

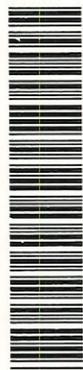
**DESENVOLVIMENTO DE TÉCNICAS
NUMÉRICAS PARA O MODELAMENTO
ESTOCÁSTICO DO TRANSPORTE DE
PESTICIDAS NO SOLO**

Sander J. T. Eskes

Tese apresentada à Escola de Engenharia de
São Carlos, da Universidade de São Paulo,
como parte dos requisitos para obtenção do
título de Doutor em Ciências da Engenharia
Ambiental

Orientador: Prof. Dr. Sílvio Crestana

DEDALUS - Acervo - EESC



31100017359



São Carlos

1998

Class.	T. 56 - 22
Curr.	4992
Tombo	7008198

311 000173 59

at 0949535

Ficha catalográfica preparada pela Seção de Tratamento
da Informação do Serviço de Biblioteca - EESC-USP

E75d Eskes, Sander J.T.
Desenvolvimento de técnicas numéricas para o
modelamento estocástico do transporte de
pesticidas no solo / Sander J.T. Eskes. -- São
Carlos, 1998.

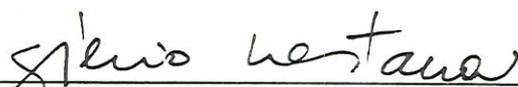
Tese (Doutorado) -- Escola de Engenharia
de São Carlos-Universidade de São Paulo, 1998.
Área: Ciências da Engenharia Ambiental.
Orientador: Prof. Dr. Sílvio Crestana.

1. Métodos numéricos. 2. Modelos estocásticos.
3. Solos. 4. Simulação. 5. Meios porosos.
6. Pesticidas. I. Título.

FOLHA DE APROVAÇÃO

Candidato: Engenheiro SANDER JACOBUS TITUS ESKES

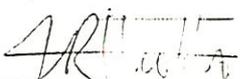
Tese defendida e aprovada em 17-02-1998
pela Comissão Julgadora:



Prof. Doutor **SILVIO CRESTANA (Orientador)**
(EMBRAPA/CNPDIÁ)



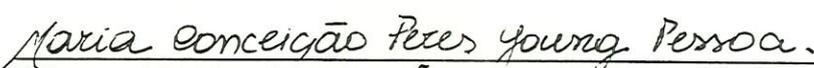
Prof. Titular **FAZAL HUSSAIN CHAUDHRY**
(Escola de Engenharia de São Carlos - Universidade de São Paulo)



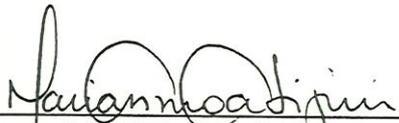
Prof. Associado **ANTONIO MAROZZI RIGHETTO**
(Escola de Engenharia de São Carlos - Universidade de São Paulo)



Prof. Doutor **ADOLFO NICOLAS POSADAS DURAND**
(Universidade Estadual de Ponta Grossa)



Doutora **MARIA CONCEIÇÃO PERES YOUNG PESSOA**
(EMBRAPA/CNPMA - Pesquisadora)



Profa. Doutora **MARIA DO CARMO CALIJURI**
Coordenadora da Área de Ciências da Engenharia Ambiental



JOSE CARLOS A. CINTRA
Presidente da Comissão de Pós-Graduação

"A simulation is a computer-based statistical sampling experiment"

Averill M. Law
W. David Kelton

Aos meus pais Elisabeth e Martin,
à minha esposa Wendy,
e ao meu filho Sean.

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar quero agradecer ao Prof. Dr. Sílvio Crestana, pela confiança depositada em mim, dando todo apoio necessário para que eu pudesse desenvolver o trabalho da melhor maneira possível.

Agradeço a Prof^a. Dra. Maria do Carmo Calijuri, pelo apoio dado ao meu ingresso na pós-graduação.

Agradeço a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP), pelo apoio financeiro (bolsa de Doutorado).

Ao Prof. Dr. Sjoerd van der Zee, pela troca de idéias, o material bibliográfico e os bons tempos.

A todos os funcionários do CNPDIA que sempre têm colocado sua competência e boa vontade à minha disposição, para que as metas sejam alcançadas.

Meus agradecimentos à minha esposa Wendy, pelo seu apoio moral e espiritual.

INSTITUIÇÕES QUE PATROCINARAM AS PESQUISAS DESSA TESE

EMBRAPA - Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária

FAPESP - Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo

USP-CRHEA - Universidade de São Paulo - Centro de Recursos Hídricos e Ecologia Aplicada

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS.....	i
LISTA DE TABELAS.....	vi
LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS.....	vii
LISTA DE SÍMBOLOS.....	viii
RESUMO.....	xviii
ABSTRACT.....	xix
1. INTRODUÇÃO.....	1
1.1 PROBLEMA E SUA IMPORTÂNCIA.....	1
1.2 OBJETIVOS.....	5
1.3 DESCRIÇÃO SUCINTA DO CONTEÚDO DA CADA CAPÍTULO.....	6
2. ABORDAGEM DETERMINÍSTICA.....	7
2.1 HIDRODINÂMICA DA ÁGUA NO SOLO.....	8
2.1.1 Fluxo vertical da água em solos não-expansivos.....	8
2.1.2 Evapotranspiração.....	14
2.2 COMPORTAMENTO DE PESTICIDAS NÃO-VOLÁTEIS NO SOLO.....	17
2.2.1 Transporte de pesticidas na fase líquida.....	17
2.2.2 Transformação bioquímica e absorção pelas raízes.....	22
3. ABORDAGEM ESTOCÁSTICA.....	25
3.1 MODELOS ESTOCÁSTICOS CONTÍNUOS.....	26
3.2 MODELOS DE FUNÇÃO - TRANSFERÊNCIA.....	27
3.3 MODELOS DE COLUNAS INDEPENDENTES.....	34
3.3.1 Modelos convectivo-estocásticos.....	34
3.3.2 Simulações Monte Carlo.....	39
4. DESENVOLVIMENTO DE MODELOS DE FLUXO DE ÁGUA.....	43
4.1 OTIMIZAÇÃO DO VALOR MÉDIO DA CONDUTIVIDADE HIDRÁULICA.....	45
4.1.1 Média uniforme para um meio poroso homogêneo e não-saturado.....	47
4.1.2 Média uniforme para um meio poroso heterogêneo e saturado.....	53
4.2 DESCRIÇÃO DOS MODELOS EMPÍRICOS.....	57
4.2.1 Modelo empírico de infiltração com uma camada superficial de água.....	58
4.2.2 Modelo empírico de evaporação de água da superfície do solo.....	64

4.3 INTEGRAÇÃO DOS MODELOS EMPÍRICOS NO MODELO NUMÉRICO.....	66
5. DESENVOLVIMENTO DE MODELOS DE TRANSPORTE DE SOLUTO.....	68
5.1 DERIVAÇÃO DA VELOCIDADE DE UMA AMOSTRA.....	71
5.1.1 Amostragem da distribuição normal.....	71
5.1.2 Amostragem da distribuição normal truncada.....	74
5.1.3 Amostragem da distribuição lognormal.....	77
5.1.4 Adaptação da distribuição lognormal a um processo convectivo-dispersivo.....	82
5.2 ADSORÇÃO COM EQUILÍBRIO TERMODINÂMICO.....	86
5.3 ABSORÇÃO PELAS RAÍZES E TRANSFORMAÇÃO COM CINÉTICA DE PRIMEIRA ORDEM.....	88
5.4 DERIVAÇÃO DA CONCENTRAÇÃO DE SOLUTO.....	90
5.5 INTEGRAÇÃO DAS EQUAÇÕES DIFERENCIAIS.....	92
5.5.1 Modelo numérico Lagrangeano usando funções-transferência.....	96
5.5.2 Modelo numérico Lagrangeano para simulações Monte Carlo.....	97
6. RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	100
6.1 DESEMPENHO DOS MODELOS DE FLUXO DE ÁGUA.....	101
6.1.1 Comparação entre as médias empregadas para a condutividade hidráulica.....	102
6.1.2 Testes numéricos do modelo empírico de infiltração.....	110
6.1.3 Testes numéricos do modelo empírico de evaporação.....	113
6.1.4 Desempenho do modelo numérico de fluxo de água.....	117
6.2 DESEMPENHO DOS MODELOS DE TRANSPORTE DE SOLUTO.....	122
6.2.1 Escala local.....	123
6.2.2 Escala de campo.....	132
7. CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS.....	139
7.1 CONCLUSÕES.....	139
7.2 TRABALHOS FUTUROS.....	141
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	144
APÊNDICE:	
A. CONCEITOS BÁSICOS DE ESTATÍSTICA.....	152
B. DERIVAÇÃO DOS PRIMEIROS DOIS MOMENTOS DA DISTRIBUIÇÃO NORMAL TRUNCADA.....	155
C. DERIVAÇÃO DA DISTÂNCIA DE PERCURSO DE UM PROCESSO CONVECTIVO-DISPERSIVO, PARA UM PERFIL SEMI-INFINITO.....	158
D. MÉDIA E VARIÂNCIA DE UM PROCESSO CONVECTIVO-DISPERSIVO, PARA UM PERFIL SEMI-INFINITO.....	160

E. DERIVAÇÃO DO COEFICIENTE DE VARIAÇÃO DA DISTRIBUIÇÃO LOGNORMAL SEGUNDO O MÉTODO 2.....	161
F. DERIVAÇÃO DO COEFICIENTE DE VARIAÇÃO DA DISTRIBUIÇÃO LOGNORMAL SEGUNDO O MÉTODO 3.....	163

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 2.1	- Uma camada de solo no modelo numérico, com as notações usadas na eq.(2.9).....	12
FIGURA 4.1	- Exemplo de um conjunto de séries temporais, simuladas por um modelo descontínuo, com períodos de infiltração, de redistribuição e de evaporação. Os passos no tempo são indicados por t_1 , t_2 , etc. A condição de contorno é o fluxo potencial; negativo durante períodos de infiltração e positivo durante períodos de evaporação.....	44
FIGURA 4.2	- Média uniforme de dois valores, para vários valores do coeficiente r	51
FIGURA 4.3	- Média uniforme dos valores 1 e 1000, em função do coeficiente r ; as linhas pontilhadas cruzam no ponto de simetria, localizada na média geométrica ($r = 0.5$).....	52
FIGURA 4.4a	- Valor de X no intervalo $[s_1, s_2]$, para $X_1 = 1$ e $X_2 = 1000$ usando-se uma escala linear para o eixo das ordenadas.....	56
FIGURA 4.4b	- Valor do logaritmo de X no intervalo $[s_1, s_2]$, para $X_1 = 1$ e $X_2 = 1000$, usando-se uma escala logarítmica para o eixo das ordenadas.....	56
FIGURA 4.5	- Passo no tempo no modelo de PARLANGE et al. (1982), na presença de uma camada superficial de água.....	63
FIGURA 5.1	- Exemplo das trajetórias dos limites inferior e superior de uma amostra em uma matriz de eventos ambientais. A linha pontilhada indica a posição da amostra no perfil do solo, em função do tempo. Os índices (1), (2), (3), etc., indicam os intervalos da série de eventos na qual esta amostra está sujeita. No exemplo, o fluxo de água é positivo (ou seja, dirigido para cima), durante o período 4.....	70
FIGURA 6.1	- Distribuição da potencial matricial no solo A, depois de 6 horas de infiltração, usando-se uma condição de contorno do tipo Dirichlet $d = -0.75$ m na superfície do perfil, -10 m no fundo do perfil, uma condição inicial de -10 m, um passo no espaço de 1 cm e a média geométrica para a condutividade hidráulica entre os nós.....	102
FIGURA 6.2	- Erro relativo no volume de água infiltrada, e o trabalho no computador por simulação, em função do passo no tempo, para um passo no espaço de 1 cm; as outras condições são iguais às condições na figura 6.1.....	103
FIGURA 6.3	- Erro relativo no volume de água infiltrada, e o trabalho no computador por simulação, em função do passo no espaço, para um passo no tempo de 0.01 dia; as outras condições são iguais às condições na figura 6.1.....	103

- FIGURA 6.4 - Erro relativo na infiltração cumulativa, depois de 0.25 dias, para valores diferentes do coeficiente r na eq.(4.14), empregada para calcular a condutividade hidráulica entre os nós em uma malha grossa, com uma distância entre os nós de 10 cm; h_i = potencial matricial inicial, h_0 = potencial matricial na superfície do solo, K_s = condutividade hidráulica saturada..... 105
- FIGURA 6.5 - Erro absoluto na infiltração cumulativa, depois de 0.25 dias, para valores diferentes do coeficiente r na eq.(4.14), empregada para calcular a condutividade hidráulica entre os nós em uma malha grossa, com uma distância entre os nós de 10 cm; h_i = potencial matricial inicial, h_0 = potencial matricial na superfície do solo, K_s = condutividade hidráulica saturada..... 105
- FIGURA 6.6 - Erro relativo na infiltração cumulativa, para as simulações 1 até 9, empregando-se a média dinâmica e uma malha grossa, com uma distância entre os nós de 10 cm. Os resultados são divididos em 3 grupos. Os pontos de cada grupo são conectados com uma linha sólida... 106
- FIGURA 6.7 - Distribuição da potencial matricial no solo A, com $K_s = 0.5 \text{ m dia}^{-1}$, depois de 6 horas de infiltração, usando-se uma condição de contorno do tipo Dirichlet de 0.0 m na superfície do perfil, -10 m no fundo do perfil, uma condição inicial de -10 m, um passo no espaço de 10 cm e a média dinâmica para a condutividade hidráulica entre os nós (i.e. a simulação 1, nas figuras 6.4 e 6.5)..... 107
- FIGURA 6.8 - Distribuição da potencial matricial no solo A, com $K_s = 8.0 \text{ m dia}^{-1}$, depois de 6 horas de infiltração, usando-se uma condição de contorno do tipo Dirichlet de -0.75 m na superfície do perfil, -10 m no fundo do perfil, uma condição inicial de -10 m, um passo no espaço de 10 cm e a média dinâmica para a condutividade hidráulica entre os nós (i.e. a simulação 4, nas figuras 6.4 e 6.5)..... 108
- FIGURA 6.9 - Comparação entre as diferentes médias para a condutividade hidráulica relativa no solo A, entre dois nós adjacentes. O primeiro nó é saturado e apresenta um potencial matricial $h > h_a$, enquanto o potencial matricial do segundo nó é indicado no eixo das abscissas; a média uniforme foi calculada para $\Delta z_{1,2} = 10 \text{ cm}$ 109
- FIGURA 6.10 - Comparação entre as diferentes médias para a condutividade hidráulica relativa no solo B, entre dois nós adjacentes. O primeiro nó é saturado e apresenta um potencial matricial $h > h_a$, enquanto o potencial matricial do segundo nó é indicado no eixo das abscissas; a média uniforme foi calculada para $\Delta z_{1,2} = 10 \text{ cm}$ 110

- FIGURA 6.11 - Comparação entre o modelo empírico de PARLANGE et al. (1982) e uma solução analítica da equação de Richards, para a infiltração do solo B; intensidade de chuva = 0.12 m dia^{-1} , $\theta_i = 0.1659$, $\Lambda_i = 0.05878 \text{ m d}^{-1/2}$ e $\vartheta = 0.8$ 111
- FIGURA 6.12 - Comparação entre o modelo empírico de PARLANGE et al. (1982) e uma solução numérica da equação de Richards, para a infiltração do solo B, com a presença de uma camada de água superficial; intensidade de chuva = 0.12 m dia^{-1} , duração da chuva = 0.25 dia , $\theta_i = 0.1659$, $\Lambda_i = 0.05878 \text{ m d}^{-1/2}$ e $\vartheta = 0.8$ 112
- FIGURA 6.13 - Espessura da camada superficial de água, em função do tempo, segundo o modelo empírico de PARLANGE et al. (1982) e segundo uma solução numérica da equação de Richards, para as condições indicadas na figura 6.12..... 112
- FIGURA 6.14. - Valores registrados de h_{ref} e h_1 , e a função de ajuste Ψ , para um único ciclo de evaporação do solo B, sem a presença de uma cultura; potencial matricial inicial = -10 m , $z_{\text{ref}} = 2.5 \text{ mm}$, $z_1 = 50 \text{ mm}$, $h_{\text{atm}} = -2500 \text{ m}$, $E_{\text{pot}} = 3 \text{ mm dia}^{-1}$ 114
- FIGURA 6.15 - Evaporação real do solo B, simulada por dois modelos numéricos, para as condições indicadas na figura 6.14 (o modelo com uma malha grossa usa a função Ψ , da figura 6.14)..... 114
- FIGURA 6.16 - Evaporação real do solo B, simulada por dois modelos numéricos, para as condições indicadas na figura 6.14, exceto uma potencial matricial inicial de 0 m e uma evaporação potencial de 1 mm dia^{-1} (o modelo com uma malha grossa usa a função Ψ , da figura 6.14)..... 115
- FIGURA 6.17 - Evaporação real do solo B, simulada por dois modelos numéricos, para as condições indicadas na figura 6.14, exceto os parâmetros $\theta_s = 0.30$ e $K_s = 0.05 \text{ m dia}^{-1}$ (o modelo com uma malha grossa usa a função Ψ , da figura 6.14)..... 116
- FIGURA 6.18 - Evaporação real do solo A, simulada por dois modelos numéricos, para as condições indicadas na figura 6.14, exceto com potencial matricial inicial de -1.0 m (o modelo com uma malha grossa usa a função Ψ da figura 6.14)..... 116
- FIGURA 6.19 - Sortividade do horizonte A do solo C, calculada com a eq.(4.42), em função da saturação relativa..... 118
- FIGURA 6.20 - Índice de área foliar e cobertura do solo, para uma cultura de milho (*Zea Mays L.*) com um ciclo normal e uma densidade de plantio de 55000 plantas por hectare (BOESTEN, 1993; CNPMS, 1994)..... 119

- FIGURA 6.21 - Fluxo potencial através da superfície do solo e transpiração potencial, durante o ano de 1992 em Pindorama (SP), para as condições descritas na seção 6.1.4..... 120
- FIGURA 6.22 - Distribuição relativa de raízes, em função da profundidade, para a cultura do milho completamente desenvolvido; a linha sólida mostra os pesos para a transpiração potencial, empregados nos modelos numéricos (fontes: OLIVEIRA et al., 1993; CALHEIROS, 1992; MERTEN & MIELNICZUK, 1991)..... 121
- FIGURA 6.23 - Drenagem cumulativa na profundidade de 30 cm, durante o ano de 1992 referente ao cenário descrito na seção 6.1.4, simulado por três modelos numéricos diferentes..... 122
- FIGURA 6.24 - Concentração residente de um soluto conservativo e não-adsorvente, segundo a solução analítica para um processo convectivo-dispersivo (TORIDE et al., 1995) e segundo o modelo Lagrangeano baseado na distribuição normal truncada, usando-se as eqs.(6.3) e (6.4) e os valores na tabela 6.4; $t = 20$ dias, $K_{om} = 0 \text{ L kg}^{-1}$, outros parâmetros dados pela tabela 6.3..... 125
- FIGURA 6.25 - Fluxo de concentração de um soluto conservativo e não-adsorvente, segundo a solução analítica para um processo convectivo-estocástico lognormal (i.e. a eq.(3.9)) e segundo o modelo Lagrangeano lognormal; $z = -1.0 \text{ m}$, $K_{om} = 0 \text{ L kg}^{-1}$, com outros parâmetros dados pela tabela 6.3..... 126
- FIGURA 6.26 - Concentração residente de um soluto conservativo e não-adsorvente, segundo a solução analítica para um processo convectivo-estocástico lognormal (i.e. a eq.(3.15)) e segundo o modelo Lagrangeano lognormal; $t = 200$ dias, $K_{om} = 0 \text{ L kg}^{-1}$, com outros parâmetros dados pela tabela 6.3..... 127
- FIGURA 6.27 - Concentração residente de um soluto conservativo e não-adsorvente, segundo a solução analítica para um processo convectivo-dispersivo (TORIDE et al., 1995) e segundo o modelo Lagrangeano lognormal, ajustado pelo método 1; $\Delta z = 10 \text{ cm}$, $t = 200$ dias, $K_{om} = 0 \text{ L kg}^{-1}$, com outros parâmetros dados pela tabela 6.3..... 127
- FIGURA 6.28 - Concentração residente de um soluto conservativo e não-adsorvente, segundo a solução analítica para um processo convectivo-dispersivo (TORIDE et al., 1995) e segundo o modelo Lagrangeano lognormal, ajustado pelo método 2; $\Delta z = 10 \text{ cm}$, $t = 200$ dias, $K_{om} = 0 \text{ L kg}^{-1}$, com outros parâmetros dados pela tabela 6.3..... 128

- FIGURA 6.29 - Concentração residente de um soluto conservativo e não-adsorvente, segundo a solução analítica para um processo convectivo-dispersivo (TORIDE et al., 1995) e segundo o modelo Lagrangeano lognormal, ajustado pelo método 3; $\Delta z = 10$ cm, $t = 200$ dias, $K_{om} = 0$ L kg⁻¹, com outros parâmetros dados pela tabela 6.3..... 128
- FIGURA 6.30 - Concentração residente de um soluto conservativo e não-adsorvente, segundo a solução analítica para um processo convectivo-dispersivo (TORIDE et al., 1995) e segundo o modelo Lagrangeano lognormal, ajustado pelo método 3; $\Delta z = -1$ m, $t = 200$ dias, $K_{om} = 0$ L kg⁻¹, com outros parâmetros dados pela tabela 6.3..... 129
- FIGURA 6.31 - Concentração residente de um soluto conservativo e não-adsorvente, segundo a solução analítica para um processo convectivo-dispersivo (TORIDE et al., 1995) e segundo o modelo Lagrangeano lognormal, ajustado pelo método 3; $\Delta z = 10$ cm, $z = 1.0$ m, $q = -0.002$ m dia⁻¹ para $t \leq 50$ dias, $q = -0.0005$ m dia⁻¹ para $t > 50$ dias, $K_{om} = 0$ L kg⁻¹, com outros parâmetros dados pela tabela 6.3..... 130
- FIGURA 6.32 - Concentração de um soluto conservativo e não-adsorvente, segundo a solução analítica para um processo convectivo-dispersivo (TORIDE et al., 1995) e segundo o modelo Lagrangeano lognormal, ajustado pelo método 3; $\Delta z = 10$ cm, $z = -20$ cm, $K_{om} = 0$ L kg⁻¹, com outros parâmetros dados pela tabela 6.3..... 131
- FIGURA 6.33 - Concentração de um soluto conservativo e não-adsorvente, segundo a solução analítica para um processo convectivo-dispersivo (TORIDE et al., 1995) e segundo o modelo Lagrangeano lognormal, ajustado pelo método 3; $\Delta z = 10$ cm, $z = 100$ cm, $K_{om} = 0$ L kg⁻¹, com outros parâmetros dados pela tabela 6.3..... 131
- FIGURA 6.34 - Concentração de um soluto conservativo e adsorvente para um processo convectivo-dispersivo, segundo uma solução numérico Euleriano (veja a seção 2.2.1) e segundo o modelo Lagrangeano lognormal, ajustado pelo método 3; $\Delta z = 10$ cm, $t = 500$ dias, $K_{om} = 50$ L kg⁻¹, $N = 0.8$, com outros parâmetros dados pela tabela 6.3..... 132
- FIGURA 6.35 - Fator de correção para μ_{ref} , em função da profundidade, ajustado aos dados de BOESTEN & VAN DER LINDEN (1991) e BARBOSA & RIGITANO (1994)..... 134
- FIGURA 6.36 - Comparação entre os modelos numéricos Eulerianos e Lagrangeanos, em termos da média de amostragem da massa residual, para uma profundidade de controle de 1.0 m e o cenário descrito nas seções 6.1.4 e 6.2.2; $N =$ expoente de Freundlich..... 137

LISTA DE TABELAS

TABELA 3.1	- Grau de variabilidade espacial dos vários parâmetros de solo, encontrados em campos experimentais de alguns hectares, adaptado de WILDING (1985).....	25
TABELA 3.2	- As funções-transferências, e os seus momentos, para o modelo convectivo-estocástico lognormal e o modelo convectivo-dispersivo (JURY & ROTH, 1990); Z = profundidade de referência (m); T = tempo de referência (dia); $\mu_t(z)$, $\sigma_t(z)$ = coeficientes (1) da distribuição lognormal para profundidade z	32
TABELA 6.1	- Parâmetros hidráulicos de solo, usados nos testes dos modelos numéricos; veja as eqs.(2.7) e (2.8) para o significado dos símbolos; dados obtidos de CELIA et al. (1990), SMITH et al. (1993), VIEIRA et al. (1992) e CASTRO, O. M. (comunicação pessoal).....	100
TABELA 6.2	- Propriedades físicas e químicas do solo C, usadas nos testes numéricos; dados obtidos de CASTRO, O. M. (comunicação pessoal), VAN OMMEN et al. (1989) e PARLANGE et al. (1982).....	117
TABELA 6.3	- Dados de entrada usados nos testes numéricos, na escala local, dos modelos de transporte, para um soluto conservativo, ou seja, $\mu_{bio} = 0$ e $\mu_{abs} = 0$	123
TABELA 6.4	- Valores otimizados para os coeficientes nas funções de ajuste $f(\omega, \lambda)$ e $g(\varpi, \lambda)$, para uma coluna de solo com $\lambda = \text{constante}$ e $0 < \lambda \leq 0.3 \text{ m}$	124
TABELA 6.5	- Propriedades dos pesticidas, usados nos testes numéricos, para o cenário descrito nas seções 6.1.4 e 6.2.2.....	133
TABELA 6.6	- Coeficientes de variação (CV) dos parâmetros aleatórios, usados nos testes numéricos para o cenário descrito nos as seções 6.1.4 e 6.2.....	135

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

- ALH - amostragem “Latin Hypercube”
- CNPDIA - Centro Nacional de Pesquisa e Desenvolvimento de Instrumentação
Agropecuária
- CNPMS - Centro Nacional de Pesquisa de Milho e Sorgo
- CRHEA - Centro de Recursos Hídricos e Ecologia Aplicada
- EMBRAPA - Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária
- FAPESP - Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo
- IAC - Instituto Agrônomo de Campinas

LISTA DE SÍMBOLOS

SÍMBOLOS LATINOS MINÚSCULOS

- a - coeficiente empírico de um modelo capilar (1) ou coeficiente de regressão (1)
 b - coeficiente empírico de um modelo capilar (1) ou coeficiente de regressão (1)
 c - coeficiente empírico de um modelo capilar (1) ou coeficiente de regressão (1)
 c - concentração mássica (g m^{-3})
 c_f - concentração de fluxo (g m^{-3})
 c_r - concentração residente na fase líquida (g m^{-3})
 $c_{r,\text{ref}}$ - valor de referência de c_r (g m^{-3})
 c_s - concentração na fase sólida (1)
 c_f^k - concentração de fluxo da amostra k (g m^{-3})
 c^k - concentração mássica da amostra k (g m^{-3})
 c_r^k - concentração residente na fase líquida da amostra k (g m^{-3})
 c_s^k - concentração na fase sólida da amostra k (1)
 $f(\omega, \lambda)$ - função de ajuste para a posição média da amostra (m)
 f_{conc} - fator de concentração do fluxo de transpiração (1)
 f_f - função-transferência do tempo de percurso (dia^{-1})
 f_r - função-transferência de distância de percurso (m^{-1})
 $f_t(z)$ - distribuição do tempo de percurso, para profundidade z (dia^{-1})
 f_z - fator de correção para a profundidade (1)
 $f_z(t)$ - distribuição da distância de percurso, no tempo t (m^{-1})
 f_T - fator de correção para a temperatura (1)
 f_θ - fator de correção para a umidade volumétrica (1)
 $g(\varpi, \lambda)$ - função de ajuste para a variância na posição da amostra (m^2)
 h - potencial matricial, negativo na região não-saturada (m)
 h_a - potencial matricial crítico de entrada de ar (m)
 h_{atm} - potencial matricial em equilíbrio com a atmosfera (m)
 $h_i^{j,m}$ - potencial matricial, do nó i , após o passo no tempo j e após a iteração Picard m (m)
 h_{lim} - limite inferior da validade do modelo empírico de Gardner-Rijtema (m)
 h_{ref} - potencial matricial na profundidade de referência (m)

- h_s - potencial matricial saturada, ou seja, $\Theta(h_s) = 1$, por definição (m)
 h_0 - potencial matricial na superfície do solo (m) ou profundidade da camada de água na superfície do (m)
 h_1 - valor empírico para o potencial (m) ou potencial matricial na profundidade z_1 (m)
 h_2 - ponto anaeróbio (m)
 h_3 - valor empírico para o potencial matricial (m)
 h_4 - ponto de murchamento (m)
 $i(t)$ - densidade do fluxo de infiltração no tempo t (m dia⁻¹)
 i_c - capacidade de infiltração (m dia⁻¹)
 i_p - intensidade da precipitação (m dia⁻¹)
 $m(z, t)$ - massa por área (g m⁻²)
 m_{om} - fração mássica de massa orgânica do solo (1)
 m^k - massa por área, da amostra k (g)
 m_{om}^k - fração mássica de matéria orgânica da amostra k (g g⁻¹)
 m_r^k - massa residente por área na fase líquida, da amostra k (g)
 m_s^k - massa adsorvida por área na fase sólida, da amostra k (g)
 m_0^k - massa inicial por área, da amostra k (g m⁻²)
 p_i^j - indicador (ou “peso”) para o desenvolvimento do sistema de raízes, no compartimento de solo i , durante passo no tempo j (1)
 q - densidade de fluxo de água, negativo quando direcionado para baixo (m dia⁻¹)
 q_{inc} - densidade de fluxo de água, durante o período de aplicação (m dia⁻¹)
 q_i^k - densidade de fluxo de água (negativo, indo para baixo) da amostra k (m dia⁻¹)
 q_0 - fluxo potencial na superfície do solo (m dia⁻¹)
 r - coeficiente (1)
 r_h - coeficiente para descrever a mudança continua da condutividade hidráulica relativa, em função do potencial matricial (1)
 r_s - coeficiente para descrever a mudança continua da condutividade hidráulica saturada, em função da distância (1)
 t - tempo (dia)
 t_e - tempo de encharcamento (dia)
 t_i - tempo do início do período de precipitação (dia)

$t_{inc,1}$	- limite inferior do tempo de aplicação (dia)
$t_{inc,2}$	- limite superior do tempo de aplicação (dia)
t_0	- tempo de aplicação do soluto (dia)
$t(z)$	- tempo de percurso para a profundidade z (dia)
t^k	- tempo de percurso, mais o tempo de aplicação, da amostra k (dia)
t_0^k	- tempo de aplicação da amostra k (m)
t^{k-}	- tempo de percurso do limite inferior da amostra k (dia)
t^{k+}	- tempo de percurso do limite superior da amostra k (dia)
u^k	- velocidade da amostra k (m dia ⁻¹)
u_{\bullet}^k	- velocidade não-adsorvente, da amostra k (m dia ⁻¹)
\bar{u}_z^k	- velocidade média Lagrangeana da amostra k (m dia ⁻¹)
\bar{u}_t^k	- velocidade média Euleriana da amostra k (m dia ⁻¹)
v	- velocidade da água nos poros (m dia ⁻¹)
v_x	- velocidade na direção x (m dia ⁻¹)
v_y	- velocidade na direção y (m dia ⁻¹)
v_z	- velocidade na direção z (m dia ⁻¹)
w^k	- peso amostral da amostra k (g m ⁻²)
w_0^t	- peso amostral inicial da amostra k (g m ⁻²)
x_c	- escala característica da função $f(x)$
z	- posição no eixo vertical, negativo abaixo da superfície do solo (m)
$z_{i-1/2}$	- posição do limite superior do compartimento i (m)
$z_{i+1/2}$	- posição do limite inferior do compartimento i (m)
$z_{inc,1}$	- limite inferior da profundidade (negativo) de aplicação (m)
$z_{inc,2}$	- limite superior da profundidade (negativo) de aplicação (m)
z_{ref}	- profundidade de referência (m)
$z(t)$	- posição da amostra, no tempo t (m)
x^k	- coordenada x da molécula k (m)
y^k	- coordenada y da molécula k (m)
z^k	- coordenada z da molécula k (m) ou posição da amostra k (m)
z_0^k	- posição inicial da amostra k (m)

- z^{k-} - distância de percurso do limite inferior da amostra k (m)
 z^{k+} - distância de percurso do limite superior da amostra k (m)

SÍMBOLOS LATINOS MAIÚSCULOS

- A_f - índice de área foliar (1)
 A_t - função auxiliar (1)
 B - função auxiliar (1)
 C - capacidade diferencial de umidade (m^{-1})
 $C_i^{j,m}$ - capacidade específica de umidade de solo, do nó i, após o passo no tempo j e após a iteração Picard m (m^{-1})
 D - coeficiente de dispersão hidrodinâmica ($m^2 \text{ dia}^{-1}$)
 D_{dif} - coeficiente de difusão na fase líquida ($m^2 \text{ dia}^{-1}$)
 D_{dis} - coeficiente de dispersão na fase líquida ($m^2 \text{ dia}^{-1}$)
 D_0 - coeficiente de difusão na água ($m^2 \text{ dia}^{-1}$)
 $(D^*)_{i-\frac{1}{2}}^j$ - coeficiente de dispersão hidrodinâmica ($m^2 \text{ dia}^{-1}$)
 $D_{i-\frac{1}{2}}^j$ - coeficiente de dispersão hidrodinâmica, corrigido para a dispersão artificial ($m^2 \text{ dia}^{-1}$)
 E - evaporação real ($m \text{ dia}^{-1}$)
 E_{int} - interceptação foliar ($m \text{ dia}^{-1}$)
 E_{pot} - evaporação potencial ($m \text{ dia}^{-1}$)
 ET_{pot} - evapotranspiração potencial ($m \text{ dia}^{-1}$)
 G_i^k - tempo de percurso normalizado, no compartimento i, da amostra k (1)
 G_t^k - tempo de percurso normalizado da amostra k (1)
 $G_{\Delta t}^k$ - tempo de percurso normalizado, no intervalo de percurso $[s, s + \Delta s]$, da amostra k (1)
 $G_{\Delta z}^k$ - distância de percurso normalizada, no intervalo de percurso $[s, s + \Delta s]$, da amostra k (1)
 H - carga hidráulica (m)
 H_{ref} - meia vida para determinadas condições de referência (dia)
 $I(t)$ - infiltração cumulativa no tempo t, desde o tempo inicial t_i (m)
 I^* - infiltração dinâmica cumulativa desde o tempo inicial t_i (m)

- J_L - fluxo de massa de pesticida na fase líquida ($\text{g m}^{-2} \text{ dia}^{-1}$)
 K - condutividade hidráulica (m dia^{-1})
 K_h - condutividade hidráulica em função do potencial matricial (m dia^{-1})
 K_i - condutividade hidráulica não saturada no tempo inicial t_i (m dia^{-1})
 K_{fs} - condutividade saturada de campo (m dia^{-1})
 K_{om} - coeficiente de distribuição material orgânico / água ($\text{m}^3 \text{ g}^{-1}$)
 K_r - condutividade hidráulica relativa, em função da distância e do potencial matricial (1)
 K_s - condutividade hidráulica saturada (m dia^{-1})
 $K_{s,h}$ - condutividade hidráulica em função da distância e do potencial matricial (m dia^{-1})
 K_0 - coeficiente (m dia^{-1})
 K_θ - condutividade hidráulica em função da umidade do solo (m dia^{-1})
 K_{om}^k - coeficiente de distribuição matéria orgânico / água, da amostra k ($\text{m}^3 \text{ g}^{-1}$)
 $K_i^{j,m}$ - condutividade hidráulica não saturada, do nó i , após o passo no tempo j e após a iteração Picard m (m dia^{-1})
 $\bar{K}_{0,ref}$ - condutividade hidráulica média entre z_0 e z_{ref} (m dia^{-1})
 $\bar{K}_{1,2}$ - condutividade hidráulica média, entre as distâncias s_1 e s_2 (m dia^{-1})
 L - lixiviação (g m^{-2})
 N - expoente de Freundlich (1)
 P - precipitação diária (m)
 P^k - P_z^k (para a distribuição da distância de percurso) ou P_t^k (para a distribuição do tempo de percurso)
 P_t^k - probabilidade de uma amostra k , atingir uma certa distância de percurso s , em um tempo menor ou igual a um certo tempo de percurso t^k (1)
 P_z^k - probabilidade de uma amostra k , atingir uma distância de percurso menor ou igual a uma certa distância de percurso s^k , em um certo tempo de percurso t (1)
 P^{k-} - limite de probabilidade inferior da amostra k (1)
 P^{k+} - limite de probabilidade superior da amostra k (1)
 R^k - coeficiente de retardo devido à adsorção, da amostra k (1)
 S - taxa específica de absorção da água pelas raízes (dia^{-1})
 S_c - cobertura do solo (1)

$S_i^{j,m}$	- taxa específica de absorção de água pelas raízes, do nó i , após o passo no tempo j e após a iteração Picard m (dia^{-1})
$(S_{\max})_i^j$	- taxa específica máxima de extração pelas raízes, no compartimento i , durante o passo no tempo j (dia^{-1})
T_{pot}	- transpiração potencial (m dia^{-1})
T_{ref}	- temperatura de referência do solo (K)
$(T_{\text{pot}})^j$	- transpiração potencial, durante o passo no tempo j (m dia^{-1})
X_i	- realização i da variável de saída X
\bar{X}_{ari}	- média aritmética
\bar{X}_{din}	- média dinâmica
\bar{X}_{est}	- média estática
\bar{X}_{geo}	- média geométrica
\bar{X}_{har}	- média harmônica
\bar{X}_{uni}	- média uniforme
$V(z, t)$	- volume por área (ou seja, espessura) de uma amostra (m)

SÍMBOLOS GREGOS MINÚSCULOS

α	- função empírica (1)
α_1	- coeficiente de ajuste (1)
α_2	- coeficiente de ajuste (1)
β	- coeficiente empírico (1)
β_1	- coeficiente de ajuste (1)
β_2	- coeficiente de ajuste (1)
β_T	- parâmetro (K^{-1})
β_θ	- parâmetro (1)
χ^k	- posição na distribuição normal padrão da amostra k (1)
$\tilde{\chi}^k$	- posição na distribuição normal padrão truncada, da amostra k (1)
δ	- fração da massa aplicada por área, que está dentro da amostra (1)
ε_f	- precisão relativa com que o valor da função $f(x)$ é calculado (1)
ϕ	- coeficiente auxiliar (1)

- γ - coeficiente de ajuste (1)
- η_i - coeficiente de variação no tempo de percurso, ou na distância de percurso, do compartimento i (1)
- η_t^k - coeficiente de variação no tempo de percurso da amostra k (1)
- $\eta_{\Delta t}^k$ - coeficiente de variação no tempo de percurso, no intervalo de percurso $[s, s + \Delta s]$, da amostra k (1)
- $\eta_{\Delta z}^k$ - coeficiente de variação na distância de percurso, no intervalo de percurso $[s, s + \Delta s]$, da amostra k (1)
- φ - coeficiente auxiliar (1)
- λ - comprimento de dispersão (m)
- λ_i - comprimento de dispersão hidrodinâmica do compartimento i (m)
- λ^k - comprimento de dispersão da amostra k (m)
- μ - coeficiente cinético de transformação bioquímica e absorção pelas raízes (dia^{-1})
- μ_{abs} - coeficiente cinético de absorção pelas raízes (dia^{-1})
- μ_{bio} - coeficiente cinético de transformação bioquímica (dia^{-1})
- μ_{ref} - coeficiente cinético de transformação em condições de referência (dia^{-1})
- μ_t - coeficiente da distribuição lognormal do tempo de percurso (1)
- μ_t^\bullet - coeficiente da distribuição lognormal do tempo de percurso de um soluto não-adsorvente (1)
- μ_z - coeficiente da distribuição normal da distância de percurso (m)
- μ_R - coeficiente da distribuição lognormal do coeficiente de retardo devido à adsorção linear (1)
- μ^k - coeficiente cinético da amostra k (dia^{-1})
- μ_{abs}^k - coeficiente cinético de absorção pelas raízes, da amostra k (dia^{-1})
- μ_{bio}^k - coeficiente cinético de transformação bioquímica, da amostra k (dia^{-1})
- μ_t^k - coeficiente da distribuição lognormal do tempo de percurso da amostra k (1)
- $\mu_{\Delta t}^k$ - coeficiente da distribuição lognormal do tempo de percurso, no intervalo de percurso $[s, s + \Delta s]$, da amostra k (1)
- μ_z^k - coeficiente da distribuição normal da distância de percurso da amostra k (m)
- $\tilde{\mu}_z$ - coeficiente da distribuição normal truncada (m)

- $\tilde{\mu}_z^k$ - coeficiente da distribuição normal truncada, da amostra k (m)
 $\hat{\mu}(n)$ - estimativa para a média de amostragem de n realizações de X_i
 θ - umidade volumétrica (1)
 θ_i - umidade volumétrica no tempo inicial t_i (1)
 θ_r - umidade volumétrica residual (1)
 θ_{ref} - umidade volumétrica de referência (1)
 θ_s - umidade volumétrica saturado (1)
 $\theta_i^{j,m}$ - umidade de solo, do nó i , após o passo no tempo j e após a iteração Picard m (1)
 θ^k - umidade volumétrica do solo da amostra k (1)
 ρ - densidade aparente do solo (g m^{-3})
 $\rho_{t^*,R}$ - coeficiente de correlação entre o tempo de percurso de um soluto não-adsorvente e o coeficiente de retardo devido à adsorção linear (1)
 ρ^k - densidade da massa seca do solo da amostra k (g m^{-3})
 σ_t - coeficiente da distribuição lognormal do tempo de percurso (1)
 σ_{t^*} - coeficiente da distribuição lognormal do tempo de percurso de um soluto não-adsorvente (1)
 σ_z - coeficiente da distribuição normal da distância de percurso (m)
 σ_R - coeficiente da distribuição lognormal do coeficiente de retardo devido à adsorção linear (1)
 σ_t^k - coeficiente da distribuição lognormal do tempo de percurso da amostra k (1)
 $\sigma_{\Delta t}^k$ - coeficiente da distribuição lognormal do tempo de percurso, no intervalo de percurso $[s, s + \Delta s]$, da amostra k (1)
 $\sigma_{\Delta z}^k$ - coeficiente da distribuição lognormal da distância de percurso, no intervalo de percurso $[s, s + \Delta s]$, da amostra k (1)
 σ_z^k - coeficiente da distribuição normal da distância de percurso, da amostra k (m)
 $\tilde{\sigma}_z$ - coeficiente da distribuição normal truncada da distância de percurso (m)
 $\tilde{\sigma}_z^k$ - coeficiente da distribuição normal truncada da amostra k (m)
 $\hat{\sigma}^2(n)$ - estimativa da variância de amostragem de n realizações de X_i
 τ - variável de integração (dia)
 υ - índice empírico para a distribuição do tamanho dos poros (1)

- ω_z^k - argumento da função de ajuste para a variância da distância de percurso da amostra k (m)
 ω_z^k - argumento da função de ajuste para a média da distância de percurso da amostra k (m)
 ψ - coeficiente auxiliar (1)
 ζ - distância relativa no intervalo $[s_1, s_2]$ (1) ou variável de integração (m)

SÍMBOLOS GREGOS MAIÚSCULOS

- Φ_i - função auxiliar no tempo inicial t_i (m)
 Γ_z^k - probabilidade de uma amostra k, ser aplicada dentro da fração r_z^k do intervalo de aplicação $[z_{inc,1}, z_{inc,2}]$ (1)
 Γ_t^k - probabilidade de uma amostra k, ser aplicada dentro da fração r_t^k do intervalo de aplicação $[t_{inc,1}, t_{inc,2}]$ (1)
 Γ^k - Γ_z^k (para uma condição inicial) ou Γ_t^k (para uma condição de contorno)
 ϑ - coeficiente empírico (1)
 Λ_i - sortividade do solo no tempo inicial t_i (m dia^{-0.5})
 Θ - saturação relativa (1)
 ζ - fator de tortuosidade (1)
 Ξ - coeficiente auxiliar (1)
 Ψ - função de ajuste (m)

SÍMBOLOS MATEMÁTICOS, OPERADORES E FUNÇÕES MATEMÁTICAS

- $|\dots|$ - operador para o valor absoluto
 $\operatorname{erfc}(\dots)$ - função erro complementar
 $\operatorname{grad}(\dots)$ - operador para o gradiente
 $\min\{\dots\}$ - mínimo de $\{\dots\}$
 $\max\{\dots\}$ - máximo de $\{\dots\}$
 ℓ - distância de referência (m)
 $\operatorname{CV}\{\dots\}$ - coeficiente de variação
 $\operatorname{Cov}\{\dots, \dots\}$ - covariância
 $E\{\dots\}$ - média ou valor esperado

$N(\dots)$	- probabilidade cumulativa da distribuição normal padrão (1)
$N^{-1}(\dots)$	- função inverso na distribuição cumulativa normal padrão (1)
$M\{\dots\}$	- operador para o momento de uma variável aleatória
$M_c\{\dots\}$	- operador para o momento centralizado de uma variável aleatória
$\text{Var}\{\dots\}$	- variância
$\delta(\dots)$	- função delta de Dirac
$\rho\{\dots, \dots\}$	- coeficiente de correlação
Δx	- incremento em x
$\tilde{\Delta}x$	- valor intermediário de Δx
Δt^j	- passo no tempo j (dia)
Δz_i	- espessura do compartimento i (m)
Δt°	- uma unidade de tempo no sistema de unidades desejado (dia)
∇_x	- operador para o gradiente de x
$\nabla h_{1,2}$	- gradiente médio do potencial matricial no intervalo $[s_1, s_2]$ (1)
$\nabla z_{1,2}$	- gradiente médio da gravidade no intervalo $[s_1, s_2]$ (1)

RESUMO

Eskes, S.J.T. (1998). *Desenvolvimento de técnicas numéricas para o modelamento estocástico do transporte de pesticidas no solo*. São Carlos, 1998. 165 p. Tese (Doutorado) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo.

