

AVALIAÇÃO DO MODELO HYDRUS-1D NA SIMULAÇÃO DO TRANSPORTE DE ÁGUA E POTÁSSIO EM COLUNAS PREENCHIDAS COM SOLOS TROPICAIS

ROQUE E. DA C. DE PINHO¹, JARBAS H. DE MIRANDA²

RESUMO: A preocupação com o destino de produtos químicos e água, aplicados ao solo, tem motivado vários pesquisadores a desenvolverem e aplicarem modelos teóricos, a fim de descrever os processos físicos envolvidos no transporte desses produtos no perfil do solo. Nesse sentido, esta pesquisa teve como objetivo aplicar o modelo HYDRUS-1D, bem como avaliar sua performance, em simulações do deslocamento do potássio e água (umidade do solo), em colunas segmentadas, preenchidas com dois tipos de solos tropicais, em condições não saturadas (Latosolo Vermelho-Amarelo e Nitossolo Vermelho). Os parâmetros de transporte do potássio foram obtidos por meio de curvas de distribuição de efluentes (*Breakthrough Curves (BTC)*). O desempenho do modelo foi avaliado com base nos seguintes parâmetros estatísticos: erro máximo, erro absoluto médio, raiz quadrada do erro médio normalizado, coeficiente de massa residual, coeficiente de determinação, eficiência e índice de concordância de Willmott. Diante dos resultados obtidos, pôde-se concluir que o modelo HYDRUS-1D foi eficiente nas simulações de deslocamento do potássio e da água, em relação aos dois materiais de solo estudados.

PALAVRAS-CHAVE: transporte de contaminantes, lixiviação, modelagem computacional, HYDRUS-1D.

EVALUATION OF HYDRUS-1D TO SIMULATE WATER AND POTASSIUM TRANSPORT IN TWO LABORATORY TROPICAL SOIL COLUMNS

ABSTRACT: The need to better understand and predict the fate and transport of water and various dissolved contaminants in tropical soils has motivated the development of theoretical models describing the basic physical and biogeochemical processes involved. This research aimed to evaluate the performance of the HYDRUS-1D software package to simulate water and potassium movement in segmented columns filled with two tropical soil types, a red-yellow Latosol (LVA) and a Nitosol (NV), during unsaturated flow conditions. The potassium transport parameters were estimated from observed solute breakthrough curves. Model performance was evaluated using several statistical criteria: maximum error, mean absolute error, root mean square standard error, coefficient of residual mass, coefficient of determination, efficiency and the Willmott agreement index. Results showed that the HYDRUS-1D model was very efficient in simulating the movement of water and potassium in the two soils.

KEYWORDS: contaminant transport, leaching, computational modeling, HYDRUS-1D.

INTRODUÇÃO

No Brasil, ainda são escassas pesquisas que avaliem o impacto da atividade agrícola sobre a qualidade das águas subterrâneas, considerando a presença de fertilizantes e agrotóxicos em áreas de agricultura e, em especial, nas áreas de recarga, onde os aquíferos tendem a ser mais vulneráveis. A preocupação com o destino destes produtos químicos aplicados ao solo tem motivado vários pesquisadores a desenvolverem modelos teóricos, objetivando descrever tais processos físicos

¹ Engº Agrônomo, Doutor, Departamento de Engenharia de Biosistemas, ESALQ-USP/Piracicaba-SP, Fone (19) 3429-4283 Ramal 207, roqueemmanuel@yahoo.com.br.

² Engº Agrônomo, Prof. Associado 2, Departamento de Engenharia de Biosistemas LEB/ESALQ/USP, Av. Pádua Dias n.11, CEP: 13.418-900, Telefone: (19) 3429-4123 ramal:210/Piracicaba-SP, jhmirand@usp.br

Recebido pelo Conselho Editorial em: 28-11-2013

Aprovado pelo Conselho Editorial em: 16-4-2014

envolvidos no transporte desses produtos no perfil do solo. De acordo com ALCÂNTARA & CAMARGO (2010) e GARCIA et al. (2012), as técnicas de resolução de equações e os recursos computacionais disponíveis permitem prever os riscos de contaminação e os impactos que os componentes químicos podem causar ao sistema solo-água-plantas.

Nas últimas décadas, tem-se observado um considerável progresso na compreensão e na descrição de processos físicos que regem os fenômenos do movimento da água e o transporte de solutos na região não saturada do solo. Surgiu, assim, grande variedade de modelos analíticos e numéricos para prever os processos de transferência da água e de solutos entre a superfície do solo e o lençol freático. Dentre eles, é possível citar: UNSATCHEM (ŠIMŮNEK et al., 1996), HYDRUS-1D (ŠIMŮNEK et al., 2005), STANMOD (ŠIMŮNEK et al., 2008). Esses modelos baseiam-se na equação de Richards para o fluxo saturado/não-saturado da água no solo e na equação de convecção-dispersão para o transporte de solutos.

O aumento da utilização dos modelos desenvolvidos, em condições variadas de laboratório e de campo, além de possibilitar melhorias para as rotinas computacionais, fornece informações acerca dos processos para os quais os modelos podem ser aplicados com confiança. O modelo HYDRUS-1D, versão 3.0, trata-se de um software utilizado na simulação do movimento unidimensional de água, calor e solutos em um meio saturado fisicamente variável. Pesquisas já foram desenvolvidas com a aplicação do *software* HYDRUS-1D para simular a dinâmica de água e outros elementos no solo, tais como: HILTEN et al. (2008), MONTEIRO et al. (2009), CHEVIRON & COQUET (2009), NEUMANN et al. (2011) e TAFTEH & SEPASKHAH (2012).

Neste contexto, partindo da hipótese de que o HYDRUS-1D é uma ferramenta eficiente para simular o deslocamento de água e de solutos em solos, esta pesquisa teve como objetivo avaliar a aplicação do modelo HYDRUS-1D para a simulação do movimento vertical descendente da água (umidade do solo) e do potássio (concentração de potássio), em condições não saturadas de solos tropicais (Latosolo Vermelho-Amarelo e Nitossolo Vermelho), acondicionados em colunas segmentadas, preparadas em laboratório.

