34**: 59-113, 1975.
- OLSEN, S.R. & KEMPER, W.D. Movement of nutrients to plant roots. **Adv. Agron.**, **20**: 91-151, 1968.
- PENNELL, K.D.; HORNSBY, A.G.; JESSUP, R.E & RAO, P.S. Evaluation of five simulation models for predicting aldicarb and bromide behavior under field conditions. **Water Resour. Res.**, **26**: 2679-2693, 1990.
- RALPH, G.N. Solid-size extraction of carbofuran, atrazine, simazine, anachlor, cyanazine from shallow well water. **J. Ass. Oss. Anal. Chem.**, **73**: 438-442, 1990.
- RHOADES, J.D & OSTER, J.D. Solute content. In: **METHODS of soil analysis; physical and mineralogical methods**. 2.ed. Madison, ASA, 1986. v. 1, cap. 42, p. 985-1006. (Agronomy, 9).
- ROTTA, C.L.; JORGE, J.A.; OLIVEIRA, J.B. & KÜPPER, A. Levantamento pedológico detalhado da Estação Experimental de Monte Alegre do Sul, SP. **Bragantia**, **30**: 215-277, 1971.
- SAWHNEY, B.L. & BROWN, K., ed. **Reactions and movement of organic chemical in soils**. Madison, SSSA/ASA, 1989. (SSSA Special Publication, 22).

- SMITH, W.N.; PRASHER, S.O.; KHAN, S.U. & BARTHAKUR, N.N. Leaching of ^{14}C - atrazine in long, intact soil columns. **Trans. of ASAE**, 35, 1992.
- SPOSITO, G. & REGINATO, R.J., ed. **Opportunities in basic soil science research**. Madison, SSSA, 1992.
- SOCOLOW, R.H. Physics and the environment.. **Physics Today**, special issue, p. 22-23, Nov. 1994.
- STEENHUIS, T.S.; PACENKA, S. & PORTE, K.S. Mouse: a management model for evaluating groundwater contamination from diffuse surface sources aided by computer graphics. **Appl. Ag. Res.**, 2: 277-289, 1987.
- SWARZENDRUBER, D. The flow of water in unsaturated soils. In: DEWIEST, R. J. M., ed., **Flow through porous media**. New York, Academic Press, 1969. Cap. 6, p. 215-292.
- TANNER, C. B. Energy balance approach to evapotranspiration from crops. **Soil Sci. Soc. Am. Proc.**, 24: 1-9, 1960.
- TANNER, C.B. Evaporation of water from plants and soil. In: WATER deficits and plant growth. New York, Academic Press, 1968.
- TILLOTSON, W.R.; ROBBINS, C.W.; WAGENET, R.J & HANKS, R.J. **Soil water, solute, and plant growth simulation**. Logan, Utah State Agricultural Experiment Station 1980. (Utah State Agricultural Experiment Station, Bulletin 502).

- TORRE, A. **Estudo e implementação de um sistema de monitoramento remoto de variáveis edafo-ambientais**. São Carlos, USP-IFSC, 1995. Tese doutorado.
- TREFIL, J.S. **Introduction to the physics of fluids and solids**. s.l. Pergamon Press, 1975.
- VAZ, C.M.P.; MACHADO, S.A.S.; MAZO, L.H.; AVACA, L.A. & CRESTANA, S. Análise de pesticidas por polarografia - Determinação de isothermas de adsorção em solos. In: XXV CONGRESSO BRASILEIRO DE CIÊNCIA DO SOLO, **Resumos expandidos**, Viçosa-MG, jul. 1995. Sociedade Brasileira de Ciência do Solo, 1995. p.2393-2395, vol 4.
- WAGENET, R.J. Principles of salt movement in soils. In: NELSON, D.W. et al., ed. **Chemical mobility and reactivity in soil systems**. Madison, SSSA/ASA, 1984. p.123-140. (SSSA Special Publication,11)
- WAGENET, R.J.; HUTSON, J.L & NIEDERHOFER, M.E. **Leaching estimation and chemistry model: a user's guide**. Version 2.0. New York, Water Resources Institute, 1989.
- WIERENGA, P.J.; NIELSEN, D.R & HAGAN, R.M. Thermal properties of a soil based upon field and laboratory measurements. **Soil Sci. Soc. Am. Proc.**, **33**: 354-360, 1969.
- WILLIAMS, J.R. & HANN JR, R.W., **Optimal operation of large agricultural watersheds with water quality constraints**. Austin, Texas A&M University, 1978. (Texas Water Resources Institute. Technical Report, 96).

WISCHMEIER, J.R. & SMITH, D.D. **Predicting rainfall-erosion losses from cropland east of the rocky mountains**: guide for selection of practices for soil and water conservation. s.l., USDA, 1965. (Agriculture Handbook, 282).

8 - GLOSSÁRIO

absorção. Movimento de íons e água para dentro (**ativa**) ou para fora (**passiva**) da raiz da planta.

adsorção. Processo pelo qual átomos, moléculas ou íons são retidos na superfície de sólidos por intermédio de ligações químicas ou físicas.