O objetivo principal desta tese é contribuir para o desenvolvimento de modelos numéricos que possam ser aplicados eficientemente, para calcular a lixiviação de pesticidas na escala de campo. Vários modelos empíricos para o fluxo de água através da superfície do solo são combinados com um modelo numérico de transporte de água. O uso dos modelos empíricos, em combinação com o emprego de uma média otimizada para a condutividade hidráulica entre os nós, permite usar distâncias relativamente grandes entre os nós do modelo numérico. Como resultado, o modelo numérico torna-se muito rápido e pode ser usado para simulações Monte Carlo. Em adição, foram desenvolvidos vários modelos Lagrangeanos muito rápidos, para simular o transporte de solutos em solos. A dispersão do soluto é simulada, usando um conjunto de amostras aleatórias, onde cada amostra tem uma velocidade diferente, baseada em uma distribuição de tempo de percurso, ou em uma distribuição de distância de percurso. Processos como a transformação de primeira ordem e a adsorção linear, podem ser facilmente incluídos. No caso em que o modelo é usado para fazer simulações Monte Carlo, a abordagem torna-se muito eficiente quando a distribuição de velocidades das amostras é incluída na amostragem estratificada das variáveis aleatórias. Isto significa que, para cada rodada Monte Carlo, a lixiviação de apenas um número limitado de amostras deve ser calculada.

Palavras chave: Métodos numéricos, Modelos estocásticos, Solos, Simulação, Meios porosos, Pesticidas.

ABSTRACT

Eskes, S.J.T. (1998). *Development of numerical techniques for the stochastic modelling of pesticide transport in soil*. São Carlos, 1998. 165 p. Ph.D. Thesis - School of Engineering São Carlos, University of São Paulo.

The main objective of this thesis is to develop numerical models that can evaluate the leached mass fraction of pesticides at the field scale, in an efficient manner. Empirical models for infiltration and evaporation of water at the soil surface are presented. These empirical models, in combination with the use of an optimised mean conductivity function, allow very large steps in time and in space, of the numerical solution of Richard's equation. As a result, the numerical model has very short execution times and can be used in Monte Carlo runs, to simulate vertical soil moisture movement at the field scale. In addition, several highly efficient Lagrangian solute transport models were developed. These models simulate solute dispersion as an ensemble of random samples travelling at different velocities. The sample velocity distribution is based on known travel time or travel distance distributions. The models can be used for heterogeneous soil profiles and under transient conditions, while processes like first order transformation or linear adsorption, can be easily included. When used in Monte Carlo simulations, the proposed technique becomes very efficient when the sample velocity distribution is included in a stratified sampling scheme. In that case, only a limited number of samples needs to be tracked per Monte Carlo run, thus producing very fast output results.

Keywords: Numerical methods, Stochastic models, Soils, Porous media, Simulation, Pesticides.

1. INTRODUÇÃO

1.1 PROBLEMA E SUA IMPORTÂNCIA

As necessidades de água para consumo humano demandam a preservação das águas subterrâneas e superficiais contra o ingresso de contaminantes. As fontes de poluição que prejudicam a preservação podem ser classificadas como "pontuais" e "não pontuais". Como fontes pontuais pode-se citar, por exemplo, os vertedouros municipais e industriais. As fontes não pontuais são descargas difusas de poluidores devido as atividades de construção, mineração e produção agrícola. Os poluidores agrícolas não pontuais mais importantes são os sedimentos, sais, nutrientes (nitratos e fosfatos) e os pesticidas.

Pesticidas são substâncias químicas usadas para controlar ou destruir organismos indesejáveis, especialmente aqueles que tem implicações econômicas. Os impactos ambientais de pesticidas são geralmente o resultado de aplicações intermitentes destas substâncias químicas. Ou seja, a maioria dos pesticidas são aplicados apenas uma ou duas vezes por ano, na superfície do solo. A partir daí, a maior parte dos compostos serão dissolvidos na água de chuva e distribuídos no ambiente solo (FLURY, 1996).

A importância ambiental dos pesticidas é dupla: eles são biocidas e possuem certo grau de persistência. A persistência dos pesticidas depende de muitos fatores ambientais. Embora as interações físicas e (bio)químicas dos pesticidas com o ambiente solo ainda são pouco entendidas, a evidência experimental geralmente indica que a persistência de pesticidas aumenta com a sua profundidade no solo (BOESTEN & VAN DER LINDEN, 1991; BARBOSA et al., 1994). Como resultado, parte do pesticida aplicado atinge o lençol freático. O ambiente químico reduzido abaixo do lençol freático geralmente favorece a conservação dos pesticidas. Isto apresenta um fato preocupante, porque a água subterrânea é uma fonte de água potável. Além do mais, ela pode levar poluentes até áreas ecologicamente sensíveis, tais como pantanais, ou aparecer em rios e lagos. Em águas

subterrâneas rasas e profundas da Europa Ocidental e da América do Norte já foi detectado a presença de pesticidas (COHEN et al., 1984; HALLBERG, 1989; LEISTRA & BOESTEN, 1989; FLURY, 1996).

Portanto, existe a necessidade de avaliar a lixiviação de pesticidas até o lençol freático. Recentemente, a *EMBRAPA - Instrumentação Agropecuária* de São Carlos (SP) e a *EMBRAPA - Meio Ambiente* de Jaguariúna (SP), em colaboração com a *Universidade de São Paulo* e o *Instituto Agrônomo de Campinas* (SP), estudaram o comportamento de pesticidas no solo, como parte do projeto temático 90/3773-7 da *FAPESP* (CRESTANA, 1990). Neste projeto temático, o comportamento de pesticidas foi estudado na escala “local”, ou seja, através de experimentos no laboratório ou em campos experimentais de, por exemplo, 25 m². Além disto, os impactos ambientais de pesticidas, na escala local, foram simulados usando-se os modelos LEACHM-P (WAGENET & HUTSON, 1987), SWATRE (BELMANS et al., 1983) e PESTLA (BOESTEN & VAN DER LINDEN, 1991). Logicamente, o próximo passo seria a avaliação deste impacto em uma escala regional. Porém, isto geralmente apresenta sérios problemas em termos de requisição de dados. Portanto, antes de formular um projeto em escala regional, é conveniente determinar a densidade mínima de amostragem por área, necessária para calcular a lixiviação de pesticidas. Isto pode ser realizado, usando-se um modelo de transporte de pesticidas desenvolvido para operar em escala de campo (ESKES & CRESTANA, 1996).

No desenvolvimento de um modelo de lixiviação, em escala de campo, é preciso identificar os principais processos físicos, químicos e biológicos que afetam o transporte de pesticidas no solo. Porém, as heterogeneidades encontradas em condições naturais, fazem com que o transporte de solutos em escala regional seja altamente variável (NIELSEN et al., 1973; VIEIRA et al., 1981). Além disto, BOESTEN (1991) mostrou que a lixiviação de pesticidas é muito sensível à variabilidade espacial dos processos de adsorção e transformação de pesticidas no ambiente solo. Portanto, deve-se acrescentar a necessidade de se levar em conta a variabilidade espacial desses processos relevantes.

O solo é um meio poroso tridimensional, exibindo heterogeneidade horizontal e vertical. Devido à natureza do processo de pedogênese, as heterogeneidades horizontais e verticais são geralmente descritas de maneiras diferentes.

Na direção vertical, um corpo de solo é composto de vários horizontes e/ou camadas. Segundo PRADO (1995), um horizonte é uma seção de constituição mineral ou orgânica, geralmente paralela à superfície do solo, que lhe conferem características de inter-relacionamento com outros horizontes do perfil. Os horizontes diferenciam-se pela diversidade de propriedades resultantes da ação da pedogênese. O perfil de solo é o conjunto de horizontes que abrange, verticalmente, desde a superfície até o material originário. Segundo PRADO (1995), “camada” difere de “horizonte” pelo fato de o conjunto de propriedades não ser resultante, ou então pouco influenciada pela atuação dos processos pedogenéticos. Nesta tese, assume-se uma definição mais geral para uma camada de solo. Chama-se de camada, uma determinada seção de um horizonte, não necessariamente escolhida por causa da sua constituição mineral ou orgânica.

Na direção horizontal, um corpo de solo compõe-se de vários “pedons”. O pedon é um corpo tridimensional de solo com dimensões laterais grandes o suficiente para permitir o estudo das formas e relações dos horizontes. Sua área varia de 10^{-1} a 10 m^2 (CURI, 1993). O “pedotop” é um conjunto de pedons similares, e corresponde ao nível mais baixo no sistema de classificação de solo (KÚTILEK & NIELSEN, 1994, p.10). Dentro de um “pedotop”, as propriedades físicas e químicas dos diferentes pedons apresentam um certo grau de variabilidade espacial. Além de serem variáveis, as propriedades do solo, geralmente estão estatisticamente correlacionadas no espaço, dentro de um “pedotop” (VIEIRA et al., 1983). Dentro de um campo experimental, um parâmetro pode ser uma variável aleatória, mas estatisticamente estacionária. Isto quer dizer que a sua média e a sua covariância não mudam em função da posição no campo. O apêndice A apresenta um sumário dos conceitos básicos da teoria da probabilidade e da estatística, usados nesta tese.

Com as considerações apresentadas em relação à heterogeneidade do solo, pode-se definir várias escalas de observação para descrever a variabilidade espacial dos parâmetros do solo. Nesta tese, são definidas as seguintes escalas de observação: escala microscópica, escala local, escala de campo e escala regional. A escala microscópica é qualquer distância que não pode ser observada diretamente através da visão humana, por exemplo, a distribuição das moléculas de soluto dentro de um poro. A escala local é qualquer distância dentro de um pedon, que pode ser observada através da visão humana. A escala de campo é a escala do maior “pedotop” exibindo estacionaridade na média e na variância dos

parâmetros observados. Finalmente, a escala regional é qualquer escala de observação maior do que a escala de campo, como, por exemplo, uma bacia hidrográfica. Nesta escala, os parâmetros observados geralmente apresentam tendências determinísticas e/ou descontinuidades na sua distribuição espacial.

Os processos físicos, químicos e biológicos que afetam o transporte local de solutos no solo são geralmente estudados na escala local. Baseado nestas observações, um modelo de transporte pode ser formulado. Os primeiros estudos faziam extrapolação de resultados, obtidos na escala local, para a escala de campo, usando-se simplesmente os valores médios das amostras obtidas. Esta não é uma abordagem confiável, porque não existe a garantia de que as relações matemáticas observadas na escala local, sejam as mesmas para uma escala muito maior.

Teoricamente, o método correto seria simular o processo de lixiviação detalhadamente, ou seja, para toda a área de estudo, usando-se um modelo numérico com um número exaustivo de nós. Porém, isto não apresenta uma opção viável, devido ao grande esforço computacional e grande esforço de amostragem, associados a esta abordagem. Portanto, existe a necessidade de desenvolvimento de abordagens mais eficientes para calcular o transporte de solutos em meios porosos, na escala de campo. Em adição, os parâmetros observados sempre apresentam um certo grau de incerteza, devido às limitações impostas no momento da amostragem. Portanto, existe a necessidade de desenvolvimento de abordagens que possam avaliar a incerteza presente nos dados de saída, em função da incerteza nos dados de entrada. Estas duas considerações motivaram o desenvolvimento de modelos estocásticos (DAGAN, 1989).

Um modelo estocástico usa valores aleatórios como dados de entrada, enquanto os seus dados de saída são probabilísticos. Teoricamente, isto permite uma descrição correta do processo de transporte na escala de campo, mesmo com um número de amostras limitado. Pode-se dividir os modelos estocásticos apresentados na literatura em três categorias: (1) modelos estocásticos contínuos, (2) modelos de função-transferência e (3) modelos de colunas independentes. Todos estes modelos são discutidos com mais detalhes no capítulo 3.

Os modelos estocásticos contínuos geralmente são modelos analíticos. Eles são importantes do ponto de vista teórico, mas raramente apresentam uma solução prática para problemas de campo (JURY & ROTH, 1990, p.148). Portanto, para a lixiviação de solutos na zona não-saturada, os modelos baseados no conceito de função-transferência e de colunas independentes são os mais relevantes.

Mesmo assim, os modelos de função-transferência apresentados na literatura, ainda apresentam bastante limitações. A limitação mais importante é que a variabilidade espacial do tempo de percurso do soluto é uma função estacionária (JURY et al., 1990). Na realidade, a variabilidade espacial do tempo de percurso depende de vários fatores ambientais, tal como a umidade do solo, o fluxo de drenagem, etc.

Um modelo de colunas independentes, por outro lado, é bastante flexível no seu uso, e processos não-lineares, por exemplo, podem ser facilmente incluídos. Os métodos empregados para calcular o transporte de solutos em um modelo de colunas independentes, pode-se dividir em duas categorias: (1) os métodos semi-analíticos e (2) os métodos Monte Carlo.

Os métodos semi-analíticos são os mais eficientes, mas apresentam limitações para os dados de entrada. Por exemplo, uma suposição comum, nesta abordagem, é que a densidade de fluxo de água no solo é estacionária e uniforme (SIMMONS et al., 1995). No caso de solutos biodegradáveis, tal como os pesticidas, isto é uma séria limitação, porque a lixiviação destes solutos é afetada pela variação no tempo do fluxo de água (FLURY, 1996).

O método Monte Carlo geralmente não apresenta sérias limitações para os dados de entrada. Porém, em termos de tempo gasto no computador, esta abordagem é pouco eficiente. Especialmente quando a área de estudo for extensa, o método poderá tornar-se impraticável.

1.2 OBJETIVOS

O desenvolvimento de técnicas numéricas para o modelamento estocástico da lixiviação de solutos no solo, principalmente pesticidas, que possam ser aplicadas em uma escala de bacia hidrográfica. As condições que os modelos devem obedecer são:

- os modelos levam em conta a variabilidade espacial dos parâmetros de entrada,
- os modelos não apresentam limitações quanto a uniformidade do fluxo de água e
- os modelos devem fornecer resultados que demandem pouco tempo de computação.

Os processos que ocorrem na superfície do solo, tal como a interceptação de pesticidas pela cobertura vegetal e o escoamento superficial de pesticidas, não serão considerados neste trabalho. Nesta tese, será dada ênfase aos processos que ocorrem no interior do solo, considerando pesticidas não-voláteis. Portanto, os processos presentes na escala local que serão considerados são: (1) a percolação de água na zona não saturada do solo e (2) o transporte de solutos na fase líquida do solo.

Admite-se também que o fluxo de água e solutos, no interior de uma coluna de solo, na escala local, possa ser descrito através de um modelo unidimensional e vertical.

1.3 DESCRIÇÃO SUCINTA DO CONTEÚDO DA CADA CAPÍTULO

A pesquisa bibliográfica será apresentada nos capítulos 2 e 3. No capítulo 2, serão discutidos os vários processos físicos, químicos e biológicos relevantes na escala local. Também será discutida a descrição destes processos através do uso de modelos determinísticos. No capítulo 3, serão apresentadas as várias abordagens estocásticas encontradas na literatura.

Nos capítulos 4 e 5, será apresentada parte das contribuições originais desta tese. No capítulo 4, será apresentado o desenvolvimento de algumas técnicas numéricas inéditas para simular eficientemente o fluxo de água no solo. No capítulo 5, será apresentado o desenvolvimento teórico de uma técnica numérica inédita para a simulação eficiente do transporte de solutos (particularmente, pesticidas) no solo.

No capítulo 6, serão apresentados os resultados obtidos dos experimentos numéricos e uma discussão referente aos mesmos. No capítulo 7, serão apresentadas as conclusões desse trabalho e algumas sugestões de trabalhos futuros.

2. ABORDAGEM DETERMINÍSTICA

Em geral, é impossível descrever o transporte de solutos na escala de campo, ou na escala regional, sem conhecimento dos processos relevantes na escala local. Nesta escala, ou seja, a escala de laboratório ou de “pedon”, os processos físicos, químicos e biológicos relevantes para o transporte de solutos em solos, podem ser medidos detalhadamente. Baseado nestes experimentos, podem ser desenvolvidos modelos matemáticos que descrevem os processos observados na escala local. Portanto, o primeiro passo, antes de descrever o transporte de água e solutos na escala de campo, com uma abordagem estocástica é o desenvolvimento de modelos na escala local.

Comumente na abordagem determinística, considera-se a heterogeneidade na escala microscópica para volumes elementares representativos (BEAR et al., 1994). Por exemplo, a difusão molecular de um soluto é o resultado do movimento Browniano das moléculas individuais na escala microscópica. Mesmo admitindo que o processo de difusão do conjunto das moléculas possa ser considerado estocástico, geralmente define-se um coeficiente macroscópico de difusão molecular, levando-se em conta a média do movimento Browniano de todas as moléculas em um volume elementar representativo. Portanto, na escala macroscópica, o processo de difusão torna-se determinístico, ou seja, existe um único coeficiente que caracteriza o processo de difusão em um certo volume elementar (i.e. a Lei de Fick).

Modelos determinísticos, portanto, são definidos aqui como modelos com domínios contínuos, para os quais volumes elementares representativos podem ser definidos, com coeficientes únicos. Nas seções seguintes, pode ser visto que a definição do transporte como um processo determinístico, resulta na equação de Richards, para o fluxo de água na região não saturada do solo, e na equação de convecção-dispersão para o transporte de solutos.

2.1 HIDRODINÂMICA DA ÁGUA NO SOLO

Para a maioria das substâncias agroquímicas aplicadas, a água é o veículo mais importante de transporte no solo. Em seguida, são apresentadas as técnicas numéricas mais comuns para modelar: (1) o fluxo vertical da água em solos não-expansivos, (2) a infiltração da água no solo, (3) a evaporação da água da superfície do solo e (4) a absorção da água pelas raízes das plantas.

2.1.1 Fluxo vertical da água em solos não-expansivos

Geralmente, o fluxo de água em um meio poroso não-saturado é modelado como um fluxo capilar macroscópico, onde o movimento da água é causado pela diferença de tensão superficial, além da força gravitacional. Para solos não-expansivos, e condições isotérmicas, isto resulta na equação de Darcy-Buckingham unidimensional, na direção vertical (KÚTILEK & NIELSEN, 1994, p.102):

$$q = -K \frac{dH}{dz} \quad (2.1)$$

com

$$H = h + z \quad (2.2)$$

onde

q = densidade de fluxo, negativo quando direcionado para baixo (m dia^{-1}),

z = posição no eixo vertical, negativo abaixo da superfície do solo (m),

h = potencial matricial, negativo na região não-saturada (m),

H = carga hidráulica (m) e

K = condutividade hidráulica (m dia^{-1}).

A eq.(2.1) é a equação mais usada na literatura para descrever o fluxo de água no solo. Um fluxo que obedece esta equação é chamado de fluxo Darciano. Porém, mudanças bruscas das propriedades do solo nos horizontes, ou a presença de macroporos, podem causar padrões de escoamento caóticos, desde o escoamento lateral até a canalização local do fluido ao longo de uma fração pequena do solo molhado, fenômeno chamado de fluxo preferencial (KUNG, 1988; POSADAS & CRESTANA, 1992). O fluxo preferencial pode ser um processo crítico na observação da ocorrência de pesticidas na água subterrânea (FLURY, 1996).

A pesquisa de fluxos não-Darcianos ainda está em desenvolvimento, com grande dificuldade de descrição de processos heterogêneos, em escala de campo. Nesta tese não pretende-se apresentar uma contribuição teórica neste campo de pesquisa. Considerando isto, e o fato que a grande maioria dos modelos que estão sendo usados hoje são baseados na equação de Darcy-Buckingham, o trabalho foi limitado ao escoamento Darciano, condição esta que torna válida a eq.(2.1).

Em um domínio contínuo de solo, na forma de uma coluna vertical, a equação de continuidade da fase líquida é:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\frac{\partial q}{\partial z} - S \quad (2.3)$$

onde

θ = umidade volumétrica (1) e

S = taxa específica de absorção da água pelas raízes (dia^{-1}).

Substituindo-se as eqs.(2.1) e (2.2) na eq.(2.3), obtém-se a equação de Richards (KÚTILEK & NIELSEN, 1994, p.112):

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K(h) \left(\frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right) \right] - S \quad (2.4)$$

ou

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

com

$$C(h) = \frac{d\theta}{dh} \quad (2.6)$$

onde

C = capacidade diferencial de umidade (m^{-1}).

A umidade do solo e a condutividade hidráulica não-saturada são geralmente consideradas funções do potencial matricial. Neste trabalho, emprega-se uma combinação das expressões apresentadas por BROOKS & COREY (1964), VAN GENUCHTEN (1980) e SMITH et al. (1993):

$$\Theta(h) = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} = \left[\left(\frac{h - h_s}{h_a} \right)^\psi + 1 \right]^{-\nu/\psi} \quad (2.7)$$

$$K(h) = K_s \Theta^b \left[1 - (1 - \Theta^\phi)^\varphi \right]^a \quad (2.8)$$

onde

Θ = saturação relativa (1),

θ_r = umidade volumétrica residual (1),

θ_s = umidade volumétrica saturado (1),

h_a = potencial matricial crítico de entrada de ar (m),

h_s = potencial matricial saturada, ou seja, por definição $\Theta(h_s) = 1$ (m),

K_s = condutividade hidráulica saturada ($m \text{ dia}^{-1}$),

a, b = coeficientes empíricos de um modelo capilar (1),

ν = índice empírico para a distribuição do tamanho dos poros (1) e

ψ, ϕ, φ = coeficientes auxiliares (1).

As eqs.(2.7) e (2.8) são equações que podem ser ajustadas para a maioria dos dados experimentais. Para $h_s = 0$, $\psi = \nu + c$, $\phi = \psi/\nu$ e $\varphi = 1/\phi$, as eqs.(2.7) e (2.8) igualam-se ao modelo de VAN GENUCHTEN (1980), onde c é um coeficiente empírico de um modelo capilar. Neste caso, para o modelo capilar de Burdine, $a = 1$, $b = 2$ e $c = 2$, enquanto para o modelo capilar de Mualem, $a = 2$, $b = 0.5$ e $c = 1$ (KÚTILEK & NIELSEN, 1994, p.108). Em adição, para $h_s = 0$, $\psi \rightarrow \infty$, $\phi = 1/\nu$ e $\varphi = 1$, as eqs.(2.7) e (2.8) igualam-se ao modelo de BROOKS & COREY (1964), quando $h < h_a$. Neste caso, para o modelo capilar de Burdine, $a = 2$ e $b = 3$, enquanto para o modelo capilar de Mualem, $a = 2$ e $b = 2.5$ (KÚTILEK & NIELSEN, 1994, p.108).

Em geral, as eqs.(2.7) e (2.8) apresentam histerese na sua dependência do potencial matricial ao longo do tempo. Por enquanto, neste trabalho supõe-se o papel da histerese como de baixa importância.

Para condições iniciais e de contorno complicadas, a eq.(2.4) ou a eq.(2.5) são geralmente resolvidas através de um método numérico Euleriano, tal como o método de diferenças finitas ou o método de elementos finitos (HAVERKAMP et al., 1977). Das duas equações apresentadas, a eq.(2.5) é a mais fácil de ser resolvida numericamente, porque ela

apresenta apenas uma variável dependente (i.e., o potencial matricial). Porém, os métodos numéricos convencionais apresentam um erro significativo no balanço de massa, quando usados para resolver a eq.(2.5) (HAVERKAMP et al., 1977). CELIA et al. (1990), introduziram um método numérico, usando-se a eq.(2.4), ao invés da eq.(2.5), que permite uma solução numérica teoricamente sem erro no balanço de massa, devido a discretização no tempo. Depois, RATHFELDER & ABRIOLA (1994) mostraram que isto também é possível através da eq.(2.5). Estes autores empregaram um método de diferenças finitas implícitas com uma iteração implícita do tipo Picard (HAVERKAMP et al., 1977). Para calcular o valor de $C(h)$ na eq.(2.5) eles usaram o “método da inclinação da corda” (AZIZ & SETTARI, 1979). O algoritmo de RATHFELDER & ABRIOLA (1994) será usado neste trabalho para resolver a equação de Richards.

Aplicando-se o algoritmo de RATHFELDER & ABRIOLA (1994) à eq.(2.5), obtém-se:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta t^j} C_i^{j+1, m} h_{i-1}^{j+1, m} - \frac{\theta_i^{j+1, m} - \theta_i^j}{\Delta t^j} - \frac{1}{\Delta z_i} (K_{i+1/2}^{j+1, m} - K_{i-1/2}^{j+1, m}) - S_i^{j+1, m} = \\ & \frac{1}{\Delta t^j} C_i^{j+1, m} h_i^{j+1, m+1} - \\ & \frac{1}{\Delta z_i} \left[\frac{K_{i-1/2}^{j+1, m}}{\Delta z_{i-1/2}} h_{i-1}^{j+1, m+1} - \left(\frac{K_{i-1/2}^{j+1, m}}{\Delta z_{i-1/2}} + \frac{K_{i+1/2}^{j+1, m}}{\Delta z_{i+1/2}} \right) h_i^{j+1, m+1} + \frac{K_{i+1/2}^{j+1, m}}{\Delta z_{i+1/2}} h_{i+1}^{j+1, m+1} \right] \end{aligned} \quad (2.9)$$

com

$$K_{i\pm 1/2}^{j, m} = \sqrt{K_i^{j, m} K_{i\pm 1}^{j, m}} \quad (2.10)$$

$$\Delta z_{i\pm 1/2} = \frac{\Delta z_i + \Delta z_{i\pm 1}}{2} \quad (2.11)$$

$$\Delta z_i = z_{i-1/2} - z_{i+1/2} \quad (2.12)$$

onde

Δt^j = passo no tempo j (dia),

$z_{i-1/2}$, $z_{i+1/2}$ = posição do limite superior e inferior, respectivamente, do compartimento i (m),

Δz_i = espessura do compartimento i (m),

$h_i^{j, m}$ = potencial matricial, do nó i , após o passo no tempo j e após a iteração Picard m (m),

$\theta_i^{j,m}$ = umidade de solo, do nó i , após o passo no tempo j e após a iteração Picard m

(1),

$S_i^{j,m}$ = taxa específica de absorção de água pelas raízes, do nó i , após o passo no tempo j e após a iteração Picard m (dia^{-1}),

$C_i^{j,m}$ = capacidade específica de umidade de solo, do nó i , após o passo no tempo j e após a iteração Picard m (m^{-1}) e

$K_i^{j,m}$ = condutividade hidráulica não saturada, do nó i , após o passo no tempo j e após a iteração Picard m (m dia^{-1}).

Vale observar que, embora a ordenada aumente, de baixo para cima ao longo do perfil de solo, os índices dos nós crescem de cima para baixo no perfil de solo, ou seja, na direção da força da gravidade. A figura 2.1 mostra um compartimento no modelo numérico, com as notações usadas na eq.(2.9).

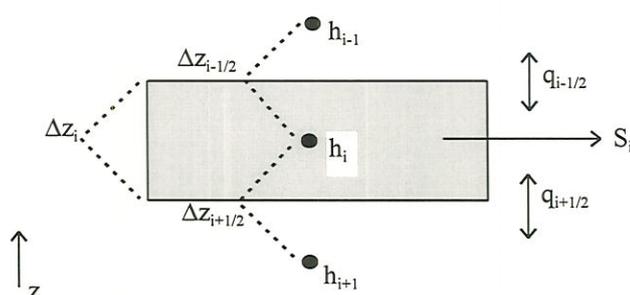


Figura 2.1 - Um compartimento no modelo numérico de diferenças finitas, com as notações usadas na eq.(2.9).

Para cada passo no tempo, iterações do tipo Picard são usadas para reduzir o erro no balanço de massa, até que:

$$\max \left\{ \left| h_i^{j,m+1} - h_i^{j,m} \right| ; i = 1, n \right\} \leq 10^{-3} \quad (2.13)$$

ou

$$\max \left\{ \left| \frac{h_i^{j,m+1} - h_i^{j,m}}{h_i^{j,m+1}} \right| ; i = 1, n \right\} \leq 10^{-5} \quad ; h_i^{m+1} \neq 0 \quad (2.14)$$

onde

$$\max \{ \} = \text{máximo de } \{ \}.$$

Observe que não necessariamente ambos os critérios devem ser atingidos, durante um passo no tempo j .

Para calcular o fluxo de água na superfície do perfil de solo, uma condição de contorno deve ser usada que é do tipo Dirichlet ou do tipo Neuman, dependendo-se do potencial matricial real na superfície do solo. Para um fluxo negativo (i.e. infiltração):

$$-K(h_0) \left(\left. \frac{\partial h}{\partial z} \right|_{z=0} + 1 \right) = q_0(t); \text{ quando } h_0 < 0 \quad (2.15a)$$

$$h_0 = 0; \text{ quando } -K(0) \left(\left. \frac{\partial h}{\partial z} \right|_{z=0} + 1 \right) > q_0(t) \quad (2.15b)$$

e para um fluxo positivo (i.e. evaporação):

$$-K(h_0) \left(\left. \frac{\partial h}{\partial z} \right|_{z=0} + 1 \right) = q_0(t); \text{ quando } h_0 > h_{\text{atm}} \quad (2.16a)$$

$$h_0 = h_{\text{atm}}; \text{ quando } -K(h_{\text{atm}}) \left(\left. \frac{\partial h}{\partial z} \right|_{z=0} + 1 \right) < q_0(t) \quad (2.16b)$$

onde

q_0 = fluxo potencial na superfície do solo (m dia^{-1}),

h_0 = potencial matricial na superfície do solo (m) e

h_{atm} = potencial matricial em equilíbrio com a atmosfera (m).

O potencial matricial em equilíbrio com a atmosfera pode ser calculado em função da pressão de vapor do ar (FEDDES et al., 1978, p.33).

O modelo numérico armazena a água de chuva não infiltrada, em uma camada de água na superfície do solo. O escoamento superficial começa quando a espessura desta camada atinge um certo valor máximo. Observe que a camada superficial somente contém água, quando $h_0 > 0$, onde h_0 é o potencial matricial na superfície do solo.

No contorno inferior do perfil de solo, pode-se usar um potencial matricial prescrito (condição do tipo Dirichlet), uma densidade de fluxo prescrita (condição do tipo Neuman), ou um gradiente hidráulica prescrito (condição do tipo Cauchy).

2.1.2 Evapotranspiração

NIMAH & HANKS (1973) e FEDDES et al. (1974) foram uns dos primeiros autores a apresentarem modelos para a simulação numérica do fluxo de água, na presença de raízes de plantas. Nestes modelos, a absorção de água pelas raízes é representada por uma taxa específica (i.e. um fluxo por volume, como por exemplo, a unidade dia⁻¹). Estes modelos precisam de informação detalhada sobre o sistema de raízes, tal como a densidade de raízes, a distribuição de raízes e o comprimento de raízes individuais. A avaliação destas funções no campo, é laboriosa e cara. Além disto, existem dúvidas sobre a precisão de modelos empregando-se este tipo de informação. Por isto, FEDDES et al. (1978) apresentaram uma expressão mais prática e simples para a taxa específica de absorção de água que, até hoje, é uma das mais usadas (KÚTILEK & NIELSEN, 1994, p.204). FEDDES et al. (1978), descreveram a absorção real de água pelas raízes como segue:

$$S_i^j = \alpha (h_i^j) (S_{\max})_i^j \quad (2.17)$$

onde

α = função empírica (1) e

$(S_{\max})_i^j$ = taxa específica máxima de extração pelas raízes, no compartimento i , durante o passo no tempo j (dia⁻¹).

Usando-se a eq.(2.17), a transpiração real é, obviamente, dada por $\sum_{i=1}^n S_i^j \Delta z_i$, onde n é o número de camadas no modelo numérico.

Foi assumido, por vários autores, que S_{\max} diminui linearmente com a profundidade PRASSAD (1988) ou exponencialmente (NOVÁK, 1987). Na verdade, a distribuição espacial de S_{\max} corresponde à distribuição das raízes no perfil (KÚTILEK & NIELSEN, 1994, p.204). Portanto, nesta tese, assume-se que o valor de S_{\max} pode ser relacionado ao perfil de densidade de raízes, como segue:

$$(S_{\max})_i^j = \frac{p_i^j (T_{\text{pot}})^j}{\sum_{h=1}^{h=n} p_h^j \Delta z_i} \quad (2.18)$$

onde

p_i^j = indicador (ou “peso”) para o desenvolvimento do sistema de raízes, no compartimento i , durante o passo no tempo j (1) e

$(T_{\text{pot}})^j$ = transpiração potencial, durante o passo no tempo j (m dia^{-1}).

Como indicador para o desenvolvimento do sistema de raízes em cada compartimento, pode-se usar, por exemplo, a massa total de raízes em cada camada de solo.

A função $\alpha(h)$ é uma função empírica do potencial matricial. A função foi definida por BELMANS et al. (1983) como segue:

$$\alpha(h) = 0 \quad ; \quad 0 \geq h \geq h_1 \quad (2.19a)$$

$$\alpha(h) = \frac{h - h_1}{h_2 - h_1} \quad ; \quad h_1 \geq h \geq h_2 \quad (2.19b)$$

$$\alpha(h) = 1 \quad ; \quad h_2 \geq h \geq h_3 \quad (2.19c)$$

$$\alpha(h) = \frac{h - h_4}{h_3 - h_4} \quad ; \quad h_3 \geq h \geq h_4 \quad (2.19d)$$

onde

h_1, h_2, h_3 e h_4 = valores empíricos para o potencial matricial, onde h_2 é chamado de “ponto anaeróbico” e h_4 de “ponto de murchamento” (m).

As eqs.(2.19a) até (2.19d) mostram que, segundo FEDDES et al. (1978), o coeficiente $\alpha(h)$ depende linearmente do potencial matricial. Em geral, os valores de h_1, h_2, h_3 e h_4 dependem do tipo de solo, da cultura e da transpiração potencial (FEDDES et al., 1978; KÚTILEK, 1978).

Com as eqs.(2.17) a (2.19d) pode ser calculado o fluxo real de água para a atmosfera, quando as condições de contorno são conhecidas. O fluxo real de água para a atmosfera compõe-se de dois fluxos: (1) a evaporação real na superfície do solo e (2) a transpiração real através do sistema de raízes. No caso da umidade do solo não ser um fator limitante, a soma dos dois fluxos é igual à demanda atmosférica, também chamada de evapotranspiração potencial.

Existem vários métodos para separar a evapotranspiração potencial em um fluxo de evaporação e em um fluxo de transpiração. Nesta tese, foi adotado o método apresentado por BELMANS et al. (1983), por ser um dos mais aceitos. Segundo BELMANS et al. (1983), a transpiração potencial é calculada como:

$$T_{\text{pot}}(t) = ET_{\text{pot}}(t) - E_{\text{pot}}(t) \quad (2.20)$$

onde

T_{pot} = transpiração potencial (m dia⁻¹),

ET_{pot} = evapotranspiração potencial (m dia⁻¹) e

E_{pot} = evaporação potencial (m dia⁻¹).

Para evitar que a evaporação seja suficientemente grande de modo a causar uma transpiração potencial negativa, o seguinte termo é adicionado:

$$T_{\text{pot}}(t) = \max\{0, T_{\text{pot}}(t)\} \quad (2.21)$$

onde

$\max\{ \}$ = máximo de $\{ \}$.

A quantidade E_{pot} é calculada, segundo BELMANS et al. (1983):

$$E_{\text{pot}}(t) = ET_{\text{pot}}(t) \exp(-0.6 A_f(t)) \quad (2.22)$$

onde

A_f = índice de área foliar (1).

O índice de área foliar é calculado a partir da cobertura do solo, segundo BELMANS et al. (1983):

$$A_f(t) = a S_c(t) + b (S_c(t))^2 + c (S_c(t))^3 \quad (2.23)$$

onde

S_c = cobertura do solo (1) e

a, b, c = coeficientes de regressão (1).

A eq.(2.23) é importante pelo fato de afetar a partição da evapotranspiração na evaporação do solo e na transpiração das plantas. A equação varia para diferentes culturas. Agora, o fluxo potencial através da superfície do solo pode ser calculado, como:

$$q_0(t) = E_{\text{pot}}(t) - (i_p(t) - E_{\text{int}}(t)) \quad (2.24)$$

onde

i_p = intensidade da precipitação (m dia⁻¹) e

E_{int} = interceptação foliar (m dia⁻¹).

O fluxo potencial através da superfície do solo é usado nas eqs.(2.15a) a (2.16b), para calcular o fluxo real, o que depende das propriedades atuais de transmissão de água no solo.

2.2 COMPORTAMENTO DE PESTICIDAS NÃO-VOLÁTEIS NO SOLO

Como foi mencionado na introdução, outros processos de transporte na superfície do solo além da infiltração, não serão considerados nesta tese. Portanto, sempre trabalha-se com a dose efetiva do pesticida aplicado. A dose efetiva é definida como a parte da dose aplicada que não é removida da superfície do solo, por um outro processo de transporte do que a infiltração de água.

Além disto, o transporte de pesticidas na fase gasosa não é considerado, ou seja, este trabalho é limitado aos pesticidas não-voláteis.

2.2.1 Transporte de pesticidas na fase líquida

O transporte de solutos em meios porosos é geralmente descrito como um processo de convecção-dispersão (NIELSEN & BIGGAR, 1962; BIGGAR & NIELSEN, 1967). Este processo, compõe-se de um fluxo convectivo e um fluxo dispersivo. O processo que causa o fluxo dispersivo, é chamado de dispersão hidrodinâmica.

A dispersão hidrodinâmica de um soluto é o resultado do movimento aleatório das moléculas individuais na escala microscópica. Nesta escala, um meio poroso apresenta um campo de fluxo de água altamente heterogêneo. Cada molécula tem uma velocidade diferente, devido a esta heterogeneidade. Porém, o processo de difusão molecular, devido ao movimento Browniano das moléculas, ocorre ao mesmo tempo, significando que uma molécula pode “visitar” tubos de fluxo na escala microscópica, com velocidades diferentes. Devido ao fato de ser um processo aleatório, cada molécula acumula uma soma de velocidades diferente, durante o seu tempo de percurso. Para um campo de velocidades tridimensional, isto pode ser escrito do seguinte modo (DAGAN, 1989, p. 277):

$$\begin{pmatrix} x^k(t) \\ y^k(t) \\ z^k(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x^k(0) \\ y^k(0) \\ z^k(0) \end{pmatrix} + \int_0^t \begin{pmatrix} v_x(x^k(\tau), y^k(\tau), z^k(\tau)) \\ v_y(x^k(\tau), y^k(\tau), z^k(\tau)) \\ v_z(x^k(\tau), y^k(\tau), z^k(\tau)) \end{pmatrix} d\tau \quad (2.25)$$

onde

v_x, v_y, v_z = velocidades nas direções x, y e z, respectivamente (m dia^{-1}),

x^k, y^k, z^k = coordenadas da molécula k, no tempo t (m) e

τ = variável de integração (dia).

A eq.(2.25) mostra que a trajetória é diferente para cada molécula, mesmo com um campo de velocidades estacionário, e macroscopicamente homogêneo.

Em volumes elementares de fluxo relativamente pequenos, supõe-se que cada molécula tem a chance de visitar todos os tubos de fluxo na escala microscópica. Neste caso, pode-se descrever o processo de dispersão hidrodinâmica como se fosse um processo de difusão, só que com passos maiores de movimento aleatório. Observe que os passos não são correlacionados, porque uma molécula, teoricamente, visita todos os tubos de fluxo, aleatoriamente. Do ponto de vista de processos estocásticos, isto corresponde à definição de um processo Wiener, ou seja, um processo “sem memória” (KOVÁCS, 1996, p. 71). Portanto, o processo convectivo-dispersivo pode ser definido como um processo Wiener, acumulando-se os passos determinísticos do processo convectivo e também os passos aleatórios não-correlacionados do processo dispersivo.

Enquanto o processo de dispersão hidrodinâmica de um conjunto de moléculas pode ser considerado estocástico, um coeficiente macroscópico de difusão molecular é geralmente definido, considerando-se a média do movimento aleatório de todas as moléculas em um volume elementar representativo. Portanto, na escala macroscópica, o processo de dispersão hidrodinâmica torna-se determinístico, ou seja, existe um único coeficiente que caracteriza o processo de dispersão em um certo volume elementar. O resultado é a equação de convecção-dispersão (TAYLOR, 1953). Desta maneira, o fluxo mássico de pesticida na fase líquida do solo, pode ser descrito como segue:

$$J_L = qc_r - \theta D \frac{\partial c_r}{\partial z} \quad (2.26)$$

com

$$D = D_{\text{dif}} + D_{\text{dis}} \quad (2.27)$$

onde

J_L = fluxo de massa do pesticida na fase líquida ($\text{g m}^{-2} \text{ dia}^{-1}$),

c_r = concentração residente na fase líquida (g m^{-3}),

D = coeficiente de dispersão hidrodinâmica ($\text{m}^2 \text{dia}^{-1}$),

D_{dif} = coeficiente de difusão na fase líquida ($\text{m}^2 \text{dia}^{-1}$) e

D_{dis} = coeficiente de dispersão na fase líquida ($\text{m}^2 \text{dia}^{-1}$).

O coeficiente de dispersão é dado por:

$$D_{\text{dis}} = \lambda |v| \quad (2.28)$$

onde

λ = comprimento de dispersão (m) e

$v = q / \theta$ = velocidade da água nos poros (m dia^{-1}).

O coeficiente de difusão no solo é descrito por:

$$D_{\text{dif}} = \varsigma D_0 \quad (2.29)$$

onde

ς = fator de tortuosidade (1) e

D_0 = coeficiente de difusão na água ($\text{m}^2 \text{dia}^{-1}$).

O fator de tortuosidade pode ser considerado uma função padrão da umidade volumétrica do solo, como descrito por LEISTRA (1978). Ao invés de usar a função de LEISTRA (1978), foi adotado $\varsigma \approx \theta$, o que resulta em erros relativamente pequenos, quando o solo está muito seco. De qualquer forma, o processo de difusão molecular é de baixa importância, quando comparado com o processo de dispersão, especialmente para pesticidas (BOESTEN & VAN DER LINDEN, 1991).

Para os processos de absorção e transformação do soluto, adota-se a cinética de primeira ordem. Para o processo de adsorção de pesticidas na fase sólida, supõe-se equilíbrio termodinâmico e isoterma do tipo Freundlich. Processos mais complicados, tal como transformação com cinética de segunda ordem, ou adsorção sem equilíbrio termodinâmico, não foram considerados, por dois motivos. Primeiro, para delimitar a abrangência deste trabalho, e segundo, geralmente não são disponíveis, na escala de campo, dados para processos mais complicados. Observe também que o nível de complexidade adotado nesta tese, é igual ao nível adotado por BOESTEN & VAN DER LINDEN (1991). O modelo para descrever o transporte de pesticidas, desenvolvido por estes autores, foi

adotado como modelo padrão por várias agências europeias de meio ambiente (por exemplo EMANS et al., 1992).

Com as suposições mencionadas acima, e um domínio contínuo de solo na forma de uma coluna vertical, a equação de conservação de massa do soluto é:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\frac{\partial J_L}{\partial z} - \mu c \quad (2.30)$$

onde

c = concentração mássica (g m^{-3}) e

μ = coeficiente cinético de transformação bioquímica e absorção pelas raízes (dia^{-1}).

A concentração mássica é:

$$c = \theta c_r + \rho c_s \quad (2.31)$$

onde

c_s = concentração na fase sólida (1) e

ρ = densidade aparente do solo (g m^{-3}).

A adsorção de pesticida na fase sólida do solo é descrita pela isoterma de Freundlich. Emprega-se a isoterma de Freundlich, na forma apresentada por BOESTEN & VAN DER LINDEN (1991):

$$c_s = m_{\text{om}} K_{\text{om}} c_{r,\text{ref}} \left(\frac{c_r}{c_{r,\text{ref}}} \right)^N \quad (2.32)$$

onde

m_{om} = fração mássica de massa orgânica do solo (1),

K_{om} = coeficiente de distribuição material orgânico / água ($\text{m}^3 \text{g}^{-1}$),

$c_{r,\text{ref}}$ = valor de referência de c_r (g m^{-3}) e

N = expoente de Freundlich (1).