MATERIAL E MÉTODOS

A pesquisa foi conduzida junto ao Laboratório de Física do Solo, do Departamento de Engenharia de Biosistemas, da Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz” (ESALQ/USP). O material de solo, para preenchimento das colunas, foi coletado na camada até 0,3 m no perfil de solo, no município de Piracicaba-SP, em um Latossolo Vermelho-Amarelo (LVA) e em um Nitossolo Vermelho (NV), classificados conforme EMBRAPA (2006). Pela Tabela 1, podem ser conferidos os resultados da análise física do material de solo, realizada após terem sido destorroados, secos ao ar e peneirados em uma malha de 2 mm, seguindo a recomendação do Manual de Métodos de Análises de Solo (EMBRAPA, 2011).

Pela Tabela 2, podem ser conferidos os parâmetros de ajuste da curva de retenção de água no solo, para os dois solos, segundo o modelo de van GENUCHTEN (1980) (eq. 1), elaborado a partir de amostras de solos com estrutura deformada, para os seguintes valores de tensão: 1; 2; 4; 10; 3; 50; 100; 500 e 1.500 kPa. Os pontos de umidade volumétrica relacionados com as tensões de 1 a 10 kPa foram obtidos por uma mesa de tensão, e os pontos, a partir de 30 kPa, foram obtidos pela Câmara de Richard (KLUTE, 1986).

TABELA 1. Caracterização física do material de solo utilizado: Latossolo Vermelho-Amarelo (LVA) e Nitossolo Vermelho (NV). **Physical properties of the Haplustox (LVA) and Hapludox (NV) soils used in the experiments.**

Características	LVA	NV
Granulometria (g kg ⁻¹)		
Areia grossa	290	90
Areia fina	520	190
Silte	27	318
Argila	163	402
Classe Textural*	Francoarenosa	Argilosa
Densidade do solo (kg dm ⁻³)	1,50	1,325
Densidade de partículas (kg dm ⁻³)	2,60	2,73
Porosidade (%)	42,3	51,4
Condutividade hidráulica do solo saturado (K _o , cm h ⁻¹)	9,5	7,8

*Classificação segundo USDA

TABELA 2. Parâmetros de ajuste da curva de retenção de água para o material de solo utilizado: Latossolo Vermelho-Amarelo (LVA) e Nitossolo Vermelho (NV). **Fitted water retention parameters for the Haplustox (LVA) and Hapludox (NV) soils.**

Tipo de solo	Parâmetros da curva de retenção (van Genuchten, 1980)*				
	θ_r	θ_s	α	n	r ²
LVA	0,025	0,423	0,0343	1,4634	0,964
NV	0,068	0,505	0,0301	1,1763	0,960

* $m = 1 - \frac{1}{n}$, $n > 1$

$$\theta(\Psi_m) = \theta_r + \frac{(\theta_s - \theta_r)}{\left[1 + (\alpha \cdot |\Psi_m|)^n\right]^m} \quad (1)$$

em que,

 $\theta(\Psi_m)$ = umidade volumétrica do solo em função do potencial mátrico do solo (Ψ_m), cm³.cm⁻³; θ_s = umidade volumétrica do solo saturado, cm³ cm⁻³; θ_r = umidade volumétrica residual do solo, cm³cm⁻³;

m, n = parâmetros de regressão da equação; adimensional;

 α = parâmetro com dimensão igual ao inverso da tensão, cm⁻¹; e Ψ_m = potencial mátrico, cm.

Parâmetros de Transporte

Os parâmetros de transporte foram obtidos mediante o ajuste numérico das curvas de distribuição de efluentes (*Breakthrough Curve* (BTC)), os quais foram: número de Peclet (P) (eq. 2), coeficiente de dispersão (D) (eq. 3), Número de Peclet em função da Dispersividade (λ) (P (λ)), Número de Peclet em função da velocidade da água nos poros (P (v)) e fator de retardamento (R) (eq. 4).

O número de Peclet (P) é um número adimensional utilizado no estudo da difusão através de um meio poroso, utilizado para determinar qual mecanismo (convecção-dispersão ou difusão) domina o processo de transferência de solutos (ROTH, 1996; GONÇALVES, 2007), exprimindo a relação entre a velocidade de transporte por convecção e a velocidade de transporte por difusão

molecular. Pequenos valores do número de Peclet indicam que o transporte de difusão domina sobre o transporte de convecção. Para maiores valores do número de Peclet, o transporte de convecção domina sobre o de difusão (WANG, 2002; GONÇALVES, 2007).

$$P = \frac{v.L}{D} \quad (2)$$

em que,

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

L = comprimento da coluna de solo, L ; e

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

O coeficiente de dispersão é geralmente assumido como sendo uma função da velocidade do fluido, cujo valor pode ser obtido pela relação entre o fluxo de água no solo e a umidade volumétrica:

$$D_h = \lambda.v^n \quad (3)$$

em que,

λ = dispersividade do meio poroso, L ;

v = velocidade da água no poro (q/θ), $L T^{-1}$; e

n = constante empírica, aproximadamente igual a 1,0.

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

$$R = 1 + \frac{\rho.k}{\theta} \quad (4)$$

em que:

R = fator de retardamento, adimensional;

ρ = densidade do solo, $M L^{-3}$;

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

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

Preenchimento das colunas para elaboração das BTCs

As colunas de PVC, com as dimensões de 0,23 m de altura e 0,049 m de diâmetro, foram preenchidas com material de solo, citado anteriormente, em camadas constantes, equivalentes e homogêneas. Um dreno foi instalado na parte superior da coluna que tinha a função de manter a carga hidráulica de 1 cm, e na parte inferior, um círculo de manta sintética e uma grade metálica, fixados por um “cap”, com a função de dar o suporte de sustentação do solo dentro da coluna.