álico. Termo empregado para denominar alta saturação por alumínio trocável (valor m igual ou superior a 50%). Calculada pela expressão:

$$m(\%) = 100Al^{3+}/(Al^{3+} + S)$$

onde S é a soma de cátions básicos trocáveis. Normalmente Al^{3+} representa a acidez extraída por solução neutra de KCl 1N.

areia fina. Partículas de solo entre 0,25 e 0,10 mm de diâmetro equivalente na escala americana, mais utilizada em ciência do solo, e entre 0,20 e 0,02 mm na escala internacional (Atterberg).

areia grossa. Partículas de solo entre 1,00 e 0,50 mm de diâmetro equivalente na escala americana, mais utilizada em ciência do solo, e entre 2,00 e 0,20 mm na escala internacional (Atterberg).

argila. Partículas de solo menores que 0,002 mm de diâmetro equivalente na escala americana, mais utilizada em ciência do solo, e 0,002 mm na escala internacional (Atterberg).

distrófico. Solo pouco fértil; dessaturado.

epipedom. É um horizonte ou conjunto de horizontes situados na parte mais superficial do solo e enriquecido de matéria orgânica. Não corresponde exatamente aos horizontes O ou A, pois pode ser menos espesso que o A e também pode incluir alguma parte do horizonte B mais rico em matéria orgânica. O termo epipedon se refere aos horizontes diagnósticos superficiais do sistema abrangente de classificação americana de solos (Soil Taxonomy).

eutrófico. Solo que possui concentrações de nutrientes em níveis ótimos ou quase, para crescimento de plantas ou animais. É usado para descrever soluções de nutrientes ou de solo e corpos de água.

horizontes do solo. Seções de constituição mineral ou orgânica, aproximadamente paralelas à superfície do terreno, parcialmente expostas no perfil do solo e dotadas de propriedades geradas por processos formadores do solo que lhe conferem características de inter-relacionamento com outros horizontes componentes do perfil. A seguir listamos as designações utilizadas nesta dissertação.

A - horizonte superficial mineral, no qual a feição enfatizada é uma acumulação de matéria orgânica decomposta intimamente associada com a fração mineral.

B - horizonte de máxima iluviação.

O - horizonte ou camada superficial de cobertura, de constituição orgânica, sobreposto a alguns solos minerais, em condições de drenagem sem restrições que possam resultar em estagnação de água.

E - horizonte mineral com evidência de perda de argila silicat, óxidos de ferro e de alumínio ou matéria orgânica, com resultante concentração de quartzo ou outros minerais resistentes do tamanho de areia ou site.

horizontes diagnósticos superficiais. São aqueles horizontes que se formam à superfície; também chamados epipedom. Não são sinônimos de horizonte A, porque eles não podem incluir horizontes O e parte ou todo o horizonte B iluvial se o escurecimento pela matéria orgânica se estender da superfície para dentro ou através do horizonte B.

iluviação. Processo de decomposição de material de solo removido de um horizonte superior para um inferior, no perfil do solo. Dentre as substâncias iluviadas, destacam-se: argilo-minerais, óxidos de Fe e Al, e matéria orgânica.

latossolos. Solos normalmente muito espessos, geralmente formados em regiões tropicais úmidas, sem horizonte subsuperficial de acúmulo de argila, caracterizados por apresentarem baixa capacidade de troca catiônica, baixa atividade de argila, baixo teor de minerais primários facilmente inteperizáveis e de constituintes solúveis.

latossolo roxo. Classe de latossolos desenvolvidos de rochas básicas (basalto, diabásio, gabro, tufito ou rochas afins). Tem entre 18 e 40% de Fe_2O_3 (determinação pelo ataque sulfúrico) e são fortemente atraídos pelo magneto (ímã). Podem ser eutróficos, distróficos ou álicos.

limo. O mesmo que **silte**. Partículas de solo entre 0,05 e 0,002 mm de diâmetro equivalente na escala americana, mais utilizada em ciência do solo, e entre 0,02 e 0,002 mm na escala internacional (Atterberg).

ordem de solos. Uma categoria de classificação de solos.

perfil do solo. Seção vertical do solo através de todos os seus horizontes e estendendo-se para dentro do material de origem. O perfil é apenas um corte, que equivale a um corte histológico ou uma seção petrográfica.

percolação. Movimento descendente de água através do perfil do solo, especialmente o fluxo descendente de água em solo saturado ou próximo à saturação, com gradientes hidráulicos da ordem de 1,0 ou menos.

plântico. Adjetivação usada para solos que contêm plintita, em volume e/ou espessura insuficientes para construir um horizonte plítico dentro da seção de controle

plintita. Formação contituída de mistura de argila, pobre em húmus e rica em ferro e alumínio, com quartzo e outros minerais.

podzólico vermelho-amarelo. Classe de solos minerais não hidromórficos, com horizonte B textural não plântico, precedido de qualquer horizonte A ou E diagnósticos, exceto

horizonte turfoso e com cores vermelho, vermelho-amarelado e bruno-forte, com conteúdo de $\text{Fe}_2\text{O}_3 \leq 11\%$.

saturação. Preenchimento de todos os vazios entre as partículas do solo com um determinado líquido.

sorção. Fenômeno simultâneo de adsorção e absorção.

turfoso. Horizonte essencialmente orgânico formado ou formando-se em decorrência de acumulação de resíduos vegetais, depositados superficialmente sob condições de excesso de água permanente ou temporário.

APÊNDICES

A.1 - Exemplo de Arquivo de Entrada

iacriber < DOS Filename (eight characters).

LEACHP PESTICIDE DATA FILE.