Observe que a introdução do parâmetro $c_{r,\text{ref}}$ na eq.(2.32) elimina o problema de que o produto $m_{\text{om}} K_{\text{om}}$ apresenta uma dimensão e uma unidade que são funções de N .

Para condições de contorno e condições iniciais heterogêneas, a eq.(2.30) é geralmente resolvida com um método numérico Euleriano, tal como o método de diferenças

finitas ou o método de elementos finitos. Para as problemas unidimensionais, a versão explícita do método de diferenças finitas é o mais usado (VAN GENUCHTEN & WIERENGA, 1974). Emprega-se este método, na forma apresentada por BOESTEN & VAN DER LINDEN (1991):

$$c_i^{j+1} = c_i^j + \Delta t^j \left(\frac{\partial c}{\partial t} \right)_i^j \quad (2.33)$$

com

$$\left(\frac{\partial c}{\partial t} \right)_i^j = \frac{J_{i+1/2}^j - J_{i-1/2}^j}{\Delta z_i} - \mu_i^j c_i^j \quad (2.34)$$

$$J_{i-1/2}^j = q_{i-1/2}^j (c_r)_{i-1/2}^j - D_{i-1/2}^j \left(\frac{(c_r)_{i-1}^j - (c_r)_i^j}{\Delta z_{i-1/2}} \right) \quad (2.35)$$

$$D_{i-1/2}^j = (D^*)_{i-1/2}^j + \frac{\Delta t^j}{2} \left[\frac{(q_{i-1/2}^j)^2}{(\rho)_{i-1/2}^j \left(\frac{\partial c_s}{\partial c_r} \right)_{i-1/2}^j + \theta_{i-1/2}^j} \right] \quad (2.36)$$

$$(D^*)_{i-1/2}^j = \lambda_{i-1/2}^j |q_{i-1/2}^j| + \varsigma_{i-1/2}^j \theta_{i-1/2}^j D_0 \quad (2.37)$$

onde

$$(D^*)_{i-1/2}^j = \text{coeficiente de dispersão hidrodinâmica (m}^2 \text{ dia}^{-1}) \text{ e}$$

$$D_{i-1/2}^j = \text{coeficiente de dispersão hidrodinâmica, corrigido para a dispersão artificial (m}^2 \text{ dia}^{-1}).$$

Observe que, na eq.(2.34), diferenças finitas centralizadas são usadas, para evitar a dispersão numérica artificial. Porém, a formulação explícita na eq.(2.33) resulta em uma dispersão numérica artificial (VAN GENUCHTEN & WIERENGA, 1974). Por isso, o coeficiente de dispersão, $(D^*)_{i-1/2}^j$, é corrigido através da eq.(2.36). A eq.(2.36) foi originalmente apresentada por BOESTEN(1986). Observe também que as variáveis indicadas com $()_{i-1/2}^j$, são as médias aritméticas dos valores nos nós i-1 e i, no final do passo no tempo j. Isto é possível, porque sempre foi escolhido $z_{i-1/2} = \frac{1}{2}(z_{i-1} + z_i)$.

Os valores de $(c_r)_i^j$ são calculados iterativamente, como sugerido por BOESTEN(1986):

$$(c_r)_i^j = \frac{c_i^j}{\theta_i^j + \rho_i^j m_{om,i} K_{om,i} \left(\frac{(c_r)_i^j}{c_{r,ref}} \right)^{N-1}} \quad (2.38)$$

BOESTEN (1986) também sugeriu os seguintes limites de estabilidade, para o passo no tempo:

$$\Delta t_i^j \leq \min \left\{ \left(\Delta z_i^j \right)^2 \frac{\left(\rho \frac{\partial c_s}{\partial c_r} \right)_i^j + \theta_i^j}{2\lambda_i |q_i^j|}; i = 1, n \right\} \quad (2.39)$$

e

$$\Delta t^j \leq \min \left\{ \frac{1}{\mu_i^j}; i = 1, n \right\}. \quad (2.40)$$

Durante períodos de infiltração, isto resulta em passos no tempo de mais ou menos 0.02 dias (BOESTEN & VAN DER LINDEN, 1991).

2.2.2 Transformação bioquímica e absorção pelas raízes

A taxa específica de transformação bioquímica de pesticida no solo, é descrita através de uma equação diferencial, com cinética de primeira ordem:

$$\left(\frac{\partial c}{\partial t} \right)_{bio} = -\mu_{bio} c \quad (2.41)$$

onde

μ_{bio} = coeficiente cinético de transformação bioquímica (dia^{-1}).

O coeficiente cinético de transformação bioquímica real, é calculado da seguinte maneira (BOESTEN & VAN DER LINDEN, 1991):

$$\mu_{bio} = f_T f_\theta f_z \mu_{ref} \quad (2.42)$$

onde

f_T = fator de correção para a temperatura (1),

f_θ = fator de correção para a umidade volumétrica (1),

f_z = fator de correção para a profundidade (1) e

μ_{ref} = coeficiente cinético de transformação em condições de referência (dia^{-1}).

O fator de correção para a temperatura do solo é descrito por (BOESTEN & VAN DER LINDEN, 1991):

$$f_T = \exp[\beta_T(T - T_{ref})] \quad (2.43)$$

onde

T_{ref} = temperatura de referência do solo ($^{\circ}\text{C}$) e

β_T = parâmetro ($^{\circ}\text{C}^{-1}$).

A eq.(2.43) pode ser considerada uma aproximação numérica da equação de Arrhenius. A temperatura de referência na literatura é geralmente considerada igual a 293.15 K ou 20 $^{\circ}\text{C}$ (BOESTEN, 1986).

O fator de correção para a umidade volumétrica é descrito no modelo por (BOESTEN & VAN DER LINDEN, 1991):

$$f_{\theta} = \min\left\{1, \left(\frac{\theta}{\theta_{ref}}\right)^{\beta_{\theta}}\right\} \quad (2.44)$$

onde

θ_{ref} = umidade volumétrica de referência (1) e

β_{θ} = parâmetro (1).

A umidade volumétrica de referência é definida como a umidade que corresponde a um potencial matricial de -1.0 m.

O fator de correção para a profundidade, pode ser diferente para cada camada no modelo. Em geral, um valor igual a 1.0 é adotado para a camada agricultável, enquanto que abaixo desta camada admite-se que o seu valor diminua rapidamente.

O coeficiente cinético de transformação, nas condições de referência, pode ser obtido a partir da meia vida, através da equação:

$$\mu_{ref} = \frac{\ln(2)}{H_{ref}} \quad (2.45)$$

onde

H_{ref} = meia vida para determinadas condições de referência (dia).

A taxa específica de absorção de pesticida pelas raízes é descrita através da equação diferencial:

$$\left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_{abs} = -\mu_{abs}c_r \quad (2.46)$$

onde

μ_{abs} = coeficiente cinético de absorção pelas raízes (dia^{-1}).

Observe que a eq.(2.46) é uma função da concentração residente na fase líquida, enquanto a eq.(2.41) é uma função da concentração mássica. A absorção de pesticida pelas raízes é descrita como um processo passivo, usando-se o conceito de um fator de concentração do fluxo de transpiração (BOESTEN & VAN DER LINDEN, 1991):

$$\mu_{abs} = f_{conc}S \quad (2.47)$$

onde

f_{conc} = fator de concentração do fluxo de transpiração (1)

Somando-se as eqs.(2.41) e (2.46), obtém-se para o coeficiente cinético de absorção e transformação:

$$\mu = \mu_{bio} + \mu_{abs} \frac{c_r}{c} \quad (2.48)$$

Nesta forma, a eq.(2.48) pode ser substituída na eq.(2.34), para resolver a eq.(2.33).

3. ABORDAGEM ESTOCÁSTICA

Em condições de campo, os parâmetros físicos, químicos e biológicos, que influenciam o transporte de água e solutos, são variáveis contínuas no espaço tridimensional e no tempo. O grau de variabilidade espacial é diferente para cada parâmetro. A tabela 3.1 mostra uma ordenação do coeficiente de variabilidade espacial dos vários parâmetros de solo encontrados em campos experimentais de alguns hectares, segundo WILDING (1985).

Tabela 3.1 - Grau de variabilidade espacial dos vários parâmetros de solo, encontrados em campos experimentais de alguns hectares, adaptado de WILDING (1985).

grau de variabilidade espacial	parâmetro
menor (coeficiente de variação < 15%)	cor do solo (matiz e valor) pH do solo espessura do horizonte A teor de silte
médio (coeficiente de variação 15%-35%)	teor de areia teor de argila capacidade de troca catiônica saturação por bases estrutura de solo
maior (coeficiente de variação > 35%)	espessura do horizonte B cor de solo (croma) profundidade de lixiviação de carbonatos teor de argila fina teor matéria orgânica teor de sais solúveis condutividade hidráulica umidade volumétrica

Devido à variabilidade espacial dos parâmetros de solo, notou-se no capítulo 1 a necessidade da transformação de modelos de transporte operando na escala local, para modelos operando na escala de campo. O conhecimento desta variabilidade é geralmente limitado, o que torna uma análise detalhada do transporte, em cada ponto do campo,

impossível. Porém, mesmo com um conjunto exaustivo de dados, uma análise detalhada nem sempre é desejada. Mesmo admitindo-se que a lixiviação de pesticidas até o lençol freático possa ser considerada um processo local e relativamente rápido, a contaminação da água subterrânea é geralmente considerada um processo regional que demora décadas, antes de causar um impacto em poços, reservatórios e represas. Portanto, ao invés de calcular o fluxo de massa em cada ponto do campo e em cada momento, supõe-se que apenas os primeiros dois momentos da distribuição da lixiviação, de uma certa área, e durante um certo período, têm que ser determinados. O comprimento do período (por exemplo, 1 ano) e o tamanho da área (por exemplo, 1 ha) geralmente serão otimizados conforme os objetivos do estudo.

Com esta suposição, é possível resolver o problema de transporte com um modelo estocástico. Um modelo estocástico usa valores aleatórios como dados de entrada. Quando estes valores variam no espaço, fala-se de um campo aleatório (PAPOULIS, 1965). Neste caso, os valores podem ser caracterizados pelas suas funções de densidade de probabilidade em cada ponto da área de estudo, e pela matriz de covariância entre estes pontos. Um modelo estocástico leva estas probabilidades em conta, na hora de formular a resposta. Conseqüentemente, a resposta do modelo é probabilística, ou seja, ela apresenta a forma de uma função de densidade de probabilidade.

Na literatura, existem várias abordagens para simular a lixiviação de um soluto em um solo não-saturado. Três abordagens diferentes serão apresentadas em seguida.

3.1 MODELOS ESTOCÁSTICOS CONTÍNUOS

Modelos estocásticos contínuos tentam levar em conta a estrutura detalhada do volume onde ocorre o transporte e a sua contribuição no movimento da água e do soluto. Na maioria dos modelos estocásticos de transporte, a abordagem geral baseia-se na descrição da trajetória aleatória de uma partícula de soluto, movendo-se através de um meio n -dimensional com uma velocidade de campo aleatória (n pode ser igual a 1, 2 ou 3). O campo de velocidade $u(x, y, z)$ é um processo estocástico, geralmente estacionário no espaço e no tempo, que não depende da concentração do soluto, mas apenas da posição (x, y, z) . A velocidade em escala de campo é dividido em três componentes: (1) a velocidade média na escala de campo, (2) a flutuação da velocidade na escala de campo, e (3) um

processo Gaussiano que resume a influência de flutuações na escala microscópica. A trajetória $(x(t), y(t), z(t))$ de uma partícula que começa em $(x(0), y(0), z(0))$ é uma realização destes três processos. Este problema é geralmente muito difícil de ser resolvido, porque as velocidades dependem da trajetória $(x(t), y(t), z(t))$. Portanto, $(x(t), y(t), z(t))$ são freqüentemente substituídos por aproximações de ordens diferentes. DAGAN (1984, 1987) usou uma aproximação de primeira ordem substituindo $(x(t), y(t), z(t))$ pelos seus valores esperados. Com esta aproximação, DAGAN (1984, 1987) e outros mostraram que é possível descrever o transporte de soluto em meios porosos saturados com um modelo estocástico contínuo.

Um resultado teórico importante dos vários modelos estocásticos contínuos apresentados na literatura (i.e. DAGAN, 1984; ROTH, 1989) é que eles mostram a mesma dependência do coeficiente de dispersão no tempo. Para tempos de percurso muito pequenos, o coeficiente de dispersão aumenta linearmente com o tempo, e o processo é então convectivo-estocástico, enquanto que para tempos de percurso muito grandes ele se aproxima um valor constante, e o processo então se torna convectivo-dispersivo, conforme será apresentado na próxima seção. Isto corresponde ao que acontece na realidade, se o meio puder ser considerado homogêneo acima da escala de campo (ou seja, corresponde à situação em que qualquer tendência regional no valor médio da velocidade foi removida).

A partir do que foi descrito segue, como consequência, que a aplicação da abordagem contínua requer conhecimento da estrutura covariante dos campos de parâmetros que determinam o transporte. Como a velocidade da água depende do conteúdo de água no solo, medidas simultâneas locais da condutividade hidráulica e do potencial matricial devem ser geradas, numa ampla faixa de umidade, com resolução espacial suficiente para analisar esta estrutura. Raramente, consegue-se obter dados de experimentos de campo em tais condições. Por esta razão, a tarefa de desenvolver uma descrição estocástica contínua do transporte de água e soluto no solo não-saturado, permanece como um grande desafio.

3.2 MODELOS DE FUNÇÃO-TRANSFERÊNCIA

Se o único fator do processo de transporte a ser caracterizado, for a vazão de saída do volume de referência para o transporte (i.e. uma coluna de solo), então uma função-transferência poderá ser usada como uma alternativa para descrever o sistema através de um

modelo de processo interno. As funções-transferência são usadas para modelar sistemas complexos de uma maneira simples, caracterizando-se o fluxo de saída como uma função do fluxo de entrada. Para sistemas lineares, a transformação de um sinal de entrada arbitrário num sinal de saída, é feita através da convolução da função resposta de impulso do sistema. A função resposta de impulso define a resposta do sistema a um pulso delta de Dirac de entrada (HIMMELBLAU, 1970).

No caso especial de um soluto conservativo (não volátil, não reativo e não sorvente), os únicos modos de entrada e de saída do volume referência de transporte são através das superfícies externas. No caso do volume de transporte consistir de uma coluna de solo vertical, com superfícies de entrada e de saída em $z = 0$ e $z = z$, e a vazão de água for estacionária, a função-transferência pode ser considerada como uma distribuição do tempo de percurso ou da distância de percurso, resultando de uma aplicação na superfície ($z = 0$) do solo de um pulso de soluto na forma de uma função delta de Dirac $\delta(t)$. Nestas condições, o fluxo de concentração pode ser calculada através da convolução da condição de contorno com a função transferência (JURY, 1982), ou seja:

$$c_f(z, t) = \int_0^t c_f(0, t_0) f_f(z, t - t_0) dt_0 \quad (3.1)$$

onde

c_f = fluxo de concentração (g m^{-3}),

f_f = função-transferência do tempo de percurso (dia^{-1}) e

t_0 = tempo de aplicação do soluto (dia).

Observe que a concentração do fluxo de soluto é definida como a razão da vazão mássica do soluto e da vazão da água. O fluxo de concentração é um conceito importante, porque a lixiviação para uma certa profundidade z , é definida como:

$$L(z, t) = \int_0^t q(z, \tau) c_f(z, \tau) d\tau \quad (3.2)$$

onde

L = lixiviação (g m^{-2}) e

q = fluxo volumétrico da fase líquida no solo (m dia^{-1}).

Além do fluxo de concentração, podemos definir a concentração residente do soluto, o que é a massa do soluto por volume. Observe que as concentrações usadas nos modelos

determinísticos do capítulo 2, sempre foram concentrações residentes. Sob as mesmas condições, pode-se usar a função-transferência da distância de percurso, para calcular a concentração residente, como segue:

$$c_r(z, t) = \int_0^z c_r(z - \zeta, 0) f_r(\zeta, t) d\zeta \quad (3.3)$$

onde

c_r = concentração residente (g m^{-3}) e

f_r = função-transferência de distância de percurso (m^{-1}).

Dependendo das suposições formuladas para o modelo do processo, soluções diferentes para as distribuições do tempo de percurso, ou da distância de percurso, podem ser obtidas. Para definir o modelo do processo em termos da sua distribuição do tempo de percurso, JURY (1982) usou a seguinte hipótese:

“Para um volume referência de transporte que possui propriedades médias homogêneas ao longo do seu comprimento, a probabilidade de que uma molécula de soluto adicionada em $t = 0$ na entrada $z = 0$ atinja a profundidade z num tempo τ menor ou igual a t , é a mesma que a probabilidade de ela atingir uma profundidade Z no tempo τ menor ou igual a tZ/z ” (JURY, 1982 apud JURY & ROTH, 1990, p. 40).

Esta afirmação de probabilidade para os tempos de percurso, corresponde fisicamente a um volume referência de transporte, onde as moléculas mais rápidas e mais lentas do soluto se movem de maneira a ficarem isoladas dos seus vizinhos, como se estivessem dentro de tubos de fluxo que não podem comunicar-se entre si.

Um modelo que obedece esta suposição é o modelo convectivo-estocástico lognormal que foi proposto primeiramente por JURY (1982) para solutos conservativos. Este modelo usa uma distribuição lognormal, para o tempo de percurso, com coeficientes $\mu_t(z)$ e $\sigma_t(z)$ que não dependem da distância de percurso, mas são definidos para uma distância de referência $z = Z$. Da mesma forma, pode-se definir uma distribuição lognormal para a distância de percurso (JURY & ROTH, 1990, p. 56).

No modelo convectivo-dispersivo, apresentado no capítulo 2, a mistura lateral de soluto entre regiões de fluxos de água diferentes, ocorre em um período mais curto do que o tempo que o soluto leva para mover-se da entrada até a saída de um volume referência de transporte (TAYLOR, 1953). Portanto, o modelo convectivo-dispersivo é diametricamente oposto a hipótese de JURY (1982), onde as moléculas mais rápidas e mais lentas do soluto se movem de uma maneira isoladas em relação aos seus vizinhos.

A função-transferência do tempo de percurso, pode também ser derivada para um processo convectivo-dispersivo, conforme será feito, em seguida. Para o escoamento de água no estado estacionário, através de um meio com um conteúdo de água uniforme, PARKER & VAN GENUCHTEN (1984) mostraram que a equação de convecção-dispersão também pode ser expressa em termos da concentração do fluxo, ou seja:

$$\frac{\partial c_f}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c_f}{\partial z^2} - v \frac{\partial c_f}{\partial z} \quad (3.4)$$

com

$$D = \lambda |v| \quad (3.5)$$

$$v = \frac{q}{\theta} \quad (3.6)$$

onde

θ = teor de umidade do solo (1),

v = velocidade da água nos poros (m dia⁻¹),

D = coeficiente de dispersão hidrodinâmica (m² dia⁻¹) e

λ = comprimento de dispersão (m).

Observe que na eq.(3.5) a difusão molecular é considerada desprezível. A partir da eq.(3.4), a função-transferência do tempo de percurso, para um processo convectivo-dispersivo, pode ser derivada, usando-se a transformada de Laplace (JURY & ROTH, 1990, p. 31) e as seguintes condições iniciais e de contorno:

$$c_f(z,0) = 0 \quad (3.7a)$$

$$c_f(0,t) = \frac{m_0}{q} \delta(t) \quad (3.7b)$$

$$c_f(\infty,t) = 0 \quad (3.7c)$$

onde

$\delta(t)$ = função delta de Dirac.

Da mesma maneira, a função-transferência da distância de percurso, para um processo convectivo-dispersivo, pode ser derivada, usando-se as seguintes condições iniciais e de contorno:

$$c_r(z,0) = 0 \quad (3.8a)$$

$$\begin{cases} c_r(0,t) = \frac{m_0}{q} \delta(z) & ; z \in \langle -\infty, \infty \rangle \\ v c_r(0,t) - D \frac{\partial c_r(0,t)}{\partial z} = \frac{m_0}{\theta} \delta(z) & ; z \in \langle -\infty, 0 \rangle \end{cases} \quad (3.8b)$$

$$\frac{\partial c_r(\infty,t)}{\partial z} = 0 \quad (3.8c)$$

Observe que para um processo convectivo-dispersivo, a condição de contorno para $z = 0$ é diferente para um perfil infinito, $z \in \langle -\infty, \infty \rangle$, e um perfil semi-infinito, $z \in \langle -\infty, 0 \rangle$. A condição para um perfil semi-infinito é geralmente preferida, quando o soluto é aplicado na superfície do perfil de solo.

A tabela 3.2 mostra as funções-transferência, e os seus momentos, para o modelo convectivo-estocástico lognormal e o modelo convectivo-dispersivo. Os momentos são facilmente derivados, relacionando-se o n -ésimo momento à n -ésima derivada da transformada de Laplace da sua função transferência (JURY & ROTH, 1990, p. 34). A média e a variância podem ser usadas para analisar as diferenças entre o modelo convectivo-estocástico lognormal e o modelo convectivo-dispersivo. Comparando-se as eqs.(3.11) e (3.14), nota-se uma diferença real na maneira em que o soluto se move segundo os dois modelos. O modelo convectivo-dispersivo prevê que o fluxo de dispersão deveria ser proporcional à primeira potência da distância, enquanto que os modelos baseados na hipótese de JURY (1982), prevêem que os tempos de percurso do soluto dispersam-se a um fluxo proporcional ao quadrado da distância a partir da entrada. Se fosse necessário que testar o modelo convectivo-dispersivo num sistema que comporta-se segundo a hipótese de JURY (1982), ele poderia ser manipulado para concordar com a distribuição do tempo de percurso em alguma profundidade, mas pareceria como se o seu coeficiente de dispersão D aumentasse linearmente com a distância, a partir da fonte de entrada do soluto. Este fenômeno, que tem sido freqüentemente observado em solos no campo (BUTTERS & JURY, 1989) e em colunas de solo de laboratório (KHAN & JURY, 1990), é as vezes chamado de “efeito de escala de dispersão” (FRIED, 1975).

Tabela 3.2 - As funções-transferência, e os seus momentos, para o modelo convectivo-estocástico lognormal e o modelo convectivo-dispersivo (JURY & ROTH, 1990); Z = profundidade de referência (m); T = tempo de referência (dia); $\mu_t(z)$, $\sigma_t(z)$ = coeficientes da distribuição lognormal (1) para a profundidade z.

modelo convectivo-estocástico lognormal	modelo convectivo-dispersivo
tempo de percurso	
$f_f(z, t) = \frac{\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\ln(tZ/z) - \mu_t(Z)}{\sigma_t(Z)}\right)^2\right]}{\sqrt{2\pi} \sigma_t(Z) t} \quad (3.9)$	$f_f(z, t) = \frac{z}{\sqrt{4\pi Dt^3}} \exp\left[-\frac{(z-vt)^2}{4Dt}\right] \quad (3.12)$
$E\{t(z)\} = \frac{z}{Z} E\{t(Z)\} \quad (3.10)$	$E\{t(z)\} = \frac{z}{Z} E\{t(Z)\} = \frac{z}{v} \quad (3.13)$
$\text{Var}\{t(z)\} = \left(\frac{z}{Z}\right)^2 \text{Var}\{t(Z)\} \quad (3.11)$	$\text{Var}\{t(z)\} = \frac{z}{Z} \text{Var}\{t(Z)\} = \frac{2Dz}{v^3} \quad (3.14)$
distância de percurso, perfil infinito	
$f_r(z, t) = \frac{\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\ln(tZ/z) - \mu_t(Z)}{\sigma_t(Z)}\right)^2\right]}{\sqrt{2\pi} \sigma_t(Z) z} \quad (3.15)$	$f_r(z, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left[-\frac{(z-vt)^2}{4Dt}\right] \quad (3.18)$
$E\{z(t)\} = \frac{t}{T} E\{z(T)\} \quad (3.16)$	$E\{z(t)\} = \frac{t}{T} E\{z(T)\} = vt \quad (3.19)$
$\text{Var}\{z(t)\} = \left(\frac{t}{T}\right)^2 \text{Var}\{z(T)\} \quad (3.17)$	$\text{Var}\{z(t)\} = \frac{t}{T} \text{Var}\{z(T)\} = 2Dt \quad (3.20)$
distância de percurso, perfil semi-infinito	
idem ao perfil infinito	$f_r(z, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi Dt}} \exp\left[-\frac{(z-vt)^2}{4Dt}\right] - \frac{v}{2D} \exp\left[\frac{vz}{D}\right] \text{erfc}\left[\frac{z+vt}{\sqrt{4Dt}}\right] \quad (3.21)$
	$E\{z(t)\} \approx vt + \frac{D}{v} ; \frac{ v \sqrt{t}}{2\sqrt{D}} \gg 1 \quad (3.22)$
	$\text{Var}\{z(t)\} \approx 2Dt - 3\left(\frac{D}{v}\right)^2 ; \frac{ v \sqrt{t}}{2\sqrt{D}} \gg 1 \quad (3.23)$

SIMMONS (1982) propôs chamar qualquer processo que obedeça a eq.(3.11) de processo *convectivo-estocástico*, e aquele que obedeça a eq.(3.14) de processo *convectivo-dispersivo*.

Foi mostrado que os processos convectivo-dispersivo e convectivo-estocástico representam situações extremas em termos da dispersão do soluto. Além disto, eles representam situações extremas em termos da correlação entre os tempos de percurso nas camadas de solo (JURY & ROTH, 1990, p. 93). Por exemplo, em um solo com n camadas idênticas até a profundidade $z = n \Delta z$, pode-se escrever, para um processo convectivo-estocástico, segundo as eqs.(3.10) e (3.11):

$$E\{t(z)\} = \frac{z}{\Delta z} E\{\Delta t\} = n E\{\Delta t\} = \sum_{i=1}^{i=n} E\{\Delta t_i\} \quad (3.24)$$

$$\text{Var}\{t(z)\} = \left(\frac{z}{\Delta z}\right)^2 \text{Var}\{\Delta t\} = n^2 \text{Var}\{\Delta t\} = \sum_{i=1}^{i=n} \sum_{j=1}^{j=n} \sqrt{\text{Var}\{\Delta t_i\} \text{Var}\{\Delta t_j\}} \quad (3.25)$$

onde

$t(z)$ = tempo de percurso para a profundidade z (dia).

Segundo a eq.(A.10), isto implica que $\rho\{\Delta t_i, \Delta t_j\} = 1$. Portanto, os tempos de percurso em um processo convectivo-estocástico estão perfeitamente correlacionados.

Para um processo convectivo-estocástico, na mesma situação, pode-se escrever, segundo as eqs.(3.13) e (3.14):

$$E\{t(z)\} = \frac{z}{\Delta z} E\{\Delta t\} = n E\{\Delta t\} = \sum_{i=1}^{i=n} E\{\Delta t_i\} \quad (3.26)$$

e

$$\text{Var}\{t(z)\} = \frac{z}{\Delta z} \text{Var}\{\Delta t\} = n \text{Var}\{\Delta t\} = \sum_{i=1}^{i=n} \text{Var}\{\Delta t_i\}. \quad (3.27)$$

Segundo a eq.(A.10), isto implica que $\rho\{\Delta t_i, \Delta t_j\} = 0$. Portanto, os tempos de percurso em um processo convectivo-dispersivo não estão correlacionados. Observe que isto já foi constatado no capítulo 2, onde um processo convectivo-dispersivo foi descrito como um processo estocástico tipo Wiener, ou seja, “sem memória”.

Quando o conteúdo de água quase não se altera ao mudar-se o fluxo de água para um novo valor constante entre $z = 0$ e $z = z$, a saída do soluto para qualquer vazão de água parecerá exatamente igual quando representada graficamente em função da drenagem cumulativa. Ou seja, se o escoamento de água for constante entre $z = 0$ e $z = z$, o parâmetro

tempo, t , na eq.(3.1) também pode ser substituído pela drenagem cumulativa (ou infiltração cumulativa), $I(t)$, definida como:

$$I(t) = \int_0^t q(t) dt. \quad (3.28)$$

Com esta substituição, e empregando-se o modelo convectivo-estocástico lognormal para a distribuição do tempo de percurso, a eq.(3.1) foi estendida por JURY et al. (1990), para descrever o transporte de soluto sob várias condições, incluindo adsorção linear, transformação e escoamento transiente de água.

Na abordagem de JURY et al. (1990), a drenagem cumulativa é definida na escala do “pedon”. Este “pedon” é usado como “pedon” de referência para um dado “pedotop”. Em outras palavras, a drenagem cumulativa é considerada um processo determinístico (veja o capítulo 2). A média e a variância do tempo de percurso do soluto, na escala de “pedotop”, são consideradas funções dependentes da drenagem cumulativa do “pedon” de referência. Esta dependência pode ser determinada, quando a drenagem cumulativa, o tempo de percurso médio, e a variância do tempo de percurso do soluto, são medidas simultaneamente. Por exemplo, BUTTERS & JURY (1989) usaram um lisímetro para medir a drenagem e extratores de solução de solo para medir a dispersão do traçador Brometo em um campo de alguns hectares.

A suposição de que o conteúdo de água quase não se altera ao mudar-se o fluxo de água para um novo valor constante, também implica que a variância no tempo de percurso neste modelo não depende do fluxo de água e/ou da umidade do solo. Estas suposições são apenas razoáveis para solos não-expansivos, de textura grossa, e sem fluxo de água em macroporos (WIERENGA, 1977; KHAN, 1988). Além disto, o modelo de JURY et al. (1990) entra em dificuldades quando a ascensão capilar não é mais desprezível, o que poderia resultar em valores para $I(t)$ muito baixos, zero, ou mesmo negativos.

3.3 MODELOS DE COLUNAS INDEPENDENTES

As abordagens apresentadas nas seções 3.1 e 3.2 são, de certa forma, abordagens opostas. Os modelos estocásticos contínuos tentam levar em conta a estrutura detalhada do volume de transporte e a sua contribuição no movimento da água e do soluto. Por outro lado, os modelos convectivo-estocásticos consideram o sistema como uma “caixa preta”,

com a vazão de saída do volume referência de transporte como o único fator do processo de transporte a ser caracterizado. Comparando-se as duas abordagens, pode-se argumentar que a primeira abordagem é complicada demais do ponto de vista prático, enquanto a segunda abordagem é simples demais do ponto de vista teórico. Admite-se, neste trabalho, que a terceira abordagem, a ser apresentada nesta seção, congrega um compromisso atraente tanto do ponto de vista teórico como do ponto de vista prático.

Na terceira abordagem, o processo de transporte no solo em uma escala de campo é modelado, usando-se uma teoria de processo local, tal como uma solução de uma equação diferencial, para representar o movimento de água e soluto em um dado tubo de fluxo. Cada tubo é isolado dos tubos adjacentes no campo (ou seja, não há troca de soluto). A concentração do soluto no tubo de fluxo é geralmente expressa unidimensionalmente como uma função de profundidade e tempo, de forma que os tubos sejam tratados como colunas de solo paralelas. A concentração média do soluto, na escala de campo, é gerada assumindo-se que os parâmetros do modelo local sejam variáveis aleatórias, descritos por distribuições de probabilidade.

DAGAN & BRESLER (1979) foram os primeiros a introduzir o conceito de colunas independentes. Um estudo mais recente por PROTOPAS & BRAS (1991), indica que a suposição de escoamento essencialmente vertical num solo heterogêneo, pode ser aplicável para muitas situações de campo. Além do mais, esta suposição é também sustentada por estudos de campo (BUTTERS & JURY, 1989; ELLSWORTH et al., 1991) e simulações (RUSSO, 1991).

A aplicação deste conceito para fenômenos de transporte em solos é razoável, considerando-se o fato de que as distâncias de percurso verticais são geralmente pequenas (da ordem de 10^0 a 10^1 m), quando comparadas com a largura e o comprimento de um “pedotop” (10^2 m, ou mais). Para estas distâncias de percurso verticais, a distância máxima de mistura lateral, devido a um processo convectivo-dispersivo, é relativamente pequena, da ordem de 10^0 m (RUSSO, 1991). Portanto, um corpo de solo tridimensional pode ser representado por um conjunto de colunas verticais, onde as colunas apresentam uma largura maior do que a distância máxima de mistura lateral. Mesmo assim, a representação do solo como um conjunto de colunas independentes ainda apresenta algumas dificuldades teóricas. As três dificuldades mais importantes serão apresentadas à seguir.

A primeira dificuldade está relacionada com a suposição de que os fluxos são independentes e essencialmente verticais. Isto nem sempre é válido, quando existe uma grande variação nas propriedades hidráulicas, ao longo do perfil (RUSSO, 1991). A solução, neste caso, é aumentar a largura das colunas, até o fluxo lateral entre as colunas torna-se desprezível. Isto significa que a densidade do fluxo de massa em cada coluna deve ser a mesma, na média, quando um soluto é aplicado igualmente na superfície do solo. WARD et al. (1995) usaram este critério para determinar a largura dos tubos de fluxo verticais, observados em um campo experimental. Porém, quanto mais larga a coluna, menor a probabilidade de encontrar um processo convectivo-dispersivo unidimensional dentro da coluna.

Para descrever o transporte em colunas de solo que não apresentam um processo convectivo-dispersivo unidimensional, surgiram recentemente os modelos determinísticos do tipo “multi-região” (WILSON et al., 1992; HUTSON & WAGENET, 1995). Estes modelos dividem uma coluna de solo em várias regiões com propriedades hidrodinâmicas diferentes. Acredita-se que a aplicação de modelos do tipo multi-região a um conjunto de colunas paralelas, é um dos caminhos mais promissoras para o futuro. Infelizmente, uma apresentação deste tipo de modelo não cabe dentro dos objetivos desta tese. Portanto, supõe-se que o transporte local possa ser adequadamente descrito pelos modelos determinísticos, apresentados no capítulo 2.

A segunda dificuldade teórica, está relacionada com a condição de contorno na superfície do solo. Para terrenos planos, a água que não infiltra no solo fica na superfície, formando-se uma camada de água. Neste caso, a suposição de um conjunto de colunas sem interação é razoável. Porém, para um terreno com declive, esta suposição torna-se menos válida, porque o excesso de água de áreas de baixa infiltração pode escorrer para áreas de alta infiltração. Para incluir este processo de redistribuição de água na superfície do solo, SMITH & HEBBERT (1979) introduziram o conceito de “runon”, ou seja, o escoamento superficial que *entra* em uma determinada área de infiltração. Este conceito foi usado, por exemplo, no modelo hidrológico conhecido SHE (Système Hydrologique Européen) de ABBOTT et al. (1986).

O processo de redistribuição de água na superfície do solo torna-se mais complicado ainda, quando o declive não é uniforme, mas côncavo ou convexo. Cada declive côncavo ou convexo, em combinação com a heterogeneidade do solo, causa a convergência ou a divergência do fluxo de água no solo. Existem ainda dificuldades na simulação deste processo (KÚTILEK & NIELSEN, p. 331). Nesta tese supõe-se que o escoamento superficial do tipo “runon” é desprezível.

A terceira dificuldade é a descrição das propriedades hidrodinâmicas do solo, para cada coluna. Geralmente, apenas a condutividade hidráulica saturada é considerada como uma variável aleatória dentro do conjunto de colunas de solo, enquanto as curvas de retenção de água e condutividade hidráulica não-saturada são consideradas constantes. Na realidade, estas curvas também são variáveis aleatórias e isto influencia o fluxo de água e solutos no solo. Porém, a medição da variação espacial destas curvas, para uma área extensa de estudo, é geralmente difícil. A situação torna-se mais complicada ainda, considerando-se que o impacto de gotas de chuva, e outras influências climatológicas, podem resultar na formação de uma crosta na superfície do solo, com propriedades hidrodinâmicas diferentes das propriedades do resto do perfil.

Nesta tese, apenas a condutividade saturada e a umidade volumétrica saturada são consideradas variáveis aleatórias. Os outros parâmetros hidráulicos do solo são considerados determinísticos. Isto significa que as curvas de retenção de água e de condutividade hidráulica não-saturada são escalonadas, conforme os valores locais para a umidade volumétrica saturada e a condutividade hidráulica saturada, respectivamente. A formação de uma crosta na superfície do solo não é considerada.

O problema de transporte de água e soluto para um conjunto de colunas paralelas de solo, pode ser resolvido com vários métodos. Os dois métodos mais usados, serão apresentados a seguir.

3.3.1 Modelos convectivo-estocásticos

Quando a dispersão hidrodinâmica dentro de uma coluna é considerada desprezível, ou aproximada por um processo convectivo-estocástico local, o transporte de soluto em um conjunto de colunas de solo independentes, pode ser descrito como um processo estocástico-

dispersivo. Isto é conhecido como a abordagem convectiva-estocástica (SIMMONS, 1982). Quando os parâmetros aleatórios são extraídos da mesma função de densidade de probabilidade, um modelo de função transferência pode ser usado para calcular o transporte no conjunto de colunas (JURY & SCOTTER, 1994). Portanto, matematicamente, a abordagem convectiva-estocástica é uma generalização da abordagem baseada na função transferência, apresentada na seção 3.2.

Na abordagem convectiva-estocástica, cada coluna de solo independente apresenta uma velocidade de percurso unidimensional diferente. Este conjunto de velocidades é geralmente definido através de uma única função de densidade de probabilidade. A massa de soluto é conceitualmente dividida em parcelas. Cada parcela é transportada em uma coluna de solo diferente e, portanto, está sujeita a uma velocidade diferente. Esta velocidade de percurso pode ser definida de duas maneiras, segundo SIMMONS (1986). Dentro do conceito Euleriano, a velocidade de uma parcela k , observada por um observador imóvel, é definida como:

$$u_t^k(s) = \left(\frac{dt^k(s)}{dz} \right)^{-1} \quad (3.29)$$

onde

t^k = tempo de percurso da parcela k (dia).

Dentro do conceito Lagrangeano, a velocidade de uma parcela k , observada por um observador móvel, é definida como:

$$u_z^k(t) = \frac{dz^k(t)}{dt} \quad (3.30)$$

onde

z^k = posição da parcela k (m).

Observe que, por definição, $u_t^k(s^k(t)) = u_z^k(t)$ e $u_z^k(t^k(s)) = u_t^k(s)$. No caso em que a velocidade é uma variável aleatória, pode-se definir duas velocidades médias diferentes (JURY & ROTH, 1989, p. 57). As velocidades médias Euleriana e Lagrangeana são definidas como:

$$\bar{u}_t^k(s) = \left(\frac{d E \{ t^k(s) \}}{dz} \right)^{-1} \quad (3.31)$$

e

$$\bar{u}_z^k(t) = \frac{d E \{ z^k(t) \}}{dt}, \quad (3.32)$$

respectivamente. Observe que para a velocidade média, não necessariamente $\bar{u}_t^k(s^k(t))$ é igual a $\bar{u}_z^k(t)$, ou $\bar{u}_z^k(t^k(s))$ é igual a $\bar{u}_t^k(s)$.

Quando a densidade do fluxo de água dentro de cada coluna de solo é uniforme e estacionária, uma solução analítica ou semi-analítica é geralmente possível, baseada na função de densidade de probabilidade da velocidade de percurso. As primeiras soluções analíticas da abordagem convectiva-estocástica foram publicadas por DAGAN & BRESLER (1979), BRESLER & DAGAN (1979), DAGAN & BRESLER (1983) e BRESLER & DAGAN (1983ab). SIMMONS et al. (1995) apresentaram uma revisão das várias linhas de pesquisa, em relação à abordagem convectiva-estocástica.

A limitação principal dos modelos analíticos e semi-analíticos é a suposição de um fluxo de água estacionário e uniforme. No caso dos pesticidas biodegradáveis, a massa residual que atinge o lençol frático, depende da velocidade de percurso em cada horizonte e da taxa de transformação bioquímica em cada horizonte do perfil do solo. Portanto, para estimar a massa residual do pesticida, é necessário simular a profundidade do pesticida no solo, em função do tempo. Devido à variação no tempo da velocidade de percurso em solos no campo, o uso de um modelo estacionário introduz um erro na estimativa para a distância de percurso do pesticida. Este erro, por sua vez, pode introduzir um erro grande na massa residual do pesticida. Portanto, do ponto de vista prático, a abordagem semi-analítica não apresenta uma opção viável, para a simulação da lixiviação de pesticidas.

3.3.2 Simulações Monte Carlo

O método Monte Carlo pode ser usado para a solução do problema de transporte para um conjunto de colunas de solo independentes, tanto para condições estacionárias, quanto para condições não-estacionárias. O uso do método Monte Carlo nas ciências ambientais, foi introduzido por FREEZE (1975). O trabalho envolve gerações seqüenciais de

parâmetros de entrada de um modelo determinístico e soluções determinísticas subsequentes da equação do modelo para cada realização dos parâmetros de entrada. Como cada solução é uma resposta igualmente provável do sistema, a função de densidade de probabilidade dos dados de saída reflete as propriedades estocásticas da previsão do modelo.

Quando o método Monte Carlo é aplicado a um conjunto de colunas de solo independentes com múltiplos parâmetros aleatórios correlacionados, devem ser adotados os seguintes passos:

1. geração de um valor aleatório com uma distribuição uniforme entre 0.0 e 1.0, para cada parâmetro aleatório de um modelo determinístico de transporte (PRESS et al., 1994, p. 266),
2. transformação dos valores aleatórios uniformes em valores aleatórios Gaussianos, utilizando-se o método de Box-Muller (PRESS et al., 1994, p. 279),
3. incorporação das correlações entre os valores aleatórios transformados no passo anterior (LAW & KELTON, 1991, p. 504),
4. transformação dos valores aleatórios com a distribuição normal padrão em valores aleatórios com as distribuições apropriadas (LAW & KELTON, 1991, p. 465),
5. simulação do transporte de água e soluto com o modelo determinístico, usando-se os valores amostrados dos parâmetros aleatórios (veja os capítulos 4 e 5), e
6. determinação dos primeiros dois momentos da distribuição espacial da lixiviação (veja o apêndice A).

Uma vez que a interação entre as colunas é considerada desprezível, cada solução do modelo (passo 5) é uma resposta independente e igualmente provável do sistema. Para n amostras estatisticamente idênticas e independentes, a média e a variância de amostragem podem ser estimadas através das eqs.(A.17) e (A.18). Portanto, pode-se usar estas duas equações para calcular a média e a variância da distribuição espacial da lixiviação, no passo 6.

O problema principal do método Monte Carlo é o grande esforço computacional envolvido na geração da distribuição dos parâmetros de saída. Porém, existem duas técnicas para tornar o método Monte Carlo mais atraente:

- amostragem eficiente de valores aleatórios e

- aplicação de técnicas numéricas muito rápidas, para simular o transporte local.

Para uma amostragem eficiente de valores aleatórios, a técnica de “amostragem Latin Hypercube”, daqui em diante chamada de “ALH”, é uma boa opção. Esta técnica usa uma amostragem estratificada dos vários parâmetros aleatórios, baseada em uma divisão do alcance de cada parâmetro em n intervalos com probabilidade igual. A amostragem de um valor em cada intervalo, resulta em n amostras para cada parâmetro. As amostras do primeiro parâmetro são combinadas randômicamente com as amostras do segundo parâmetro. Em seguida, estas combinações são combinadas randômicamente de novo, com as amostras do terceiro parâmetro, etc. O resultado final é uma coleção de n combinações de m parâmetros. Esta coleção é a “amostra Latin Hypercube” (MCKAY et al., 1979; IMAN & CONOVER, 1980).

Usando-se certas restrições durante a combinação das amostras individuais, é possível incorporar correlações e também evitar correlações ilegítimas causadas pela ALH (IMAN & CONOVER, 1982). Usando-se a ALH, o valor para n pode ser pequeno; $n > m 4/3$ é suficiente, em geral (IMAN & HELTON, 1985). Foi provado por STEIN (1987), que o uso da ALH resulta em estimativas eficientes de várias características estatísticas (i.e. a média e a variância) da distribuição dos parâmetros de saída. Recentemente, apareceram pacotes de software no mercado que fazem a ALH, tal como UNCSAM (i.e. “UNCertainty analysis by Monte Carlo SAMpling techniques”) de JANSSEN et al. (1994).

AMOOZEGAR-FARD et al. (1982) combinaram o método Monte Carlo com uma solução analítica para a equação de convecção-dispersão, para obter várias distribuições de concentração do soluto, quando afetadas por variabilidades na velocidade da água dentro dos poros e no coeficiente de dispersão. Porém, o uso de uma solução analítica somente permite um fluxo de água uniforme e estacionário. Para condições não-estacionárias e/ou não uniformes, precisa-se usar soluções numéricas para o modelo local de transporte de água e solutos.

Mesmo com uma amostragem estratificada, o método Monte Carlo torna-se pouco eficiente quando o transporte é calculado com um modelo numérico convencional, tal como os modelos numéricos apresentados no capítulo 2. Vários modelos numéricos rápidos foram apresentados na literatura, a maioria baseado em certas simplificações do processo de

transporte (ADDISCOTT, 1977; NICOLLS et al., 1982; HUTSON & WAGENET, 1993). Nestes modelos, o transporte de água e solutos apenas depende de considerações de balanço de massa e algumas suposições empíricas. Uma das suposições empíricas mais comuns, por exemplo, é que o processo de drenagem dentro do perfil de solo termina dentro de um dia (HUTSON & WAGENET, 1993). Este tipo de solução é geralmente considerado menos confiável do que uma solução numérica convencional (ADDISCOTT & WAGENET, 1985). Além disto, no caso da lixiviação de pesticidas, geralmente existe uma grande diferença entre as respostas dos vários modelos, devido às suposições empíricas diferentes de cada modelo (PERSICANI, 1993).