Para promover a saturação do solo na coluna e iniciar os testes, foram seguidos os mesmos procedimentos de MIRANDA et al. (2005) e ROSSI et al. (2007), substituindo-se apenas a água destilada por água deionizada e utilizando-se, um medidor de íon específico para o potássio.

Foi aplicada uma solução com uma concentração de 2.000 mg L^{-1} de potássio e foram coletados volumes sequenciais de efluentes de 15 mL, representando frações de 0,076 e 0,086 volume de poros (VP) do NV e do LVA, respectivamente. Os VP foram calculados em função do volume de solo da coluna ($3,771 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3$) e da porosidade do material de solo (52% para o NV e 46% para LVA). Para auxiliar ao longo do processo de coleta dos efluentes, foi utilizado um medidor de íon específico para o potássio, e o teste da *BTC* era interrompido apenas quando a concentração relativa (C/C_0) fosse igual a 1,0, ou seja, a concentração do potássio sendo igual à concentração do potássio na saída.

Aplicação da solução de potássio em coluna segmentada

Com o objetivo de se obter um perfil de umidade e da concentração de potássio ao longo da profundidade do perfil, aplicou-se a solução de potássio (2000 mg L^{-1}) em uma coluna segmentada, preenchida com material de solo não saturado, com 70 cm de altura, ou seja, 10 anéis com 7 cm de altura. O fato de ser segmentada em anéis permitira a obtenção da concentração do potássio em cada faixa e assim tornar possível a comparação com as simulações a serem realizadas pelo modelo HYDRUS-1D (Figura 1).

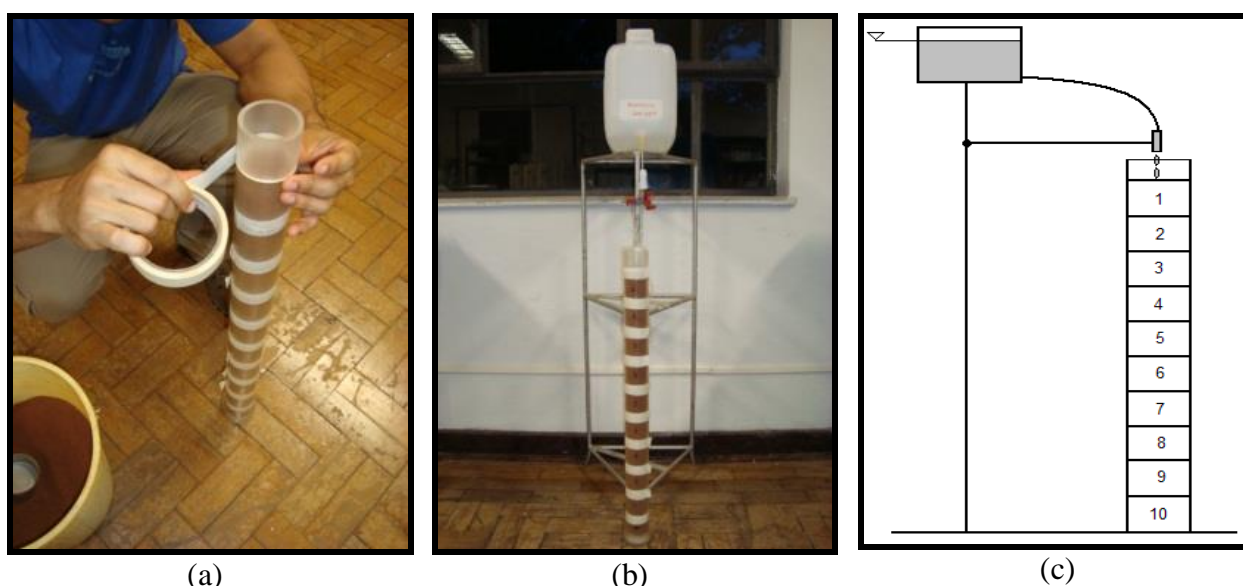


FIGURA 1. Montagem da coluna segmentada (a) e (b) e esquema ilustrativo da aplicação da solução de potássio na coluna segmentada (c). **Construction of the segmented soil columns (a and b), and schematic showing application of the potassium solution (c).**

A coluna foi preenchida de forma homogênea e uniforme, buscando-se obter a mesma densidade quando foi realizada a *BTC*, e os anéis foram unidos por uma fita adesiva.

Os valores médios de tempo de aplicação da solução de potássio (2.000 mg L^{-1}), vazão do gotejador e densidade de fluxo foram: a) LVA: Tempo de aplicação: 2,41 h; Vazão do gotejador: $163 \text{ cm}^3 \text{ h}^{-1}$, e densidade de fluxo: $8,3 \text{ cm h}^{-1}$; b) NV: Tempo de aplicação: 3,87 h; Vazão do gotejador: $100 \text{ cm}^3 \text{ h}^{-1}$, e densidade de fluxo: $5,1 \text{ cm h}^{-1}$. Tais valores foram considerados satisfatórios, pois devido às condições de densidade dos solos nas colunas, não ocasionaram formação de lâmina de água, o que alteraria os valores dos potenciais de energia ao longo da coluna, nem prolongaram em demasia o tempo dos ensaios. Estipulou-se como tempo de aplicação até que a frente de molhamento atingisse o oitavo anel. Daí seria possível montar o perfil com os primeiros anéis possuindo os maiores valores de umidade do solo e concentração de potássio, os anéis intermediários com valores médios de umidade do solo e concentração de potássio e os anéis finais com as condições iniciais de umidade do solo e os valores iniciais da concentração de potássio no solo.