(A value must be present for each item, although it may not be Bused)

Date type (US:1 UK:2)	1		
Starting date	041294	Ending (date or day no.)	70
Largest time interval (day)	.0500E+00	Maximum water flux/time st	.0100E-00
Read theta(1) or pot'l(2)	2	No. of chemical species	1
No. of water applications	3	No. chemical applications	1
Cycles through data	1	No. of crops	0

PROFILE DETAILS

Profile depth (mm)	.1800E+04	Bottom boundary condition	2
Segment thickness (mm)	.2000E+03	:1 or 5, water table depth	.0000E+04

DIFFUSION/DISPERSION

Molecular diffusion Do	.1200E+03	Dispersivity (mm)	.1000E+02
coefficient (mm ² /d) DIFA	.1000E-02	Diff coeff in air (mm ² /d)	.4300E+06
(Bresler's eq.) DIFB	.1000E+02	Barometric enhancement	.0000E+00

NUMBER OF OUTPUT FILES	1	Outflow incr. for BTC (mm)	1.0
-----OUT file-----		-----SUM file-----	
Units: 1 ug/kg, 2 mg/m ²	1	Summary print interval (d)	1.00
Node print frequency	1	Three depth segments for the summary	
Print options: 1, 2 or 3	2	file (0's default to thirds of the profile) (mm):	
1: Time intervals/print 1			
2: days/print	1.0	Surface to [depth 1?]	300
3: No. of prints	2	Depth 1 to [depth 2?]	600
Tables printed: 1,2 or 3	2	Depth 2 to [depth 3?]	1500

List here the times at which *.OUT file is desired for print option 3

(The number of times must match the 'No. of prints' above)

Date or	Time of day	(At least one must be specified
Day no.	(to nearest tenth)	even if print option is not B3)

-----	-----
122688	.2
010189	.5

SOIL PHYSICAL PROPERTIES

(Retentivity model 0 uses listed Campbell's retention parameters, otherwise the desired pedotransfer function is used)

Soil Layer no.	Particle size distribution			Organic Carbonpot'l %	Match K(h) at: Pedotransfer		
	Clay %	Silt %	Rho kg/dm3		K mm/d	Matric Retentivity kP	function: model Bno.
1	49.0	30.0	1.02	1.0	880.2	-0.	0
2	62.5	18.5	1.02	1.0	880.2	-0.	0
3	64.5	17.5	1.00	1.0	880.2	-0.	0
4	64.5	17.5	1.00	0.5	544.3	-0.	0
5	61.5	19.0	1.00	0.5	544.3	-0.	0
6	61.5	19.0	1.00	0.5	522.6	-0.	0
7	60.5	21.0	0.98	0.5	522.6	-0.	0
8	60.5	21.0	0.98	0.5	522.6	-0.	0
9	60.5	21.0	0.98	0.5	522.6	-0.	0

Particle density kg/dm3:	Clay 3.00	Sand 2.65	Organic matter 1.10
--------------------------	--------------	--------------	------------------------

For a uniform profile: Any non-zero value here will override those in the table of hydrological characteristics below.

0.0 <Soil bulk density Mg/cu.m
-0.00 <Air -entry value' kPa
0.00 <Exponent in Campbell's water retention equation
0000 -0.0 <Conductivity (mm/day) and corresponding matric potential (kPa)
1 <Dispersivity scaling (relative to value Babove)

Soil layer no.	Starting values		Water retention parameters		Root fraction (for const root distr)	Dispersivity scaling (relative to reference above)	Equação Regressão
	Pot'l or kPa	Theta	AEV kPa	BCAM			lhida.
1	-475.9	0.0	-.190E+02	3.00	0.100	1	3
2	-605.5	0.0	-.190E+02	3.00	0.100	1	3
3	-605.5	0.0	-.200E+02	3.00	0.050	1	3
4	-83.5	0.0	-.210E+02	4.00	0.000	1	3
5	-83.5	0.0	-.210E+02	4.00	0.000	1	3
6	-83.5	0.0	-.220E+02	7.00	0.000	1	3
7	-83.5	0.0	-.220E+02	7.00	0.000	1	3
8	-83.5	0.0	-.220E+02	7.00	0.000	1	3
9	-83.5	0.0	-.220E+02	7.00	0.000	1	3

CROP DATA

 Data for at least one crop must be specified, even if no crop desired.
 For fallow soil, set flag below to 0, or germination past the end date.

0 <Plants present: 1 yes, 0 no. This overrides all other crop data.
 1 <Roots: Constant (1), using data specified above; growing (2).
 -1500 <Wilting point (soil) kPa.
 -3000 <Min.root water pot'l(kpa).
 1.1 <Maximum ratio of actual to potential transpiration (dry surface).
 1.05 <Root resistance weights water uptake by depth. (No weighting: 1.0)

Crop no	Germination Date	Emergence Day no	Maturity Root	Plant	Harvest	Rel. root depth	Crop cover fraction	Pan factor
1	110692	121992	030192	030892	040892	1.00	0.8	1.0

INITIAL PROFILE DATA

Soil layer	Temperature Celcius	Chem1	Chem2	Chem3	Chem4
		----mg/kg dry soil----			
1	23.6	00.0	0.0	0.0	000.0
2	22.8	00.0	0.0	0.0	000.0
3	22.0	0.0	0.0	0.0	000.0
4	22.0	0.0	0.0	0.0	000.0
5	22.0	0.0	0.0	0.0	000.0
6	22.0	0.0	0.0	0.0	000.0
7	21.0	0.0	0.0	0.0	000.0
8	21.0	0.0	0.0	0.0	000.0
9	21.0	0.0	0.0	0.0	000.0

Concentration (mg/l) below the profile (leave at zero)

0.0 0.0 0.0 0.0

CHEMICAL PROPERTIES

Species No.	Name	Solub mg/dm3	Vap.Dens mg/dm3	Koc l/kg	L Equil sites	Phase trans	Plant Uptake
1	ATRAZINE	.700E+04	.160E-04	1.63E+02	1	0.00	00.00 0