Em conclusão, existe uma necessidade para o desenvolvimento de técnicas numéricas rápidas que, na escala de campo, atinjam a mesma precisão que as técnicas numéricas convencionais. O desenvolvimento de técnicas numéricas rápidas para condições não-estacionárias, não-uniformes, e em um perfil de solo heterogêneo, é o objetivo principal desta tese e é o assunto dos próximos dois capítulos.

4. DESENVOLVIMENTO DE MODELOS DE FLUXO DE ÁGUA

Este capítulo trata do desenvolvimento de técnicas numéricas rápidas para calcular o fluxo unidimensional de água em meios porosos não-saturados. No caso especial da lixiviação de solutos em solos, a aplicação das técnicas desenvolvidas envolveu um modelo de colunas independentes.

BLACK et al. (1969) e GARDNER (1973, 1974), entre outros autores, introduziram o conceito de simulação descontínua para calcular o fluxo de água no solo. A simulação descontínua é uma técnica numérica que otimiza o tempo gasto no computador através do uso de passos variáveis no tempo. O comprimento do passo é determinado por eventos no tempo como, por exemplo, o começo de um intervalo de chuva. Em geral, três tipos de intervalos no tempo podem ser considerados, ou seja: períodos de infiltração, de redistribuição e de evaporação, conforme ilustrado na figura 4.1. Durante um intervalo, as condições meteorológicas são geralmente consideradas constantes, enquanto os fluxos de água no interior e na superfície do solo são descritos por modelos relativamente simples. Isto resulta na simulação eficiente dos processos de infiltração, redistribuição e evaporação.

Dentro do conceito de simulação descontínua, existem várias abordagens na literatura. Por exemplo, o fluxo de redistribuição (ou “fluxo de drenagem”) pode ser calculado utilizando-se um modelo empírico (BLACK et al., 1969), considerado constante (LAAT, 1980) ou instantâneo (KIM et al., 1996).

BRESLER & DAGAN (1983a) mostraram a possibilidade de usar modelos empíricos na escala local, para calcular o fluxo médio de infiltração na escala de campo em um modelo de colunas independentes. O modelo empírico usado por BRESLER & DAGAN (1983a) não apresentou um desvio sistemático na infiltração, mas não levou em conta os processos de evaporação e transpiração. MILLY (1989) desenvolveu um modelo descontínuo para simular o fluxo de água e calor em solos, e incluiu o processo de

evaporação. Porém, o modelo não leva em conta a absorção de água pelas raízes e, portanto, serve apenas para solos descobertos. KIM et al. (1996) apresentaram um modelo descontínuo com uma descrição completa do processo de evapotranspiração. Porém, o fluxo de redistribuição foi considerado instantâneo. Devido a esta suposição, este modelo torna-se inadequado para a simulação do transporte de pesticidas, porque não é possível estimar, com boa precisão, o tempo que o pesticida demora para atingir uma certa profundidade.

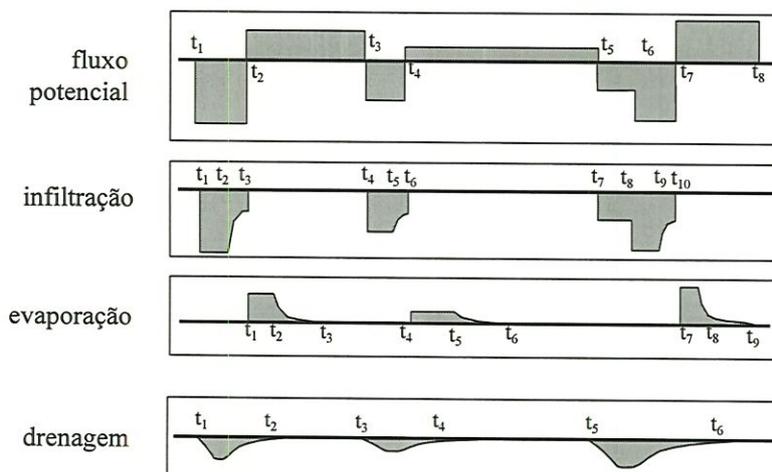


Figura 4.1 - Exemplo de um conjunto de séries temporais, simuladas por um modelo descontínuo, com períodos de infiltração, de redistribuição e de evaporação. Os eventos no tempo são indicados por t_1 , t_2 , etc. A condição de contorno é o fluxo potencial; negativo durante períodos de infiltração e positivo durante períodos de evaporação.

O objetivo deste capítulo é desenvolver e apresentar um modelo descontínuo que leva em conta a evaporação na superfície do solo, a absorção de água pelas raízes e o processo de redistribuição. O modelo descontínuo desenvolvido usa o algoritmo de diferenças finitas de RATHFELDER & ABRIOLA (1994), apresentado na seção 2.1.1, para calcular o fluxo interno de água (i.e. drenagem e ascensão capilar). Em adição, o modelo usa o método de FEDDES et al. (1978), apresentado na seção 2.1.2, para calcular a evapotranspiração real.

O modelo foi programado para fazer simulações descontínuas através do uso de passos variáveis no tempo. Existem várias técnicas para otimizar o passo no tempo (HAVERKAMP, 1977; HORNUNG, 1977). Neste caso, o comprimento do passo no tempo é ajustado em função do número de iterações Picard necessárias para satisfazer as eqs.(2.13) e (2.14). Isto significa que vários passos no tempo são necessários entre dois eventos. Portanto, mesmo com passos variáveis no tempo, e mesmo com o algoritmo sofisticado de

RATHFELDER & ABRIOLA (1994), o modelo numérico demora para fazer as simulações. Isto, em geral, torna inviável o seu uso em simulações do tipo Monte Carlo. Neste capítulo, serão apresentadas várias técnicas para tornar o modelo mais rápido.

4.1 OTIMIZAÇÃO DO VALOR MÉDIO DA CONDUTIVIDADE HIDRÁULICA

Devido às funções não-lineares de retenção de água e de condutividade hidráulica, a equação de Richards (i.e. a eq.(2.4)) torna-se altamente não-linear. Esta é a razão principal para a demora na convergência das soluções numéricas. Para resolver o problema da não-linearidade, várias transformações da variável dependente da equação de Richards foram propostas na literatura, como mostrado recentemente em PAN & WIERENGA (1997).

O esforço computacional de um modelo numérico está diretamente relacionado à distância entre os nós no modelo. Além disto, quanto menor os passos no espaço, menor os passos no tempo, o que também aumenta o esforço computacional. Portanto, um modelo numérico torna-se muito mais rápido, quando a distância entre os nós é aumentada. Infelizmente, um modelo numérico com distâncias grandes entre os nós, geralmente apresenta um grande erro nos fluxos simulados, devido ao erro no valor médio da condutividade hidráulica e do gradiente hidráulico entre os nós. Embora as transformações mencionadas acima melhorem a convergência do modelo, elas não consideram estes erros fundamentais. Portanto, as técnicas baseadas em uma transformação de variável dependente, não necessariamente apresentam uma precisão maior.

Resumindo, a questão principal é como é possível aumentar a distância entre os nós, sem aumentar o erro na densidade do fluxo de água. Matematicamente, o problema pode ser colocado como segue. Supõe-se que o fluxo de água é unidimensional, na direção do vetor $\bar{s} = (s_x, s_y, s_z)$, que não é necessariamente vertical. A distância ao longo deste vetor, chama-se de s . O uso do vetor \bar{s} permite endereçar o problema para um meio poroso tridimensional, sem necessidade de se usar uma notação vetorial. Supõe-se que o fluxo unidimensional de água na direção \bar{s} é dada por $q(s)$. Agora, a equação de Darcy-Buckingham (veja a eq.(2.1)), para uma distância s no vetor \bar{s} , pode ser escrita como:

$$q(s) = -K_{s,h}(s, h) \left(\frac{dh}{ds} + \frac{dz}{ds} \right) \quad (4.1)$$

onde

$K_{s,h}$ = condutividade hidráulica em função da distância e do potencial matricial (m dia⁻¹).

A eq.(4.1) é válida para qualquer distância s em um meio poroso saturado ou não-saturado. Porém, em um modelo numérico de diferenças finitas, apenas o gradiente hidráulico médio entre dois nós é conhecido, o que necessita a integração da eq.(4.1) ao longo do vetor \bar{s} . A integração entre dois nós arbitrários 1 e 2, resulta em:

$$\int_{s_1}^{s_2} \frac{q(s)}{K_{s,h}(s, h(s))} ds = - \int_{h_1}^{h_2} dh - \int_{z_1}^{z_2} dz = (h_1 - h_2) + (z_1 - z_2) = -\Delta h_{1,2} - \Delta z_{1,2}. \quad (4.2)$$

A eq.(4.2) dividida por $\Delta s_{1,2}$ resulta em:

$$\frac{1}{\Delta s_{1,2}} \int_{s_1}^{s_2} \frac{q(s)}{K_{s,h}(s, h(s))} ds = -\nabla h_{1,2} - \nabla z_{1,2} \quad (4.3)$$

onde

$\nabla h_{1,2} = \Delta h_{1,2} / \Delta s_{1,2}$ = gradiente médio do potencial matricial (1) e

$\nabla z_{1,2} = \Delta z_{1,2} / \Delta s_{1,2}$ = gradiente médio do potencial gravitacional (1).

Para uma certa direção \bar{s} , supõe-se que o gradiente do potencial gravitacional é uma constante no intervalo $\Delta s_{1,2}$. O fluxo por unidade de área entre os dois nós é o componente da densidade do fluxo, normal à interface entre os nós (veja a figura 2.1). Supõe-se que a interface está localizada na distância s_m e apresenta um fluxo normal de $q_{1,2} = q(s_m)$. Portanto, o valor correto da condutividade hidráulica média entre os nós 1 e 2 é dado por:

$$\bar{K}_{1,2} = - \frac{q_{1,2}}{\nabla h_{1,2} + \nabla z_{1,2}} \quad (4.4)$$

onde

$\bar{K}_{1,2}$ = condutividade hidráulica média, entre as distâncias s_1 e s_2 (m dia⁻¹).

Com a substituição da eq.(4.3) na eq.(4.4), obtém-se:

$$\bar{K}_{1,2} = \frac{q_{1,2}}{\frac{1}{\Delta s_{1,2}} \int_{s_1}^{s_2} \frac{q(s)}{K_{s,h}(s, h(s))} ds}. \quad (4.5)$$

Portanto, matematicamente, o problema consiste em resolver a eq.(4.5) para determinar o valor certo para $\bar{K}_{1,2}$, mesmo para distâncias $\Delta s_{1,2}$ relativamente grandes.

A densidade do fluxo geralmente não é conhecida em função da distância. Supõe-se que ela pode ser considerada aproximadamente constante no intervalo $\Delta s_{1,2}$, durante um passo no tempo Δt . Agora, pode-se escrever a eq.(4.5) como:

$$\bar{K}_{1,2} = \frac{\Delta s_{1,2}}{\int_{s_1}^{s_2} \frac{1}{K_{s,h}(s, h(s))} ds} . \quad (4.6)$$

Geralmente, a eq.(4.6) é difícil de ser resolvida porque a integral depende das duas variáveis h e s , enquanto a função $h(s)$ não é necessariamente conhecida *a priori*. Portanto, ao invés de apresentar uma solução analítica para a eq.(4.6), considera-se dois casos que podem ser resolvidos com facilidade. O primeiro caso é um meio poroso homogêneo não-saturado, cuja condutividade hidráulica depende apenas do potencial matricial h . O segundo caso é um meio poroso heterogêneo saturado, cuja condutividade hidráulica depende apenas da distância s . As soluções para estes dois casos serão apresentadas nas próximas seções.

4.1.1 Média uniforme para um meio poroso homogêneo e não-saturado

Para resolver a eq.(4.6) para um meio poroso homogêneo, precisa-se definir a condutividade hidráulica em função do potencial matricial. A evidência experimental apresentada por GARDNER (1958), RIJTEMA (1965) e outros, mostra que a condutividade hidráulica não-saturada é aproximadamente uma função exponencial do potencial matricial, para solos não muito secos. Nesta tese, esta relação empírica é chamada de modelo de Gardner-Rijtema, ou seja:

$$K_h(h) = K_0 \exp(\beta h); \quad h_{lim} < h \leq h_a \quad (4.7)$$

com

$$K_0 = K_s \exp(-\beta h_a) \quad (4.8)$$

onde

K_h = condutividade hidráulica em função do potencial matricial ($m \text{ dia}^{-1}$),

K_0 = coeficiente ($m \text{ dia}^{-1}$),

β = coeficiente empírico ($m \text{ m}^{-1}$),

K_s = condutividade hidráulica saturada ($m \text{ dia}^{-1}$),

h_a = potencial matricial crítico de entrada de ar (m) e

h_{lim} = limite inferior da validade do modelo empírico de Gardner-Rijtema (m).

WIND & VAN DOORNE (1975) mostraram que a equação de Darcy pode ser integrada facilmente, usando-se o modelo de Gardner-Rijtema para a função $K_h(h)$. Substituindo-se a eq.(4.7) e $dK_h(h)/ds = \beta K_h(h) dh/ds$ na eq.(4.1), e supondo-se um fluxo uniforme $q(s) = q_{1,2}$ no intervalo $\Delta s_{1,2}$, durante um passo no tempo Δt , obtém-se:

$$\frac{dK_h(h)}{ds} + \beta(K_h(h)\nabla z_{1,2} + q_{1,2}) = 0. \quad (4.9)$$

A eq.(4.9) é uma equação diferencial simples que pode ser integrada através da separação das variáveis K_h e s :

$$q_{1,2} = \nabla z_{1,2} \left[\frac{K_h(h_2) - K_h(h_1)}{\exp(\beta \nabla z_{1,2}(s_1 - s_2)) - 1} - K_h(h_1) \right]. \quad (4.10)$$

A eq.(4.10) foi usada por WIND & VAN DOORNE (1975) para calcular a densidade do fluxo de água entre dois nós, em um modelo numérico. Porém, este modelo é apenas válido para solos não muito secos.

Nesta tese, ao invés de calcular a densidade do fluxo de água com a eq.(4.10), calcula-se uma condutividade hidráulica que satisfaz a eq.(4.10). Supõe-se que os valores de h_1 , h_2 são conhecidos para dois nós arbitrários 1 e 2. Agora pode-se escrever, para um meio poroso homogêneo:

$$\begin{cases} K_h(h_1) = K_0 \exp(\beta h_1) \\ K_h(h_2) = K_0 \exp(\beta h_2) \end{cases} \Rightarrow \beta = \frac{1}{h_1 - h_2} \ln \left(\frac{K_h(h_1)}{K_h(h_2)} \right). \quad (4.11)$$

Substituindo-se a eq.(4.11) na eq.(4.10) e a eq.(4.10), por sua vez, na eq.(4.4), obtém-se:

$$\bar{K}_{1,2} = \frac{r_{1,2}}{r_{1,2} + 1} \left[K_h(h_1) + \frac{K_h(h_1) - K_h(h_2)}{\left(\frac{K_h(h_1)}{K_h(h_2)} \right)^{r_{1,2}} - 1} \right]; K_h(h_1) \neq K_h(h_2) \quad (4.12)$$

com

$$r_{1,2} = \frac{\nabla z_{1,2}}{\nabla h_{1,2}}. \quad (4.13)$$

A eq.(4.12) depende apenas de dois valores para a condutividade hidráulica, e do coeficiente $r_{1,2}$. Portanto, a eq.(4.12) é, de fato, uma fórmula para determinar a média de

dois valores. Devido ao fato desta média ter sido baseada na suposição de fluxo uniforme, foi decidido nomear esta média de *média uniforme*. Rearranjando-se a eq.(4.12), pode-se definir a média uniforme de dois valores X_1 e X_2 positivos (ou dois valores negativos) como:

$$\bar{X}_{\text{uni}}(X_1, X_2; r) = \frac{r}{r+1} \bar{X}_{\text{uni}}^{\circ} \quad ; X_1 \neq X_2; X_1 X_2 > 0 \quad (4.14)$$

com

$$\bar{X}_{\text{uni}}^{\circ} = \frac{(X_1)^{r+1} - (X_2)^{r+1}}{(X_1)^r - (X_2)^r} \quad ; X_1 \neq X_2; X_1 X_2 > 0 \quad (4.15)$$

onde

\bar{X}_{uni} = média uniforme e
 r = coeficiente (1).

A vantagem do emprego da função auxiliar $\bar{X}_{\text{uni}}^{\circ}$ será evidente na próxima seção. Agora, observe que a eq.(4.14) apresenta vários limites, ou seja:

$$\lim_{r \rightarrow 0} \bar{X}_{\text{uni}}(X_1, X_2; r) = \frac{X_1 - X_2}{\ln(X_1/X_2)} \equiv \bar{X}_{\text{din}}(X_1, X_2) \quad (4.16)$$

$$\lim_{r \rightarrow -1} \bar{X}_{\text{uni}}(X_1, X_2; r) = X_1 X_2 \frac{\ln(X_1/X_2)}{X_1 - X_2} \equiv \bar{X}_{\text{est}}(X_1, X_2) \quad (4.17)$$

$$\lim_{r \rightarrow -\infty} \bar{X}_{\text{uni}}(X_1, X_2; r) = \min\{X_1, X_2\} \quad (4.18)$$

$$\lim_{r \rightarrow +\infty} \bar{X}_{\text{uni}}(X_1, X_2; r) = \max\{X_1, X_2\} \quad (4.19)$$

onde

\bar{X}_{din} = média dinâmica,

\bar{X}_{est} = média estática,

$\min\{ \}$ = mínimo de $\{ \}$ e

$\max\{ \}$ = máximo de $\{ \}$.

A derivação de \bar{X}_{din} pode ser feita, resolvendo-se a eq.(4.9) para $\nabla z = 0$. O fluxo gravitacional é desprezível, quando $\nabla h \gg \nabla z$. Isto acontece, por exemplo, na frente de molhamento de um processo de infiltração de água em um solo seco, o que é um processo dinâmico. Portanto, \bar{X}_{din} foi nomeada de “média dinâmica”.

A derivação de \bar{X}_{est} pode ser feita, resolvendo-se a eq.(4.9) para $h = -z + c$, onde c é uma constante arbitrária. Em um solo não-saturado esta situação acontece quando todo o excesso de água no solo foi drenado, ou seja, $\nabla h = -\nabla z$. Neste caso, o solo apresenta um perfil de potencial matricial estático e a densidade de fluxo vertical é zero. Portanto, \bar{X}_{est} foi nomeada de “média estática”.

Em adição, a eq.(4.14) apresenta todas as médias convencionais, para determinados valores de r :

$$\bar{X}_{uni}(X_1, X_2; r = 1) = \frac{X_1 + X_2}{2} \equiv \bar{X}_{ari}(X_1, X_2) \quad (4.20)$$

$$\bar{X}_{uni}(X_1, X_2; r = -0.5) = \sqrt{X_1 X_2} \equiv \bar{X}_{geo}(X_1, X_2) \quad (4.21)$$

$$\bar{X}_{uni}(X_1, X_2; r = -2) = \frac{2}{\frac{1}{X_1} + \frac{1}{X_2}} \equiv \bar{X}_{har}(X_1, X_2) \quad (4.22)$$

onde

\bar{X}_{ari} = média aritmética,

\bar{X}_{geo} = média geométrica e

\bar{X}_{har} = média harmônica.

Observe que as eqs.(4.16), (4.17), (4.20), (4.21) e (4.22) mostram que as médias estão relacionadas como:

$$\bar{X}_{geo} = \sqrt{\bar{X}_{din} \bar{X}_{est}} = \sqrt{\bar{X}_{ari} \bar{X}_{har}} \quad (4.23)$$

A figura 4.2 mostra a média uniforme, ou seja, a eq.(4.14), para vários valores do coeficiente r .

A eq.(4.14) pode ser empregada para calcular a condutividade média uniforme de vários processos de transporte. Dependendo do valor do coeficiente r na eq.(4.14), a média pode assumir qualquer valor no intervalo $[X_1, X_2]$, veja a figura 4.3. Portanto, é suficiente encontrar a expressão correta para o coeficiente r , e a média uniforme pode ser calculada.

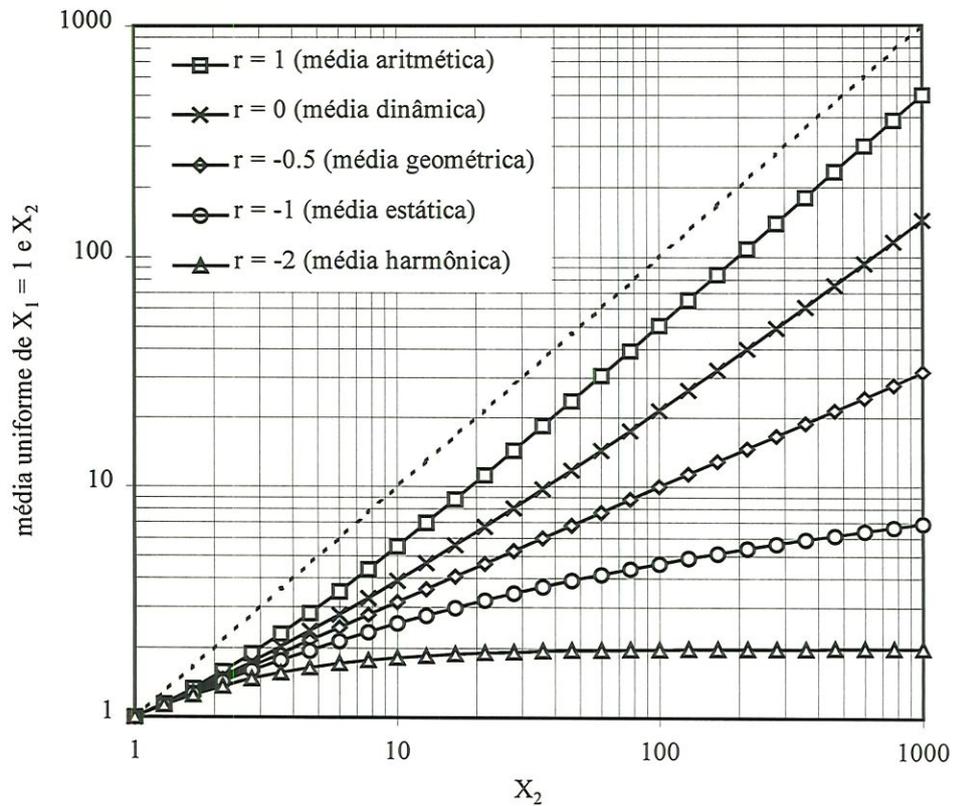


Figura 4.2 - Média uniforme de dois valores, para vários valores do coeficiente r .

Para um solo homogêneo e não muito seco, o modelo de Gardner-Rijtema é geralmente válido e, logicamente, a eq.(4.13) apresenta uma estimativa boa para o coeficiente r . No caso da eq.(4.13), r assume o valor da razão entre o gradiente do potencial gravotacional e o gradiente do potencial matricial, quando $h_{lim} < h \leq h_a$. Para o modelo numérico vertical, apresentado na seção 2.1.1, o gradiente do potencial gravitacional $\nabla z = 1$. Portanto, $r_{i-1/2}^j = (z_{i-1} - z_i) / (h_{i-1}^j - h_i^j)$, onde $r_{i-1/2}^j$ é o valor para r entre os nós $i-1$ e i , durante o passo no tempo j . Usando-se este valor para $r_{i-1/2}^j$, calcula-se $K_{i-1/2}^j = \bar{X}_{uni}(K_{i-1}^j, K_i^j; r_{i-1/2}^j)$. Observe que na eq.(2.10), RATHFELDER & ABRIOLA (1994) usaram a média geométrica, ou seja, $K_{i-1/2}^j = \bar{K}_{geo}(K_{i-1}^j, K_i^j)$, o que é uma escolha comum. Porém, a figura (4.3) mostra que a média geométrica pode ser muito diferente da média uniforme, dependendo do valor de r .

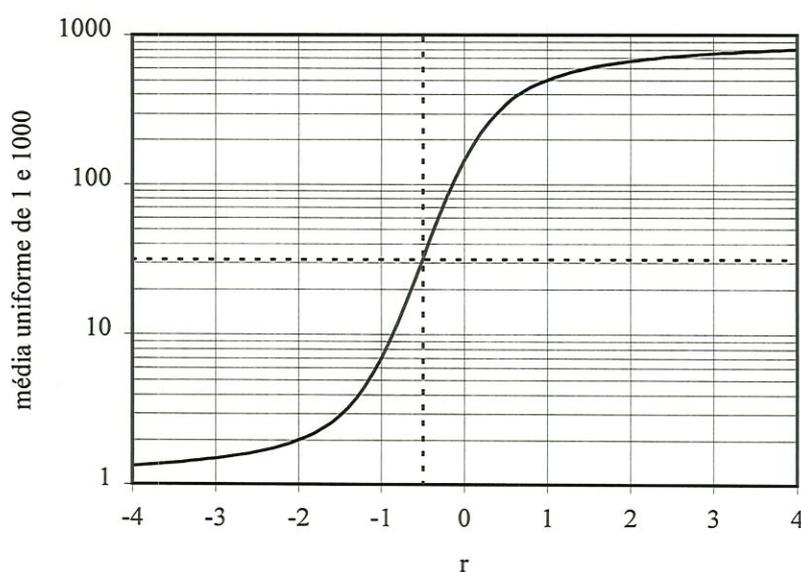


Figura 4.3 Média uniforme dos valores 1 e 1000, em função do coeficiente r ; as linhas pontilhadas cruzam no ponto de simetria, localizada na média geométrica ($r = -0.5$).

O processo de infiltração de água em um solo muito seco, geralmente apresenta valores de h_{i-1}^j e h_i^j fora do intervalo $[h_{lim}, h_a]$. Neste caso, a eq.(4.13) não é necessariamente a melhor estimativa para o valor de r . Felizmente, o uso da média uniforme apresenta a vantagem de que r pode ser otimizado. O valor ótimo de r , para o modelo numérico apresentado na seção 2.1.1, será investigado no capítulo 6.

Ainda não foi discutida a média da condutividade hidráulica, na presença de horizontes de solo com características hidrodinâmicas diferentes. As mudanças na direção vertical podem ser contínuas ou descontínuas. Geralmente, as características hidrodinâmicas são medidas separadamente em cada horizonte e as mudanças são consideradas descontínuas. Neste caso, a condutividade média entre nós 1 e 2, é a média harmônica ponderada das condutividades $\bar{K}_{1,m}|_1$ na camada 1, e $\bar{K}_{m,2}|_2$ na camada 2, onde m é a interface entre as camadas 1 e 2, na distância s_m . Isto pode ser provado como segue. Para uma mudança descontínua na interface entre duas camadas de solo, pode-se escrever a eq.(4.6) como:

$$\bar{K}_{1,2} = \frac{\Delta s_{1,m} + \Delta s_{m,2}}{\int_{s_1}^{s_m} \frac{1}{K_h(h(s))} ds \Big|_{\text{camada 1}} + \int_{s_m}^{s_2} \frac{1}{K_h(h(s))} ds \Big|_{\text{camada 2}}} = \frac{\Delta s_{1,m} + \Delta s_{m,2}}{\bar{K}_{1,m} \Big|_1 + \bar{K}_{m,2} \Big|_2}, \quad (4.24)$$

o que é a definição da média harmônica ponderada.

As médias $\bar{K}_{1,m} \Big|_1$ e $\bar{K}_{m,2} \Big|_2$ na eq.(4.24) são homogêneas e, portanto, a média uniforme (ou seja, a eq.(4.14)) pode ser usada para calculá-las. Porém, isto exige o conhecimento dos valores de $K(h_m) \Big|_1$ e $K(h_m) \Big|_2$, onde h_m é o potencial matricial na interface. Portanto, faz-se necessário um método iterativo para determinar a raiz da eq.(4.24). Para evitar isto, pode-se também inserir um nó na posição da interface m , e escrever a eq.(2.9) para um nó com dois compartimentos (meio compartimento na camada 1 e meio compartimento na camada 2), exigindo na interface, para o potencial matricial que $h_m \Big|_1 = h_m \Big|_2$ e para a densidade do fluxo que $q_m \Big|_1 = q_m \Big|_2$.

Em síntese, a incorporação de mudanças descontínuas no espaço não apresenta grandes dificuldades. A próxima seção trata da incorporação de mudanças contínuas no espaço, o que é mais difícil, conforme será mostrado.

4.1.2 Média uniforme para um meio poroso heterogêneo e saturado

Para um meio poroso saturado, o potencial matricial $h \geq h_a$, onde h_a é o potencial matricial crítico de entrada de ar. Neste caso, a condutividade hidráulica não depende mais do potencial matricial e pode-se escrever a eq.(4.6) como segue:

$$\bar{K}_{1,2} = \frac{\Delta s_{1,2}}{\int_{s_1}^{s_2} \frac{1}{K_s(s)} ds} \quad (4.25)$$

onde

K_s = condutividade hidráulica saturada em função da distância (m dia⁻¹).

Considerando-se que a eq.(4.25) não depende do potencial matricial, a média pode ser calculada *a priori*, ou seja antes de calcular o potencial matricial. Observe que, para mudanças descontínuas, a eq.(4.25) torna-se igual à média harmônica ponderada (veja a

eq.(4.24)). Porém, para mudanças contínuas a integração numérica da eq.(4.25) pode ser uma operação demorada. Portanto, apresenta-se aqui um método para descrever o heterogeneidade do meio poroso através de funções analíticas, o que possibilita uma solução analítica da eq.(4.25).

Na seção anterior, a média uniforme foi apresentada na forma da eq.(4.14). Dependendo do valor do coeficiente r , a média uniforme pode ser igual a qualquer valor no intervalo $[X_1, X_2]$. Nesta seção, determina-se o valor correto do coeficiente r , para um meio poroso saturado e heterogêneo, conforme será feito em seguida. A condutividade hidráulica saturada em função da distância pode ser expressa como:

$$K_s(s) \equiv K_h[h(s)]. \quad (4.26)$$

Na eq.(4.1) a função $h(s) \equiv h$, onde h é o potencial matricial, mas na eq.(4.26) h é apenas uma função auxiliar para descrever a mudança contínua de $K_s(s)$. Para determinar a função $h(s)$, precisamos voltar à situação da seção anterior e escrever a eq.(4.1) para um meio poroso não-saturado e homogêneo. Substituindo-se o modelo de Gardner-Rijtema na eq.(4.1), resulta que:

$$q(s) = -K_h(h(s)) \left(\frac{dh(s)}{ds} + \frac{dz}{ds} \right) = -K_0 \exp(\beta h(s)) \left(\frac{dh(s)}{ds} + \frac{dz}{ds} \right). \quad (4.27)$$

Supondo-se um fluxo uniforme $q(s) = q_{1,2}$ no intervalo $\Delta s_{1,2}$, durante um passo no tempo Δt , e rearranjando-se a eq.(4.27), obtém-se a seguinte equação diferencial:

$$\frac{dh(s)}{ds} + \frac{q_{1,2}}{K_0} \exp(-\beta h(s)) + \nabla z_{1,2} = 0. \quad (4.28)$$

A derivação da solução da eq.(4.28) não apresenta dificuldades. Através da separação das variáveis $h(s)$ e s , a solução da eq.(4.28) torna-se:

$$h(s) = \frac{1}{\beta} \ln \left\{ \frac{K_0}{q_{1,2} \nabla z_{1,2}} \left[\left(1 + \frac{q_{1,2} \nabla z_{1,2}}{(K_0)^2} K_h(h_1) \right) \exp[\beta \nabla z_{1,2} (s_1 - s)] - 1 \right] \right\}. \quad (4.29)$$

Substituindo-se a eq.(4.11) na eq.(4.29), a eq.(4.29) na eq.(4.7) e a eq.(4.7) na eq.(4.26), obtém-se uma expressão para a condutividade hidráulica saturada em função da distância. Esta expressão pode ser apresentada, usando-se a variável genérica X , ao invés de K_s , como segue:

$$X(\zeta; X_1, X_2, r) = \bar{X}_{\text{uni}}^{\circ} + (X_1 - \bar{X}_{\text{uni}}^{\circ}) \left(\frac{X_1}{X_2} \right)^{r\zeta} \quad (4.30)$$

com

$$\zeta = \frac{s - s_1}{s_2 - s_1} \quad (4.31)$$

onde

$\zeta =$ distância relativa no intervalo $[s_1, s_2]$ (1).

Vale observar que a função auxiliar $\bar{X}_{\text{uni}}^{\circ}$ também foi usada na eq.(4.14). A figura 4.4a mostra o valor de X no intervalo $[s_1, s_2]$, para $X_1 = 1$ e $X_2 = 1000$, e vários valores do coeficiente r . A figura 4.4b mostra os mesmos dados, mas usa uma escala logarítmica.

A eq.(4.30) é uma ferramenta útil para descrever a heterogeneidade espacial. Por exemplo, supõe-se que um meio poroso apresenta uma tendência regional linear na condutividade hidráulica saturada. A figura 4.4a mostra que, neste caso, $r = 0$. Portanto, a condutividade média entre dois nós tem que ser calculado com $\lim_{r \rightarrow 0} \bar{X}_{\text{uni}}(X_1, X_2; r)$, ou seja, com a média dinâmica. Isto é um fato interessante, porque a média aritmética, ou a média aritmética por área, é geralmente usada para interpolar uma tendência regional linear na condutividade hidráulica.

Pode acontecer também, que um estudo seja feito em uma área que apresenta flutuações aleatórias na condutividade hidráulica. Neste caso, a distribuição espacial da condutividade hidráulica saturada e não-saturada encontrada no campo, é geralmente lognormal (NIELSEN et al., 1973). Supõe-se que uma realização estocástica deste campo aleatório possa ser simulada em duas dimensões. Agora, as condutividades nas posições dos nós do modelo numérico formam uma superfície derivada de uma distribuição lognormal. Portanto, para uma distância $\Delta s_{1,2}$ relativamente pequena, pode-se assumir que $K_s(s)$ segue uma função exponencial no intervalo $[s_1, s_2]$. A figura 4.4b mostra que, neste caso, $r = -1$. Pois, a condutividade média entre dois nós tem que ser calculada com $\lim_{r \rightarrow -1} \bar{X}_{\text{uni}}(X_1, X_2; r)$, ou seja, com a média estática. Isto também é um fato interessante, porque a média geométrica, ou a média geométrica por área, é geralmente usada para interpolar uma variável com uma distribuição lognormal.

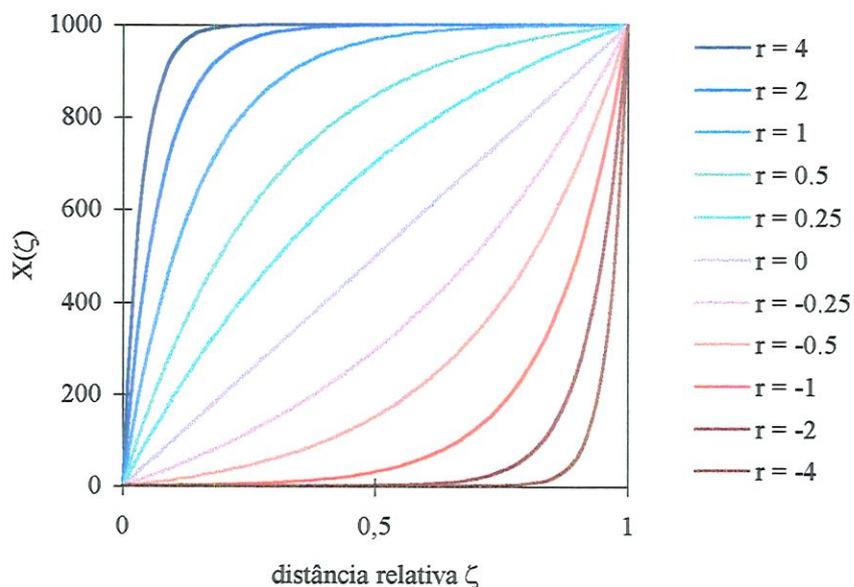


Figura 4.4a - Valor de X no intervalo $[s_1, s_2]$, para $X_1 = 1$ e $X_2 = 1000$, usando-se uma escala linear para o eixo das ordenadas.

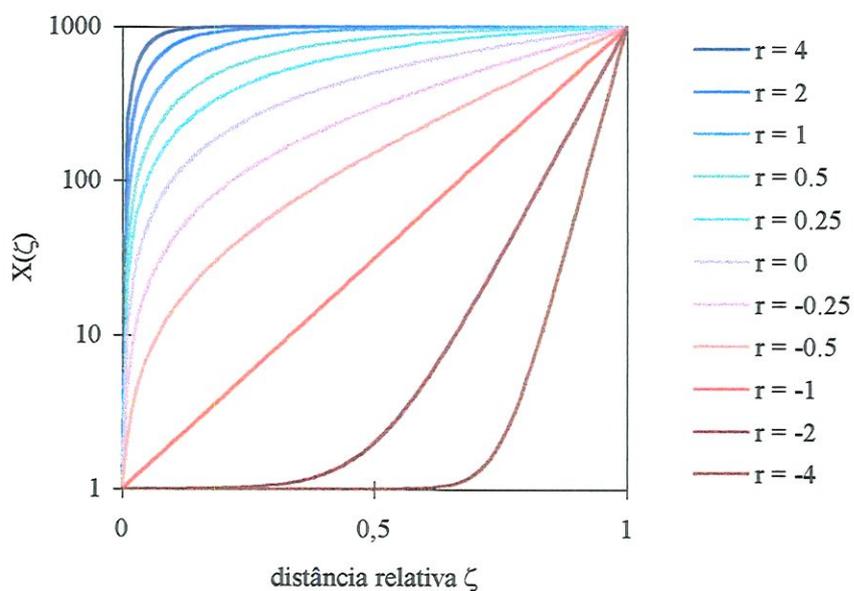


Figura 4.4b - Valor de X no intervalo $[s_1, s_2]$, para $X_1 = 1$ e $X_2 = 1000$, usando-se uma escala logarítmica para o eixo das ordenadas.

Através da eq.(4.6) pode-se calcular a média uniforme para um meio poroso com uma condutividade hidráulica apresentando uma dependência, tanto na distância s , quanto no potencial matricial h . Como foi mencionado anteriormente, a solução analítica da eq.(4.6) é

difícil. Mesmo usando-se a eq.(4.30) para $K_s(s)$, e o modelo de Gardner-Rijtema para a dependência em h , não foi possível, neste trabalho, encontrar uma solução analítica. Porém, foi mostrado que a média de $K_h(h)$ e a média de $K_s(s)$ podem ser expressas com a mesma fórmula, ou seja, a da eq.(4.14). Portanto, no caso em que β é uma constante no intervalo $[s_1, s_2]$, uma solução aproximada da eq.(4.6) pode ser apresentada:

$$\begin{aligned} \bar{X}(K_{s,h}(s_1, h_1), K_{s,h}(s_2, h_2); r_s, r_h) \approx \\ \bar{X}_{uni}(K_s(s_1, h_1), K_s(s_2, h_2); r_s) \bar{X}_{uni}(K_r(s_1, h_1), K_r(s_2, h_2); r_h) \end{aligned} \quad (4.32)$$

com

$$K_r(s, h) = \frac{K_{s,h}(s, h)}{K_s(s)} \quad (4.33)$$

onde

K_r = condutividade hidráulica relativa, em função da distância e do potencial matricial (1),

r_s = coeficiente para descrever a mudança contínua da condutividade hidráulica saturada, em função da distância (1) e

r_h = coeficiente para descrever a mudança contínua da condutividade hidráulica relativa, em função do potencial matricial (1).

Pode ser observado que a eq.(4.32) apresenta a média uniforme correta para ambos os casos considerados, ou seja, o caso homogêneo não-saturado e o caso heterogêneo saturado. Em todos os outros casos, a eq.(4.32) é apenas uma aproximação. Além da eq.(4.32), outras aproximações podem ser obtidas, baseadas na teoria apresentada neste capítulo.

4.2 DESCRIÇÃO DOS MODELOS EMPÍRICOS

O emprego de uma média otimizada para a condutividade hidráulica, permite considerar distâncias relativamente grandes (10^{-1} m) entre os nós em um modelo numérico de diferenças finitas. As eqs.(2.15a) a (2.16b) mostram como um modelo numérico deste tipo pode ser usado para calcular o fluxo de água na superfície do perfil de solo. Porém, com este tipo de condição de contorno, o fluxo de água através da superfície do solo somente pode ser calculado com precisão suficiente, quando o potencial matricial na superfície do solo é conhecido. Para simular o potencial matricial na superfície do solo com precisão suficiente, as primeiras camadas no modelo precisam ser relativamente finas, da

ordem de 10^{-3} a 10^{-2} m, indiferente da média usada para a condutividade hidráulica. Convém observar que isto é especialmente relevante para os climas sub-tropicais. Em climas temperados, por outro lado, a precipitação geralmente apresenta intensidades baixas, resultando em um fluxo de escoamento superficial baixo ou mesmo não-existente. Neste caso, pode-se usar uma condição de contorno do tipo Neuman na superfície do solo, ao invés das eqs.(2.15a) a (2.16b).

As camadas finas da superfície do solo exigem passos no tempo relativamente pequenos e, como resultado, o modelo torna-se menos eficiente. Para evitar isto, empregam-se dois modelos empíricos para calcular o fluxo de água através da superfície do solo, ao invés das eqs.(2.15a) a (2.16b). Os modelos empíricos serão apresentadas a seguir.

4.2.1 Modelo empírico de infiltração com uma camada superficial de água

Um modelo típico de infiltração da água no solo apresenta dois estágios a partir do início de um período de precipitação. No primeiro estágio, o solo apresenta uma capacidade de infiltração de água maior do que a intensidade de chuva. Portanto, o fluxo de infiltração é igual à intensidade de chuva. Depois de um certo tempo, uma camada fina na superfície do solo fica saturada com água. Este instante de tempo é chamado de “tempo de encharcamento” (TUCCI, 1993, p.338). No modelo numérico apresentado no capítulo 2, este instante de tempo é registrado quando $h_0 = 0$, onde h_0 é o potencial matricial do nó localizado na superfície do perfil de solo. O tempo de encharcamento marca o início do segundo estágio, no qual o solo apresenta uma capacidade de infiltração menor do que a intensidade de chuva, o que resulta na formação de uma camada de água livre na superfície do solo.

Existem dificuldades teóricas na descrição do processo de infiltração durante o segundo estágio. Como foi discutido na seção 3.3, não se leva em conta o fluxo de água em macroporos, o escoamento superficial do tipo “runon” ou a formação de uma crosta na superfície do solo. Com estas suposições, geralmente pode-se usar um modelo de infiltração baseado na equação do Green-Ampt (GREEN & AMPT, 1911). Porém, SMITH & PARLANGE (1978) e outros autores, mostraram que para certos tipos de solos, a equação de Green-Ampt não apresenta uma aproximação muito boa. Para resolver isto,

PARLANGE et al. (1982) apresentaram um modelo de infiltração analítico que pode ser ajustado para qualquer tipo de solo homogêneo.

Nesta tese, é utilizado o modelo de PARLANGE et al. (1982) para descrever o processo de infiltração, na forma apresentada por SMITH et al. (1993):

$$I^{\circ}(t) = \frac{\Delta\theta_i \Phi_i}{\mathcal{S}} \ln \left(\frac{i_c(t) - K_s + \mathcal{S}K_s}{i_c(t) - K_s} \right) \quad (4.34)$$

com

$$\Phi_i = \frac{(\Lambda_i)^2}{2 \Delta\theta_i K_s} \quad (4.35)$$

$$\Delta\theta_i = \theta_s - \theta_i \quad (4.36)$$

onde

I° = infiltração dinâmica cumulativa desde o tempo inicial t_i (m),

i_c = capacidade de infiltração (m dia⁻¹),

K_s = condutividade hidráulica saturada (m dia⁻¹),

θ_i = umidade volumétrica no tempo inicial t_i (1),

θ_s = umidade volumétrica saturada (1),

Λ_i = sortividade do solo no tempo inicial t_i (m dia^{-0.5}),

Φ_i = função auxiliar no tempo inicial t_i (m) e

\mathcal{S} = coeficiente empírico (1).

A infiltração dinâmica cumulativa é definida como (SMITH et al., 1993):

$$I^{\circ}(t) = I(t) - K_i(t - t_i) \quad (4.37)$$

onde

$$I(t) = \int_{t_i}^t i(t) dt = \text{infiltração cumulativa no tempo } t, \text{ desde o tempo inicial } t_i \text{ (m),}$$

$i(t)$ = densidade do fluxo de infiltração no tempo t (m dia⁻¹),

K_i = condutividade hidráulica não saturada no tempo inicial t_i (m dia⁻¹),

t_i = tempo do início do período de precipitação (dia) e

t = tempo (dia).