Ao final da aplicação da solução, os anéis eram desmontados rapidamente e passados à etapa de extração da solução para obter os valores de concentração do potássio em cada anel, corrigindo-se o valor da concentração de potássio de acordo com a umidade do solo de cada anel e em função da quantidade de água que foi adicionada para se extrair a solução, conforme a eq. 5.

$$C_{\text{íon Corrigida}} = \frac{U_{\text{Pasta}} \cdot C_{\text{íon}}}{U_{\text{Anel}}} \quad (5)$$

em que,

$C_{\text{íon Corrigida}}$ = concentração do íon potássio corrigida em função da umidade, g cm^{-3} ;

U_{Pasta} = umidade com base em peso da pasta utilizada para a extração da solução do solo, g g^{-1} ;

$C_{\text{íon}}$ = concentração do íon (potássio) determinada na extração da solução, g cm^{-3} ;

U_{Anel} = umidade com base em peso do solo em cada anel da coluna após o término da aplicação da solução, g g^{-1} .

Dados de entrada no modelo HYDRUS-1D

Pelo modelo, foi possível aumentar o detalhamento espacial, adotando-se uma discretização espacial de 0,01 m. O detalhamento temporal foi o mesmo para todas as simulações com um intervalo de tempo inicial de 0,0024 h, com mínimo de 0,000024 h e máximo de 24 h. O tempo inicial foi considerado como “zero”, e o tempo final foi o tempo decorrido da aplicação da solução de potássio, citado anteriormente. De posse da seção da coluna ($1,963 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2$) e conhecendo-se a vazão de aplicação das soluções, pôde-se, assim, determinar o fluxo de entrada para cada simulação.

O modelo das propriedades hidráulicas adotado foi o de van GENUCTHEN (1980), sem considerar o fenômeno de histerese. A condição de contorno superior foi de fluxo constante, e a inferior, frente de infiltração ($h = 0$), estando as condições iniciais do solo determinadas pelos conteúdos de água. O valor do fluxo na superfície do solo variou de acordo com cada ensaio, e foi utilizado o valor médio das três repetições para cada solo utilizado. O modelo de equilíbrio foi adotado para o transporte de soluto em todas as simulações, considerando-se uma duração de pulso sempre superior ao tempo total de aplicação, o que representa aplicação contínua da mesma concentração durante todo o ensaio. As condições de contorno para o transporte de solutos foram: superior, concentração do fluxo de entrada; inferior, gradiente de concentração zero; e condições iniciais baseadas nas concentrações tomadas na fase líquida. A temperatura foi fixada em $25 \text{ }^\circ\text{C}$ para todas as simulações. Para a umidade inicial, foi considerado o valor de umidade volumétrica residual das colunas. A concentração inicial de potássio foi adotada como igual ao valor obtido pela análise química dos solos, $1,0$ e $4,4 \text{ mmolc dm}^{-3}$ para o LVA e o NV, respectivamente.

Análise Estatística

Os índices utilizados para a análise da performance do modelo HYDRUS-1D foram: índice de concordância de Willmott (d); erro máximo (E_{max}); erro absoluto médio (EAM); raiz quadrada do erro médio normalizado (RQEM); coeficiente de massa residual (CMR) e eficiência (E), conforme as eqs. 6 a 11. Informações sobre estes índices e suas aplicações podem ser encontradas em PEREIRA et al. (2008) e BRITO et al. (2009).

$$d = 1 - \left[\frac{\sum_{i=1}^n (P_i - O_i)^2}{\sum_{i=1}^n \left(|P_i - \bar{O}| + |O_i - \bar{O}| \right)^2} \right] \quad (6)$$

$$E_{\text{max}} = \max \left(|O_i - P_i| \right)_{i=1}^n \quad (7)$$

$$EAM = \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (O_i - P_i) \right] \quad (8)$$

$$RQEM = \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (O_i - P_i)^2 \right]^{0,5} \times \left(\frac{100}{\bar{O}} \right) \quad (9)$$

$$CMR = \left[\sum_{i=1}^n O_i - \sum_{i=1}^n P_i \right] / \sum_{i=1}^n O_i \quad (10)$$

$$E = \left[\sum_{i=1}^n (O_i - \bar{O})^2 - \sum_{i=1}^n (O_i - P_i)^2 \right] / \sum_{i=1}^n (O_i - \bar{O})^2 \quad (11)$$

em que,

P_i = Dados-padrão, obtidos nos ensaios experimentais;

O_i = dados simulados pelo modelo HYDRUS-1D;

n = número de observações; e

\bar{O} = média dos valores simulados.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Parâmetros de transporte do potássio

Para a obtenção dos parâmetros de transporte, foram elaboradas as curvas de distribuição de efluentes (*BTC*), para os dois tipos de solo, as quais representaram o comportamento de deslocamento do potássio em relação aos diferentes solos (Figura 2).

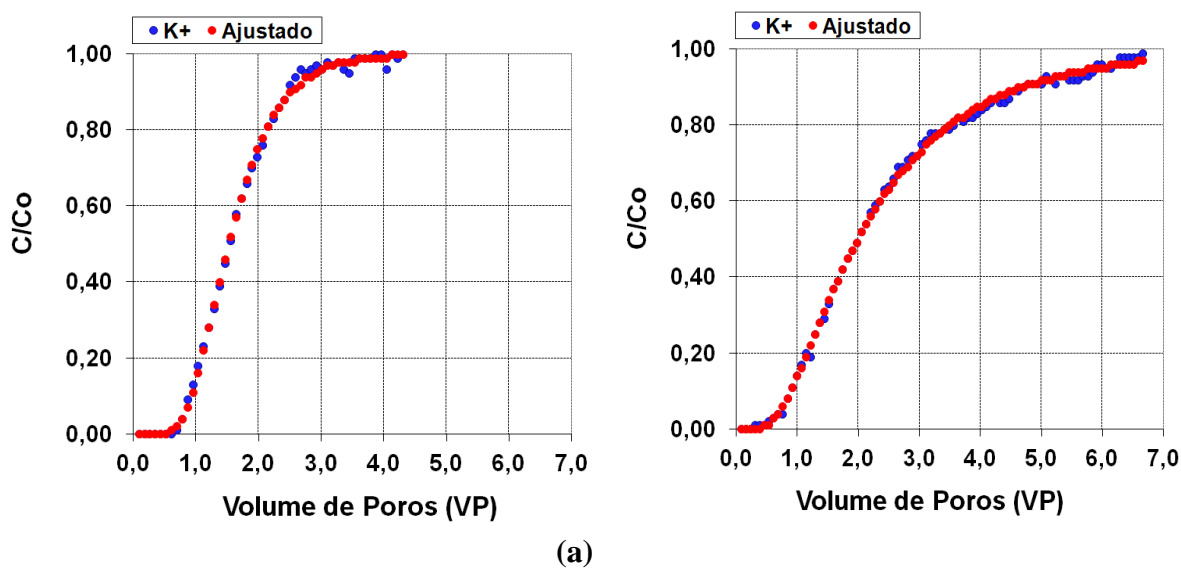


FIGURA 2. Curvas de distribuição de efluentes para o potássio, referentes ao LVA (a) e NV (b) utilizados no experimento. **Potassium breakthrough curves for the LVA (a) and NV (b) soils used in the experiments.**