-----1(yes),0(no)-----

*The values of L1,L2--->Ln ('Link' in the Chemical Properties above) determine *which species form a transformation chain. Setting Ln = 0 breaks the pathway,
 *Ln = 1 restores it.

```

-----Transformation pathways-----
* |   RATE 1   RATE 2   RATE 3   RATE 4
* SE1---/L1/--->SE2---/L2/--->SE3---/L3/--->SE4---/L4/--->...
* |
* |   RATE 5   |   RATE 6   |   RATE 7   |   RATE 8   | Degradation
* |           |           |           |           | pathways
* |           |           |           |           | |
* |   v       |   v       |   v       |   v       | |
*PRODUCT     PRODUCT     PRODUCT     PRODUCT     |
*                                                    |
*****

```

ADJUSTMENTS TO TRANSFORMATION AND DEGRADATION RATE CONSTANTS

```

-----
0    <Rate constants apply to bulk soil (1), or solution phase only (0)
      Temperature and water content effects on rate constants:
0    <Include temperature subroutine and adjustments? yes(1), no(0)
3    <Q10: factor by which rate constant changes per 10 C increase
20   <Base temperature: at which rate constants below apply
35   <Optimum temperature: Q10 relationship applies from 0 C to here
50   <Maximum temperature: Rate constants decrease from optimum to
      here
.08  <High end of optimum water content range: air-filled porosity
-300 <Lower end of optimum water content: matric potential kPa
-1500 <Minimum matric potential for transformations kPa
0.6  <Relative transformation rate at saturation
*****

```

TRANSFORMATION RATE CONSTANTS

```

-----
Layer   Chemical 1   Chemical 2   Chemical 3   Chemical 4
no      -----
-----  <----- day ** -1 ----->
1       0.01220E-00  0.0000E-00  0.0000E-00  0.0000E-00
2       0.01220E-00  0.0000E-00  0.0000E-00  0.0000E-00
3       0.01220E-00  0.0000E-00  0.0000E-00  0.0000E-00
4       0.01220E-00  0.0000E-00  0.0000E-00  0.0000E-00
5       0.01220E-00  0.0000E-00  0.0000E-00  0.0000E-00
6       0.01220E-00  0.0000E-00  0.0000E-00  0.0000E-00
7       0.01220E-00  0.0000E-00  0.0000E-00  0.0000E-00
8       0.01220E-00  0.0000E-00  0.0000E-00  0.0000E-00
9       0.01220E-00  0.0000E-00  0.0000E-00  0.0000E-00
*****

```

DEGRADATION RATE CONSTANTS

```

-----
LayerOBB Chemical 1   Chemical 2   Chemical 3   Chemical 4
no      -----
-----  <----- day ** -1 ----->
1       0.0000E-00  0.0000E-00  0.0000E-00  0.0000E-01
2       0.0000E-00  0.0000E-00  0.0000E-00  0.0000E-01
3       0.0000E-00  0.0000E-00  0.0000E-00  0.0000E-01

```

4	0.0000E-00	0.0000E-00	0.0000E-00	0.0000E-01
5	0.0000E-00	0.0000E-00	0.0000E-00	0.0000E-01
6	0.0000E-00	0.0000E-00	0.0000E-00	0.0000E-01
7	0.0000E-00	0.0000E-00	0.0000E-00	0.0000E-01
8	0.0000E-00	0.0000E-00	0.0000E-00	0.0000E-01
9	0.0000E-00	0.0000E-00	0.0000E-00	0.0000E-01

CHEMICAL APPLICATIONS

START OF DAY (Date or Day no.)	INCORP'N (SEGMENTS)	CHEM1	CHEM2	CHEM3	CHEM4
		mg/sq.m (1mg/sq.m = .01kg/ha)			

1	0	600.00	000.0	000.0	000.00
---	---	--------	-------	-------	--------

RAIN/IRRIGATION AND WATER COMPOSITION

(Choosing the steady-state flow option will prevent calls to the water flowsubroutine, fix flux at that specified and keep theta constant with time. Interrupted steady-state can be specified by an appropriate times and amounts)

0	< Steady-state? yes(1), no(0). Set 0 for transient flow.
0.4	< Water content for steady-state (theta)

Date or Day no.	Start time Time of Day	Amount (mm)	Surface flux density mm/d	Dissolved in water (can be 0) Chem1 Chem2 Chem3 Chem3 mg/l			
2	0.4	31.83	50.00	.0E+00	.0E+00	.0E+00	.0E+00
3	0.4	31.83	50.00	.0E+00	.0E+00	.0E+00	.0E+00
34	0.4	31.83	50.00	.0E+00	.0E+00	.0E+00	.0E+00

POTENTIAL ET (WEEKLY TOTALS, mm), DEPTH TO WATER TABLE (mm)

MEAN WEEKLY TEMPERATURES AND MEAN WEEKLY AMPLITUDE (degrees C)

Week no.	ET	Water table	Mean temp	Amplitude
1	56.0	0.	28.0	4.0
2	56.0	0.	28.0	4.0
3	56.0	0.	28.0	4.0
4	56.0	0.	28.0	4.0
5	56.0	0.	29.0	3.0
6	56.0	0.	29.0	3.0
7	56.0	0.	28.0	4.0
8	56.0	0.	28.0	4.0