Observe que no modelo de PARLANGE et al. (1982) as quantidades i e I são números positivos, enquanto que no modelo numérico apresentado no capítulo 2, um fluxo na direção

da gravidade é considerado negativo. Portanto, $q_0(t) = -i(t)$, durante um período de precipitação.

Integrando-se a eq.(4.34), obtém-se uma equação para a infiltração cumulativa em função do tempo (SMITH et al., 1993):

$$I(t) = I(t') + K_s (1 - \vartheta) (t - t') + \frac{\Delta\theta_i K_s \Phi_i}{K_d} \ln \left(\frac{A(t) - 1 + \Xi}{A(t') - 1 + \Xi} \right) \quad (4.38)$$

com

$$A(t) = \exp \left(\frac{\vartheta I^*(t)}{\Delta\theta_i \Phi_i} \right) \quad (4.39)$$

$$\Xi = \vartheta \frac{K_s}{K_d} \quad (4.40)$$

$$K_d = K_s - K_i \quad (4.41)$$

onde

t' = qualquer tempo no intervalo $[t_i, t]$ (dia),

Ξ = coeficiente auxiliar (1) e

A_t = função auxiliar (1).

A sortividade Λ_i pode ser derivada das funções hidráulicas características de qualquer solo, como segue (SMITH & PARLANGE, 1978):

$$\Lambda_i = \sqrt{2(\theta_s - \theta_i) \int_{\theta_i}^{\theta_s} K_\theta(\theta) \frac{d\theta}{d\theta}} \quad (4.42)$$

onde

K_θ = condutividade hidráulica em função da umidade do solo (m dia^{-1}).

O valor do coeficiente empírico ϑ teoricamente depende do tipo de solo, mas na prática não apresenta uma variação muito grande. Segundo PARLANGE et al. (1982) pode-se empregar $\vartheta \approx 0.85$, na maioria dos casos. Todos os outros parâmetros, tal como K_s , podem ser derivados da curva de retenção de água ou da curva de condutividade hidráulica não-saturada.

O tempo de encharcamento, t_e , é determinado conforme será descrito em seguida. Primeiro: coloca-se $i_c = i_p$ na eq.(4.34), onde i_p é a intensidade da precipitação. Isto

produz um valor para $I^*(t_e)$. Segundo: calcula-se t_e do balanço de massa para a água infiltrada, ou seja:

$$t_e = t' + \frac{I^*(t_e) - \int_{t_i}^{t'} i_p(t) dt}{i_p(t_e) - K_i} \quad (4.43)$$

onde

i_p = a intensidade da precipitação ($m \text{ dia}^{-1}$) e

t_e = tempo de encharcamento (dia).

Observe que na eq.(4.43), $i_p(t)$ é considerado constante durante o intervalo $[t', t_e]$, o que corresponde ao conceito de simulação descontínua, conforme pode ser visto na figura 4.1.

Quando o modelo de PARLANGE et al. (1982) é usado como condição de contorno em um modelo numérico, um dos problemas principais é achar a infiltração cumulativa para um dado intervalo no tempo $[t', t]$. Porém, PARLANGE et al. (1982) apresentaram o seu modelo na forma da eq.(4.38), o que é uma equação implícita em I . A convergência da iteração implícita da eq.(4.38) é muito lenta. Nesta tese, ao invés de uma iteração implícita, o método Newton-Raphson (PRESS et al., 1992, p. 355) foi empregado para achar a raiz da eq.(4.38). O método Newton-Raphson minimiza uma função $F(x) = 0$ através da avaliação da sua derivada $dF(x)/dx$. No caso da eq.(4.38), define-se a função F como segue:

$$F(I) = I(t') + K_s (1 - \theta) (t - t') + \frac{\Delta\theta_i K_s \Phi_i}{K_d} \ln \left(\frac{A_t(t) - 1 + \Xi}{A_t(t') - 1 + \Xi} \right) - I(t). \quad (4.44)$$

Em adição, a derivada da eq.(4.44) é determinada como:

$$\frac{dF(I)}{dI} = \frac{A_t(t)\Xi}{A_t(t) - 1 + \Xi} - 1. \quad (4.45)$$

Com as eqs.(4.44) e (4.45) a infiltração cumulativa para o intervalo $[t', t]$ pode ser facilmente determinado, empregando-se o método Newton-Raphson.

O modelo de PARLANGE et al. (1982) não leva em conta o armazenamento de água na superfície do solo, durante o segundo estágio da infiltração. Para resolver isto, o modelo pode ser adaptado como segue. O balanço de massa para a água na camada superficial pode ser escrito como:

$$h_0(t) - h_0(t') = (t - t') i_p(t) - i(t) + i(t') \quad (4.46)$$

onde

h_0 = profundidade da camada de água na superfície do solo, considerada igual ao potencial matricial na superfície do solo, no tempo t (m).

Vale notar que na eq.(4.46), novamente i_p é considerado constante durante o intervalo $[t', t]$.

Substituindo-se a eq.(4.46) na eq.(4.38), obtém-se:

$$h(t) = h(t') + [i_p(t) - K_s(1 - \vartheta)](t - t') - \frac{\Delta\theta_i K_s \Phi_i}{K_d} \ln \left(\frac{B(t) - 1 + \Xi}{B(t') - 1 + \Xi} \right) \quad (4.47)$$

com

$$B(t) = \exp \left(\frac{\vartheta}{\Delta\theta_i \Phi_i} \left[(i_p(t) - K_i)(t - t') - h_0(t) + h_0(t') + I^*(t') \right] \right) \quad (4.48)$$

onde

B = função auxiliar (1).

Convém observar que, embora as funções $A(t)$ e $B(t)$ sejam apresentadas com símbolos diferentes, $A(t) = B(t)$, para todos os tempos t no intervalo $[t', t]$. Pode-se empregar novamente o método Newton-Raphson para minimizar uma função $F(x) = 0$. No caso da eq.(4.47), define-se a função F como:

$$F(t) = h_0(t) - h_0(t') - [i_p(t) - K_s(1 - \vartheta)](t - t') + \frac{\Delta\theta_i K_s \Phi_i}{K_d} \ln \left(\frac{B(t) - 1 + \Xi}{B(t') - 1 + \Xi} \right). \quad (4.49)$$

Em adição, a derivada da eq.(4.49) é determinada como:

$$\frac{dF(t)}{dt} = K_s(1 - \vartheta) + i_p(t) \left[\frac{B(t)\Xi}{B(t) - 1 + \Xi} - 1 \right]. \quad (4.50)$$

Com as eqs.(4.49) e (4.50) pode ser determinado o tempo t quando a profundidade da água na camada superficial atinge o valor $h_0(t)$, empregando o método Newton-Raphson.

Supõe-se que a camada superficial pode atingir uma profundidade mínima de 0 e uma profundidade máxima de d_0 , ou seja, $h_0(t) \in [0, d_0]$, durante o segundo estágio de infiltração. Para um intervalo de infiltração $[t', t]$, durante o segundo estágio da infiltração, os eventos $h_0(t) = 0$ e $h_0(t) = d_0$ são determinados como segue. Primeiro, determina-se o novo valor de $h_0(t)$ usando-se o balanço de massa da camada superficial para um intervalo de infiltração $[t', t]$, ou seja:

$$h_0(t) = h_0(t') + \int_{t'}^t i_p(\tau) d\tau - \int_{t'}^t I(\tau) d\tau. \quad (4.51)$$

Segundo, quando $h_0(t) > d_0$, usa-se $h_0(t) = d_0$ nas eqs.(4.49) e (4.50), para calcular o tempo t'' até o começo de um período de escoamento superficial. Quando $h_0(t) < 0$, usa-se $h_0(t) = 0$, para calcular o tempo t'' até o final do segundo estágio da infiltração. Em ambos os casos, $t'' < t$, enquanto em todos os outros casos, $t'' = t$. Portanto, o valor correto para o passo no tempo é sempre $t'' - t'$, enquanto a nova profundidade da camada superficial é $h_0(t'')$; conforme pode ser visto na figura 4.5.

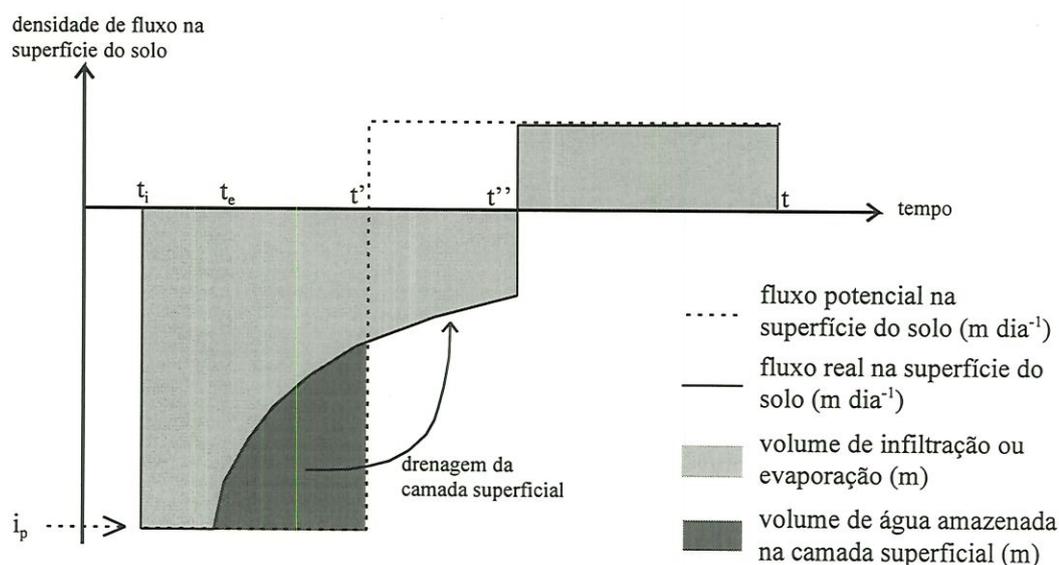


Figura 4.5 - Passo no tempo no modelo de PARLANGE et al. (1982), na presença de uma camada superficial de água.

O modelo de PARLANGE et al. (1982) não leva em conta a redistribuição de água no perfil de solo, durante os períodos sem precipitação. SMITH et al., (1993) e CORRADINI et al. (1994) combinaram o modelo de PARLANGE et al. (1982) com um modelo empírico para a redistribuição em um perfil de solo homogêneo e descoberto. Neste caso, o modelo simula várias frentes de infiltração, simultaneamente. Este conceito não foi empregado nesta tese, porque isto serve apenas para solos descobertos. Porém, o uso de uma frente única de infiltração implica que os períodos de redistribuição não podem ser muito curtos, ou seja, $t - t' > \Delta t_{\min}$. Em adição, PARLANGE et al. (1982) assumiram um perfil de solo homogêneo. Portanto, o primeiro horizonte não pode ser muito fino. Resumindo, o uso do modelo de PARLANGE et al. (1982) como condição de contorno, impõe certos limites inferiores para os passos no tempo e no espaço do modelo numérico. Isto, na verdade, é uma característica geral de um modelo de simulação descontínua, cujos parâmetros e

condições de contorno deveriam ser especificados para os maiores intervalos possíveis. No caso contrário, obviamente, a simulação descontínua não apresentaria uma vantagem em termos de tempo gasto no computador.

4.2.2 Modelo empírico de evaporação de água da superfície do solo

A evaporação da água do solo apresenta três estágios, desde o início de um período de evaporação. No primeiro estágio, a umidade do solo é suficientemente alta para manter a evaporação igual à demanda atmosférica, ou seja, à evaporação potencial. Depois de um certo tempo, o potencial matricial na superfície entra em equilíbrio com a pressão de vapor do ar e não desce mais. Este instante de tempo marca o início do segundo estágio, no qual o solo apresenta uma evaporação real menor do que a evaporação potencial. Durante o segundo estágio, o solo continua dessecando até um ponto no tempo em que a evaporação real torna-se desprezível. Este instante de tempo marca o início do terceiro estágio, que não apresenta um fluxo de água através da superfície do solo, ou seja, $q_0(t) = 0$.

Existem vários modelos analíticos (GARDNER, 1959) e empíricos (BLACK et al., 1969) na literatura, para descrever a evaporação de um solo descoberto, na ausência de um lençol freático. Todos estes modelos foram baseados na suposição que, durante um período de evaporação, a redistribuição devido ao fluxo gravitacional é desprezível, ou seja, $\nabla z \approx 0$ na equação de Richards. Isto não necessariamente apresenta uma boa aproximação da densidade do fluxo de evaporação na superfície do solo (KÚTILEK & NIELSEN, 1994, p. 190). Em adição, estes modelos não levam em conta a interação entre os processos da evaporação e da transpiração, na presença de uma sistema de raízes perto da superfície do solo.

Resumindo, os processos de evaporação, transpiração e redistribuição são todos acoplados e deveriam ser simulados simultaneamente. Isto pode ser realizado usando-se um modelo numérico. Porém, como foi mencionado acima, isto necessita a presença de camadas finas (i.e. com espessura da ordem de 10^{-3} m) no modelo numérico, perto da superfície do solo. Devido a estas camadas finas, o modelo torna-se menos eficaz. Este problema pode ser resolvido, quando a evaporação real é definida como uma condição de contorno do tipo Cauchy. Usando-se a equação de Darcy-Buckingham, para $q_0(t) > 0$ e $z_0 = 0$, pode-se escrever para a densidade do fluxo de evaporação real:

$$E(t) = -\bar{K}_{0,\text{ref}}(t) \frac{h_{\text{atm}}(t) - h_{\text{ref}}(t)}{z_0 - z_{\text{ref}}} = \bar{K}_{0,\text{ref}}(t) \frac{h_{\text{atm}}(t) - h_{\text{ref}}(t)}{z_{\text{ref}}} \quad (4.52)$$

com

$$h_{\text{ref}}(t) = \Psi(h_1(t)) \quad (4.53)$$

onde

E = evaporação real (m dia⁻¹),

h_{atm} = potencial matricial em equilíbrio com a atmosfera (m),

h_{ref} = potencial matricial na profundidade de referência (m),

h_1 = potencial matricial na profundidade z_1 (m),

z_{ref} = profundidade de referência (m),

$\bar{K}_{0,\text{ref}}$ = condutividade média entre z_0 e z_{ref} (m dia⁻¹) e

Ψ = função de ajuste (m).

Com as eqs.(4.52) e (4.53), a densidade do fluxo de evaporação real é calculada como segue. O potencial matricial em equilíbrio com a atmosfera pode ser calculado em função da pressão de vapor do ar (FEDDES et al., 1978, p. 33). Além disto, um modelo numérico rápido, com distâncias grandes entre os nós, é usado para simular h_1 na profundidade z_1 (convenientemente, o primeiro nó do modelo poderia ser colocado na profundidade z_1). O valor simulado de h_1 não pode ser usado para calcular $E(t)$, porque a profundidade z_1 é muito grande. Ao invés disto, h_1 é usado para calcular o valor de h_{ref} com a eq.(4.53), o que é, por sua vez, usado para calcular $E(t)$ com a eq.(4.52).

O método apresentado para calcular a evaporação com um modelo numérico com camadas grossas, só pode ser usado quando a função de ajuste Ψ é conhecida. Determina-se esta função conforme será descrito em seguida. Primeiro, um único ciclo de evaporação é simulado com muita precisão, por um modelo numérico com camadas finas. O primeiro nó deste modelo é localizado na superfície do solo e o segundo nó na profundidade de referência, ou seja, uma profundidade da ordem de 10⁻³ m. Durante a simulação, são registrados simultaneamente os potenciais matriciais h_{ref} e h_1 , nas profundidades z_{ref} e z_1 , respectivamente. Segundo, a função Ψ é ajustada para os valores registrados de h_{ref} e h_1 .

Uma consideração importante é que o método apresentado somente faz sentido quando a função Ψ é suficientemente universal. Neste caso, pode-se calibrar um número

limitado de funções para cenários diferentes. Por exemplo, acontece que Ψ quase não depende do K_s , nem do θ_s . Neste caso, Ψ precisa ser calibrada uma só vez, para um modelo de colunas independentes. A questão da universalidade da função Ψ é um dos assuntos do capítulo 6.

Intuitivamente, pode-se dizer que o método apresentado é mais confiável quando as profundidades z_{ref} e z_1 fazem parte do mesmo horizonte de solo. Portanto, o primeiro horizonte de solo considerado, provavelmente não pode ser muito fino. Esta restrição já foi discutida na seção anterior.

4.3 INTEGRAÇÃO DOS MODELOS EMPÍRICOS NO MODELO NUMÉRICO

O modelos empíricos apresentados podem ser usados para calcular o fluxo de água através da superfície do solo no modelo numérico da seção 2.1.1. O emprego de uma média otimizada para a condutividade hidráulica, em combinação com os modelos empíricos apresentados, permite usar distâncias relativamente grandes entre os nós do modelo (i.e. 10^{-1} m). Como resultado, o modelo numérico torna-se muito rápido e pode ser usado para simulações Monte Carlo, em combinação com o uso de um método de amostragem eficiente de variáveis aleatórias, tal como a ALH (veja a seção 3.3.2).

A integração dos modelos empíricos apresentados será realizada em seguida. Primeiro, uma condição de contorno na superfície do solo do tipo Neuman é especificada pelo usuário, na forma de um fluxo potencial $q_0(t)$. Ao invés de passar a função $q_0(t)$ para o modelo numérico, ela é passada para um dos dois modelos empíricos. O sinal de $q_0(t)$ determina a escolha entre os dois modelos empíricos (ou seja, $q_0(t) > 0$ implica evaporação e $q_0(t) < 0$ implica infiltração). Portanto, somente um dos dois modelos empíricos é ativo, em qualquer momento durante a simulação.

Desta maneira, o modelo numérico gera uma série de eventos e armazena estes eventos em uma, assim chamada, matriz de eventos ambientais. Esta matriz faz parte dos dados de entrada dos modelos de transporte de solutos, desenvolvida no capítulo 5. Os eventos armazenadas na matriz são, por camada de solo e por período: a umidade de água no início do período, o fluxo de água para a camada superior, o fluxo de água para a camada inferior, a absorção de água pelas raízes e a temperatura do solo. Em termos de fluxo de

água, a matriz de eventos ambientais representa o balanço de água em uma coluna, por camada de solo e por período. Neste trabalho, a temperatura do solo não é simulada mas simplesmente interpolada (veja o capítulo 6).

O começo e o fim de cada período, na matriz de eventos ambientais, são baseados nos dois estágios de infiltração e nos três estágios de evaporação discutidos nas seções anteriores. Além disto, um período de redistribuição é introduzido depois de cada período de precipitação. O período de redistribuição é concluído, quando a camada agricultável atinge a sua capacidade de campo.

5. DESENVOLVIMENTO DE MODELOS DE TRANSPORTE DE SOLUTO

Este capítulo trata do desenvolvimento de técnicas numéricas rápidas para calcular o transporte unidimensional de solutos em meios poros não saturados. No caso especial da lixiviação de solutos para o lençol freático, as técnicas desenvolvidas foram aplicadas a um modelo de colunas independentes (veja o capítulo 3). Isto implica que as técnicas não devem apresentar um desvio sistemático, mesmo para condições não-estacionárias, não-uniformes e um perfil de solo heterogêneo.

Foi considerado apenas o transporte de substâncias químicas na fase líquida do solo. Supõe-se que a substância química é razoavelmente solúvel e não-volátil. Além disto, ao invés de considerar todas as substâncias agroquímicas, foi dada ênfase aos pesticidas biodegradáveis.

A lixiviação de um soluto é a parte da massa aplicada por área que atinge ou ultrapassa uma certa profundidade de controle z_c , enquanto z_c é geralmente fixada na profundidade do lençol freático. Um soluto aplicado na superfície do solo pode percorrer várias camadas com características físicas, químicas e biológicas diferentes, antes de atingir o lençol freático. No caso de solutos biodegradáveis, a parte do soluto que atinge o fundo de uma certa camada de solo é determinada por dois fatores: (1) a velocidade de percurso nesta camada e (2) as taxas de transformação bioquímica e absorção pelas raízes nesta camada. Quanto maior as taxas de transformação e absorção e quanto menor a velocidade de percurso, menor será a lixiviação para a camada inferior.

No capítulo 4, foi introduzido o conceito de simulação descontínua. Também foi desenvolvido um modelo numérico descontínuo para o fluxo de água no solo, que gera uma matriz de eventos ambientais para uma coluna de solo. Nesta matriz, os eventos ambientais

são armazenados por camadas de solo e por período. Assim, os eventos ambientais servem como dados de entrada de um modelo numérico de transporte de soluto descontínuo.

O conceito da simulação descontínua pode também ser aplicado à simulação do transporte de solutos, empregando-se a suposição de que a lixiviação de um soluto não é muito afetada, quando as velocidades de percurso e as taxas de transformação são substituídas pelas suas médias por camada e por período. Esta suposição foi testada por WIERENGA (1977), BEESE & WIERENGA (1980), LAAT (1980), e outros, comparando-se modelos não-estacionários com modelos quase-estacionários.

Geralmente, uma técnica numérica Euleriana é usada para resolver a equação de convecção-dispersão em uma coluna de solo. Dentro do conceito Euleriano, a concentração residente do soluto é calculada para posições fixas no espaço. Isto é o oposto do conceito Lagrangeano, onde a concentração do soluto é calculada para uma parcela de água em movimento. Infelizmente, um modelo Euleriano exige um passo no tempo relativamente pequeno, mesmo com um fluxo estacionário (veja a eq.(2.39)). Por exemplo, BOESTEN & VAN DER LINDEN (1991) usaram um passo no tempo de 0.02 dias, durante períodos de infiltração. Além disso, em um modelo Euleriano, o trabalho numérico tem ordem igual ao número de camadas \times número de passos no tempo. Em um modelo Lagrangeano o trabalho numérico corresponde à ordem igual ao número de parcelas \times número de passos no tempo. Portanto, um modelo Lagrangeano torna-se muito rápido quando o número de parcelas é reduzido, e, ao mesmo tempo, o comprimento dos passos no tempo é aumentado.

Neste trabalho foram desenvolvidos vários modelos Lagrangeanos. Nestes modelos, as moléculas de soluto apresentam uma velocidade baseada em uma distribuição do tempo de percurso ou em uma distribuição da distância de percurso conhecida. Neste caso, uma dada molécula é vista como um limite de probabilidade, percorrendo a matriz de eventos ambientais. Em outras palavras, o limite de probabilidade que está sendo seguido apresenta uma amostra extraída da distribuição do tempo de percurso do soluto. O peso amostral de uma amostra é igual à dose do soluto aplicado, dividido pelo número de amostras usadas na simulação. O peso amostral é usado para calcular a média e a variância de amostragem da massa residual em simulações do tipo Monte Carlo (veja a seção 5.5.2). Quando é preciso calcular a concentração de soluto no interior de uma amostra, pode-se definir uma amostra, usando dois limites de probabilidade, ao invés de um. A massa entre estes dois limites é

simplesmente chamada de “massa da amostra”. Deve-se ressaltar que uma amostra com dois limites de probabilidade é, pela sua própria definição, um intervalo de probabilidade.

Supõe-se que uma amostra k apresenta uma trajetória $(z^k(\xi), t^k(\xi))$ conhecida, onde ξ é a variável independente, podendo ser o tempo de percurso ou a distância de percurso da amostra. Agora, pode-se dizer que uma função $f(z, t)|_{z=z^k(\xi), t=t^k(\xi)}$ é igual a uma função $f^k(\xi)$ para todos os valores de ξ . Portanto, dentro do conceito Lagrangeano, o número de variáveis independentes é reduzido a um. De ora em diante, uma função escrita na sua notação Lagrangeana apresenta o sobrescrito k , para indicar o número da amostra.

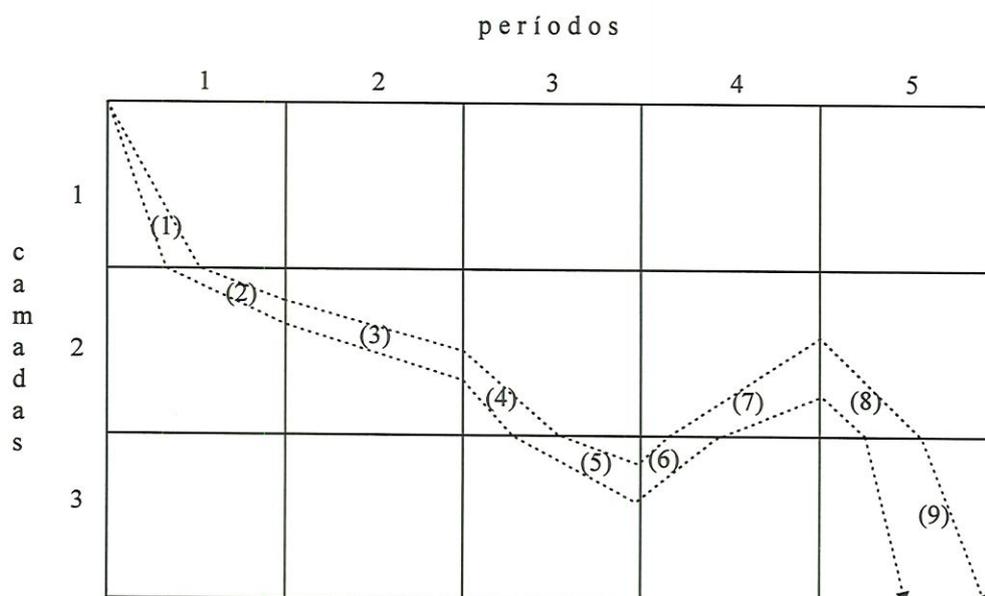


Figura 5.1 - Exemplo das trajetórias dos limites inferior e superior de uma amostra em uma matriz de eventos ambientais. A linha pontilhada indica a posição da amostra no perfil do solo, em função do tempo. Os índices (1), (2), (3), etc., indicam os intervalos da série de eventos na qual esta amostra está sujeita. No exemplo, o fluxo de água é positivo (ou seja, dirigido para cima), durante o período 4.

O emprego do conceito Lagrangeano, permite fazer simulações descontínuas muito eficientes, conforme pode ser visto na figura 5.1. Neste caso, o modelo recebe a informação sobre o estado das condições de contorno e sobre os parâmetros, na forma de dois tipos de eventos para amostras individuais de soluto: (1) um evento no espaço, ou seja, a chegada de uma amostra no fim de uma camada de solo e (2) um evento no tempo, ou seja, o término de um período quase-estacionário. Portanto, a sequência de passos no tempo e no espaço de

uma amostra, tornou-se uma série de eventos ambientais que pode ser rapidamente percorrida.

Nas seções seguintes, a velocidade de uma amostra é derivada para um soluto conservativo e não adsorvente, aplicado em um único pulso tipo delta de Dirac. Depois disto, o conceito é estendido para outros tipos de solutos e para condições iniciais ou condições de contorno gerais.

5.1 DERIVAÇÃO DA VELOCIDADE DE UMA AMOSTRA

Quando um soluto é aplicado na superfície do solo na forma de um pulso tipo delta Dirac, a velocidade de uma amostra pode ser derivada de distribuições de tempo de percurso conhecidas, ou de distribuições de distância de percurso conhecidas. Levando-se em conta que, neste trabalho, o processo de transporte de um soluto no interior de uma coluna de solo é considerado convectivo-dispersivo, é necessário determinar a velocidade de uma amostra para um processo convectivo-dispersivo. Com este fim, várias alternativas serão apresentadas nas seções seguintes.

5.1.1 Amostragem da distribuição normal

De acordo com um processo convectivo-dispersivo, uma amostra acumula os passos determinísticos do processo convectivo, e também os passos aleatórios não-correlacionados do processo dispersivo (veja o capítulo 2). O teorema do Limite Central (KOVÁCS, 1996, p. 38), mostra que a soma de variáveis aleatórias independentes, de distribuição arbitrária, convergirá para uma distribuição normal (também chamada de distribuição Gaussiana). Portanto, para um perfil de solo infinito e homogêneo, e condições iniciais, $z = 0$, $t = 0$, a distância de percurso das amostras apresenta uma distribuição normal, ou seja:

$$f_z(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_z(t)} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z - \mu_z(t)}{\sigma_z(t)}\right)^2\right] \quad (5.1)$$

com

$$\mu_z(t) = E\{z(t)\} \quad (5.2)$$

$$\sigma_z(t) = \sqrt{\text{Var}\{z(t)\}} \quad (5.3)$$

onde

$z(t)$ = posição da amostra, no tempo t (m),

$f_z(t)$ = distribuição da distância de percurso (m^{-1}) e

μ_z, σ_z = coeficientes da distribuição normal da distância de percurso (m).

Em um perfil com fluxo uniforme, mas não-estacionário, a distribuição da distância de percurso continua sendo normal, porque a não-estacionaridade afeta as velocidades de todos os limites de probabilidade da mesma maneira. Porém, em um perfil heterogêneo, a distância de percurso não é mais normal, porque a velocidade da amostra é diferente em cada camada de solo. Isto é, o processo continua sendo um processo convectivo-dispersivo, mas com uma distribuição diferente da distribuição normal. A nova posição da amostra pode ser calculada como sendo a soma das distâncias de percurso das distribuições normais de cada passo no tempo. A soma de variáveis aleatórias com distribuições normais, também é normal (KOVÁCS, 1996, p. 40). Portanto, a posição da amostra k, no tempo t, é dada por:

$$z^k(t) \approx z_0^k + \mu_z^k(t) + \sigma_z^k(t) \chi_z^k \quad (5.4)$$

com

$$\chi_z^k = N^{-1}(P_z^k) \quad (5.5)$$

onde

z^k = posição da amostra k (m),

z_0^k = posição inicial da amostra k (m),

μ_z^k, σ_z^k = coeficientes da distribuição da distância de percurso da amostra k (m),

χ_z^k = posição na distribuição normal padrão da amostra k (1),

$N^{-1}(\dots)$ = função inverso na distribuição cumulativa normal padrão (1) e

P_z^k = probabilidade de uma amostra k, atingir uma distância de percurso menor ou igual a uma certa distância de percurso s^k , em um certo tempo de percurso t (1).

Observe que amostras com velocidades relativas diferentes, podem produzir séries diferentes. Portanto, para o caso mais geral, todos os coeficientes da eq.(5.4) dependem de k. A posição média, no tempo t, da amostra k, é calculada, usando a eq.(3.19) para todos os intervalos percorridos, ou seja:

$$\mu_z^k(t) = E\{z^k(t)\} = \int_{t_0^k}^t \bar{u}_z^k(\tau) d\tau \quad (5.6)$$

onde

\bar{u}_z^k = velocidade média Lagrangeana da amostra k (m dia⁻¹),

t_0^k = tempo de aplicação da amostra k (m) e

τ = variável de integração (dia).

Segundo as eqs.(3.13) e (3.19), a velocidade média Lagrangeana é igual à velocidade média Euleriana, para um processo convectivo-dispersivo em um perfil infinito. A velocidade média Euleriana, por sua vez, é geralmente considerada igual à velocidade da água nos poros, para um soluto não adsorvente e na ausência de uma fase líquida imóvel no volume de fluxo. Em síntese, pode-se escrever $\bar{u}_z^k(t) = v^k(t)$, onde $v^k(t)$ é a velocidade da água nos poros da amostra k.

A variância na posição das amostras pode ser relacionada ao comprimento de dispersão, usando a eq.(3.20) para todos os intervalos percorridos. Vale ressaltar que as distâncias de percurso em um processo convectivo-dispersivo não estão correlacionadas e $\rho\{X_1, X_2\} = 0$ na eq.(A.10). Portanto, a soma da eq.(3.20) para todos os intervalos percorridos, é:

$$\left(\sigma_z^k(t)\right)^2 = \text{Var}\{z^k(t)\} = \int_{t_0^k}^t 2\lambda^k(\tau) |\bar{u}_z^k(\tau)| d\tau \quad (5.7)$$

onde

λ^k = comprimento de dispersão da amostra k (m) e

$|\dots|$ = operador para o valor absoluto.

As eqs.(5.6) e (5.7) mostram que a média e a variância da posição da amostra são funções do tempo de percurso e da velocidade média de percurso. Substituindo-se as eqs.(5.6) e (5.7) na eq.(5.4), e diferenciando-se para o tempo, obtém-se para a velocidade da amostra k:

$$\begin{aligned} u^k(t) &= \frac{d}{dt} \left[\int_{t_0^k}^t \bar{u}_z^k(\tau) d\tau + \sqrt{\int_{t_0^k}^t 2\lambda^k(\tau) |\bar{u}_z^k(\tau)| d\tau} \chi_z^k \right] \\ &= \bar{u}_z^k(t) + \frac{\lambda^k(t) |\bar{u}_z^k(t)|}{\sqrt{\int_{t_0^k}^t 2\lambda^k(\tau) |\bar{u}_z^k(\tau)| d\tau}} \chi_z^k \end{aligned} \quad (5.8)$$

onde

u^k = velocidade da amostra k (m dia⁻¹).

Embora o modelo para um perfil de solo infinito seja atraente por causa da sua simplicidade, seu valor prático é limitado, pois os solutos são geralmente aplicados na superfície do solo. Procurando superar isto, um modelo para um perfil semi-infinito será apresentado na próxima seção.

5.1.2 Amostragem da distribuição normal truncada

A distribuição da distância de percurso para um processo convectivo-dispersivo, em um perfil semi-infinito, pode ser calculada através da distribuição normal truncada na posição $z = 0$. Esta transformação é necessária para conservar a massa do soluto dentro do perfil. Portanto, para um perfil de solo semi-infinito e homogêneo, e condições iniciais ($z = 0, t = 0$), a distribuição da distância de percurso pode ser escrita como segue:

$$\begin{aligned}
 f_z(t) &= \frac{\frac{1}{\sqrt{2\pi\tilde{\sigma}_z(t)}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z-\tilde{\mu}_z(t)}{\tilde{\sigma}_z(t)}\right)^2\right]}{\int_{-\infty}^0 \frac{1}{\sqrt{2\pi\tilde{\sigma}_z(t)}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\zeta-\tilde{\mu}_z(t)}{\tilde{\sigma}_z(t)}\right)^2\right] d\zeta} \\
 &= \frac{\frac{1}{\sqrt{2\pi\tilde{\sigma}_z(t)}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z-\tilde{\mu}_z(t)}{\tilde{\sigma}_z(t)}\right)^2\right]}{\int_{-\infty}^{-\frac{\tilde{\mu}_z(t)}{\tilde{\sigma}_z(t)}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\zeta)^2\right] d\zeta} \\
 &= \frac{\frac{1}{\sqrt{2\pi\tilde{\sigma}_z(t)}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z-\tilde{\mu}_z(t)}{\tilde{\sigma}_z(t)}\right)^2\right]}{N\left(-\frac{\tilde{\mu}_z(t)}{\tilde{\sigma}_z(t)}\right)} \tag{5.9}
 \end{aligned}$$

onde

$\tilde{\mu}_z, \tilde{\sigma}_z$ = coeficientes da distribuição normal truncada da distância de percurso (m) e

$N(\)$ = probabilidade cumulativa da distribuição normal padrão (1).

Vale lembrar que, neste trabalho, a coordenada z é considerada negativa abaixo da superfície do solo. A média e a variância da distribuição truncada são (veja a derivação no apêndice B):

$$E\{z(t)\} = \tilde{\mu}_z(t) - \tilde{\sigma}_z(t) \xi_z(t) \quad (5.10)$$

$$\text{Var}\{z(t)\} = (\tilde{\sigma}_z(t))^2 + E\{z(t)\} \tilde{\sigma}_z(t) \xi_z(t) \quad (5.11)$$

com

$$\xi_z(t) = \frac{\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\tilde{\mu}_z(t)}{\tilde{\sigma}_z(t)}\right)^2\right]}{N\left(-\frac{\tilde{\mu}_z(t)}{\tilde{\sigma}_z(t)}\right)}. \quad (5.12)$$

Quando são conhecidos $E\{z(t)\}$ e $\text{Var}\{z(t)\}$, os coeficientes $\tilde{\mu}_z(t)$ e $\tilde{\sigma}_z(t)$ podem ser calculados através das equações (5.10), (5.11) e (5.12), usando um método iterativo.

O denominador da eq.(5.12) é igual à definição da distribuição normal e o divisor é uma constante. Portanto, como na seção anterior, a nova posição da amostra pode ser aproximada como a soma das distâncias de percurso das distribuições normais de cada passo no tempo (veja a derivação no apêndice C, para um comprimento de dispersão constante). No caso que o comprimento de dispersão é apenas constante na distância de percurso Δz , no intervalo Δt , pode-se escrever para a posição da amostra k , no tempo t :

$$z^k(t) = z_0^k + \int_{t_0^k}^t \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \frac{\tilde{\mu}_z^k(\tau + \Delta\tau) + \tilde{\sigma}_z^k(\tau + \Delta\tau) \tilde{\chi}_z^k(\tau + \Delta\tau) - \tilde{\mu}_z^k(\tau) - \tilde{\sigma}_z^k(\tau) \tilde{\chi}_z^k(\tau)}{\Delta\tau} d\tau \quad (5.13)$$

com

$$\tilde{\chi}_z^k(t) = N^{-1} \left[(1 - P^k) N \left(-\frac{\tilde{\mu}_z^k(t)}{\tilde{\sigma}_z^k(t)} \right) \right] \quad (5.14)$$

$$\tilde{\mu}_z^k(t) \approx f(\omega^k(t), \lambda^k(t)) \quad (5.15)$$

$$(\tilde{\sigma}_z^k(t))^2 \approx g(\varpi^k(t), \lambda^k(t)) \quad (5.16)$$

$$\omega^k(t) = \int_{t_0^k}^t \bar{u}_z^k(\tau) d\tau \quad (5.17)$$

$$\varpi^k(t) = \int_{t_0^k}^t |\bar{u}_z^k(\tau)| d\tau \quad (5.18)$$

onde

$\tilde{\chi}_z^k$ = posição na distribuição normal truncada da amostra k (1),

$\tilde{\mu}_z^k, \tilde{\sigma}_z^k$ = coeficientes da distribuição normal truncada da amostra k (m),

$f(\omega, \lambda)$ = função de ajuste para a posição média da amostra (m),

$g(\varpi, \lambda)$ = função de ajuste para a variância na posição da amostra (m^2) e

ω^k, ϖ^k = argumentos das funções de ajuste da amostra k (m).

Para valores conhecidos de $E\{z(t)\}$ e $\text{Var}\{z(t)\}$, as funções de ajuste $f(\omega, \lambda)$ e $g(\varpi, \lambda)$ são as soluções para os coeficientes $\tilde{\mu}_z^k(t)$ e $(\tilde{\sigma}_z^k(t))^2$ nas eqs.(5.10), (5.11) e (5.12). Por exemplo, para um perfil semi-infinito, um fluxo de água predominantemente na direção da gravidade e um pulso do tipo delta Dirac aplicado na superfície do solo, $E\{z(t)\}$ e $\text{Var}\{z(t)\}$ são funções conhecidas, como pode ser visto no apêndice D. Para um pulso aplicado abaixo da superfície do solo o problema torna-se mais complicado. Neste caso, os valores de $E\{z(t)\}$ e $\text{Var}\{z(t)\}$ têm que ser interpolados entre os valores para um perfil infinito e um perfil semi-infinito.

Substituindo-se as eqs.(5.15) e (5.16) na eq.(5.13), e diferenciando-se para o tempo, obtém-se para a velocidade da amostra k:

$$\begin{aligned} u^k(t) &= \frac{d}{dt} \left[\int_{t_0^k}^t \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \frac{\tilde{\mu}_z^k(\tau + \Delta\tau) + \tilde{\sigma}_z^k(\tau + \Delta\tau)\tilde{\chi}_z^k(\tau + \Delta\tau) - \tilde{\mu}_z^k(\tau) - \tilde{\sigma}_z^k(\tau)\tilde{\chi}_z^k(\tau)}{\Delta\tau} d\tau \right] \\ &= \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \frac{\tilde{\mu}_z^k(t + \Delta\tau) + \tilde{\sigma}_z^k(t + \Delta\tau)\tilde{\chi}_z^k(t + \Delta\tau) - \tilde{\mu}_z^k(t) - \tilde{\sigma}_z^k(t)\tilde{\chi}_z^k(t)}{\Delta\tau} \end{aligned} \quad (5.19a)$$

ou

$$\begin{aligned} u^k(t) &= \tilde{\mu}_z^k(t) + \tilde{\sigma}_z^k(t)\tilde{\chi}_z^k(t) + \sigma_z^k(t)\tilde{\chi}_z^k(t) \\ &= f(\omega^k(t), \lambda^k(t)) + \frac{g'(\varpi^k(t), \lambda^k(t))}{2\sqrt{g(\varpi^k(t), \lambda^k(t))}} \tilde{\chi}_z^k(t) + g(\varpi^k(t), \lambda^k(t))\tilde{\chi}_z^k(t). \end{aligned} \quad (5.19b)$$

Apesar da eq.(5.19b) ser a mais correta, seria mais fácil usar a eq.(5.19a) cujas derivadas são aproximadas numericamente, supondo um comprimento de dispersão constante em cada intervalo ($\Delta z, \Delta t$).

Embora tenha sido mostrado que a derivação da velocidade de percurso de uma amostra é possível para um perfil semi-infinito, no entanto, o algoritmo para calcular os passos no espaço tornou-se bastante laborioso. Procurando superar isto, um algoritmo baseado na distribuição lognormal, será apresentado na próxima seção.

5.1.3 Amostragem da distribuição lognormal

A eq.(3.12) é a distribuição do tempo de um pulso tipo delta Dirac, para um processo convectivo-dispersivo. Esta função não é parecida com uma distribuição de probabilidade conhecida, mas pode ser aproximada como a distribuição lognormal, ou seja, com a eq.(3.9). Teoricamente, esta aproximação é apenas válida para uma distância de percurso infinito, mas na prática ela já é muito boa para distâncias de percurso da ordem de 10^0 m, ou mais. Para distâncias de percurso menores, o terceiro momento central da eq.(3.12) começa a divergir do terceiro momento central da eq.(3.9). Mesmo assim, a média e a variância podem ser adaptadas a um processo convectivo-dispersivo, para qualquer distância de percurso.

Para um perfil de solo homogêneo, e condições iniciais $z = 0$, $t = 0$, a distribuição lognormal do tempo de percurso, ou seja, a eq.(3.9), pode ser escrita como segue:

$$f_t(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_t(z)t} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\ln(t) - \mu_t(z)}{\sigma_t(z)}\right)^2\right] \quad (5.20)$$

com

$$\mu_t(z) = \ln(E\{t(z)\}) - \frac{(\sigma_t(z))^2}{2} \quad (5.21)$$

$$\sigma_t(z) = \sqrt{\ln[1 + (CV\{t(z)\})^2]} \quad (5.22)$$

$$CV\{t(z)\} = \frac{\sqrt{\text{Var}\{t(z)\}}}{E\{t(z)\}} \quad (5.23)$$

onde

$t(z)$ = tempo de percurso para profundidade z (dia),

$f_t(t; z)$ = distribuição do tempo de percurso, para profundidade z (dia^{-1}) e

$\mu_t(z)$, $\sigma_t(z)$ = coeficientes da distribuição lognormal, para profundidade z (1).

Para um perfil de solo heterogêneo, o fluxo pode ser positivo ou negativo. Neste caso, a profundidade da amostra não é uma variável independente adequada, porque $z(t)$ pode ter incrementos negativos ou positivos. Portanto, ao invés da profundidade usa-se como variável independente o valor absoluto da distância de percurso. A distância de percurso absoluta da amostra k , é definida como a soma do valor absoluto de todos os passos no espaço, ou seja, $s^k(t) = \int_{t_0}^t |u^k(\tau)| d\tau$, enquanto que a profundidade ou posição da amostra k , é definida como $z^k(t) = z_0^k + \int_{t_0}^t u^k(\tau) d\tau$.

Neste caso, o tempo de percurso da amostra é calculado como sendo a soma dos tempos de percurso das distribuições lognormais de cada intervalo Δs , ou seja:

$$\begin{aligned} t^k(s) - t_0^k &= \int_0^s \frac{dt^k(\zeta)}{d\zeta} d\zeta \\ &= \int_0^s \lim_{\Delta\zeta \rightarrow 0} \frac{t^k(\zeta + \Delta\zeta) - t^k(\zeta)}{\Delta\zeta} d\zeta \\ &= \int_0^s \lim_{\Delta\zeta \rightarrow 0} \frac{\Delta t^\circ \exp\left[\mu_{\Delta t}^k(\zeta) + \sigma_{\Delta t}^k(\zeta) \chi_t^k\right]}{\Delta\zeta} d\zeta \end{aligned} \quad (5.24)$$

com

$$\begin{cases} \chi_t^k = N^{-1}(P_t^k) & ; \bar{u}_t^k(s) < 0 \\ \chi_t^k = -N^{-1}(P_t^k) & ; \bar{u}_t^k(s) > 0 \end{cases} \quad (5.25)$$

onde

$t^k - t_0^k$ = tempo de percurso da amostra k (dia),

$\mu_{\Delta t}^k, \sigma_{\Delta t}^k$ = coeficientes da distribuição lognormal do tempo de percurso, no intervalo de percurso $[s, s + \Delta s]$, da amostra k (1),

\bar{u}_t^k = velocidade média Euleriana, da amostra k (m dia⁻¹),

Δt° = uma unidade de tempo no sistema de unidades desejado (dia),

χ_t^k = posição na distribuição normal padrão da amostra k (1),

$N^{-1}(\dots)$ = função inversa na distribuição cumulativa normal padrão (1),

P_t^k = probabilidade de uma amostra k atingir uma certa distância de percurso s , em um tempo menor ou igual a um certo tempo de percurso t^k (1) e

ζ = variável de integração (m).