Pode-se observar que o íon potássio necessitou de maior número de volume de poro (VP) para atingir a máxima concentração relativa: 3,5 VP para o LVA e 6,6 VP para o NV. Isto indicou que houve elevada interação deste íon com a matriz de ambos os solos, principalmente para o solo NV.

Enquanto as curvas de distribuição de efluentes caracterizam o deslocamento miscível das soluções, os parâmetros de transporte, obtidos por meio de seus ajustes, quantificam esta movimentação (Tabelas 3). Os valores obtidos de número de Peclet (P) para o LVA foram maiores do que para o NV, o que confirma a maior velocidade de advecção no primeiro caso, devida à

predominância de macroporos, responsáveis diretos pela condução da água no solo durante os processos de infiltração, conforme LIBARDI (2005).

TABELA 3. Parâmetros de transporte do potássio: número de Peclet (P), velocidade da solução nos poros em função de P (v), dispersividade em função de P (λ), coeficiente dispersivo-difusivo (D) e fator de retardamento (R), para os dois solos estudados. **Estimated potassium transport parameters for both soils: Peclet number (P), pore water velocity (v), dispersivity (λ), dispersion coefficient (D) and retardation factor (R).**

Tipos de Solo	Parâmetros de transporte de potássio				
	P	v (P) (cm h ⁻¹)	λ (P) (cm)	D (cm ² h ⁻¹)	R
LVA	12,31	21,341	1,625	34,673	1,640
NV	3,970	15,808	5,038	79,636	2,476

Os valores obtidos para o fator de retardamento (R) confirmam este efeito da seguinte forma: o maior valor ocorreu para o potássio em relação ao NV, indicando forte interação entre o cátion e as cargas negativas do solo.

Valores da concentração de potássio e umidade do solo nos anéis da segmentada

Da concentração de 2.000 mg L⁻¹ de potássio, os valores máximos encontrados para os dois solos foram semelhantes e mantiveram-se próximos a 1.600 mg L⁻¹. A diferença entre o valor aplicado e o valor coletado deve-se ao fato do efeito da adsorção do íon potássio pelo solo, cujo efeito é detectado pelo fator de retardamento (um dos parâmetros de transporte utilizado como dado de entrada no modelo), conforme comentado anteriormente e observado pela Tabela 3. A diferença textural entre os solos influenciou notadamente no deslocamento do potássio ao longo da coluna, principalmente nos cinco primeiros anéis, modificando sua profundidade de alcance, mantendo certa conformidade com a frente de molhamento ou deslocamento da água. Influência da textura no deslocamento de íons também foi observada por OLIVEIRA et al. (2010) e RIBEIRO et al. (2011).

A distribuição de potássio ao longo da coluna apresentou uma tendência típica em todas as repetições para cada tipo de solo. No LVA, o íon alcançou maiores profundidades ao longo da coluna, se comparado com o NV. Para as profundidades de 0,07 m, 0,14 m e 0,21 m, respectivamente, concentrações médias aproximadas de 1.622 mg L⁻¹, 1.586 mg L⁻¹ e 1.484 mg L⁻¹, para o LVA, e de 1.552 mg L⁻¹, 828 mg L⁻¹ e 408 mg L⁻¹, para o NV. Este comportamento corrobora os resultados obtidos por RIVERA et al. (2006), no qual, para um Latossolo Vermelho, também foi observado o efeito da adsorção que, de certa forma, influenciou na movimentação do potássio em relação à frente de molhamento. O deslocamento de potássio por fluxo difusivo está diretamente ligado ao conteúdo de água do solo, conforme COSTA et al. (2009), porém a interação entre o elemento e as cargas negativas dos solos foi determinante para diferenciar seu deslocamento.