A.2 - Exemplo de Arquivo de Saída

SOIL HYDROLOGICAL CHARACTERISTICS

PREDICTED RETENTIVITY AND CONDUCTIVITY DATA

Satrn	Depth (mm)									Water content, theta (Conductivity mm/day)	
	-0.3kPa	-1.0kPa	-3 kPa	-10 kPa	-30 kPa	-100kPa	-300kPa	-1000 kPa	a (kPa)	b	
Ti	Hi	(kPa)									
100.	0.518	0.518	0.516	0.494	0.255	0.042	0.006	0.001	0.000	-6.500	
	0.607	0.284	-9.361								
	0.242E+04	0.241E+04	0.234E+04	0.180E+04	0.294E+02	0.384E-03	0.170E-08	0.222E-13			
	0.986E-19										
300.	0.466	0.466	0.465	0.464	0.449	0.318	0.046	0.007	0.001	-25.000	
	0.600	0.254	-35.965								
	0.242E+04	0.242E+04	0.241E+04	0.237E+04	0.194E+04	0.229E+03	0.145E-02	0.171E-			
	07	0.675E-13									
500.	0.529	0.529	0.528	0.526	0.505	0.313	0.042	0.007	0.001	-22.000	
	0.600	0.288	-31.650								
	0.242E+04	0.242E+04	0.241E+04	0.235E+04	0.173E+04	0.552E+02	0.311E-04	0.585E-			
	10	0.311E-16									
700.	0.567	0.566	0.557	0.506	0.448	0.400	0.354	0.316	0.280	-0.992	
	9.788	0.540	-1.616								
	0.130E+04	0.124E+04	0.802E+03	0.719E+02	0.309E+01	0.175E+00	0.754E-02	0.427E-			
	03	0.184E-04									
900.	0.567	0.566	0.557	0.506	0.448	0.400	0.354	0.316	0.280	-0.992	
	9.788	0.540	-1.616								
	0.130E+04	0.124E+04	0.787E+03	0.642E+02	0.244E+01	0.124E+00	0.471E-02	0.238E-			
	03	0.907E-05									
1100.	0.592	0.590	0.572	0.511	0.450	0.401	0.353	0.314	0.277	-0.752	
	9.455	0.562	-1.224								
	0.452E+03	0.418E+03	0.187E+03	0.102E+02	0.376E+00	0.185E-01	0.684E-03	0.337E-04			
	0.124E-05										
1300.	0.536	0.536	0.535	0.534	0.511	0.317	0.043	0.007	0.001	-22.000	
	0.600	0.292	-31.650								
	0.452E+03	0.452E+03	0.450E+03	0.437E+03	0.309E+03	0.611E+01	0.466E-06	0.140E-			
	12	0.100E-19									
1500.	0.536	0.536	0.535	0.534	0.511	0.317	0.043	0.007	0.001	-22.000	
	0.600	0.292	-31.650								
	0.452E+03	0.452E+03	0.451E+03	0.439E+03	0.324E+03	0.103E+02	0.581E-05	0.109E-			
	10	0.581E-17									

1700. 0.536 0.536 0.535 0.534 0.513 0.336 0.046 0.007 0.001-23.000
0.600 0.292 -33.088
0.452E+03 0.452E+03 0.451E+03 0.440E+03 0.333E+03 0.156E+02 0.991E-05 0.186E-
10 0.991E-17

TIME ELAPSED	0.000 DAYS	CUMULATIVE TOTALS AND MASS BALANCE	
DATE	4/12/94	Water mm	ATRAZINE mg/m2
Initial total		394.1	0.0
Currently in profile		394.1	0.0
Undissolved on soil surface			600.0
Cum. Runoff			0.0
Simulated change		0.0	600.0
Additions:	i) in rain or irrig	0.0	0.0
	ii) as amendment		600.0
Losses:	i) in drainage	0.0	0.0
	ii) by evap/voltn/cnvrns:	0.0	0.0
	iii) by transformation		0.0
	iv) by degradation		0.0
	v) by plant uptake	0.0	0.0
Mass error		0.0	0.0

Volatile loss (mg/m2) of pesticide during ponded ☐ water application 0.0000E+00

Node Depth mm	Theta kPa	Potnl mm	Flux I-5	Total ug/kg	ATRAZINE Solution mg/l	Gas ug/l
100.	0.000	-640.60	0.0	0.617E-09	0.294E-08	0.142E-11
300.	0.061	-84.80	0.0	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
500.	0.056	-84.80	0.0	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
700.	0.391	-38.10	0.0	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
900.	0.391	-38.10	0.0	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
1100.	0.391	-38.10	0.0	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
1300.	0.214	-38.10	0.0	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
1500.	0.214	-38.10	0.0	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
1700.	0.253	-36.10	0.0	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
Drainage flux :			0.0			

Total 394.1 0.00

(Water fluxes are cumulative since the previous printout and, except for the drainage flux, refer to the upper boundary of each depth segment.)

The following distribution is calculated ignoring undissolved chemical on the soil surface and that lost from the profile by leaching, plant uptake and volatilization

Depth and conc of 1st %ile 0 mm 0.00E+00
 Depth and conc of 5th %ile 0 mm 0.00E+00
 Depth and conc of 16th %ile 0 mm 0.00E+00
 Depth and conc of 50th %ile 0 mm 0.00E+00
 Depth and conc of 84th %ile 0 mm 0.00E+00
 Depth and conc of 95th %ile 0 mm 0.00E+00
 Depth and conc of 99th %ile 0 mm 0.00E+00

Tabela A.3 - Valores de Potencial Matricial obtidos através dos Tensiômetros colocados nos lisímetros do I.A.C. Os valores são negativos. Estes dados foram obtidos de 12/04/94 a 24/06/94.