Substituindo-se a eq.(5.21) na eq.(5.24), e com a ajuda da eq.(3.31), obtém-se:

$$\begin{aligned}
 t^k(s) - t_0^k &= \int_0^s \lim_{\Delta\zeta \rightarrow 0} \frac{E\{t^k(\zeta + \Delta\zeta) - t^k(\zeta)\}}{\Delta\zeta} G_{\Delta t}^k(\zeta) d\zeta \\
 &= \int_0^s \lim_{\Delta\zeta \rightarrow 0} \frac{E\{t^k(\zeta + \Delta\zeta)\} - E\{t^k(\zeta)\}}{\Delta\zeta} G_{\Delta t}^k(\zeta) d\zeta \\
 &= \int_0^s \frac{dE\{t^k(\zeta)\}}{d\zeta} G_{\Delta t}^k(\zeta) d\zeta \\
 &= \int_0^s \frac{G_{\Delta t}^k(\zeta)}{|\bar{u}_t^k(\zeta)|} d\zeta
 \end{aligned} \tag{5.26}$$

com

$$G_{\Delta t}^k(s) = \exp\left\{\sigma_{\Delta t}^k(s) \chi_t^k - \frac{(\sigma_{\Delta t}^k(s))^2}{2}\right\}. \tag{5.27}$$

Usando-se a eq.(5.22), obtem-se:

$$\sigma_{\Delta t}^k(s) = \sqrt{\ln\left(1 + (\eta_{\Delta t}^k(s))^2\right)} \tag{5.28}$$

com

$$\eta_{\Delta t}^k(s) = \lim_{\Delta s \rightarrow 0} CV\{t^k(s + \Delta s) - t^k(s)\} \tag{5.29}$$

onde

$G_{\Delta t}^k$ = tempo de percurso normalizado, no intervalo de percurso $[s, s + \Delta s]$, da amostra k (1),

$\eta_{\Delta t}^k$ = coeficiente de variação no tempo de percurso, no intervalo de percurso $[s, s + \Delta s]$, da amostra k (1).

Convém ressaltar que a eq.(5.26) é válida para $\bar{u}_t^k(s) < 0$, $\bar{u}_t^k(s) > 0$ e $\bar{u}_t^k(s) \rightarrow 0$.

Diferenciando-se a eq.(5.26), obtém-se:

$$\frac{1}{|u^k(s)|} = \frac{d(t^k(s) - t_0^k)}{ds} = \frac{d}{ds} \left[\int_0^s \frac{G_{\Delta t}^k(\zeta)}{|\bar{u}_t^k(\zeta)|} d\zeta \right] = \frac{G_{\Delta t}^k(s)}{|\bar{u}_t^k(s)|}. \tag{5.30}$$

Portanto, a velocidade da amostra k é:

$$u^k(s) = \frac{\bar{u}_t^k(s)}{G_{\Delta t}^k(s)}. \quad (5.31)$$

Observe que a eq.(5.31) é válida para qualquer valor de $\bar{u}_t^k(s)$, mesmo para $\bar{u}_t^k(s) = 0$.

Ainda é preciso discutir o valor de χ_t^k na eq.(5.25). Nas seções anteriores, os modelos foram baseados na distribuição normal e o valor de χ_t^k foi calculado usando a função inversa na distribuição cumulativa normal. Em uma distribuição normal, uma amostra com um valor de χ_t^k menor, sempre tem uma profundidade menor no perfil de solo, tanto com fluxo de água dirigido para baixo (fluxo negativo) quanto dirigido para cima (fluxo positivo). Portanto, os caminhos das amostras *nunca se cruzam* na matriz de eventos ambientais. Isto é uma condição indispensável para a validade da técnica proposta neste capítulo, porque as amostras são consideradas limites de probabilidade e um limite de probabilidade não pode cruzar um outro limite, por causa da sua própria definição.

Em uma distribuição lognormal, uma amostra com um valor de χ_t^k menor, sempre tem um tempo de percurso menor, tanto com fluxo negativo, quanto positivo. Portanto, no modelo lognormal os caminhos das amostras se cruzariam se o mesmo coeficiente de retardo, $G_{\Delta t}^k(s)$, fosse usado para ambos os fluxos. Para evitar isto, considera-se que a amostra mais rápida, no sentido descendente, deveria ser a amostra mais lenta, no sentido ascendente. Isto pode ser realizado, quando a distribuição do tempo de percurso no modelo lognormal é refletida na sua mediana. Ou seja, ao invés de se usar a probabilidade P_t^k para a amostra k , usa-se $1 - P_t^k$. Observe que para a função inversa da distribuição cumulativa normal padrão, $N^{-1}(1 - P_t^k) = -N^{-1}(P_t^k)$. Portanto, para uma amostra no modelo lognormal, obtém-se a eq.(5.25).

Esta reversão da distribuição do tempo de percurso pode ser justificada na escala local, porque isto também acontece em um processo convectivo-dispersivo, cujo fluxo de dispersão é, por definição, bidirecional. Em adição, ela também pode ser justificada na escala de campo, onde as colunas de solo com infiltração maior geralmente apresentam uma textura mais grossa, enquanto uma textura mais fina geralmente favorece o fluxo de água na

direção oposta, ou seja, o da ascensão capilar. Como resultado, a distribuição do tempo de percurso é invertida, quando o fluxo de água é invertido.

Ao invés de se usar a distribuição lognormal do tempo de percurso, pode-se usar a distribuição lognormal da distância de percurso, ou seja, a eq.(3.15), para derivar a velocidade da amostra. Esta derivação é muito parecida com o que já foi apresentado anteriormente. Portanto, será mostrado aqui apenas o resultado final:

$$u^k(s) = \bar{u}_z^k(s) G_{\Delta z}^k(s) \quad (5.32)$$

com

$$G_{\Delta z}^k(s) = \exp\left(\sigma_{\Delta z}^k(s) \chi_z^k - \frac{(\sigma_{\Delta z}^k(s))^2}{2}\right) \quad (5.33)$$

$$\begin{cases} \chi_z^k = N^{-1}(P_z^k) & ; \bar{u}_z^k(s) < 0 \\ \chi_z^k = -N^{-1}(P_z^k) & ; \bar{u}_z^k(s) > 0 \end{cases} \quad (5.34)$$

onde

$G_{\Delta z}^k$ = distância de percurso normalizada, no intervalo de percurso $[s, s + \Delta s]$, da amostra k (1) e

P_z^k = probabilidade de uma amostra k atingir uma distância de percurso menor ou igual a uma certa distância de percurso s^k , em um certo tempo de percurso t (1).

$\sigma_{\Delta z}^k$ = coeficiente da distribuição lognormal da distância de percurso, no intervalo de percurso $[s, s + \Delta s]$, da amostra k (1),

\bar{u}_z^k = velocidade média Lagrangiana da amostra k ($m \text{ dia}^{-1}$),

Observe que o coeficiente $\sigma_{\Delta z}^k(s)$ é o mesmo para a distribuição do tempo e para a distribuição da distância de percurso. Ou seja, $\sigma_{\Delta z}^k(s) = \sigma_{\Delta t}^k(s)$ e $\eta_{\Delta z}^k(s) = \eta_{\Delta t}^k(s)$.

Por definição, $P_z^k = 1 - P_t^k$, durante a percolação de uma amostra k. Segundo a eq.(5.34), isto resulta em $\chi_z^k = -\chi_t^k$. Substituindo-se este valor na eq.(5.33) e igualando-se as eqs.(5.31) e (5.32), obtém-se a relação entre a velocidade média Euleriana e

Lagrangeana: $\bar{u}_z^k(s) = \bar{u}_t^k(s) \left[1 + \left(\eta_{\Delta t}^k(s) \right)^2 \right]$ que corresponde ao que foi mostrado por JURY & ROTH (1990), p. 57.

As eqs.(5.31) e (5.32) apresentam soluções numéricas para um processo convectivo-estocástico para condições heterogêneas e não-estacionárias. Das duas equações, a eq.(5.31) é a preferida, porque geralmente $\bar{u}_t^k(s)$ pode ser considerada igual à velocidade da água nos poros, para um soluto não adsorvente e na ausência de uma fase líquida imóvel no volume de fluxo. Ou seja, $\bar{u}_t^k(s) = v^k(s)$, tanto para um processo convectivo-estocástico, quanto para um processo convectivo-dispersivo. A eq.(5.31) usa os valores de P_t^k , $\bar{u}_t^k(s)$ e $\eta_{\Delta t}^k(s)$ como dados de entrada. O valor de P_t^k é usado para calcular o valor de χ_t^k , empregando a eq.(5.25). O coeficiente de variação, $\eta_{\Delta t}^k(s)$, é constante no espaço, para um processo convectivo-estocástico e um meio poroso homogêneo. Portanto, o valor de $\eta_{\Delta t}^k(s)$ pode ser considerado uma medida do grau de heterogeneidade do meio poroso, na posição $z^k(t)$.

5.1.4 Adaptação da distribuição lognormal a um processo convectivo-dispersivo

Para um processo convectivo-dispersivo, os valores de $\bar{u}_t^k(s)$ e $\eta_{\Delta t}^k(s)$, na eq.(5.31), devem ser adaptados a este processo. O tempo médio de percurso é ajustado a um processo convectivo-dispersivo, usando-se a eq.(3.13) para todos os intervalos percorridos, ou seja:

$$E\{t^k(s) - t_0^k\} \approx \int_0^s \frac{d\zeta}{|\bar{u}_t^k(\zeta)|}. \quad (5.35)$$

Lembrando que $E\{G_{\Delta t}^k(s)\} = E\{\Delta t^k(s)/E\{\Delta t^k(s)\}\} = 1$, então o valor esperado da eq.(5.26) é a eq.(5.35). Isto implica que, para um processo convectivo-dispersivo, $\bar{u}_t^k(t)$ pode ser considerada igual à velocidade da água nos poros, para um soluto não adsorvente e na ausência de uma fase líquida imóvel no volume de fluxo.

A variância do tempo de percurso, pode ser relacionada ao comprimento de dispersão de um processo convectivo-dispersivo, usando-se a eq.(3.14), para todos os intervalos percorridos. As distâncias de percurso em um processo convectivo-dispersivo não estão

correlacionadas, ou seja, $\rho\{X_1, X_2\} = 0$ na eq.(A.10). Portanto, a soma da eq.(3.14) para todos os intervalos percorridos, é:

$$\text{Var}\{t^k(s) - t_0^k\} = \int_0^s \frac{2\lambda^k(\zeta)}{(\bar{u}_t^k(\zeta))^2} d\zeta. \quad (5.36)$$

Observe que na eq.(5.36), a difusão molecular é considerada desprezível, ou seja, o coeficiente de dispersão é dado por $D = \lambda|\bar{u}_t|$ (i.e. igual à eq.(3.5), para $\bar{u}_t = v$).

Seja $\eta_t^k(s)$ o coeficiente de variação do tempo de percurso para uma dada distância de percurso s . Assume-se que os efeitos da não-estacionaridade e não-homogeneidade do fluxo de água, no valor de $\eta_t^k(s)$, são desprezíveis. Substituindo-se as eqs.(5.35) e (5.36) na eq.(5.23), e com $\bar{u}_t^k(s) \approx \text{constante}$, obtém-se:

$$\eta_t^k(s) = \frac{\sqrt{\int_0^s \frac{2\lambda^k(\zeta)}{(\bar{u}_t^k(\zeta))^2} d\zeta}}{\int_0^s \frac{d\zeta}{|\bar{u}_t^k(\zeta)|}} \approx \frac{1}{s} \sqrt{\int_0^s 2\lambda^k(\zeta) d\zeta} \quad (5.37)$$

onde

η_t^k = coeficiente de variação do tempo de percurso da amostra k (1).

Em adição, assume-se que o fluxo predominante é descendente, e o soluto é aplicado perto da superfície do solo. Neste caso, a distância de percurso até o limite inferior de um dado compartimento no modelo é aproximadamente igual à profundidade deste limite. Para o limite inferior do compartimento i no modelo, $s = |z_{i+1/2}|$, e pode-se escrever a eq.(5.37) como:

$$\eta_t(z_{i+1/2}) \approx \frac{1}{|z_{i+1/2}|} \sqrt{2 \sum_{j=1}^{j=i} \lambda_j \Delta z_j} \quad (5.38)$$

onde

Δz_i = espessura do compartimento i (m),

λ_i = comprimento de dispersão hidrodinâmica no compartimento i (m) e

$z_{i+1/2}$ = posição do limite inferior do compartimento i (m).

Observe que, no caso da eq.(5.38), o coeficiente de variação não depende da amostra k . Portanto, os valores de $\eta_t(|z_{i+1/2}|)$ podem ser calculados com a eq.(5.38), para cada compartimento do modelo, antes de seguir a(s) amostra(s) na matriz de eventos ambientais. A seguir, serão apresentados três métodos diferentes para ajustar o coeficiente de variação do tempo de percurso no modelo lognormal à eq.(5.37) ou (5.38).

No primeiro método, a variância do modelo lognormal é somente ajustada uma vez durante o tempo de percurso de uma amostra. O ajuste é feito para uma dada distância de referência, $s = s_{ref}$. Neste caso, $\eta_{\Delta t}^k(s) = \eta_t(s_{ref}) = \text{constante}$. Embora este método seja atraente por causa da sua simplicidade, os primeiros dois momentos da distribuição lognormal somente são corretos para a distância de referência. Para todas as outras distâncias de percurso, a média e a variância da distribuição lognormal são diferentes das eqs.(5.35) e (5.36).

No segundo método, os primeiros dois momentos da distribuição lognormal são ajustados para o limite inferior de cada camada de solo no modelo, ao invés de apenas uma distância de referência. Teoricamente, isto resulta em uma descrição mais realística do processo convectivo-dispersivo. Supõe-se que a distribuição do tempo de percurso, até o limite inferior do compartimento i , pode ser descrita como a soma das distribuições lognormais dos compartimentos superiores $1, 2, \dots, i$. Neste caso, assume-se que os efeitos da não-estacionaridade e não-homogeneidade do fluxo de água, no valor de $\eta_{\Delta t}^k(s)$, são desprezíveis. Isto resulta em uma equação parabólica para o coeficiente $\eta_{\Delta t}^k(s)$ (veja a derivação no apêndice E):

$$\Delta s \left(\eta_{\Delta t}^k(s) \right)^2 + \sqrt{8 \int_0^s \lambda^k(\zeta) d\zeta} \eta_{\Delta t}^k(s) - 2\lambda^k(s) \approx 0. \quad (5.39)$$

A eq.(5.39) deve ser resolvida para cada passo Δs . Ao invés disto, supõe-se que não é necessário calcular a posição da amostra no interior dos compartimentos. Só importa o tempo quando a amostra chega ao fim do compartimento, desde que as propriedades físicas, químicas e biológicas no interior de uma camada de solo relativamente fina (i.e. uma camada de 10 cm), possam ser consideradas aproximadamente homogêneas. Portanto, ao invés de se calcular $\eta_{\Delta t}^k(s)$ para cada distância de percurso s , o modelo faz uma

extrapolação da distância de percurso até o fim do compartimento corrente e usa o mesmo valor $\eta_{\Delta t}^k(s) = \eta_i$, durante o tempo que a amostra fica no compartimento i . Quando o fluxo predominante é para baixo, e o soluto é aplicado perto da superfície do solo, a distância de percurso até o limite inferior do compartimento i no modelo é aproximadamente igual à profundidade do limite inferior do compartimento i . Neste caso, pode-se escrever a eq.(5.39) como:

$$\Delta z_i (\eta_i)^2 + \sqrt{8 \sum_{j=1}^{j=i-1} \lambda_j \Delta z_j} \eta_i - 2\lambda_i \approx 0 \quad (5.40)$$

onde

η_i = coeficiente de variação no tempo de percurso, ou na distância de percurso, do compartimento i (1).

Observe que os coeficientes η_i podem ser calculados com a eq.(5.40), para cada compartimento do modelo, antes de seguir a(s) amostra(s) na matriz de eventos ambientais.

No terceiro método, supõe-se que a distribuição do tempo de percurso, até o limite inferior do compartimento i , possa ser descrita através de uma única distribuição lognormal, ao invés da soma das distribuições lognormais das camadas superiores. No terceiro método, é mais conveniente expressar o resultado em termos da distância de percurso normalizada $G_{\Delta t}^k(s)$. Neste caso, assume-se que os efeitos da não-estacionaridade e não-homogeneidade do fluxo de água, no valor de $\eta_t^k(s)$ são desprezíveis. Isto resulta na seguinte equação, para o coeficiente (veja a derivação no apêndice F):

$$G_{\Delta t}^k(s) \approx G_t^k(s + \Delta s) + \frac{s}{\Delta s} (G_t^k(s + \Delta s) - G_t^k(s)) \quad (5.41)$$

onde

G_t^k = tempo de percurso normalizado da amostra k (1).

O coeficiente $G_t^k(s)$ é calculado da mesma maneira que o coeficiente $G_{\Delta t}^k(s)$, mas usando-se os valores $\eta_t^k(s)$, ao invés dos valores $\eta_{\Delta t}^k(s)$ (veja o apêndice F). Assume-se, novamente, que os compartimentos no modelo podem ser consideradas aproximadamente homogêneas, que o fluxo predominante é para baixo e o soluto é aplicado perto da superfície do solo. Neste caso, pode-se escrever a eq.(5.41) como:

$$G_i^k \approx G_t^k(z_{i+1/2}) + \frac{|z_{i-1/2}|}{\Delta z_i} \left(G_t^k(z_{i+1/2}) - G_t^k(z_{i-1/2}) \right) \quad (5.42)$$

onde

G_i^k = tempo de percurso normalizado, no compartimento i , da amostra k (1) e

$z_{i-1/2}$ = posição do limite superior do compartimento i (m).

Observe que os valores de G_i^k podem ser determinados com as eqs.(5.38), (F.3), (F.4) e (5.42), para cada compartimento i no modelo, antes de seguir a(s) amostra(s) na matriz de eventos ambientais.

Cada um dos métodos apresentados para ajustar o modelo lognormal a um processo convectivo-dispersivo, foi testado. Os resultados dos testes numéricos estão apresentados no capítulo 6.

5.2 ADSORÇÃO COM EQUILÍBRIO TERMODINÂMICO

Para um soluto adsorvente, a massa aplicada de uma substância química está presente na fase líquida, em um estado dissolvido, e na fase sólida, em um estado adsorvido, ou seja:

$$m^k(t) = m_r^k(t) + m_s^k(t) \quad (5.43)$$

onde

m^k = massa por área, da amostra k (g),

m_r^k = massa residente por área na fase líquida, da amostra k (g) e

m_s^k = massa adsorvida por área na fase sólida, da amostra k (g).

Dividindo-se pela espessura da amostra, a eq.(5.43) torna-se:

$$c^k(t) = \theta^k(t) c_r^k(t) + \rho^k(t) c_s^k(t) \quad (5.44)$$

onde

c^k = concentração mássica da amostra k ($g\ m^{-3}$),

c_r^k = concentração residente na fase líquida da amostra k ($g\ m^{-3}$),

c_s^k = concentração na fase sólida da amostra k (1),

θ^k = umidade volumétrica do solo da amostra k (1) e

ρ^k = densidade da massa seca do solo da amostra k (g m^{-3}).

Geralmente, a fase sólida é considerada imóvel, desprezando-se o movimento devido à compactação do solo, por exemplo. Portanto, a parte da massa aplicada que é adsorvida irreversivelmente, também pode ser considerada imóvel. Porém, a maior parte do processo de adsorção é geralmente reversível e, conseqüentemente, existe uma troca de massa entre as duas fases. Deste modo, uma amostra de massa adsorvida também pode ser considerada móvel, porque uma molécula adsorvida pode passar para a fase líquida, se deslocar, e ser adsorvida de novo. Portanto, formalmente, dever-se-ia definir duas amostras: uma amostra na fase líquida e uma amostra na fase sólida. Em geral, estas amostras têm velocidades diferentes, porque o processo de desorção é geralmente mais lento do que o processo de adsorção. Neste trabalho, para melhor delimitar os assuntos estudados, supõe-se que existe um equilíbrio termodinâmico entre as duas fases. Quando existe um equilíbrio termodinâmico, a velocidade de troca de massa entre as duas fases é teoricamente infinito, o que significa que as amostras na fase líquida e na fase sólida têm a mesma velocidade. Portanto, é necessário somente uma única amostra para descrever o transporte de um soluto com adsorção que apresenta equilíbrio termodinâmico.

A razão entre a massa total por área e a massa por área na fase líquida, no interior de uma amostra, pode ser definida como:

$$R^k(t) = \frac{c^k(t)}{\theta^k(t) c_r^k(t)} \quad (5.45)$$

onde

R^k = coeficiente de retardo devido à adsorção, da amostra k (1).

Supõe-se também que um soluto adsorvente ocupa o mesmo volume de transporte no solo do que um soluto não-adsorvente. Desta forma, dado um processo de adsorção com equilíbrio termodinâmico, e uma razão de massa entre as duas fases de $R^k(t)$, uma molécula de soluto dissolvida tem uma probabilidade de $1/R^k(t)$ de ficar na fase líquida. Portanto, uma amostra adsorvente demora $R^k(t)$ vezes mais para percorrer uma certa distância do que uma amostra não adsorvente, ou seja, a velocidade de uma amostra k adsorvente, é dada por:

$$u^k(t) = \frac{u_o^k(t)}{R^k(t)} \quad (5.46)$$

onde

u_o^k = velocidade não-adsorvente, da amostra k (m dia⁻¹).

Para uma isoterma linear, pode-se substituir as eqs.(2.31) e (2.32) na eq.(5.45). Como resultado, obtém-se para o coeficiente de retardo, devido à adsorção que:

$$R^k(t) = 1 + \frac{\rho^k(t)}{\theta^k(t)} m_{om}^k(t) K_{om}^k(t) \quad (5.47)$$

onde

m_{om}^k = fração mássica de matéria orgânica da amostra k (g g⁻¹) e

K_{om}^k = coeficiente de distribuição matéria orgânica / água, da amostra k (m³ g⁻¹).

Para uma isoterma linear, o modelo de transporte é linear, porque os coeficientes de retardo não dependem da concentração residente do soluto, como pode ser visto na eq.(5.47). Para uma isoterma não-linear, precisa-se calcular a concentração residente da amostra para cada passo no tempo, para se determinar o valor de $R^k(t)$ através da eq.(5.45).

5.3 ABSORÇÃO PELAS RAÍZES E TRANSFORMAÇÃO COM CINÉTICA DE PRIMEIRA ORDEM

Admite-se, neste caso, que o soluto apresenta uma taxa de transformação com cinética de primeira ordem. Usando-se coordenadas Eulerianas, pode-se escrever o balanço de massa para uma amostra em movimento, como:

$$\left. \frac{\partial c(z,t)}{\partial t} \right|_{z=z(t)} + \frac{c(z,t)}{V(z,t)} \left. \frac{\partial V(z,t)}{\partial t} \right|_{z=z(t)} + \mu(z,t)c(z,t) \Big|_{z=z(t)} = 0 \quad (5.48)$$

onde

$\mu(z,t)$ = coeficiente cinético (dia⁻¹) e

$V(z,t)$ = espessura de uma amostra (m).

Observando-se que o segundo termo da eq.(5.48) descreve a mudança na concentração mássica dentro da amostra, devido à expansão da amostra significa que a massa da amostra não mudaria, se não houvesse transformação ou absorção de soluto. Isto é fundamental para

a técnica proposta, porque, como foi mencionado nas seções anteriores, a massa de uma amostra é definida como um intervalo de probabilidade.

Usando-se a regra da cadeia para a diferenciação, e substituindo-se $m(z, t) = c(z, t)V(z, t)$ na eq.(5.48), obtém-se:

$$\begin{aligned} & \left. \frac{\partial c(z, t)V(z, t)}{\partial t} \right|_{z=z(t)} + \mu(z, t)c(z, t)V(z, t) \Big|_{z=z(t)} \\ & = \left. \frac{\partial m(z, t)}{\partial t} \right|_{z=z(t)} + \mu(z, t)m(z, t) \Big|_{z=z(t)} = 0 \end{aligned} \quad (5.49)$$

onde

$$m(z, t) = c(z, t)V(z, t) = \text{massa por área (g m}^{-2}\text{)}.$$

A solução da equação diferencial (5.49), na sua notação Lagrangeana, para a amostra k , é dada por:

$$m^k(t) = m_0^k \exp\left(- \int_{\tau=t_0}^{\tau=t} \mu^k(\tau) d\tau\right) \quad (5.50)$$

onde

$$m_0^k = \text{massa inicial por área, da amostra } k \text{ (g m}^{-2}\text{) e}$$

$$\mu^k = \text{coeficiente cinética da amostra } k \text{ (dia}^{-1}\text{)}.$$

Deve-se ressaltar que está sendo usada a mesma notação para o coeficiente cinético adotada no capítulo 2. Porém, é preciso expressar todas as taxas em termos da concentração mássica, como pode ser visto na eq.(5.48). Isto pode ser realizado, substituindo-se a eq.(5.45) na eq.(2.48). Como resultado, obtém-se:

$$\mu^k(t) = \mu_{\text{bio}}^k(t) + \frac{\mu_{\text{abs}}^k(t)}{\theta^k(t) R^k(t)} \quad (5.51)$$

onde

$$\mu_{\text{bio}}^k = \text{coeficiente cinético de transformação bioquímica, da amostra } k \text{ (dia}^{-1}\text{) e}$$

$$\mu_{\text{abs}}^k = \text{coeficiente cinético de absorção pelas raízes, da amostra } k \text{ (dia}^{-1}\text{)}.$$

Vale observar que processos cinéticos não-lineares também podem ser incorporados. No caso que $\mu(z, t)$ depende da concentração do soluto, a eq.(5.49) pode ser resolvida numericamente. Por exemplo, GINN et al. (1995) apresentaram um modelo convectivo-estocástico com fluxo estacionário e usaram diferenças finitas para calcular a mudança na massa de um soluto sujeito à biodegradação com cinética tipo “Michaelis-Menten”. Neste trabalho, supõe-se que a biodegradação obedece uma cinética de primeira ordem, o que permite uma solução analítica na forma da eq.(5.50).

5.4 DERIVAÇÃO DA CONCENTRAÇÃO DE SOLUTO

Por definição, a massa de uma amostra k é a fração da massa aplicada que está entre dois limites de probabilidade. Os limites de probabilidade são definidos como:

$$P_t^{k-} = P_t^k - \frac{\delta}{2} \quad (5.52a)$$

$$P_t^{k+} = P_t^k + \frac{\delta}{2} \quad (5.52b)$$

onde

P_t^{k-} = probabilidade calculada no limite inferior da amostra k (1),

P_t^{k+} = probabilidade calculada no limite superior da amostra k (1) e

δ = fração da massa aplicada por área, que está dentro da amostra (1).

Para calcular a concentração dentro de uma amostra, precisa-se seguir dois limites de probabilidade na matriz de eventos ambientais. Os valores P_t^{k-} e P_t^{k+} são facilmente convertidos para as distâncias correspondentes na distribuição normal padrão, ou seja, χ_t^{k-} e χ_t^{k+} , aplicando-se o inverso da função erro (ABRAMOWITZ & STEGUN, 1970). Com estes valores para χ_t^{k-} e χ_t^{k+} , as distâncias de percurso e/ou tempos de percurso são calculados, usando-se as equações da velocidade da amostra, apresentadas na seção 5.1. Os tempos e as distâncias de percurso destes limites são notados como t^{k-} e z^{k-} , para o limite inferior, e t^{k+} e z^{k+} , para o limite superior, respectivamente.

Emprega-se uma aproximação numérica de primeira ordem, para calcular a concentração mássica dentro da amostra:

$$c^k(t) = m^k(t) \frac{\delta}{(z^{k+}(t) - z^{k-}(t))}. \quad (5.53)$$

A concentração residente na fase líquida e a concentração de fluxo são respectivamente calculadas como:

$$c_r^k(t) = \frac{m^k(t)}{\theta^k(t) R^k(t)} \frac{\delta}{(z^{k+}(t) - z^{k-}(t))} \quad (5.54)$$

e

$$c_f^k(z) = \frac{m^k(z)}{q^k(z)} \frac{\delta}{(t^{k-}(z) - t^{k+}(z))} \quad (5.55)$$

onde

c_f^k = concentração de fluxo da amostra k ($g\ m^{-3}$) e

q^k = densidade de fluxo da água da amostra k ($m\ dia^{-1}$).

Observe que as eqs.(5.53.), (5.54) e (5.55) são as derivadas numéricas centralizadas da função $m(z, t)$. A definição da derivada numérica centralizada, para uma função $f(x)$ é, por definição (PRESS et al., 1992, p.180):

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}. \quad (5.56)$$

PRESS et al. (1992), p.181, demonstraram que a melhor escolha para o intervalo h na eq.(5.56), é dada por:

$$h \approx \left(\frac{\varepsilon_f f(x)}{f'''(x)} \right)^{1/3} \approx (\varepsilon_f)^{1/3} x_c \quad (5.57)$$

onde

ε_f = precisão relativa com que o valor da função $f(x)$ é calculado (1) e

x_c = escala caraterística da função $f(x)$.

Para funções simples, a precisão ε_f é mais ou menos igual à precisão relativa com que o computador calcula valores com aritmética de ponto flutuante (i.e. $\varepsilon_f \approx 10^{-6}$). A escala caraterística x_c é uma indicação da curvatura da função $f(x)$. Geralmente, assume-se $x_c \approx |x|$. Com estas considerações, pode-se escrever a eq.(5.57), para os intervalos no espaço e os intervalos no tempo, como segue:

$$|z^{k+}(t) - z^{k-}(t)| \approx (\varepsilon_f)^{1/3} |z^k(t)| \quad (5.58a)$$

e

$$|t^{k-}(z) - t^{k+}(z)| \approx (\varepsilon_f)^{1/3} |t^k(z)|. \quad (5.58b)$$

As eqs.(5.58a) e (5.58b) mostram que, para manter a mesma precisão na derivada numérica, a amostra tem que expandir continuamente, em relação à distância de percurso ou em relação ao tempo de percurso. Para as velocidades de amostra apresentadas na seção 5.1 isto sempre foi o caso, porque a dispersão foi modelada (1) como uma função da distância de percurso e/ou do tempo de percurso da amostra, e (2) como um processo irreversível, ou seja, sempre crescendo. Teoricamente, dever-se-ia escolher, para cada passo no tempo, um valor diferente para δ , satisfazendo-se as eqs.(5.58a) e (5.58b). Na prática, as diferenças entre os valores otimizados para δ são provavelmente pequenos. Portanto, é suficiente escolher um valor constante para δ (i.e. 10^{-3} : veja os testes numéricos no capítulo 6).

No modelo lognormal (apresentado na seção 5.1.3), a distribuição do tempo de percurso é refletida na sua mediana, quando o fluxo de água é ascendente (ou seja, negativo). Portanto, para uma amostra com dois limites de probabilidade, no modelo lognormal, obtém-se para o limite inferior:

$$\begin{cases} \chi_t^{k-} = N^{-1}(P_t^{k-}) & ; \bar{u}_t^k(s) < 0 \\ \chi_t^{k-} = -N^{-1}(P_t^{k-}) & ; \bar{u}_t^k(s) > 0 \end{cases} \quad (5.59)$$

e para o limite superior:

$$\begin{cases} \chi_t^{k+} = N^{-1}(P_t^{k+}) & ; \bar{u}_t^k(s) < 0 \\ \chi_t^{k+} = -N^{-1}(P_t^{k+}) & ; \bar{u}_t^k(s) > 0 \end{cases} \quad (5.60)$$

5.5 INTEGRAÇÃO DAS EQUAÇÕES DIFERENCIAIS

Todos os modelos Lagrangeanos apresentados, podem ser colocados na forma de um conjunto de equações diferenciais ordinárias, usando o tempo como a variável independente. Por exemplo, para uma amostra k , definida com apenas um limite de probabilidade, pode-se escrever o seguinte:

$$\begin{cases} \frac{dz^k(t)}{dt} = u^k(t, z^k, \Omega^k) \\ \frac{d\Omega^k(t)}{dt} = \mu^k(t, z^k, \Omega^k) \end{cases} \quad (5.61)$$

com

$$\Omega^k(t) = -\ln\left(\frac{m^k(t)}{m_0^t}\right) = -\ln\left(\frac{w^k(t)}{w_0^t}\right) \quad (5.62)$$

onde

w_0^t = peso inicial da amostra k (g m⁻²) e

w^k = peso da amostra k (g m⁻²).

Convém observar que Ω^k é igual à integral no tempo, do coeficiente cinético, para a amostra k. Portanto, a massa ou o peso da amostra pode ser calculado para qualquer tempo t, usando a eq.(5.62).

A eq.(5.61) pode ser integrada usando um método Runge-Kutta (PRESS et al., 1992, p. 701). Por exemplo, a solução da eq.(5.61), empregando o método Runge-Kutta de segunda ordem, resulta no algoritmo:

$$\begin{cases} \tilde{\Delta z}_i^k = \Delta t_i^k u^k(t_{i-1}^k, z_{i-1}^k, \Omega_{i-1}^k) \\ \Delta z_i^k = \Delta t_i^k u^k\left(t_{i-1}^k + \frac{\Delta t_i^k}{2}, z_{i-1}^k + \frac{\tilde{\Delta z}_i^k}{2}, \Omega_{i-1}^k + \frac{\tilde{\Delta \Omega}_i^k}{2}\right) \\ z_i^k = z_{i-1}^k + \Delta z_i^k \end{cases} \quad (5.63a)$$

$$\begin{cases} \tilde{\Delta \Omega}_i^k = \Delta t_i^k \mu^k(t_{i-1}^k, z_{i-1}^k, \Omega_{i-1}^k) \\ \Delta \Omega_i^k = \Delta t_i^k \mu^k\left(t_{i-1}^k + \frac{\Delta t_i^k}{2}, z_{i-1}^k + \frac{\tilde{\Delta z}_i^k}{2}, \Omega_{i-1}^k + \frac{\tilde{\Delta \Omega}_i^k}{2}\right) \\ \Omega_i^k = \Omega_{i-1}^k + \Delta \Omega_i^k \end{cases} \quad (5.63b)$$

onde

Δ = incremento do nível i-1 para o nível i e

$\tilde{\Delta}$ = valor intermediário de Δ .

Observe que as eqs(5.63a) e (5.63b) são colocadas na forma mais geral, onde a velocidade de percurso depende da concentração residente da amostra. Isto só é necessário quando a isoterma de adsorção é não-linear.

Para uma amostra definida com apenas um limite de probabilidade, as variáveis dependentes são $z^k(t)$ e $\Omega^k(t)$, como foi mostrado no exemplo acima. Para uma amostra definida com dois limites de probabilidade, as variáveis dependentes são $z^{k-}(t)$, $z^{k+}(t)$ e $\Omega^k(t)$.

Na seção 5.1, as distâncias e os tempos de percurso foram calculados para a aplicação de um soluto na superfície do solo na forma de um pulso tipo delta Dirac. Para processos lineares (i.e. com uma isoterma de adsorção linear), a técnica apresentada pode ser aplicada para qualquer condição inicial ou de contorno, empregando-se o conceito de superposição de múltiplas amostras. Supõe-se que as condições de contorno e as condições iniciais podem ser divididas em camadas homogêneas e períodos quase-estacionários, respectivamente. Além disto, assume-se que dentro das camadas homogêneas e dos períodos quase-estacionários, as moléculas da massa aplicada, apresentam uma distribuição uniforme.

Para um problema de condição inicial, as posições iniciais dos limites de probabilidade são, para uma amostra k aplicada no intervalo de profundidade $[z_{inc,1}, z_{inc,2}]$:

$$t_0^k = t_{inc,1} \quad (5.64a)$$

$$z_0^k = z_{inc,1} + (z_{inc,2} - z_{inc,1})\Gamma_z^k \quad (5.64b)$$

$$z_0^{k-} = z_{inc,1} + (z_{inc,2} - z_{inc,1})\left(\Gamma_z^k - \frac{\delta}{2}\right) \quad (5.64c)$$

$$z_0^{k+} = z_{inc,1} + (z_{inc,2} - z_{inc,1})\left(\Gamma_z^k + \frac{\delta}{2}\right) \quad (5.64d)$$

onde

Γ_z^k = probabilidade de uma amostra k, ser aplicada dentro da fração r_z^k do intervalo de aplicação $[z_{inc,1}, z_{inc,2}]$ (1),

$z_{inc,1}$ = limite inferior da profundidade (negativo) de aplicação (m) e

$z_{inc,2}$ = limite superior da profundidade (negativo) de aplicação (m).

Para um problema de condição de contorno, as posições iniciais dos limites de probabilidade são, para uma amostra k aplicada no intervalo de tempo $[t_{inc,1}, t_{inc,2}]$:

$$t_0^k = t_{inc,1} + (t_{inc,2} - t_{inc,1})\Gamma_t^k \quad (5.65a)$$

$$z_0^k = z_{inc,1} \quad (5.65b)$$

$$z_0^{k-} = z_{inc,1} + q_{inc} (t_{inc,2} - t_{inc,1}) \frac{\delta}{2} \quad (5.65c)$$

$$z_0^{k+} = z_{inc,1} - q_{inc} (t_{inc,2} - t_{inc,1}) \frac{\delta}{2} \quad (5.65d)$$

onde

Γ_t^k = probabilidade de uma amostra k ser aplicada dentro da fração r_t^k do intervalo de aplicação $[t_{inc,1}, t_{inc,2}]$ (1),

$t_{inc,1}$ = limite inferior do período de aplicação (dia),

$t_{inc,2}$ = limite superior do período de aplicação (dia) e

q_{inc} = densidade de fluxo de água, durante o período de aplicação ($m \text{ dia}^{-1}$).

Neste trabalho, a coordenada z abaixo da superfície do solo é considerada negativa, assim como um fluxo descendente. Portanto, durante a infiltração de soluto na superfície do solo, o valor de q_{inc} é negativo nas eqs.(5.65c) e (5.65d).

Em resumo, pode-se afirmar que cada amostra apresenta duas características probabilísticas fundamentais: uma probabilidade Γ^k (i.e. Γ_z^k ou Γ_t^k) e uma probabilidade P^k (i.e. P_z^k ou P_t^k). Todas as amostras com o mesmo valor para Γ^k pertencem ao mesmo grupo de amostras. Pode-se definir uma matriz de aplicação tridimensional, como segue: número de aplicações \times número de grupos por aplicação \times número de amostras por grupo. Portanto, cada aplicação de soluto compõe-se de vários grupos com valores para Γ^k diferentes, e cada grupo compõe-se, por sua vez, de várias amostras com valores para P^k diferentes.

As soluções dos modelos Lagrangeanos apresentadas nesta seção, podem ser empregadas em um modelo estocástico de transporte de soluto, de duas maneiras diferentes: (1) usando funções transferência ou (2) usando simulações Monte Carlo. No primeiro caso,

cada coluna independente usa a mesma matriz de variáveis aleatórias, definidas por funções de densidade de probabilidade. No segundo caso, cada coluna independente usa uma matriz de eventos ambientais diferente.

5.5.1 Modelo numérico Lagrangeano usando funções-transferência

Os dois parâmetros que influenciam no tempo de percurso de uma amostra de pesticida são: a velocidade da água nos poros ($v^k(t)$) e o coeficiente de retardo do pesticida, devido à adsorção ($R^k(t)$). Quando apenas estes dois parâmetros são aleatórios e a isoterma de adsorção é linear, seria mais eficiente aplicar um modelo estocástico, usando funções-transferência ao invés de simulações Monte Carlo. JURY et al. (1990) apresentaram um modelo estocástico de transporte, usando funções-transferência semi-analíticas. Nesta tese, emprega-se uma versão numérica deste modelo, que apresenta menos limitações do que a abordagem semi-analítica seguido por JURY et al. (1990).

As funções-transferência analíticas empregadas no modelo, são as distribuições lognormais de tempo de percurso, para cada camada de solo, e cada período de tempo, na matriz de eventos ambientais (veja a figura 5.1). Observe que, neste caso, uma única matriz de eventos é usada. Nesta matriz, as variáveis $v^k(t)$ e $R^k(t)$ são aleatórias, com as suas distribuições probabilísticas inteiramente especificadas, para cada intervalo.

Seguindo JURY et al. (1990), o transporte de soluto, na escala de campo, é descrita como um processo convectivo-estocástico com uma distribuição de tempo de percurso lognormal. Portanto, usa-se a eq. (5.31) para seguir uma amostra na matriz de eventos ambientais. Além disto, supõe-se que o tempo de percurso de um soluto não-sorvente e o coeficiente de retardo devido à adsorção, apresentam ambos uma função de distribuição de probabilidades conjunta lognormal. Portanto, o tempo de percurso de uma amostra adsorvente também apresenta uma distribuição lognormal, com os coeficientes (JURY & ROTH, 1990, p.72):

$$\mu_t(z) = \mu_{t^*}(z) + \mu_R(z) \quad (5.67)$$

$$\left(\sigma_t(z)\right)^2 = \left(\sigma_{t^*}(z)\right)^2 + \rho_{t^*,R}(z) \sigma_{t^*}(z) \sigma_R(z) + \left(\sigma_R(z)\right)^2 \quad (5.68)$$

onde

μ_{t^*}, σ_{t^*} = coeficientes da distribuição lognormal do tempo de percurso de um soluto não-adsorvente, para a profundidade z (1),

μ_R, σ_R = coeficientes da distribuição lognormal do coeficiente de retardo devido à adsorção linear, para a profundidade z (1) e

$\rho_{t^*,R}$ = coeficiente de correlação entre o tempo de percurso de um soluto não-adsorvente e o coeficiente de retardo devido à adsorção linear, para a profundidade z (1).

Para problemas de condições iniciais e/ou de contorno mais complicados do que um pulso delta Dirac, precisa-se efetuar a convolução destas condições com a função transferência, conforme pode ser visto através da eq.(3.1). Neste caso, empregam-se múltiplas amostras na matriz de aplicação. A convolução é realizada numericamente, interpolando-se as concentrações das amostras dentro de cada grupo de aplicação, e, depois, somando-se as concentrações interpoladas de cada grupo de aplicação.

No caso em que os tempos de percurso em duas camadas de solo não estão perfeitamente correlacionados, precisa-se da convolução do tempo de percurso da primeira camada com o tempo de percurso da segunda camada. Portanto, um grupo de aplicação tem que ser definido, para cada camada não correlacionada no modelo. Assim, o modelo torna-se menos eficiente, e, neste caso, talvez uma melhor opção seja o uso de simulações Monte Carlo, de acordo com o que será apresentado na próxima seção.

5.5.2 Modelo numérico Lagrangeano para simulações Monte Carlo

As restrições principais do modelo apresentado na seção anterior, são o seu número de variáveis aleatórias limitado e a sua incapacidade de descrever processos não-lineares. Estas restrições podem ser superadas, usando-se simulações Monte Carlo.

Geralmente, quando se emprega simulações Monte Carlo para calcular a lixiviação de pesticidas, o interesse está apenas nos primeiros dois momentos da distribuição da massa residual do soluto aplicado. A massa residual é a parte da massa aplicada, que atinge uma certa profundidade de controle, por exemplo, a profundidade do lençol freático. A massa residual, associada a uma amostra k que atingiu a profundidade de controle no tempo t , é:

$$w^k(t) = w_0^k \exp(-\Omega^k(t)). \quad (5.69)$$

A média e a variância da distribuição espacial da massa residual, podem ser estimadas com a média amostral (eq.(A.17)) e a variância amostral (eq.(A.18)), de todos os valores $w^k(t)$ simulados.

Na seção 3.3, foi introduzido um método para a amostragem estratificada das distribuições de parâmetros de entrada. Cada combinação de valores amostrados caracteriza uma coluna de solo imaginária. A lixiviação é calculada com um modelo de transporte local, usando-se os valores amostrados para cada coluna de solo imaginária. O transporte local é considerado um processo convectivo-dispersivo e um modelo de diferenças finitas, tal como foi apresentado no capítulo 2, pode ser usado para resolver a equação de convecção-dispersão. Estes método é muito lento e pouco elegante, porque um modelo de alta precisão é executado múltiplas vezes, enquanto que, ao final, são usadas apenas a média e a variância dos resultados individuais.