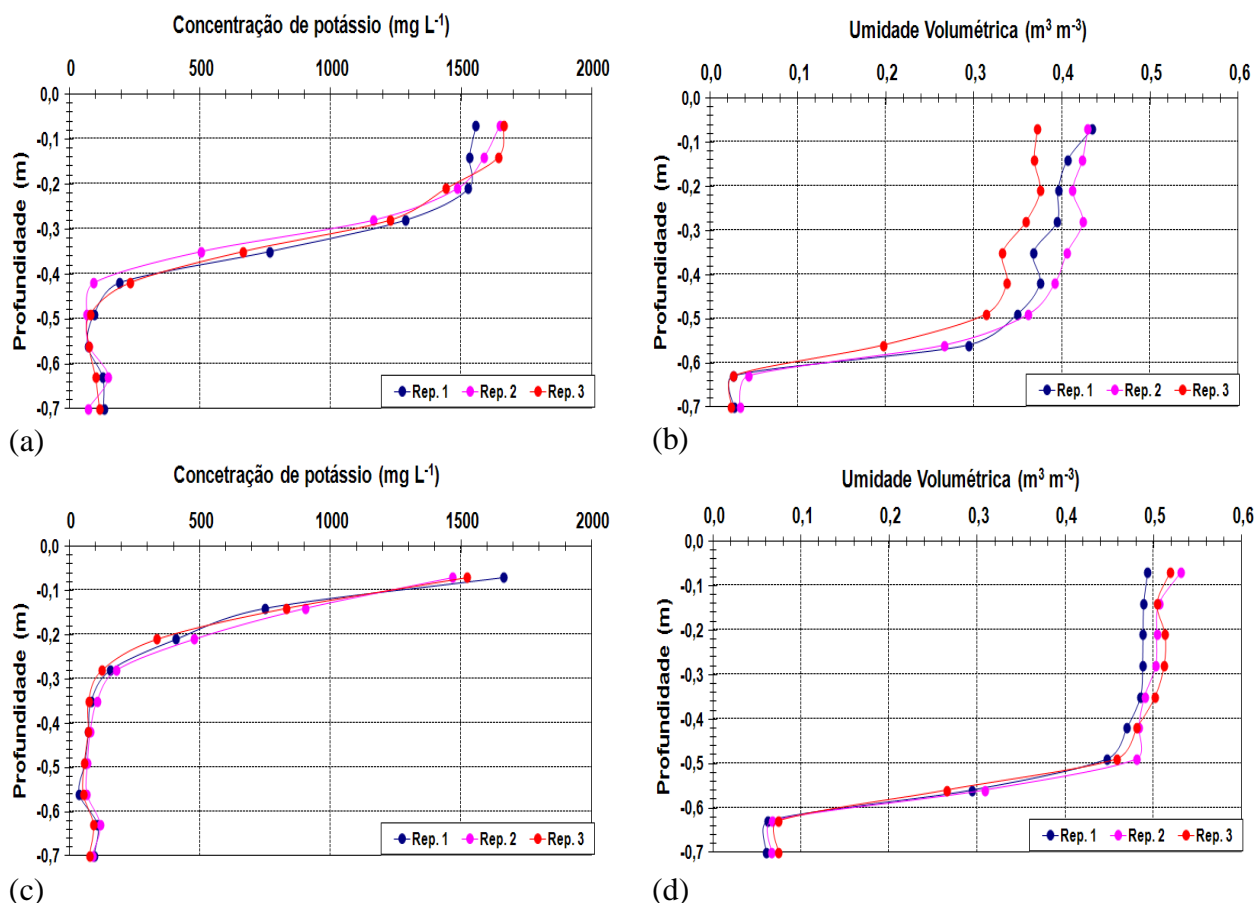


FIGURA 3. Teores de potássio e água, em três repetições, para o LVA (a) e (b) e para o NV (c) e (d). **Observed water content and potassium distributions (three replicates) for soils LVA (a and b) and NV (c and d).**

Para as profundidades de 0,07 m, 0,14 m e 0,21 m, no LVA, foram observadas umidades volumétricas médias de 41,2%, 39,9% e 39,4%, respectivamente; e para o NV, 51,4%, 50,0% e 50,2%. O conteúdo de água em cada profundidade, considerando as três repetições, foi mais uniforme no NV do que no LVA. Os resultados para o movimento de potássio e água no LVA estão de acordo com os encontrados por MIRANDA et al. (2005), em um estudo sobre a movimentação de potássio, em um mesmo tipo de solo.

Simulações dos perfis da dinâmica de Potássio e Água pelo modelo HYDRUS-1D

Em geral, todos os perfis foram bem representados pelas simulações pelo modelo HYDRUS-1D, tanto para o LVA quanto para o NV. Porém, na simulação do perfil de umidade volumétrica para o LVA, observou-se que os valores simulados foram superiores àqueles observados até a profundidade de 0,49 m. A média da umidade volumétrica, simulada até essa profundidade, foi de 42%, enquanto o valor médio observado foi de 38%. Para o NV, o valor médio simulado foi de 50%, e o observado de 49%, considerando a camada de 0,0 m a 0,42 m, na qual os valores simulados se apresentaram superiores aos observados. A maior proximidade entre os valores simulados e observados para o NV, em relação ao LVA, pode ser explicada pela sua maior capacidade de retenção de água, que oferece melhores condições para a saturação da camada de solo considerada.