Local	Monte Alegre do Sul-SP				Ribeirão Preto-SP				Pindorama-SP			
Profundidade	cm				cm				cm			
	15	35	70	160	15	35	70	160	15	35	70	160
Tempo (dias)	Pot. Mat. (Kpa)				Pot. Mat. (Kpa)				Pot. Mat. (Kpa)			
00	640,6	84,8	38,1	44,1	475,9	---	83,5	35,7	218,9	100,3	38,1	2,1
01	427,2	93,2	43,1	35,7	393,6	605,5	71,7	40,7	230,6	110,0	38,1	47,5
02	203,8	24,3	44,8	35,7	113,1	289,7	59,9	40,7	66,0	64,5	39,7	37,3
03	30,8	10,8	33,1	37,3	76,1	54,5	41,5	34,0	47,6	20,9	34,7	23,9
04	37,5	12,5	31,3	37,3	98,0	52,8	41,5	32,3	57,6	20,9	31,3	25,6
05	37,5	12,5	31,3	39,1	91,2	61,2	44,8	30,7	66,0	26,0	33,1	13,9
06	50,9	19,2	33,1	39,1	123,2	66,3	41,5	39,1	77,9	26,0	33,1	39,1
07	61,1	20,9	36,4	37,3	118,1	71,3	43,1	35,7	81,2	30,9	33,1	39,1
08	61,1	17,6	24,7	35,7	165,2	74,7	43,1	32,3	84,5	32,7	33,1	23,9
09	71,1	16,3	26,3	37,3	166,8	79,7	43,1	34,0	86,3	34,4	33,1	20,5
10	77,9	15,9	29,7	39,1	171,9	86,4	43,1	32,3	91,2	37,7	33,1	20,5
11	84,5	15,9	29,7	39,1	185,3	96,5	43,1	34,0	94,7	42,8	34,7	18,9
12	99,6	15,9	31,3	40,7	197,1	103,2	43,1	34,0	96,3	44,4	34,7	18,9
13	111,5	15,9	33,1	40,7	205,4	110,0	43,1	34,0	96,3	46,1	34,7	17,2
14	128,3	24,3	35,2	42,4	205,4	118,4	38,1	32,3	96,3	47,7	34,7	22,3
15	150,0	17,6	33,1	37,3	225,6	121,7	43,1	32,3	99,3	46,1	38,1	18,9
16	158,5	19,3	34,8	40,8	229,1	135,2	41,5	32,4	99,3	49,5	38,1	18,9
17	182,5	24,3	34,8	44,1	239,2	140,2	41,5	34,1	104,3	52,9	36,5	27,3
18	191,3	21,0	38,1	40,8	241,7	148,6	41,5	34,1	104,3	54,6	36,5	29,0
19	210,2	22,6	38,1	40,8	248,0	158,7	43,2	34,1	103,1	56,2	36,5	29,0
20	213,8	24,3	36,5	40,8	268,1	170,5	39,8	35,7	108,1	56,2	36,5	24,0
21	222,8	24,3	34,8	40,8	279,5	182,2	44,8	35,7	108,1	56,2	36,5	27,3
22	249,2	26,0	34,8	44,1	300,9	194,0	36,5	35,7	110,6	57,9	36,5	20,6
23	244,2	29,4	33,1	42,4	297,1	200,7	44,8	34,1	106,9	57,9	36,5	17,3
24	249,2	26,0	34,8	44,1	316,0	212,5	46,5	32,4	110,6	59,6	36,5	5,5
25	270,7	32,7	33,1	44,1	332,4	225,9	46,5	35,7	114,4	59,6	36,5	25,7
26	282,0	36,1	36,5	42,4	342,5	236,0	48,2	35,7	115,7	63,0	38,1	27,3
27	307,2	39,4	39,8	44,1	358,9	247,7	51,6	40,8	118,2	63,0	41,5	24,0
28	316,0	41,1	36,5	40,8	380,3	262,9	49,9	39,1	118,2	64,6	39,8	27,3
29	340,0	39,4	36,5	44,1	397,9	272,9	49,9	35,7	127,0	64,6	38,1	20,6
30	327,4	47,8	36,5	40,8	401,7	289,7	51,6	37,4	118,2	66,3	39,8	24,0