O objetivo agora é introduzir o conceito de que a distribuição do tempo de percurso do soluto, dentro de cada coluna de solo, também pode ser incluído na amostragem estratificada. Isto é possível, quando o tempo de percurso de uma amostra é independente de todas as outras amostras na mesma coluna de solo, o que é a mesma suposição usada no desenvolvimento das técnicas apresentadas na seção 5.1. Portanto, ao invés de se calcular a concentração em toda a coluna de solo, calcula-se apenas a concentração de uma amostra k , usando-se um dos modelos Lagrangeanos apresentados. Dentro do conceito convectivo-estocástico, isto pode ser interpretado como a troca de um conjunto de colunas de solo, para um conjunto de tubos de fluxo mais estreitos. Teoricamente, isto não muda a lixiviação média. Porém, a variância de um conjunto de tubos de fluxo mais estreitos é, teoricamente, maior. O desvio na variância pode ser removido, usando-se mais do que uma amostra aleatória por tubo de fluxo. Por outro lado, pode-se tomar a decisão de não remover o desvio na variância. Do ponto de vista do manejo de recursos hídricos, o que geralmente importa é a lixiviação média por área, e não necessariamente a variância dentro da área.

Para problemas com condições iniciais e/ou de contorno mais complicadas do que um pulso delta Dirac, as amostras têm que ser escolhidas a partir da matriz de aplicação. Devido a troca do conjunto de colunas de solo, para um conjunto de tubos de fluxo mais

estritos, as duas probabilidades Γ^k e P^k podem ser incluídas na amostragem estratificada. O algoritmo de amostragem estratificada escolhe apenas um valor para Γ^k e um valor para P^k , por simulação Monte Carlo. Isto quer dizer que apenas uma amostra por aplicação de soluto é usada para cada simulação Monte Carlo. Portanto, a técnica torna-se muito mais eficiente, em termos de tempo gasto no computador.

É oportuno observar que até agora, os tempos de percurso no interior de uma coluna de solo, são considerados perfeitamente correlacionados entre si. No caso da existência de um fluxo lateral na interface entre duas camadas de solo, esta suposição não é mais válida. A incorporação de tempos de percurso não correlacionados ou parcialmente correlacionados é fácil na abordagem Monte Carlo: para cada camada não perfeitamente correlacionada, mais uma variável aleatória do tipo P^k é incluída na amostragem estratificada.

A abordagem proposta pode ser usada também para processos não-lineares, tal como a adsorção com isoterma de Freundlich. Porém, o conceito de superposição não é mais válido para processos não-lineares. Por isso, uma solução não-linear é possível, somente para uma condição inicial, ou condição de contorno, igual a um pulso do tipo delta Dirac. A maioria dos pesticidas são aplicados na superfície do solo, uma ou duas vezes por ano. Isto corresponde, aproximadamente, do ponto de visto prático, a um pulso do tipo delta Dirac.

6. RESULTADOS E DISCUSSÃO

O desempenho dos modelos numéricos apresentados nos capítulos 4 e 5 foi testado, usando-se dados da literatura. Boa parte dos dados foi obtida de uma série de experimentos, realizados na estação experimental do *IAC* em Pindorama (SP), como parte do projeto *FAPESP* n° 90/3773-7 (CRESTANA, 1990). Além dos dados de Pindorama, foram usados os dados experimentais publicados por CELIA et al. (1990), SMITH et al. (1993) e outras fontes, mencionadas no texto. Todos os testes numéricos foram executados em um PC 486 DX4 100 Mhz, usando-se o sistema operacional DOS, versão 6.22. O código fonte foi escrito em FORTRAN e compilado com Microsoft Fortran Powerstation™, versão 1.0.

Para os testes numéricos, foram selecionados três solos com características hidráulicas bastante diferentes; conforme mostrado na tabela 6.1.

Tabela 6.1 - Parâmetros hidráulicos de solo, usados nos testes dos modelos numéricos; veja as eqs.(2.7) e (2.8) para o significado dos símbolos; dados obtidos de CELIA et al. (1990), SMITH et al. (1993) e CASTRO, O. M. (comunicação pessoal).

parâmetro	solo A	solo B	solo C 0 - 60 cm	solo C > 60 cm
K_s	7.966 m dia ⁻¹	0.0096 m dia ⁻¹	2.282 m dia ⁻¹	0.569 m dia ⁻¹
θ_s	0.3680	0.3325	0.3500	0.3810
θ_r	0.1020	0.1225	0.0730	0.0890
h_a	-0.2985 m	-0.800 m	-0.500 m	-0.500 m
h_s	0 m	0.100 m	0 m	0 m
ν	1.0	0.2	1.0	1.0
ψ	2.0	5.0	2.0	2.0
ϕ	2.0	5.0	2.0	2.0
φ	0.5	1.0	0.5	0.5
a	2.0	2.0	2.0	2.0
b	0.5	3.0	0.5	0.5

O solo A é um solo arenoso, e foi também usado por CELIA et al. (1990) e por RATHFELDER & ABRIOLA (1990), para testar a simulação numérica da infiltração de água. Este solo apresenta uma função de condutividade hidráulica altamente não-linear. Ou



seja, se o modelo empírico de Gardner-Rijtema fosse ajustado para o solo A, o valor para o coeficiente β nas eqs.(4.7) e (4.8) seria relativamente alto (por volta de 8.0).

O solo B é um solo argiloso, e um dos solos usados por SMITH et al. (1993), para testar o modelo de infiltração apresentado na seção 4.2.1. Este solo apresenta uma função de condutividade hidráulica moderadamente não-linear, com um coeficiente β relativamente baixo (por volta de 2.0).

O solo C é um solo Podzólico arenoso bastante comum no estado de São Paulo (PRADO, 1995, p. 162). Os parâmetros hidráulicos do solo C foram medidos por vários pesquisadores do IAC, no campo experimental de Pindorama (SP) (CASTRO, O. M., comunicação pessoal). A curva de retenção de água foi medida em 4 trincheiras. Também, foi medida a condutividade hidráulica em 230 pontos, usando-se o permeâmetro Guelph. A relação entre a condutividade hidráulica e o potencial matricial, como determinada pelo permeâmetro Guelph, esta baseada no modelo empírico de Gardner-Rijtema, ou seja (REYNOLDS et al., 1983):

$$K(h) = K_{fs} \exp(\beta h); \quad h_{lim} < h \leq h_a \quad (6.1)$$

onde

$$K_{fs} = \text{condutividade saturada de campo (m dia}^{-1}\text{)}.$$

As eqs.(2.7) e (2.8) foram ajustadas aos dados do IAC, usando-se o modelo capilar de Mualem (KÚTILEK & NIELSEN, 1994, p.108), as equações de VAN GENUCHTEN (1980) e assumiu-se que $K_s \approx K_{fs}$. Os parâmetros hidráulicos do solo C, na tabela 6.1, apresentam os valores ajustados à média de amostragem (i.e. a média aritmética) dos dados do campo experimental de Pindorama (SP).

6.1 DESEMPENHO DOS MODELOS DE FLUXO DE ÁGUA

Esta seção mostra o desempenho dos modelos de fluxo de água, apresentados no capítulo 4. Primeiro, são apresentadas as comparações entre as médias empregadas para a condutividade hidráulica em um modelo numérico com uma malha grossa de nós. Segundo, são apresentadas as comparações entre os vários modelos empíricos e soluções exatas, na escala local. Terceiro, o modelo numérico com a malha grossa, usando-se os modelos

empíricos como condição de contorno, é testado, usando-se um cenário baseado no campo experimental de Pindorama (SP).

6.1.1 Comparação entre as médias empregadas para a condutividade hidráulica

Na seção 2.1.1, foi apresentado o algoritmo de diferenças finitas de RATHFELDER & ABRIOLA (1994), para a simulação do fluxo de água em solos. A infiltração de água, no solo A, foi simulada com este algoritmo, usando-se uma condição de contorno do tipo Dirichlet de -0.75 m na superfície do perfil, -10 m no fundo do perfil, e uma condição inicial de -10 m. Também, foram empregados um passo no espaço de 1 cm, e a média geométrica para a condutividade hidráulica entre os nós (veja a eq.(2.10)). É oportuno observar que 1 cm representa um passo no espaço relativamente pequeno e, portanto, o erro devido à discretização do espaço, também é muito pequeno. A figura 6.1 mostra a distribuição do potencial matricial, depois de 6 horas de infiltração, segundo duas versões do modelo numérico e segundo a solução exata de PHILIP (1969).

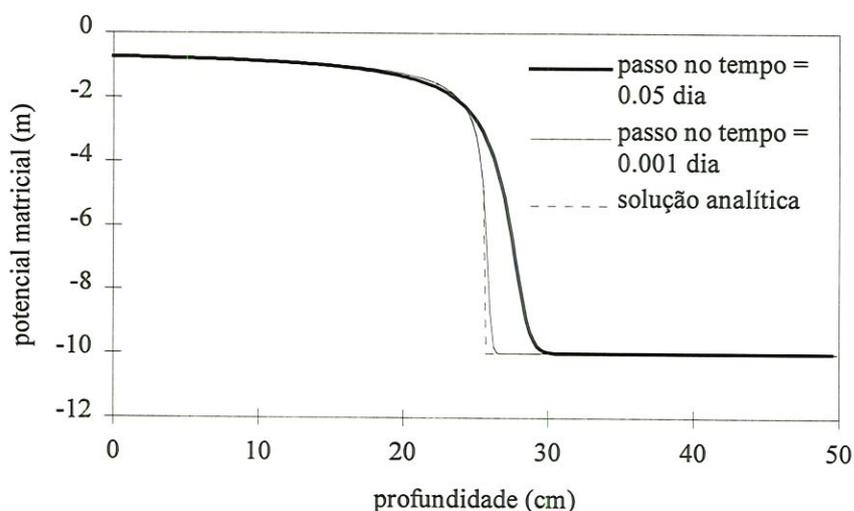


Figura 6.1 - Distribuição do potencial matricial do solo A, depois de 6 horas de infiltração, usando-se uma condição de contorno do tipo Dirichlet de -0.75 m na superfície do perfil, -10 m no fundo do perfil, uma condição inicial de -10 m, um passo no espaço de 1 cm e a média geométrica para a condutividade hidráulica entre os nós.

A figura 6.1 mostra que a solução numérica converge para a solução exata, usando-se passos pequenos no tempo. Para passos maiores no tempo, a frente de infiltração torna-se mais difusa do que a solução exata, mas aproximadamente mantém a mesma posição. Ou seja, o erro no volume de água infiltrada não aumenta muito, em função do tamanho do passo no tempo. Isto também foi mostrado por CELIA et al. (1990) e RATHFELDER &

ABRIOLA (1994). Portanto, foi confirmado que o uso do assim chamado “chord slope method” (veja a seção (2.1.1)), para calcular a capacidade diferencial de umidade, resulta em erros relativamente pequenos, devido a discretização no tempo.

O mesmo cenário de simulação foi repetido várias vezes, variando-se o tamanho dos passos no espaço e no tempo. Estas simulações foram usadas para medir o erro relativo no volume de água infiltrada e o trabalho no computador por simulação. O “índice de trabalho”, neste caso, é uma função do número de iterações Picard realizadas por simulação, e, portanto, uma indicação relativa do tempo gasto no computador. A figura 6.2 mostra os resultados para um passo no espaço de 1 cm e vários passos no tempo, enquanto a figura 6.3 mostra os resultados para um passo no tempo de 0.01 dia e vários passos no espaço.

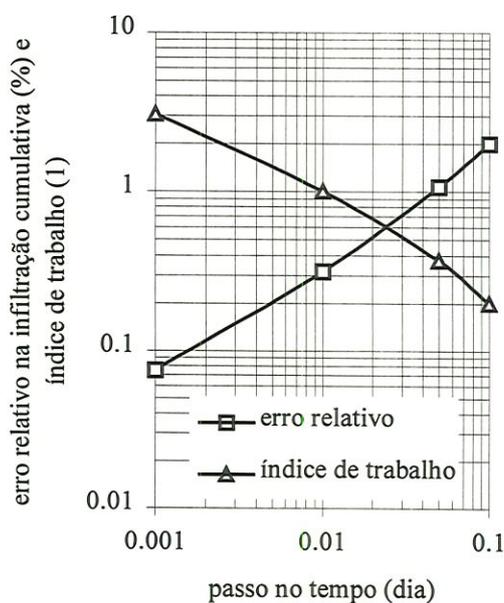


Figura 6.2 - Erro relativo no volume de água infiltrada, e o índice de trabalho no computador por simulação, em função do passo no tempo, para um passo no espaço de 1 cm; as outras condições são iguais às condições da figura 6.1

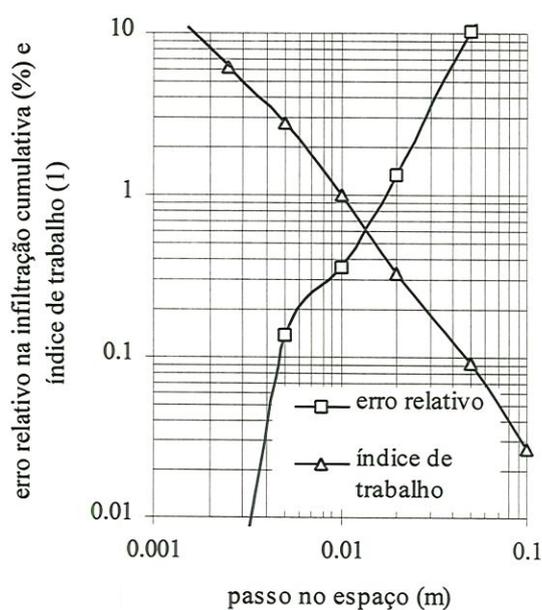


Figura 6.3 - Erro relativo no volume de água infiltrada, e o índice de trabalho no computador por simulação, em função do passo no espaço, para um passo no tempo de 0.01 dia; as outras condições são iguais às condições da figura 6.1

Pode-se tirar duas conclusões das figuras 6.2 e 6.3. Primeiro, multiplicando-se o passo no tempo por um fator 10, resulta em uma simulação 5 vezes mais veloz, enquanto o mesmo aumento no passo no espaço (aumentando-se o passo de 1 cm até 10 cm), resulta em uma simulação 40 vezes mais veloz. Portanto, apenas aumentando-se o passo no tempo, não é suficiente para tornar o modelo numérico bastante rápido. Segundo, um passo no

tempo relativamente longo, de 0.1 dia, resulta em um erro relativo de apenas 2%. Isto confirma novamente que o algoritmo de RATHFELDER & ABRIOLA (1994) resulta em erros relativamente pequenos, devido a discretização no tempo. Porém, a figura 6.3 mostra que um passo no espaço relativamente comprido, de 10 cm, resulta em um erro relativo inaceitável (por volta de 60%). Portanto, o algoritmo de RATHFELDER & ABRIOLA (1994) não resulta em erros relativamente pequenos, devido a discretização no espaço.

O algoritmo de RATHFELDER & ABRIOLA (1994) usa a média geométrica para calcular a condutividade hidráulica entre os nós (veja a eq.(2.10)), o que é a escolha mais comum para o método de diferenças finitas. A partir desta afirmação, o objetivo é provar que o erro, devido a discretização no espaço, pode ser reduzido, através do uso da média correta. Como foi mencionado no capítulo 4, o uso da média uniforme apresenta a vantagem do coeficiente r (na eq.(4.14)) poder ser otimizado. O valor ótimo de r , durante a infiltração de água no solo, foi investigado para várias situações, apresentando-se uma condição de contorno do tipo Dirichlet. Foi usada uma malha com uma distância entre os nós de 10 cm. Além disto, foram inseridos alguns nós, perto da superfície do solo, para evitar que a condição de Dirichlet introduza um erro no volume de água infiltrada. A simulação foi repetida 9 vezes, variando-se o potencial matricial inicial (h_i), o potencial matricial na superfície do solo (h_0), a condutividade hidráulica saturada (K_s) e o tipo de solo (A ou B). Assume-se que os resultados destas 9 situações diferentes, permite retirar conclusões genéricas, em relação ao desempenho das médias testadas. Foram testados 5 valores para o coeficiente r na eq.(4.14): $r = -0.5$ (i.e. a média geométrica), $r = -0.25$, $r = 0$ (i.e. a média dinâmica), $r = \nabla z / \nabla h = 1/\text{grad}(h)$ (i.e. a média uniforme em uma coluna de solo vertical) e $r = 1$ (i.e. a média aritmética). Foi calculado o erro relativo e o erro absoluto da infiltração cumulativa, depois de 0.25 dia, conforme pode ser visto nas figuras 6.4 e 6.5.

A figura 6.4 mostra que os erros relativos variam muito, de uma situação para a outra, quando a média geométrica ou a média aritmética são usadas. Portanto, estas médias são de baixa confiabilidade. O melhor desempenho é apresentado pela média dinâmica, cujo erro é sempre relativamente baixo (no máximo 6.3%, para as 9 situações estudadas). Soma-se a isto que a média dinâmica apresenta a propriedade de que o seu erro relativo é relativamente baixo, quando a densidade de fluxo é relativamente alta. Isto resulta em erros absolutos relativamente baixos, quando a média dinâmica é empregada. Isto é confirmado na figura 6.5, que mostra a distribuição dos erros absolutos na infiltração cumulativa.

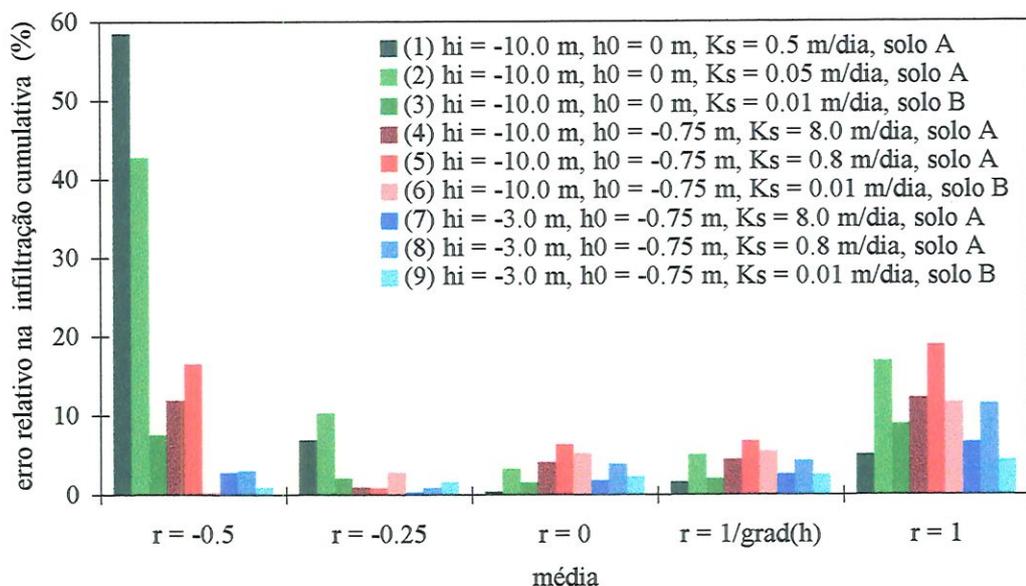


Figura 6.4 - Erro relativo na infiltração cumulativa, depois de 0.25 dia, para valores diferentes do coeficiente r na eq.(4.14), empregada para calcular a condutividade hidráulica entre os nós em uma malha grossa, com uma distância entre os nós de 10 cm; h_i = potencial matricial inicial, h_0 = potencial matricial na superfície do solo, K_s = condutividade hidráulica saturada.

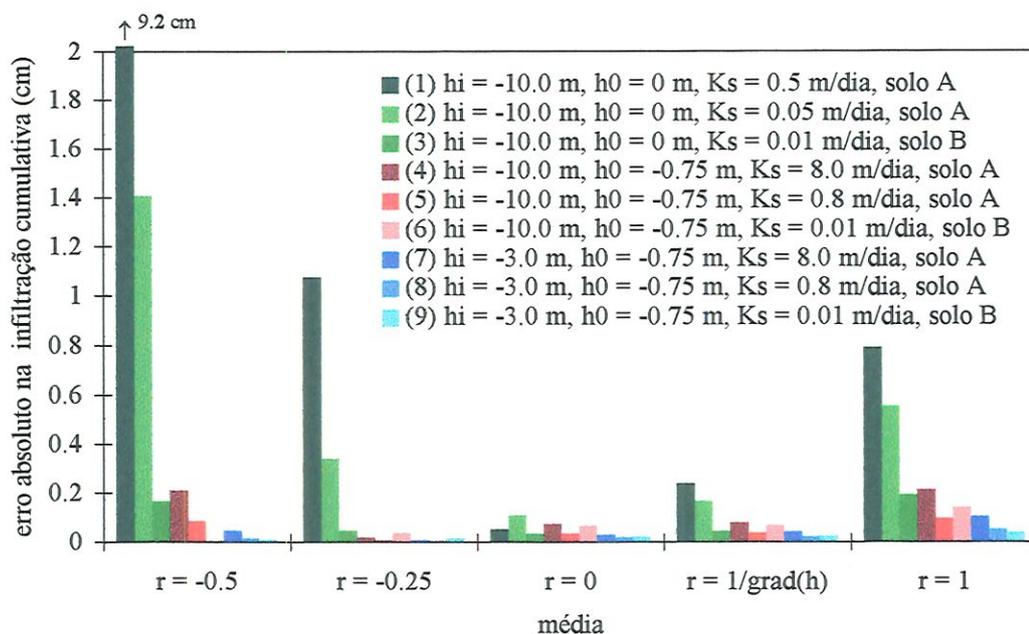


Figura 6.5 - Erro absoluto na infiltração cumulativa, depois de 0.25 dia, para valores diferentes do coeficiente r na eq.(4.14), empregada para calcular a condutividade hidráulica entre os nós em uma malha grossa, com uma distância entre os nós de 10 cm; h_i = potencial matricial inicial, h_0 = potencial matricial na superfície do solo, K_s = condutividade hidráulica saturada.

A figura 6.6 mostra os resultados obtidos para a média dinâmica, em detalhes. Os erros relativos das simulações individuais, são indicados com os números 1 até 9. Além disto, os resultados são divididos em 3 grupos, ou seja: as simulações 1-3, 4-6 e 7-9. As condições iniciais e as condições de contorno são as mesmas, dentro de cada grupo. Ou seja, as únicas diferenças entre as simulações, dentro de um dado grupo, são as características hidráulicas do solo conforme mostram as legendas das figuras 6.4 e 6.5. Desta maneira, a figura 6.6 confirma que, no caso da média dinâmica, o erro relativo é menor, quando as propriedades hidráulicas do solo resultam em uma densidade de fluxo maior.

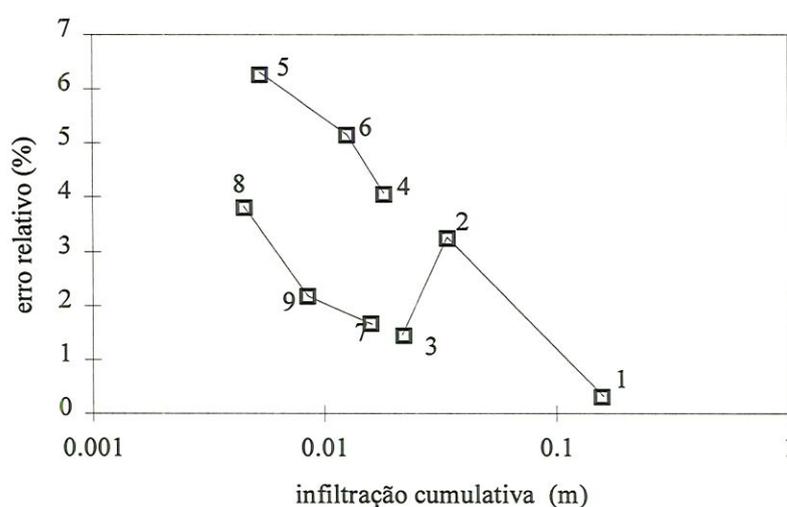


Figura 6.6 - Erro relativo na infiltração cumulativa, para as simulações 1 até 9, empregando-se a média dinâmica e uma malha grossa, com uma distância entre os nós de 10 cm. Os resultados são divididos em 3 grupos. Os pontos de cada grupo são conectados com uma linha sólida.

Portanto, o emprego da média dinâmica em um modelo de colunas independentes (veja a introdução do capítulo 4), resulta em uma precisão maior nas colunas mais permeáveis e uma precisão menor nas colunas menos permeáveis. Isto apresenta uma situação favorável, porque as colunas mais permeáveis são as mais importantes, em termos de lixiviação de pesticidas para o lençol freático.

As figuras 6.7 e 6.8 mostram como o emprego da média dinâmica resulta na simulação do fluxo de infiltração sem desvio sistemático, em solos altamente permeáveis (simulações 1 e 4 nas legendas das figuras 6.4 e 6.5). É conveniente observar que a simulação da frente de infiltração é apenas uma aproximação, devido ao uso de uma malha

grossa de nós. Porém, a posição média da frente está correta, resultando-se em um erro muito baixo na infiltração cumulativa. Teoricamente, isto evita um desvio sistemático nos primeiros dois momentos da distribuição espacial do processo de infiltração, em um modelo de colunas independentes.

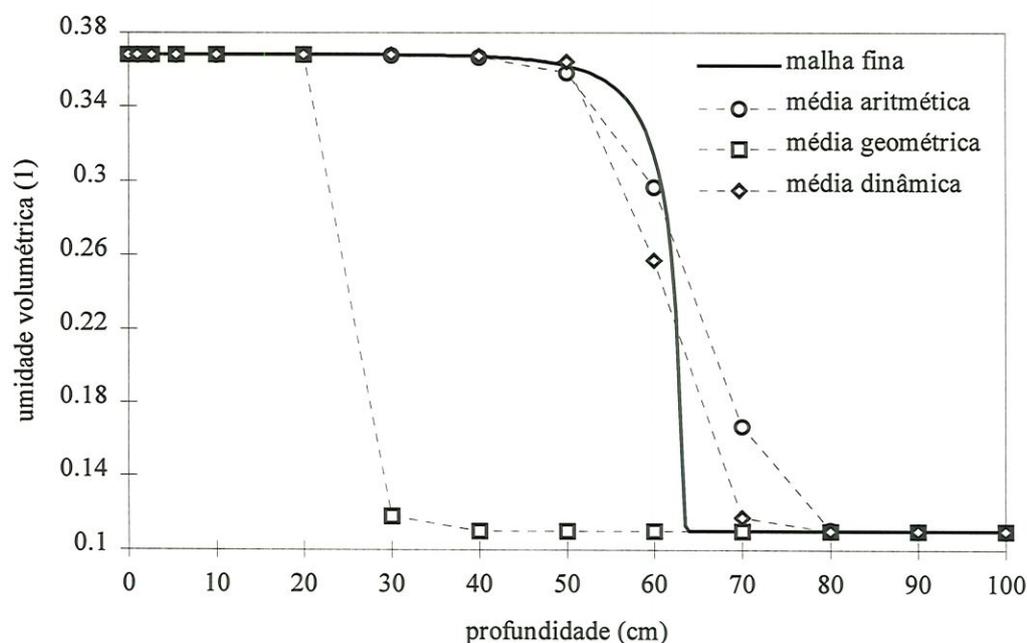


Figura 6.7 - Distribuição do potencial matricial do solo A, com $K_s = 0.5 \text{ m dia}^{-1}$, depois de 6 horas de infiltração, usando-se uma condição de contorno do tipo Dirichlet de 0.0 m na superfície do perfil, -10 m no fundo do perfil, uma condição inicial de -10 m, um passo no espaço de 10 cm e a média dinâmica para a condutividade hidráulica entre os nós (i.e. a simulação 1, nas figuras 6.4 e 6.5).

Além disto, os resultados mostram que a média dinâmica resulta em erros relativos menores, quando o gradiente no potencial matricial é maior (compare as simulações de 1 a 3, com as demais). Isto é óbvio, porque a média dinâmica, em uma coluna de solo vertical, é caracterizada por $r = 1/\text{grad}(h) = 0$, ou seja, $\text{grad}(h) \rightarrow \pm\infty$.

Em um solo em condições de campo, o gradiente do potencial matricial muda em função do tempo, devido às mudanças nas condições meteorológicas. Pode acontecer que, durante os períodos sem infiltração, o valor absoluto do gradiente do potencial matricial seja relativamente baixo. Neste caso, a média dinâmica não é necessariamente a melhor escolha. Porém, um gradiente hidráulico menor, também significa que as condutividades hidráulicas de dois nós adjacentes são mais próximas, porque a condutividade hidráulica é uma função do potencial matricial. Conseqüentemente, o erro na condutividade média (qualquer média)

é menor. As figuras 6.9 e 6.10 mostram os valores das condutividades médias entre dois nós adjacentes. O primeiro nó é saturado e apresenta um potencial matricial $h > h_a$, enquanto o potencial matricial do segundo nó é indicado no eixo das abscissas. As figuras 6.9 e 6.10 mostram que a média dinâmica sempre chega muito perto da média uniforme, para qualquer diferença no potencial matricial.

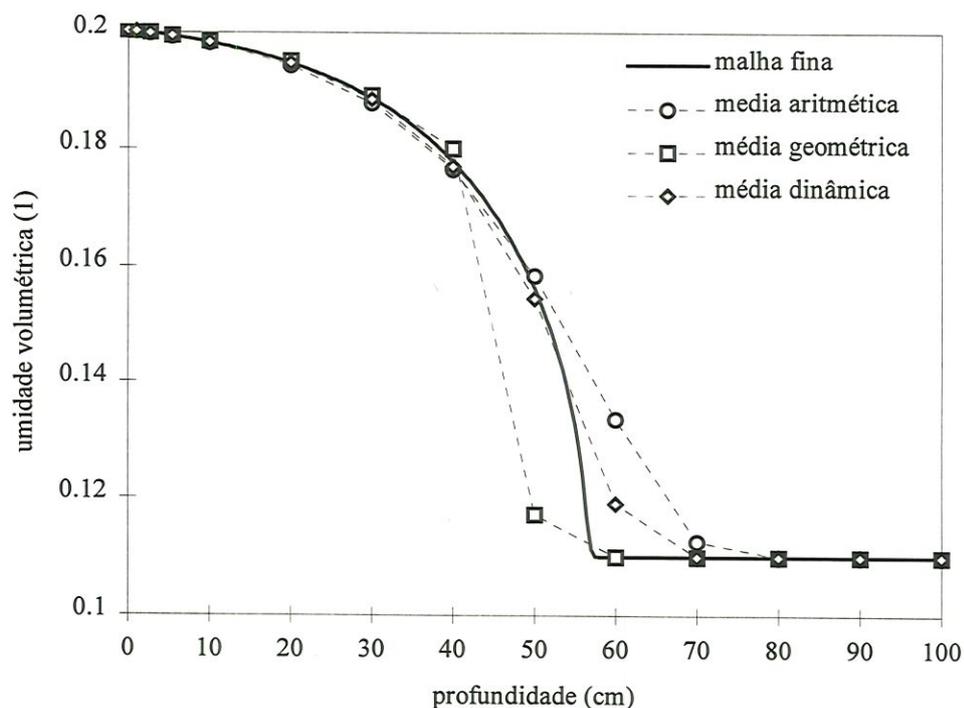


Figura 6.8 - Distribuição do potencial matricial no solo A, com $K_s = 8.0 \text{ m dia}^{-1}$, depois de 6 horas de infiltração, usando-se uma condição de contorno do tipo Dirichlet de -0.75 m na superfície do perfil, -10 m no fundo do perfil, uma condição inicial de -10 m , um passo no espaço de 10 cm e a média dinâmica para a condutividade hidráulica entre os nós (i.e. a simulação 4, das figuras 6.4 e 6.5).

As figuras 6.4 e 6.5 mostraram que a média dinâmica apresenta um desempenho melhor do que a média uniforme, na simulação da infiltração de água. Como foi mencionado na seção 4.1.1, durante a infiltração de água em um solo seco, o modelo empírico de Gardner-Rijtema geralmente não é mais válido. Neste caso, a eq.(4.13) não é necessariamente a melhor estimativa para o valor de r e a média dinâmica torna-se superior à média uniforme.

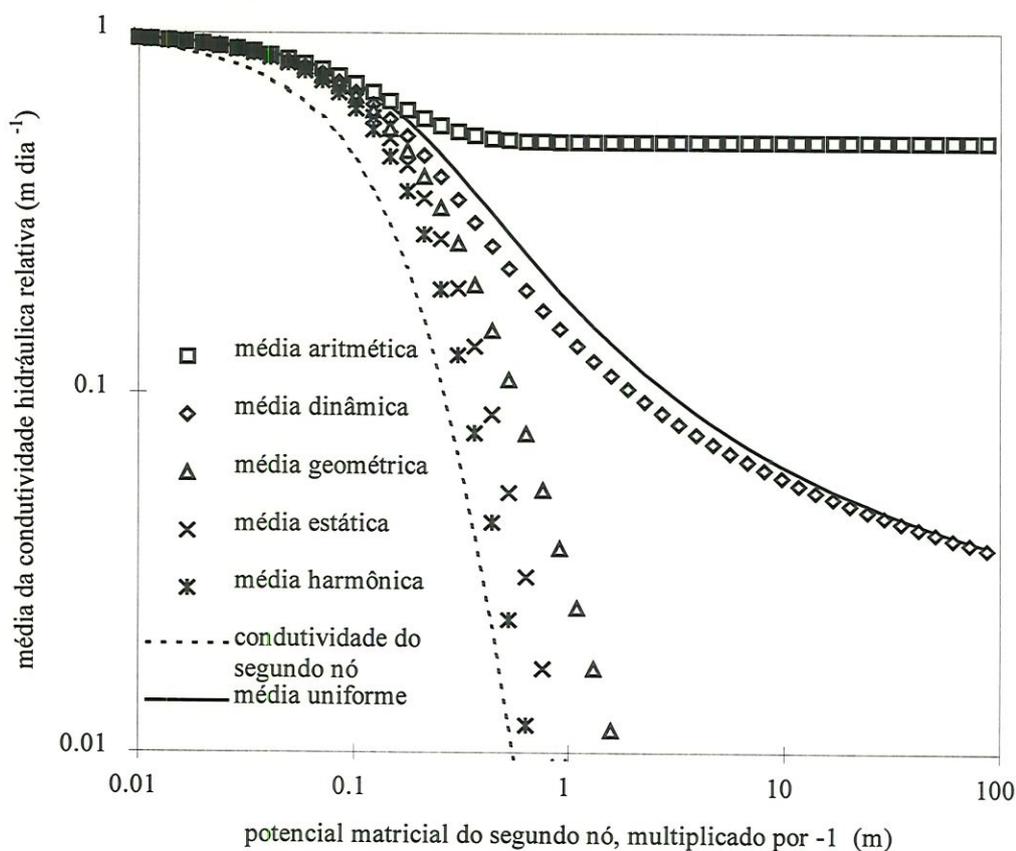


Figura 6.9 - Comparação entre as diferentes médias para a condutividade hidráulica relativa do solo A, entre dois nós adjacentes. O primeiro nó é saturado e apresenta um potencial matricial $h > h_a$, enquanto o potencial matricial do segundo nó é indicado no eixo das abscissas; a média uniforme foi calculada para $\Delta z_{1,2} = 10$ cm.

Ainda não foi discutida a questão da estabilidade da solução numérica. Uma solução numérica instável poderá convergir, mas apresentará oscilações no fluxo simulado em função do tempo. Durante alguns testes com o algoritmo de RATHFELDER & ABRIOLA (1994), usando-se a eq.(2.15) como a condição de contorno e uma malha grossa (distância entre os nós: 10 cm), foi observado o seguinte: quanto maior o valor da média, mais estável é a solução numérica. Portanto, de todas as médias testadas a média aritmética é a mais estável e a média geométrica a menos estável (veja as figuras 6.9 e 6.10). Infelizmente, a média aritmética resulta em erros relativamente grandes no fluxo simulado, como pode ser visto nas figuras 6.4 e 6.5. A média dinâmica, por outro lado, é quase tão estável como a média aritmética, mas apresenta um erro muito menor no fluxo simulado. A média geométrica, cujo uso é geralmente recomendado em textos numéricos bem conhecidos, tornou o modelo numérico tão instável, que não houve uma solução convergente, para

alguns dos testes realizados com a eq.(2.15) como condição de contorno e uma malha grossa (distância entre os nós: 10 cm).

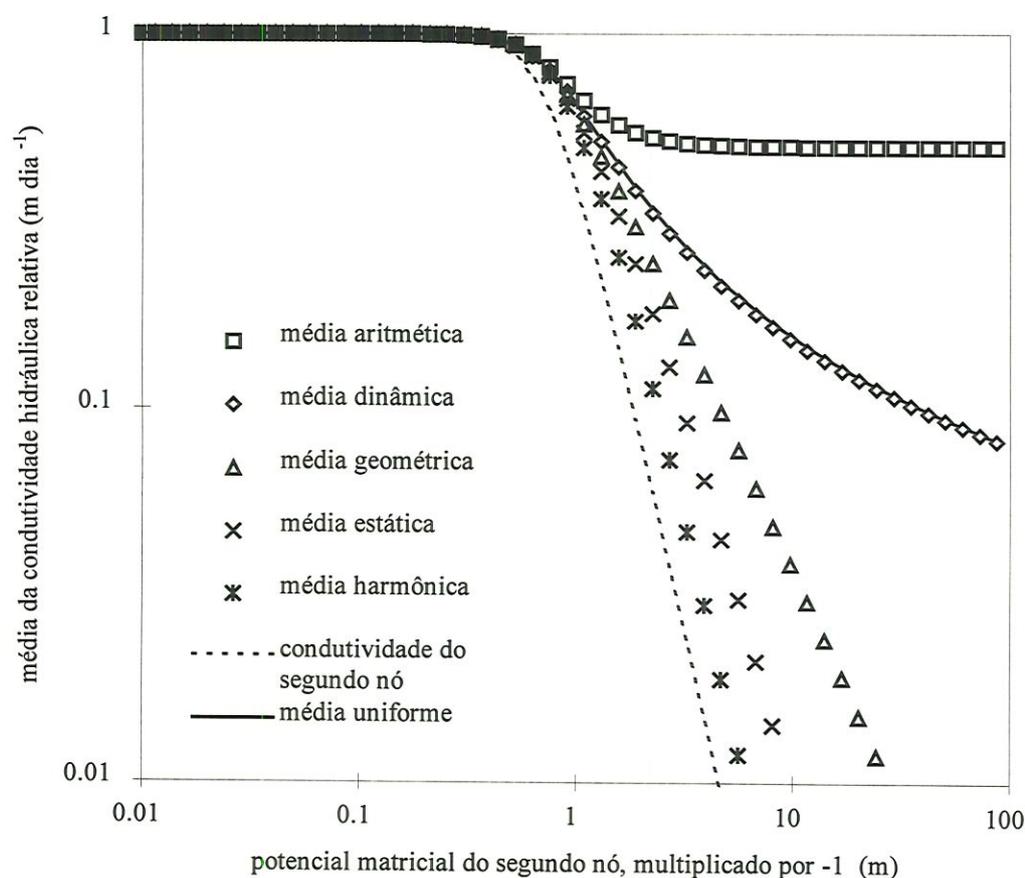


Figura 6.10 - Comparação entre as diferentes médias para a condutividade hidráulica relativa do solo B, entre dois nós adjacentes. O primeiro nó é saturado e apresenta um potencial matricial $h > h_a$, enquanto o potencial matricial do segundo nó é indicado no eixo das abscissas; a média uniforme foi calculada para $\Delta z_{1,2} = 10$ cm.

6.1.2 Testes numéricos do modelo empírico de infiltração

O solo B, sem a presença de uma cultura, foi usado para testar o modelo empírico de PARLANGE et al. (1982), apresentado na seção 4.2.1.

O modelo empírico foi comparado com uma solução analítica da equação de Richards, apresentada por SMITH et al. (1993). Esses autores calcularam a infiltração no solo B, empregando-se uma umidade volumétrica inicial de 0.1659 e uma chuva de 0.12 m dia⁻¹, durante 6 horas. Empregando-se a eq.(4.42), uma umidade volumétrica inicial de

0.1659 resulta em um valor para a sortividade inicial (Λ_i) de $0.05878 \text{ m d}^{-1/2}$ e um valor de 0.8 foi escolhido para o coeficiente ϑ na eq.(4.34), de acordo com SMITH et al. (1993).

A figura 6.11 mostra a existência de uma boa comparação entre a solução analítica e o modelo empírico, para este cenário. Convém observar que, neste caso, o tempo de encharcamento é da ordem de 3 horas.

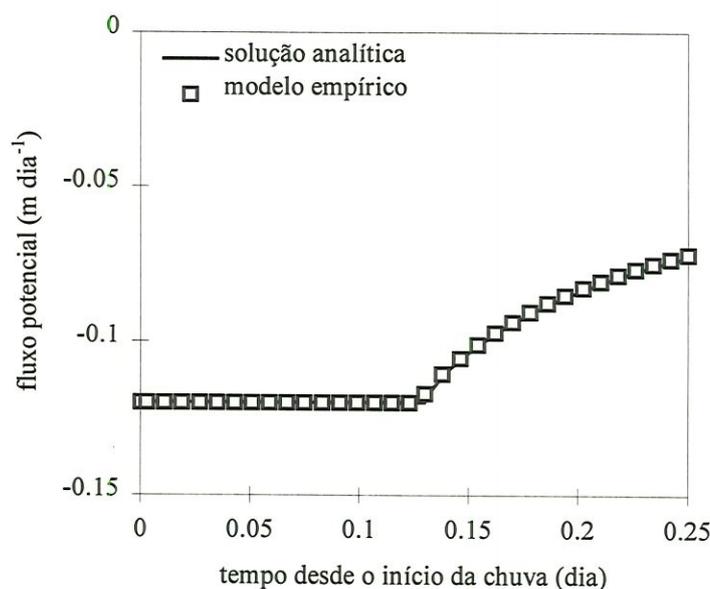


Figura 6.11 - Comparação entre o modelo empírico de PARLANGE et al. (1982) e uma solução analítica da equação de Richards, para a infiltração do solo B; intensidade de chuva = 0.12 m dia^{-1} , $\theta_i = 0.1659$, $\Lambda_i = 0.05878 \text{ m d}^{-1/2}$ e $\vartheta = 0.8$.

O mesmo cenário foi usado para testar o modelo empírico na presença de uma camada de água na superfície do solo. Supõe-se que o solo consiga armazenar, no máximo, 5 cm de água na sua superfície. Neste caso, o modelo empírico foi comparado com o modelo numérico apresentado na seção 2.1.1, usando-se a eq.(2.15) como condição de contorno. Foi empregada, no modelo numérico, uma malha fina (distância entre os nós: 2.5 mm), resultando-se em uma solução de alta precisão.

As figuras 6.12 e 6.13 mostram uma boa comparação entre a solução analítica e o modelo empírico, para este cenário. Vale destacar que, neste caso, mais água entra no solo do que na figura 6.11, porque depois do término da chuva, a água armazenada na superfície continua infiltrando-se no solo (veja também a figura 4.5).

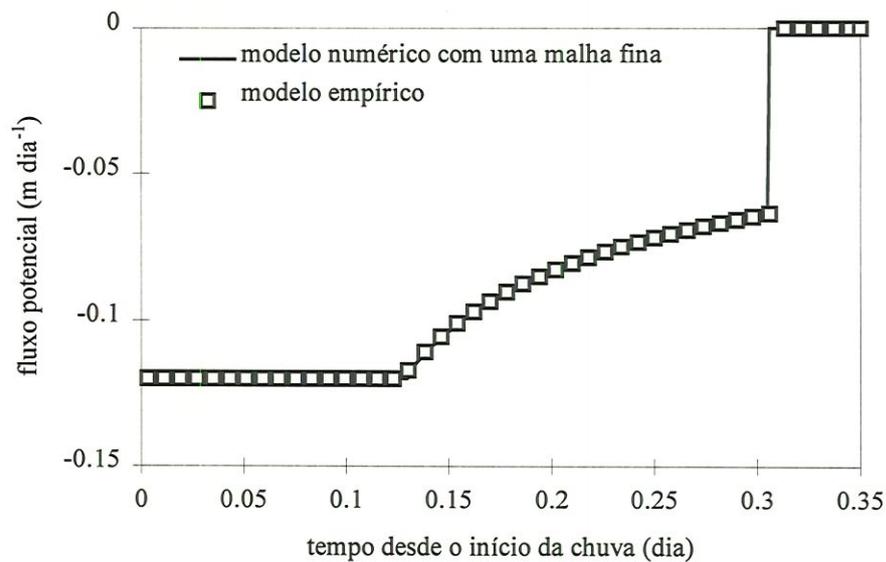


Figura 6.12 - Comparação entre o modelo empírico de PARLANGE et al. (1982) e uma solução numérica da equação de Richards, para a infiltração do solo B, com a presença de uma camada de água superficial; intensidade de chuva = 0.12 m dia^{-1} , duração da chuva = 0.25 dia , $\theta_i = 0.1659$, $\Lambda_i = 0.05878 \text{ m d}^{-1/2}$ e $\mathcal{S} = 0.8$.