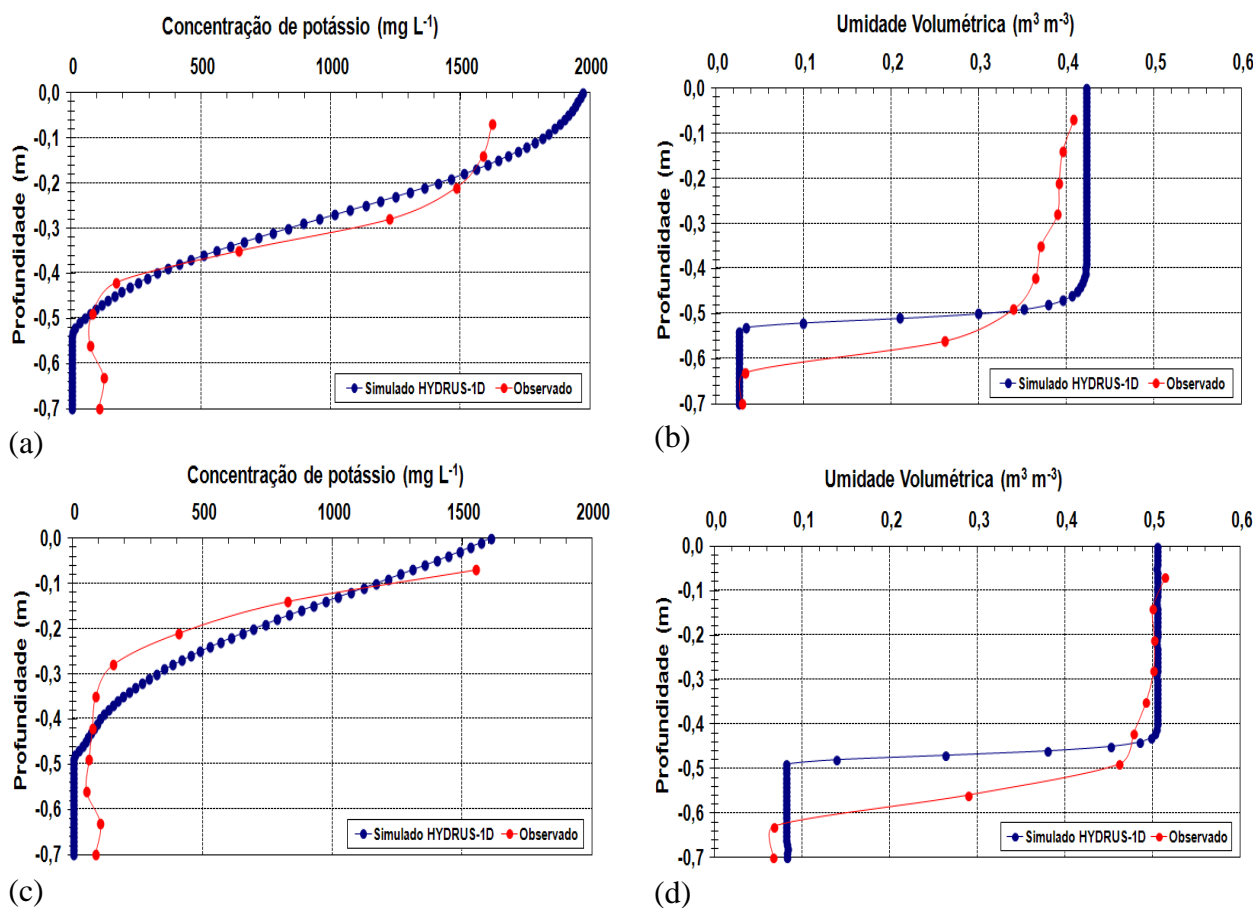


FIGURA 4. Simulação dos perfis de concentração de potássio e umidade do solo, comparada com a média das três repetições, (a) e (b) LVA e (c) e (d) NV. **Comparison of simulated water content and potassium distributions against measured values (the average of three replicates) for soils LVA (a and b) and NV (c and d).**

Nota-se, pela Figura 4, que, durante as simulações, o modelo assume o avanço da frente de molhamento, ao passo que satura todos os poros da camada em que se encontra. Na prática, a solução química aplicada pode avançar ao longo da coluna, mesmo ainda não tendo saturado a camada em que se encontra. Portanto, este efeito torna-se mais acentuado em solos com maior proporção de macroporos, como ocorre com o LVA em relação ao NV. Verifica-se, em relação à porosidade total, que foram saturados aproximadamente 90% dos poros do LVA e 98% dos poros do NV.

Desempenho do modelo

A avaliação adequada do desempenho de modelos de simulação precisa estar amparada pela análise conjunta de diversos índices. Para o modelo HYDRUS-1D, as simulações realizadas para a dinâmica de água e de potássio no solo apresentaram altos índices de concordância e eficiência (Tabela 4).

É importante ressaltar que, para os índices “E_{max}” e “E_{AM}”, que têm a unidade da variável analisada, os valores para potássio e água não podem ser comparados entre si. Uma ideia desse efeito de proporcionalidade entre os diferentes valores analisados é dada pelo índice “RQME”, segundo o qual as simulações para os teores de água, nos dois solos, mantiveram-se muito próximas entre si.

TABELA 4. Índices estatísticos para comparação entre os valores de teor de água e potássio simulados pelo modelo HYDRUS-1D e obtidos experimentalmente, para o Latossolo Vermelho-Amarelo (LVA) e para o Nitossolo Vermelho (NV). **Statistical indicators for comparison of HYDRUS-1D simulated and observed water contents and potassium concentrations for the Haplustox (LVA) and Hapludox (NV) soils.**

Concentração	Índice estatístico*						
	Emáx mg L ⁻¹	EAM	RQEM	CMR %	E	d	
K ⁺	LVA	305	49,8	20,9	-0,070	0,958	0,999
	NV	381	87,1	59,3	-0,255	0,832	0,994
Umidade Volumétrica		(m ³ m ⁻³)					
θ	LVA	0,158	0,011	20,6	-0,036	0,869	0,995
	NV	0,207	-0,027	20,4	0,069	0,827	0,994

* Emáx = Erro máximo; EAM = Erro absoluto médio; RQEM = Raiz quadrada do erro médio; CMR = Coeficiente de massa residual; E = Eficiência; e d = Índice de concordância de Willmott.

Valores negativos de “EAM” indicam que o modelo superestimou os valores obtidos experimentalmente (ou observados), enquanto valores positivos indicam que os dados experimentais foram subestimados. O índice “E” aproximou-se da unidade, indicando pouca diferença entre os valores simulados e observados. Por meio dos valores negativos de “CMR”, é possível notar que o modelo superestimou os valores observados da concentração de potássio e umidade do solo na maioria das simulações, com exceção para o perfil de umidade no caso do NV.

O índice “d” demonstrou boa concordância entre os valores simulados e observados em todas as simulações

CONCLUSÕES

Diante dos resultados obtidos pôde-se concluir que:

O software HYDRUS-1D apresentou-se como uma boa ferramenta para se prever o deslocamento de potássio, bem como o perfil de umidade do solo, no caso de ambos os materiais de solo aqui aplicados.

A estimativa dos parâmetros de transporte por meio das curvas de distribuição de efluentes é uma etapa importante e deve ser feita da melhor maneira possível com o objetivo de caracterizar bem as relações de adsorção entre o soluto e a matriz do solo.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) e ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – CNPq, pelo apoio financeiro a esta pesquisa.

REFERÊNCIAS

- ALCÂNTARA, M.A.K.; CAMARGO, O.A. Movimentação de nitrato em horizonte superficial e subsuperficial de Latossolo e Nitossolo com cargas variáveis. *Pesquisa Agropecuária Brasileira*, Brasília, v. 45, n. 1, p. 81-88, jan. 2010.
- BRITO, A.S.; LIBARDI, P.L.; MOTA, J.C.A.; MORAES, S.O. Desempenho do tensiômetro com diferentes sistemas de leitura. *Revista Brasileira de Ciência do Solo*, Viçosa, MG, v. 33, n. 1, p. 17-24, 2009.
- CHEVIRON, B.; COQUET YVES. Sensitivity analysis of transient-MIM HYDRUS-1D: Case study related to pesticide fate in soils. *Vadose Zone Journal*, Madison, v. 8, n. 4, p. 1064-1079, 2009.