Local	Monte Alegre do Sul-SP				Ribeirão Preto-SP				Pindorama-SP			
Profundidade	cm				cm				cm			
	15	35	70	160	15	35	70	160	15	35	70	160
Tempo (dias)	Pot. Mat. (Kpa)				Pot. Mat. (Kpa)				Pot. Mat. (Kpa)			
31	371,8	51,2	36,4	44,1	420,5	304,8	53,2	44,1	129,9	68,0	39,7	42,4
32	405,4	56,1	38,1	44,1	442,4	326,6	51,5	44,1	140,0	69,6	38,1	39,1
33	417,2	59,6	36,4	42,4	460,8	340,1	51,5	44,1	138,3	69,6	38,1	37,3
34	392,0	62,9	34,7	44,1	454,1	358,5	53,2	44,1	134,9	69,6	38,1	25,6
35	86,9	19,2	38,1	44,1	98,0	128,4	49,9	42,4	50,9	39,3	33,1	28,9
36	57,6	20,9	34,7	44,1	119,9	116,7	43,1	42,4	61,1	39,3	34,7	25,6
37	56,0	22,5	36,4	44,1	134,9	114,9	41,5	40,7	69,5	36,0	36,4	25,6
38	62,7	24,3	36,4	40,7	151,7	120,0	41,5	42,4	77,9	37,7	36,4	39,1
39	67,8	22,6	34,8	39,1	168,6	126,8	39,8	42,4	86,3	41,1	38,3	29,0
40	74,5	22,6	36,5	40,8	177,0	136,9	41,5	42,4	91,3	44,5	38,3	39,1
41	81,2	26,0	38,3	40,8	190,4	146,9	41,5	40,8	96,3	44,5	38,3	42,4
42	82,8	24,3	38,1	40,7	195,5	153,6	43,1	40,7	96,3	46,1	38,1	28,9
43	89,6	26,0	38,1	40,7	205,4	162,0	41,5	40,7	101,3	47,7	38,1	30,7
44	94,7	24,3	38,1	40,7	212,2	170,4	41,5	40,7	103,1	51,2	41,5	30,7
45	126,5	27,6	39,7	40,7	237,4	188,9	44,8	40,7	11,5	54,5	39,7	40,7
46	133,2	24,3	38,1	40,7	250,8	197,3	44,8	40,7	108,0	54,5	39,7	25,6
47	150,0	26,0	38,1	40,7	250,8	205,7	44,8	40,7	109,7	57,9	38,1	32,3
48	161,9	27,6	39,7	40,7	259,2	215,7	46,5	40,7	116,4	59,6	39,7	34,0
49	176,9	29,3	39,7	40,7	267,6	227,6	46,5	40,7	106,4	61,2	39,7	25,6
50	193,7	26,0	39,7	40,7	279,4	234,2	46,5	35,7	109,7	561,2	38,1	28,9
51	215,6	30,9	39,7	40,7	294,5	247,7	48,1	40,7	113,1	61,2	39,7	28,9
52	218,1	32,7	41,5	40,7	296,2	259,5	48,2	35,7	105,6	63,0	39,8	29,0
53	256,8	36,1	41,5	40,7	319,8	271,3	49,9	41,5	117,3	64,3	38,1	34,1
54	250,1	37,8	41,5	40,7	324,8	283,0	49,9	42,5	118,2	66,3	38,1	25,6
55	263,5	42,8	39,8	44,1	329,0	301,5	53,3	42,5	115,7	68,0	39,8	34,1
56	283,6	46,2	39,8	42,5	345,8	313,3	48,2	39,1	122,4	69,7	39,8	35,7
57	316,4	44,5	41,5	44,1	365,1	326,7	53,2	39,1	124,1	69,7	39,8	40,8
58	318,9	46,2	39,8	42,5	374,4	335,1	48,2	37,4	124,9	68,0	39,8	34,1
59	320,6	47,8	39,8	42,5	376,0	350,2	48,2	37,4	116,5	68,0	39,8	25,7
60	322,3	56,2	41,5	42,5	383,6	365,3	55,0	39,1	119,9	74,7	41,5	39,1
61	339,1	56,2	39,8	42,5	391,2	390,5	58,3	40,8	123,2	73,0	41,5	37,4
62	350,8	59,6	39,8	42,5	401,2	404,0	60,0	44,1	135,8	74,7	44,9	40,8
63	376,9	63,0	39,8	42,5	418,0	419,1	58,3	44,1	138,3	78,1	46,5	32,4
64	384,4	64,6	41,5	42,5	426,4	435,9	58,3	44,1	134,1	79,8	46,5	27,3
65	397,9	73,0	41,5	42,5	425,6	457,7	63,3	44,1	131,6	81,4	46,5	30,7
66	393,7	74,7	36,5	44,1	429,0	471,2	61,7	45,8	129,1	83,1	49,9	30,7
67	402,1	78,1	41,5	44,1	434,8	482,9	61,7	49,2	135,0	86,5	46,5	27,3
68	417,2	84,8	38,1	44,1	442,4	499,7	61,7	57,6	140,9	88,2	51,6	27,3
69	439,0	86,5	41,5	44,1	445,8	518,2	66,7	71,0	139,2	89,8	49,9	35,7
70	482,7	94,9	31,4	45,8	471,8	540,0	61,7	81,0	158,5	120,1	48,2	44,1
71	522,2	99,9	38,1	49,2	489,4	555,2	65,0	94,5	161,9	121,8	48,2	42,5
72	508,7	105,0	39,8	47,5	491,1	575,3	65,0	---	158,5	98,2	---	27,3

Tabela A.4 - Valores obtidos através de Cromatografia Líquida para as amostras coletadas nos lisímetros do I.A.C.

Localidade	Monte Alegre do Sul-SP			Ribeirão Preto-SP			Pindorama-SP		
Profundidade	cm			cm			cm		
	45	90	180	45	90	180	45	90	180
Tempo	ppm			ppm			ppm		
02	17,6	,213	ND		ND		,187		
03	25,7	,175	,152		ND		,154		
04	31,32					,133			
05		,156			,118	,144			
06		,130				,065		,056	
07								,049	
08		,093				,088			,082
09		,109				,052			,084
12		,083						ND	
13			,059			ND			,054
14		,073				ND			,054
15							ND		
17			,036			,074			
19			ND			,088			
23		,495	,142			,384		,033	
28			,030						
32			,103						
35		,058	,062						ND
38									ND
39		,041	ND						
43		,133							
47		,074							
49			ND						
54									ND
55								ND	
56								ND	
57			ND						
59						ND			ND
62		,047							
67			ND						

A.5 - Tabelas com os dados de entrada do modelo LEACHM-P, para o experimento com os lisímetros situados no I.A.C.

Tabela A.5.1 - Quantidade de chuva simulada aplicada, em cada um dos nove lisímetros.

Data	Tempo de Aplicação (horas)	Lamina de Água Aplicada (mm)
13/04/94	1,0	31,83
14/04/94	1,0	31,83
16/05/94	1,0	31,84

Tabela A.5.2 - Características físico-químicas do pesticida aplicado (USEPA-ODW, 1991)

Pesticida	Atrazina
Solubilidade (mg/dm ³)	0,700 x 10 ²
Densidade de Vapor (mg/dm ³)	0,1600 x 10 ⁻⁴
K _{oc} (coef. carbono orgânico) (l/kg)	1,630 x 10 ²
Quantidade Aplicada (mg/m ²)	50

Tabela A.5.3 - Distribuição de partículas através do perfil para o lisímetro com solo de Pindorama-SP (Lepsch & Valadares, 1976).