- COSTA, J.P.V.; BARROS, N.F.; BASTOS, A.L.; ALBUQUERQUE, A.W. Fluxo difusivo de potássio em solos sob diferentes níveis de umidade e de compactação. *Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental*, Campina Grande, v. 13, n. 1, p. 56-62, jan./fev. 2009.
- EMBRAPA - Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária. *Sistema brasileiro de classificação de solos*. 2.ed. Rio de Janeiro: Embrapa Solos, Brasília: Sistema de Produção de Informação, 2006. 306 p.
- EMBRAPA - Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária. *Manual de métodos de análises de solo*. 2.ed. Rio de Janeiro: Embrapa Solos, 2011. 230 p.
- GARCIA, W.V.; ALCÂNTARA, M.A.K.; CAMARGO, O.A.; IZÁRIO FILHO, H.J.; ANDREOTE, F.D. Deslocamento miscível de um efluente de indústria de explosivo em colunas de solo. *Bragantia*, Campinas, v. 71, n. 1, p. 98-105, 2012.
- GONÇALVES, A.D.M.A. *Efeito da temperatura no transporte dos íons potássio e nitrato no solo*. 2007. 83 f. Dissertação (Mestrado em Física do Ambiente Agrícola) – Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”, Universidade de São Paulo, Piracicaba, 2007.
- HILTEN, R.N.; LAWRENCE, T.M.; TOLLNER, E.W. Modeling stormwater runoff from green roofs with HYDRUS-1D. *Journal of Hydrology*, Amsterdam, v. 358, p. 288-293, 2008.
- KLUTE, A. Water retention: laboratory methods. In: KLUTE, A. (Ed.). *Methods of soil analysis*. 2nd ed. Madison: American Society of Agronomy, Soil Science Society of America, 1986. pt. 1, p. 635-662. (Agronomy Monography, 9).
- LIBARDI, P.L. Dinâmica da água no solo. São Paulo: EDUSP, 2005. 329 p.
- MIRANDA, J.H.; DUARTE, S.N.; LIBARDI, P.L.; FOLEGATTI, M.V. Simulação do deslocamento de potássio em colunas verticais de solo não-saturado. *Engenharia Agrícola*, Jaboticabal, v. 25, n. 3, p. 677-685, set./dez. 2005.
- MONTEIRO, A.L.N.; MONTENEGRO, A.A.A.; MONTENEGRO, S.M.G.; SANTOS, F.X. Avaliação de lavagem parcial de sais em Neossolo Flúvico irrigado, utilizando modelagem computacional. *Engenharia Agrícola*, Jaboticabal, v. 29, n. 2, p. 207-220, abr./jun. 2009.
- NEUMANN, L.E.; ŠIMŮNEK, J.; COOK, F.J. Implementation of quadratic upstream interpolation schemes for solute transport into HYDRUS-1D. *Environmental Modelling & Software*, Oxford, v. 26, n. 1, p. 1298-1308, nov. 2011.
- OLIVEIRA, L.F.C.; LEMKE-DE-CASTRO, M.L.; RODRIGUES, C.; BORGES, J.D. Adsorção e deslocamento de íon cádmio em solos do Cerrado. *Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental*, Campina Grande, v. 14, n. 8, p. 848-855, 2010.
- PEREIRA, L.M.P.; CARAMORI, P.H.; RICCE, W.S.; CAVIGLIONE, J.H. Análise comparativa de dados meteorológicos obtidos por estação convencional e automática em Londrina – PR. *Semina: Ciências Agrárias*, Londrina, v. 29, n. 2, p. 299-306, abr./jun. 2008.
- RIBEIRO, D.P.; MARTINEZ, M.A.; MATOS, A.T.; RUIZ, H.A.; PARREIRAS, M.S.N.; CECON, P.R. Relação da velocidade de escoamento da solução e do comprimento da coluna de solo com os parâmetros de transporte de potássio em um Latossolo e um Neossolo. *Revista Brasileira de Ciência do Solo*, Viçosa, MG, v. 35, n. 6, p. 1907-1916, 2011.
- RIVERA, R.N.C.; DUARTE, S.N.; MIRANDA, J.H.; BOTREL, T.A. Modelagem da dinâmica do potássio no solo sob irrigação por gotejamento: validação do modelo. *Engenharia Agrícola*, Jaboticabal, v.26, n.2, p.388-94, Ago. 2006.
- ROSSI, P.; MIRANDA, J.H.; DUARTE, S.N. Curvas de distribuição de efluentes do íon nitrato em amostras de solo deformadas e indeformadas. *Engenharia Agrícola*, Jaboticabal, v. 27, n. 3, p. 675-682, set. 2007.

ROTH, K. *Lecture notes in soil physics*: version 3.2. Stuttgart: University of Hohenheim, Institute of Soil Science, 1996. 180 p.

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

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

ŠIMŮNEK, J.; VAN GENUCHTEN, M.Th.; ŠEJNA, M. Development and Applications of the HYDRUS and STANMOD Software Packages and Related Codes. *Vadose Zone Journal*, Madison, v.7, p.587-600, 2008.

TAFTEH, A.; SEPASKHAH, A.R. Application of HYDRUS-1D model for simulating water and nitrate leaching from continuous and alternate furrow irrigated rapeseed and maize fields. *Agricultural Water Management*, Amsterdam, v.113, p. 19-29, 2012.

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

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

WANG, H. *Describing and predicting breakthrough curves for non-reactive solute transport in statistically homogeneous porous media*. 2002. Thesis (Degree of Doctor of Philosophy in Crop and Soil Environmental Science) - Faculty of the Virginia Polytechnic Institute and State University, Virginia, 2002.