Profundidade (cm)	0-15	15-28	28-45	45-75	75-100	100-130	130-180
% Argila	5,9	7,3	11,7	29,2	26,7	22,9	15,6
% Limo	1,7	1,7	2,2	4,4	7,5	8,7	11,0
% Carbono Orgânico	1,00	1,00	1,00	0,50	0,50	0,50	0,50

Tabela A.5.4 - Condutividade hidráulica saturada (média dos valores obtidos experimentalmente), para os lisímetros com solo de Pindorama-SP.

Profundidade (cm)	0 - 45	45 - 90	90 - 180
Média dos K _s (mm/d)	2419,2	1296,0	452,0

Tabela A.5.5 - Potencial matricial experimental, obtido no primeiro dia de experimento, para os lisímetros com solo de Pindorama-SP.

Profundidade (cm)	15	35	70	160
Valor Medido (Kpa)	-218,9	-160,3	-38,1	-2,1

Tabela A.5.6 - Distribuição de partículas através do perfil para o lisímetro com solo de Monte Alegre do Sul-SP (Rotta et al., 1971).

Profundida de (cm)	0-9	9-16	16-29	29-50	50-75	75-100	100-180
% Argila	25,0	25,0	41,0	47,5	48,0	47,0	37,0
% Limo	20,5	21,5	15,5	13,5	14,5	15,0	21,5
% Carbono Orgânico	1,00	1,00	1,00	0,50	0,50	0,50	0,50

Tabela A.5.7 - Condutividade hidráulica saturada (média dos valores obtidos experimentalmente), para os lisímetros com solo de Monte Alegre do Sul-SP.

Profundidade (cm)	0 - 45	45 - 90	90 - 180
Média dos K_s (mm/d)	561,0	224,6	334,5

Tabela A.5.8 - Potencial matricial experimental, obtido no primeiro dia de experimento, para os lisímetros com solo de Monte Alegre do Sul-SP.

Profundidade (cm)	15	35	70	160
Valor Medido (Kpa)	-640,6	-84,8	-38,1	-44,1

Tabela A.5.9 - Distribuição de partículas através do perfil para o lisímetro com solo de Ribeirão Preto-SP (Oliveira & Moniz, 1975).

Profundidade (cm)	0-20	20-38	38-62	62-112	112-180
% Argila	49,0	62,5	64,5	61,5	60,5
% Limo	30,0	18,5	17,5	19,0	21,0
% Carbono Orgânico	1,00	1,00	0,50	0,50	0,50

Tabela A.5.10 - Condutividade hidráulica saturada (média dos valores obtidos experimentalmente), para os lisímetros com solo de Ribeirão Preto-SP.

Profundidade (cm)	0 - 45	45 - 90	90 - 180
Média dos K_s (mm/d)	880,2	544,3	522,6

Tabela A.5.11 - Potencial matricial experimental, obtido no primeiro dia de experimento, para os lisímetros com solo de Ribeirão Preto-SP.

Profundidade (cm)	15	35	70	160
Valor Medido (Kpa)	-475,9	N.D.	-83,5	-35,7

A.6 -Gráficos Complementares Para a Retenção, o Potencial Matricial e a Concentração de Pesticida.

Figura A.6-1 - Gráfico de potencial matricial em função do tempo, que permite comparar os pontos obtidos experimentalmente com a curva simulada pelo modelo, à profundidade de 30 cm, para o solo de Pindorama-SP.

Figura A.6-2 - Gráfico de potencial matricial em função do tempo, que permite comparar os pontos obtidos experimentalmente com a curva simulada pelo modelo, à profundidade de 160 cm, para o solo de Pindorama-SP.

Figura A.6-3- Gráfico de potencial matricial em função do tempo, que permite comparar os pontos obtidos experimentalmente com a curva simulada pelo modelo, à profundidade de 30 cm, para o solo de Monte Alegre do Sul-SP.

Figura A.6-4 Gráfico de potencial matricial em função do tempo, que permite comparar os pontos obtidos experimentalmente com a curva simulada pelo modelo, à profundidade de 160 cm, para o solo de Monte Alegre do Sul-SP.

Figura A.6-5- Gráfico de potencial matricial em função do tempo, que permite comparar os pontos obtidos experimentalmente com a curva simulada pelo modelo, à profundidade de 30 cm, para o solo de Ribeirão Preto-SP.

Figura A.6-6- Gráfico de potencial matricial em função do tempo, que permite comparar os pontos obtidos experimentalmente com a curva simulada pelo modelo, à profundidade de 160 cm, para o solo de Ribeirão Preto-SP.

Figura A.6-7 - Concentração de atrazina em função da profundidade, 06 dias após a aplicação do herbicida para o solo de Pindorama-SP.

Figura A.6-8 - Concentração de atrazina em função da profundidade, 07 dias após a aplicação do herbicida para o solo de Pindorama-SP.

Figura A.6-9 - Concentração de atrazina em função da profundidade, 03 dias após a aplicação do herbicida para o solo de Monte Alegre do Sul-SP.

Figura A.6-10 - Concentração de atrazina em função da profundidade, 35 dias após a aplicação do herbicida para o solo de Monte Alegre do Sul-SP.

Figura A.6-11 - Concentração de atrazina em função da profundidade, 62 dias após a aplicação do herbicida para o solo de Monte Alegre do Sul-SP.