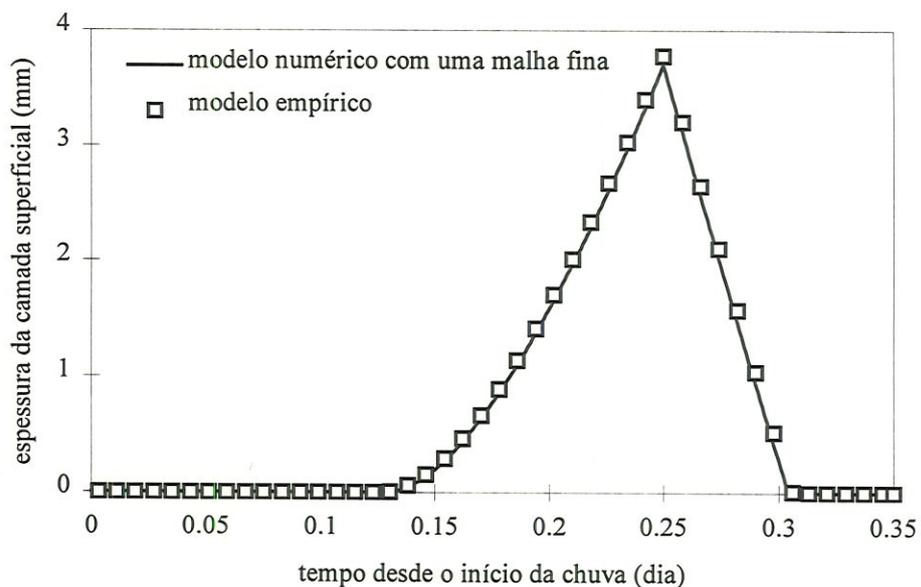


Figura 6.13 - Espessura da camada superficial de água, em função do tempo, segundo o modelo empírico de PARLANGE et al. (1982) e segundo uma solução numérica da equação de Richards, para as condições indicadas na figura 6.12

Os testes numéricos provaram que o método Newton-Raphson, como apresentado na seção 4.2.1, é muito eficiente para resolver o modelo de PARLANGE et al. (1982). No

máximo, 6 iterações foram necessárias para reduzir o erro relativo do fluxo cumulativo até o limite de 10^{-3} . Ainda mais, foi demonstrado que o modelo de PARLANGE et al. (1982) pode ser empregado com uma camada superficial de água. A possibilidade de armazenar água na superfície do solo resulta em valores mais altos de infiltração.

Ressalta-se que, nos testes numéricos realizados, o modelo empírico de infiltração foi empregado em simulações contínuas, com passos no tempo relativamente pequenos, visando-se comparar o fluxo de infiltração com as soluções exatas.

6.1.3 Testes numéricos do modelo empírico de evaporação

O solo B apresenta um ciclo de evaporação relativamente longo. Portanto, o solo B, sem a presença de uma cultura, foi escolhido para testar o modelo empírico de evaporação apresentado na seção 4.2.2. Primeiro, um único ciclo de evaporação foi simulado por um modelo numérico com uma malha fina (distância entre os nós: 0.25 mm), empregando-se a eq.(2.16) como condição de contorno. O potencial matricial em equilíbrio com a atmosfera foi igual a -2500 m e a evaporação potencial igual a 3 mm dia⁻¹. Para calcular a condutividade hidráulica entre os nós, a média dinâmica foi empregada. Durante a simulação, foram registrados simultaneamente os potenciais matriciais h_1 e h_{ref} , nas profundidades $z_{ref} = 2.5$ mm e $z_1 = 50$ mm, respectivamente. Segundo, uma função monotônica Ψ foi ajustada para os valores de h_1 e h_{ref} , registrados durante o segundo estágio da evaporação. Foi ajustada a função logarítmica $h_{ref} = 335.27 - 183.67 \ln(-h_1)$, válida para $h_1 < 15.0$ m, conforme mostrado na figura 6.14.

A figura 6.15 mostra a evaporação real, simulada com o mesmo modelo numérico, mas com uma malha grossa de nós (distância entre os nós: 10 cm), usando-se a função Ψ , ajustada na figura 6.14. Uma solução de alta precisão foi simulada por um modelo numérico com uma malha fina (distância entre os nós: 0.25 mm), empregando-se a eq.(2.16) como condição de contorno. Como pode ser visto na figura 6.15, a aproximação é muito boa, Observe que os passos no tempo são muito maiores no modelo numérico com a malha grossa, do que no modelo com a malha fina.

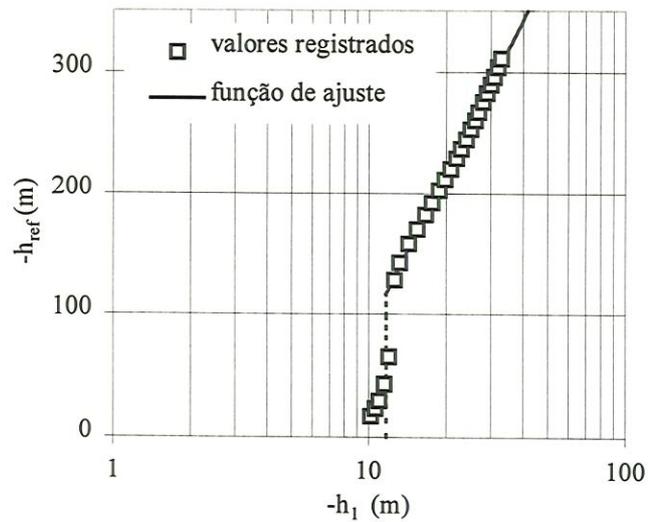


Figura 6.14 - Valores registrados de h_1 e h_{ref} , e a função de ajuste Ψ , para um único ciclo de evaporação do solo B, sem a presença de uma cultura; potencial matricial inicial = -10 m, $z_{ref} = 2.5$ mm, $z_1 = 50$ mm, $h_{atm} = -2500$ m e $E_{pot} = 3$ mm dia⁻¹.

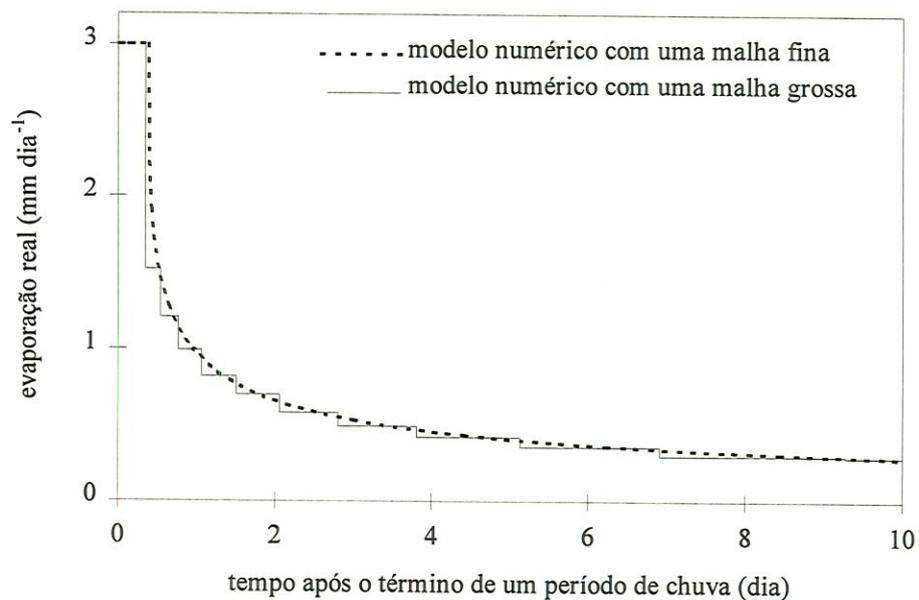


Figura 6.15 - Evaporação real do solo B, simulada por dois modelos numéricos, para as condições indicadas na figura 6.14 (o modelo com uma malha grossa usa a função Ψ da figura 6.14).

Para testar a universalidade da função Ψ , pode-se repetir a simulação da figura 6.15, com parâmetros hidráulicos, condições de contorno ou condições iniciais diferentes. A figura 6.16 mostra a evaporação do solo B, com um potencial matricial inicial de -0.5 m e

uma evaporação potencial de 1 mm dia^{-1} . A figura 6.17 mostra a evaporação do solo B, com valores para θ_s e K_s diferentes da tabela 6.1. A figura 6.18 mostra a evaporação do solo A, ao invés do solo B. Todas estas simulações foram realizadas, empregando-se a função Ψ , calibrada para o solo B, na figura 6.14. Os resultados mostram que o modelo numérico com a malha grossa, aproxima muito bem a evaporação cumulativa, mesmo para condições muito diferentes.

Quando o tipo de solo é completamente diferente, a função Ψ deve ser calibrada de novo, para obter uma maior precisão. Por exemplo, a figura 6.18 mostra que a aproximação não é muito boa, no caso do solo A, que é um solo completamente diferente do solo B.

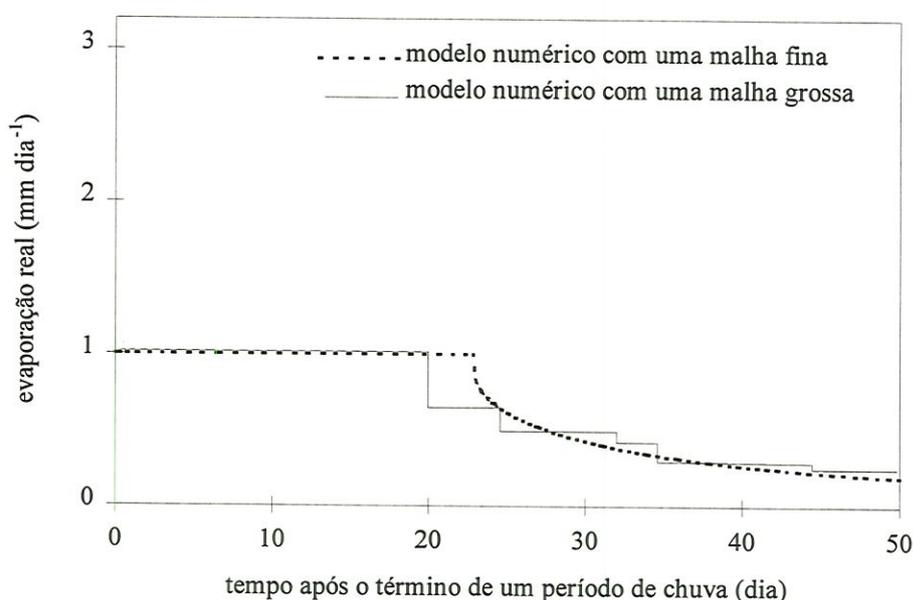


Figura 6.16 - Evaporação real do solo B, simulada por dois modelos numéricos, para as condições indicadas na figura 6.14, exceto com potencial matricial inicial de -0.5 m e uma evaporação potencial de 1 mm dia^{-1} (o modelo com uma malha grossa usa a função Ψ da figura 6.14).

Foi mostrado que a função Ψ quase não depende de K_s , nem de θ_s , e nem das condições iniciais e condições de contorno. Portanto, Ψ é uma função bastante genérica e precisa ser calibrada uma única vez, para um modelo de colunas independentes, onde K_s e θ_s são as variáveis aleatórias.

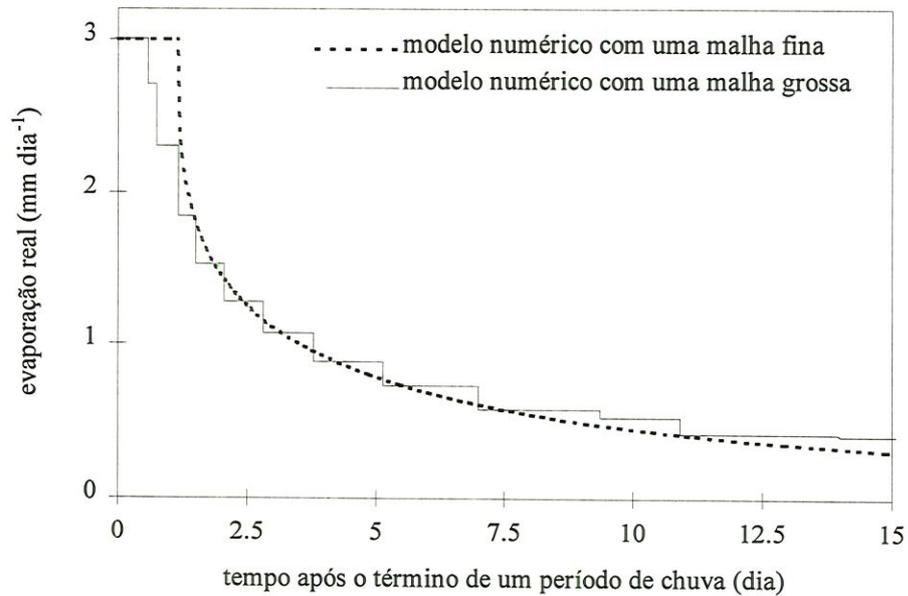


Figura 6.17 - Evaporação real do solo B, simulada por dois modelos numéricos, para as condições indicadas na figura 6.14, exceto os parâmetros $\theta_s = 0.30$ e $K_s = 0.05 \text{ m dia}^{-1}$ (o modelo com uma malha grossa usa a função Ψ da figura 6.14).

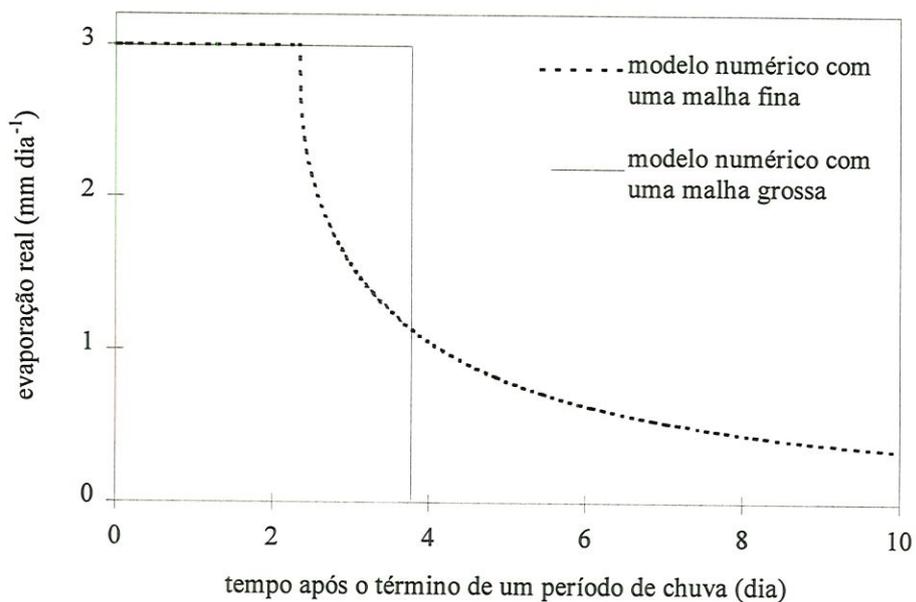


Figura 6.18 - Evaporação real do solo A, simulada por dois modelos numéricos, para as condições indicadas na figura 6.14, exceto com potencial matricial inicial de -1.0 m (o modelo com uma malha grossa usa a função Ψ da figura 6.14).

6.1.4 Desempenho do modelo numérico de fluxo de água

O modelo numérico de fluxo de água, apresentado na seção 4.3, foi testado, usando-se dados da literatura e do campo experimental de Pindorama (SP), constituído de um solo Podzólico arenoso, ou seja, o solo C da tabela 6.1. Este solo apresenta uma condutividade hidráulica relativamente alta e um teor de matéria orgânica relativamente baixo; duas propriedades que geralmente facilitam a lixiviação de pesticidas (BOESTEN & VAN DER LINDEN, 1991). A tabela 6.2 mostra algumas propriedades físicas e químicas do solo C, relevantes para este trabalho. Como pode ser visto nas tabelas 6.1 e 6.2, o solo C apresenta dois horizontes, com características físicas e químicas diferentes.

Tabela 6.2 - Propriedades físicas e químicas do solo C, usadas nos testes numéricos; dados obtidos de CASTRO, O. M. (comunicação pessoal), VAN OMMEN et al. (1989) e PARLANGE et al. (1982).

Parâmetro	0 - 60 cm	> 60 cm
ρ_b	1640 kg m ⁻³	1640 kg m ⁻³
m_{om}	0.9 %	0.5 %
λ	5 mm	5 mm
ϑ	0.85	-
Λ	veja a figura 6.19	-

O comprimento de dispersão hidrodinâmica do solo C foi estimado em 5 mm, valor dentro da faixa de valores encontrada por BOESTEN (1986), para solos arenosos.

O coeficiente ϑ do modelo de PARLANGE et al. (1982) é uma função empírica da umidade volumétrica do solo e diferente para cada tipo de solo. Porém, a variação em $\vartheta(\theta)$, para solos diferentes, não é muito grande. Além disto, a infiltração não é muito sensível a este parâmetro. Portanto, PARLANGE et al. (1982) aconselham o uso de $\vartheta(\theta) \approx 0.85$, o que também foi adotado nesta tese. Além disto, a sortividade foi calculada com a eq.(4.42), em função da umidade volumétrica do solo, para o horizonte A, conforme a figura 6.19. É interessante observar que a sortividade não depende de K_s ou θ_s . Portanto, para um modelo de colunas independentes com variáveis aleatórias K_s e θ_s na escala de campo, a função $\Lambda_i(\theta)$ precisa ser calibrada uma única vez.

A função Ψ foi ajustada, da mesma maneira que na seção anterior, para o solo C. Isto resultou na função logarítmica $h_{ref} = 1.19 - 16.38 \ln(-h_1)$, para $h_1 < 3.18$ m.

Dados sobre a precipitação diária (P) e a evapotranspiração Thornthwaite (ET_0) para a estação meteorológica de Pindorama (SP) foram obtidos do *Instituto Agrônomo de Campinas (IAC)*, para o ano de 1992 (I. CLERICI de MARIA, comunicação pessoal). Nos dados do *IAC*, a precipitação é registrada diariamente, enquanto uma chuva em Pindorama apresenta uma duração típica entre 5 e 120 minutos (VIEIRA et al., 1994). Na ausência de dados mais detalhados, foi suposto, neste trabalho, que a duração de chuva em Pindorama apresenta um valor de 60 minutos. Além disto, foi suposto que a precipitação diária ocorre em um único pulso de chuva. Portanto, a série temporal de precipitação diária (P) é facilmente convertida em uma série de intensidades de chuva (i_p), o que apresenta uma condição de contorno mais realística. Além disto, supõe-se uma espessura máxima de 5 cm para a camada de água armazenada na superfície do solo, durante uma chuva.

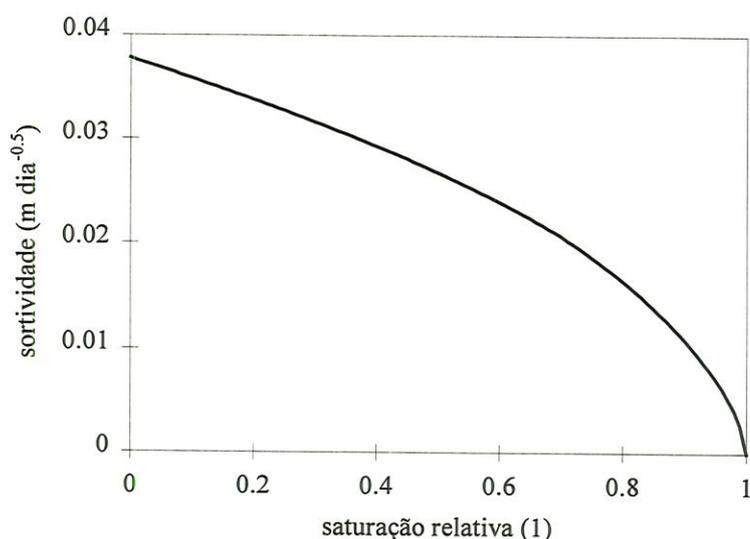


Figura 6.19 - Sortividade do horizonte A do solo C, calculada com a eq.(4.42), em função da saturação relativa.

Como cultura escolheu-se milho (*Zea Maize L.*), por ser a cultura mais estudada em relação à lixiviação de pesticidas (FLURY, 1996). A cultura de milho aqui usada apresenta um ciclo médio de crescimento de 146 dias (CNPMS, 1994). Supõe-se que, cada ano, o milho foi plantado em 20 de outubro e colhido em 13 de março, havendo somente uma safra por ano.

A evapotranspiração potencial (ET_{pot} na eq.(2.20)) foi igualada à demanda atmosférica (ET_0) que corresponde ao valor para uma cultura de milho completamente

desenvolvida (BOESTEN, 1993) e ao valor correspondente a solos descobertos (PENMAN, 1948).

O fator α para a redução da absorção de água pela cultura é uma função do potencial matricial, conforme mostra a eq.(2.19). Para milho a função α é definida como (FEDDES et al., 1978): α é igual a zero para $h \geq -0.1$ m; α aumenta linearmente até 1 para $-0.1 \geq h \geq -0.25$ m; α é igual a 1 para $-0.25 \text{ m} \geq h \geq -5$ m e α decresce linearmente para zero para $-5 \geq h \geq -80$ m.

Para o índice de área foliar durante o crescimento do milho foi utilizada uma curva obtida pelo *Centro Nacional de Pesquisa de Milho e Sorgo (CNPMS)* em Sete Lagoas, MG (CNPMS, 1994), conforme mostra a figura 6.20. Baseado no índice de área foliar, os diferentes estágios de desenvolvimento do milho foram estabelecidos da seguinte forma: emergência 10 dias após o plantio, fim do estágio vegetativo 80 dias após o plantio, e colheita 146 dias após o plantio (CNPMS, 1994). A cobertura do solo foi calculada com a eq.(2.23). Para os coeficientes de regressão nesta equação foram adotados os valores $a = 2.9363$, $b = 0.9462$ e $c = 0$ (BOESTEN, J.J.T.I., comunicação pessoal). Isto resultou na cobertura do solo mostrada na figura 6.20.

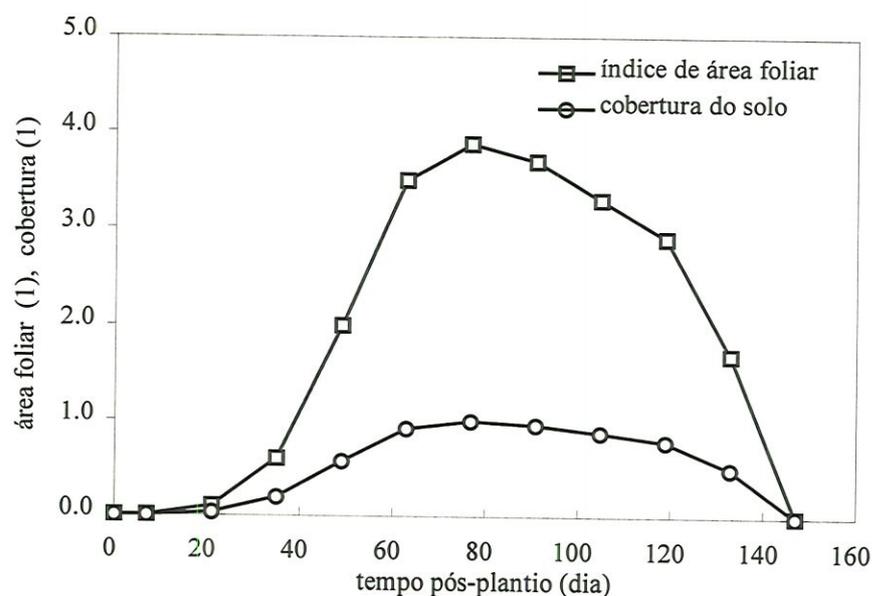


Figura 6.20 - Índice de área foliar e cobertura do solo, para uma cultura de milho (*Zea Mays L.*) com um ciclo normal e uma densidade de plantio de 55000 plantas por hectare (BOESTEN, 1993; CNPMS, 1994).

SILVA et al. (1994) investigaram a interceptação da chuva pela cultura de milho completamente desenvolvido em Sete Lagoas (MG), em função da intensidade de chuva. Baseado no trabalho destes autores, foi adotado o seguinte modelo de interceptação:

$$E_{\text{int}} = S_c 0.0784 P^{0.623} \quad (6.2)$$

onde

P = precipitação diária (m)

Para o ano de 1992, a interceptação total calculada com a eq.(6.2), foi igual a 10 % da precipitação medida.

A figura 6.21 mostra o fluxo potencial através da superfície do solo, calculado com a eq.(2.24) e a transpiração potencial, calculada com a eq.(2.20), durante o ano de 1992, para o cenário anteriormente descrito.

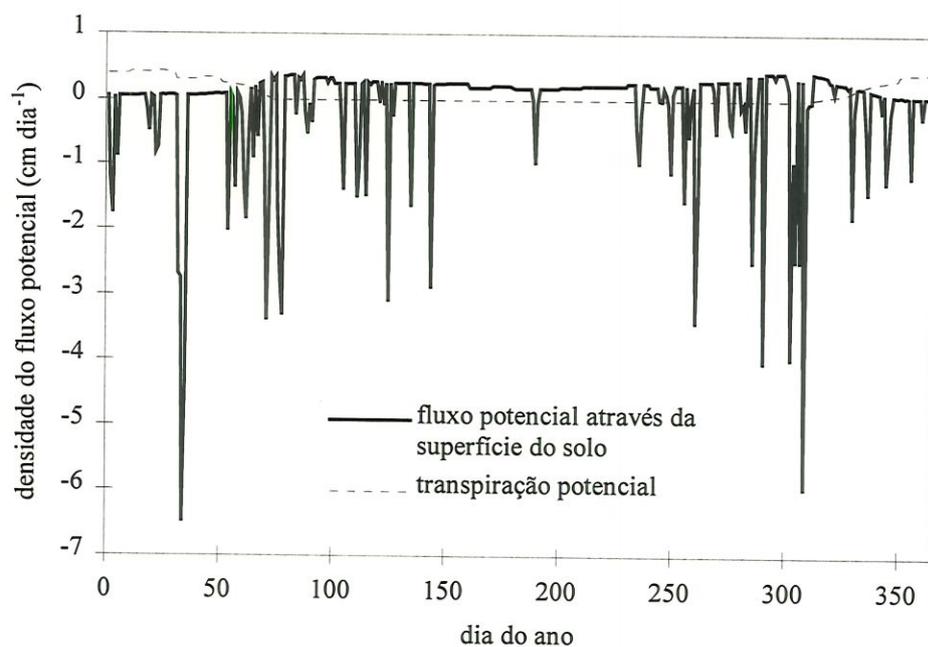


Figura 6.21 - Fluxo potencial através da superfície do solo e transpiração potencial, durante o ano de 1992 em Pindorama (SP), para as condições descritas na seção 6.1.4.

A profundidade da zona de raízes em função dos dias após o plantio, e a distribuição das raízes para o milho completamente desenvolvido, foram medidos por OLIVEIRA et al. (1993), CALHEIROS (1992) e MERTEN & MIELNICZUK (1991), para vários solos brasileiros. A figura 6.22 mostra os dados destes autores e a função usada nos modelos numéricos. Também, baseado nos trabalhos de OLIVEIRA (1993) e BOESTEN (1993), foi

adotado que a profundidade da zona de raízes aumenta linearmente em função do tempo, durante o estágio vegetativo do milho, até uma profundidade máxima de 40 cm. Durante o estágio vegetativo do milho, a distribuição relativa de raízes da figura 6.22 foi adaptada à profundidade real através de uma interpolação linear.

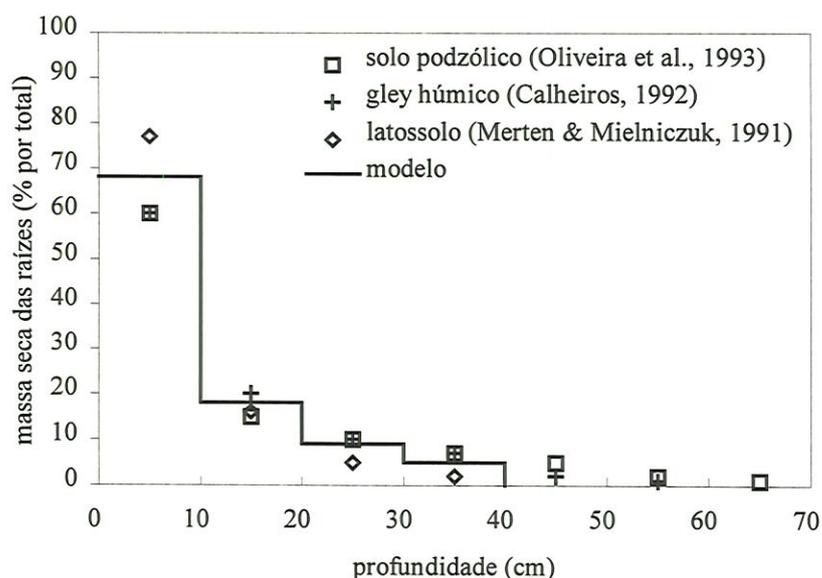


Figura 6.22 - Distribuição relativa de raízes, em função da profundidade, para a cultura do milho completamente desenvolvido; a linha sólida mostra os pesos para a transpiração potencial, empregados nos modelos numéricos (fontes: OLIVEIRA et al., 1993; CALHEIROS, 1992; MERTEN & MIELNICZUK, 1991)

Em todos os testes numéricos, a profundidade do lençol freático foi considerado infinito. Portanto, a condição de contorno no fundo do perfil de solo é dada por $\nabla h = \text{grad}(h) = 1$.

A figura 6.23 apresenta uma comparação entre a drenagem cumulativa na profundidade de 30 cm, simulada por três modelos numéricos diferentes, aplicados ao cenário anteriormente descrito:

1. um modelo com uma malha grossa ($\Delta z = 10$ cm), usando-se a média geométrica para a condutividade hidráulica e as eqs.(2.15) e (2.16) como a condição de contorno;
2. um modelo com a mesma malha grossa, usando-se a média dinâmica para a condutividade hidráulica e os modelos empíricos para a infiltração e a evaporação e
3. um modelo numérico com uma malha fina ($\Delta z = 0.25$ cm perto da superfície do solo e $\Delta z = 1$ cm no resto do perfil).

O primeiro modelo apresenta uma solução rápida convencional, usando-se simplesmente o algoritmo de RATHFELDER & ABRIOLA (1994) com uma malha grossa. O segundo modelo apresenta uma solução rápida, usando-se o mesmo algoritmo, mas com as modificações mencionadas acima. O terceiro modelo apresenta uma solução lenta, mas de alta precisão.

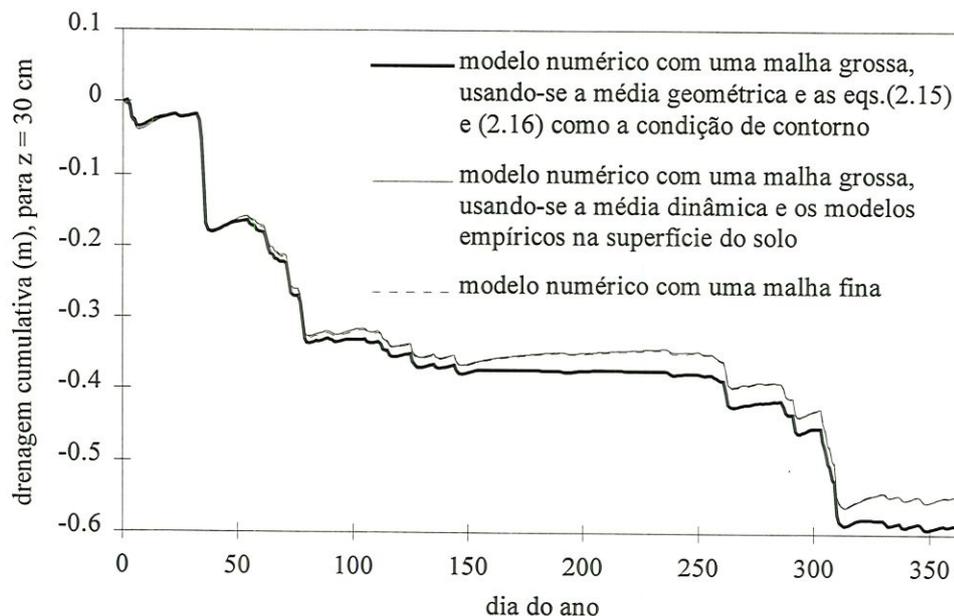


Figura 6.23 - Drenagem cumulativa na profundidade de 30 cm, durante o ano de 1992 referente ao cenário descrito na seção 6.1.4, simulada por três modelos numéricos diferentes.

Como pode ser visto na figura 6.23, a solução rápida convencional apresenta um desvio sistemático na drenagem cumulativa. A solução rápida proposta (i.e. o segundo modelo), entretanto, aproxima a solução do modelo com uma malha fina muito bem. Porém, este modelo é aproximadamente 100 vezes mais rápido do que o modelo com uma malha fina.

6.2 DESEMPENHO DOS MODELOS DE TRANSPORTE DE SOLUTO

Esta seção mostra o desempenho dos modelos numéricos de transporte de soluto, apresentados no capítulo 5. Em primeiro lugar, são apresentadas as comparações entre os vários modelos Lagrangeanos desenvolvidos e as respectivas soluções analíticas, para uma coluna de solo semi-infinito, na escala local. Em segundo lugar, é apresentado o desempenho do modelo Lagrangeano lognormal, para um conjunto de colunas independentes, na escala de campo.

6.2.1 Escala local

No capítulo 5 foram desenvolvidos vários modelos Lagrangeanos. Os modelos para uma coluna de solo semi-infinito foram testados na escala local, usando-se os dados da tabela 6.3.

Tabela 6.3 - Dados de entrada usados nos testes numéricos, na escala local, dos modelos de transporte, para um soluto conservativo, ou seja, $\mu_{\text{bio}} = 0$ e $\mu_{\text{abs}} = 0$.

Parâmetro	valor
m_0	1 kg ha ⁻¹
q	-0.1 cm dia ⁻¹
θ	0.20
λ	10.0 cm
D_0	0 m ² dia ⁻¹
ρ_b	1500 kg m ⁻³
m_{om}	1.0 %
K_{om}	0 ou 50 L kg ⁻¹
N	0.8 ou 1.0
c_{ref}	1.0 mg L ⁻¹
$z_{\text{inc},1}$	-0.1 cm
$z_{\text{inc},2}$	0 cm

Teoricamente, para uma coluna de solo semi-infinito, o modelo Lagrangeano mais correto é o modelo baseado na distribuição normal truncada, apresentado na seção 5.1.2. Neste modelo, as funções de ajuste $f(\omega, \lambda)$ e $g(\varpi, \lambda)$ são as soluções para os coeficientes $\tilde{\mu}_z^k(t)$ e $(\tilde{\sigma}_z^k(t))^2$ das eqs.(5.10), (5.11) e (5.12), para valores conhecidos de $E\{z(t)\}$ e $\text{Var}\{z(t)\}$. Para um perfil semi-infinito, com fluxo de água somente direcionado para baixo e um pulso do tipo delta Dirac aplicado na superfície do solo, $E\{z(t)\}$ e $\text{Var}\{z(t)\}$ são dadas pelas eqs.(D.4) e (D.5) no apêndice D. Porém, as eqs.(D.4) e (D.5) são equações bastante complicadas, enquanto as eqs.(5.10), (5.11) e (5.12) são implícitas. Portanto, um método mais rápido foi desenvolvido para determinar as funções $\tilde{\mu}_z^k(t)$ e $(\tilde{\sigma}_z^k(t))^2$. Para uma coluna de solo com $\lambda = \text{constante}$, as funções $f(\omega, \lambda)$ e $g(\varpi, \lambda)$ foram baseadas nas eqs.(3.22) e (3.23), para $\{\omega, \varpi\} \geq \ell$, onde ℓ é uma distância de referência. Para os valores $\{\omega, \varpi\} < \ell$, as eqs.(3.22) e (3.23) foram corrigidas por funções da forma

$(\omega/\ell)^{\alpha_1} - (\omega/\ell)^{\alpha_1+1} + (\omega/\ell)^{\alpha_2+1}$ e $(\varpi/\ell)^{\beta_1} - (\varpi/\ell)^{\beta_1+1} + (\varpi/\ell)^{\beta_2+1}$, respectivamente. Desta forma, as funções $f(\omega, \lambda)$ e $g(\varpi, \lambda)$ podem ser descritas da seguinte maneira:

$$f(\omega, \lambda) = \begin{cases} (\ell + \lambda) \left[\left(\frac{\omega}{\ell} \right)^{\alpha_1} - \left(\frac{\omega}{\ell} \right)^{\alpha_1+1} + \left(\frac{\omega}{\ell} \right)^{\alpha_2+1} \right] & ; \omega < \ell \\ \omega + \lambda & ; \omega \geq \ell \end{cases} \quad (6.3)$$

$$g(\varpi, \lambda) = \begin{cases} (2\lambda\ell - 3\lambda^2) \left[\left(\frac{\varpi}{\ell} \right)^{\beta_1} - \left(\frac{\varpi}{\ell} \right)^{\beta_1+1} + \left(\frac{\varpi}{\ell} \right)^{\beta_2+1} \right] & ; \varpi < \ell \\ 2\lambda\varpi - 3\lambda^2 & ; \varpi \geq \ell \end{cases} \quad (6.4)$$

com

$$\ell = \gamma \lambda; \quad \gamma > \frac{3}{2} \quad (6.5)$$

onde

ℓ = distância de referência (m) e

$\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2$ e γ = coeficientes de ajuste (1).

Os expoentes $\alpha_1, \alpha_2, \beta_1$ e β_2 são empregados para ajustar as eqs.(6.3) e (6.4) às funções $\tilde{\mu}_z^k(t)$ e $(\tilde{\sigma}_z^k(t))^2$, para $\{\omega, \varpi\} < \ell$. Os expoentes são teoricamente diferentes para cada comprimento de dispersão. Porém, cálculos experimentais mostraram que as mudanças nestes expoentes são desprezíveis, quando λ é menor do que 30 cm (na literatura encontram-se valores para λ geralmente menores do que 30 cm). A tabela 6.4 mostra os valores otimizados para $\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2$ e γ , para um comprimento de dispersão entre 0 e 30 cm.

Tabela 6.4 - Valores otimizados para os coeficientes nas funções de ajuste $f(\omega, \lambda)$ e $g(\varpi, \lambda)$, para uma coluna de solo com $\lambda = \text{constante}$ e $0 < \lambda \leq 0.3$ m.

coeficiente	valor
α_1	0.915
α_2	1.000
β_1	1.020
β_2	1.100
γ	20.0

A figura 6.24 mostra uma comparação entre a solução analítica de TORIDE et al. (1995) e o modelo Lagrangeano baseado na distribuição normal truncada, usando-se as eqs.(5.19), (6.3) e (6.4) e os valores da tabela 6.4. Como pode ser visto, a aproximação é

muito boa, mesmo para um tempo de percurso relativamente pequeno de 20 dias e um comprimento de dispersão relativamente grande de 10 cm..

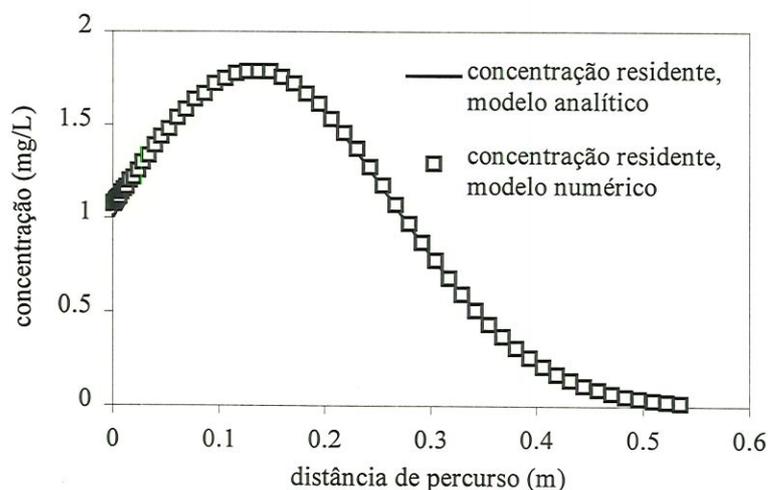


Figura 6.24 - Concentração residente de um soluto conservativo e não-adsorvente, segundo a solução analítica para um processo convectivo-dispersivo (TORIDE et al., 1995) e segundo o modelo Lagrangeano baseado na distribuição normal truncada, usando-se as eqs.(6.3) e (6.4) e os valores da tabela 6.4; $t = 20$ dias, $K_{om} = 0 \text{ L kg}^{-1}$, com outros parâmetros dados pela tabela 6.3.

Mesmo sendo o modelo Lagrangeano mais correto para um processo convectivo-dispersivo, o modelo baseado na distribuição normal truncada apresenta algumas restrições: (1) o fluxo de água tem que ser descendente, (2) a aplicação do soluto tem que ter a forma de um pulso do tipo delta Dirac na superfície do solo e (3) o comprimento de dispersão tem que ser constante no perfil. Portanto, este modelo não é muito prática e a sua importância é principalmente acadêmica. Por exemplo, o modelo foi usado para determinar o valor ótimo de δ nas eqs.(5.53), (5.54) e (5.55), o que resultou em $\delta = 10^{-3}$. De ora em diante, empregar-se-á somente o modelo Lagrangeano lognormal, por ser menos restritivo, na prática.

As figuras 6.25 e 6.26 mostram as soluções analíticas segundo as eqs.(3.9) e (3.15) e as soluções numéricas segundo o modelo Lagrangeano lognormal. As figuras 6.25 e 6.26 mostram que as eqs.(5.54) e (5.55) mantêm a mesma precisão, independente da velocidade da amostra (cada retângulo nas figuras 6.25 e 6.26, apresenta uma amostra com um valor P^k diferente e, portanto, uma velocidade diferente).

Nesta tese, supõe-se que o processo de transporte de solutos no solo, na escala local, é convectivo-dispersivo. Na seção 5.1.4 foram apresentados 3 métodos diferentes para ajustar o modelo Lagrangeano lognormal a um processo convectivo-dispersivo. As figuras 6.27, 6.28 e 6.29 mostram as concentrações residentes para um processo convectivo-dispersivo, depois de um tempo de percurso de 200 dias, para cada um dos 3 métodos de ajuste.

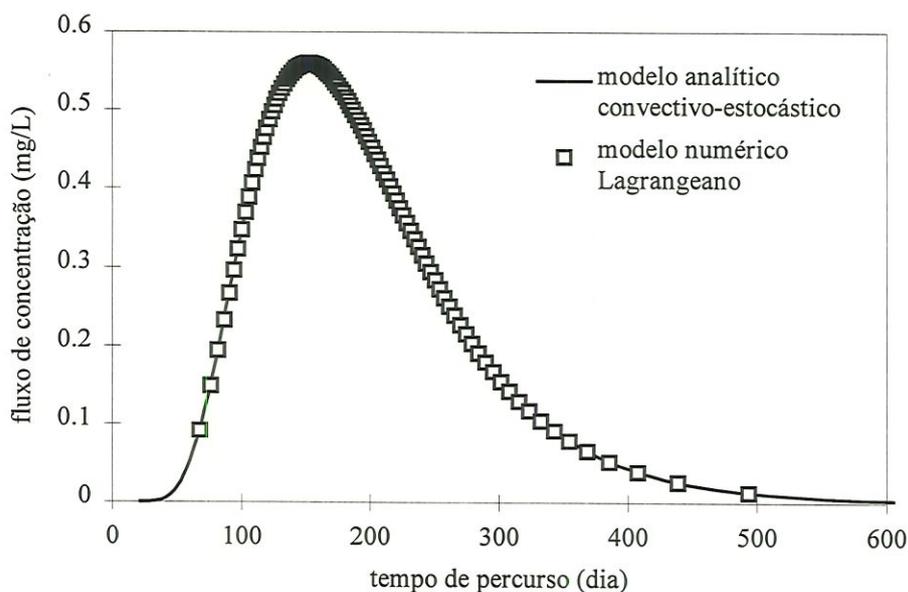


Figura 6.25 - Fluxo de concentração de um soluto conservativo e não-adsorvente, segundo a solução analítica para um processo convectivo-estocástico lognormal (i.e. a eq.(3.9)) e segundo o modelo Lagrangeano lognormal; $z = -1.0$ m, $K_{om} = 0$ L kg⁻¹, com outros parâmetros dados pela tabela 6.3.

Comparando-se as figuras 6.27, 6.28 e 6.29, fica evidente que o método 3 é a melhor opção. O que surpreende é que uma soma de várias distribuições lognormais, ou seja, o que pressupõe o método 2, não apresenta o resultado desejado. Aparentemente, o método 2 não corrige, mas acumula o erro no terceiro momento da distribuição convectivo-dispersiva. Portanto, de ora em diante, empregar-se-á somente o método 3 para ajustar o modelo numérico Lagrangeano lognormal.

Os resultados constantes das figuras 6.27, 6.28 e 6.29 foram realizadas, usando-se compartimentos com uma espessura de 10 cm. Para os métodos 2 e 3, isto significa que os primeiros dois momentos da distribuição lognormal foram ajustados a cada 10 cm. A figura 6.30 mostra uma simulação segundo o método 3, com dois compartimentos de 1.0 m. Como

pode ser visto, depois de uma única correção na distância de 1.0 m, o método 3 já produz um resultado muito bom.

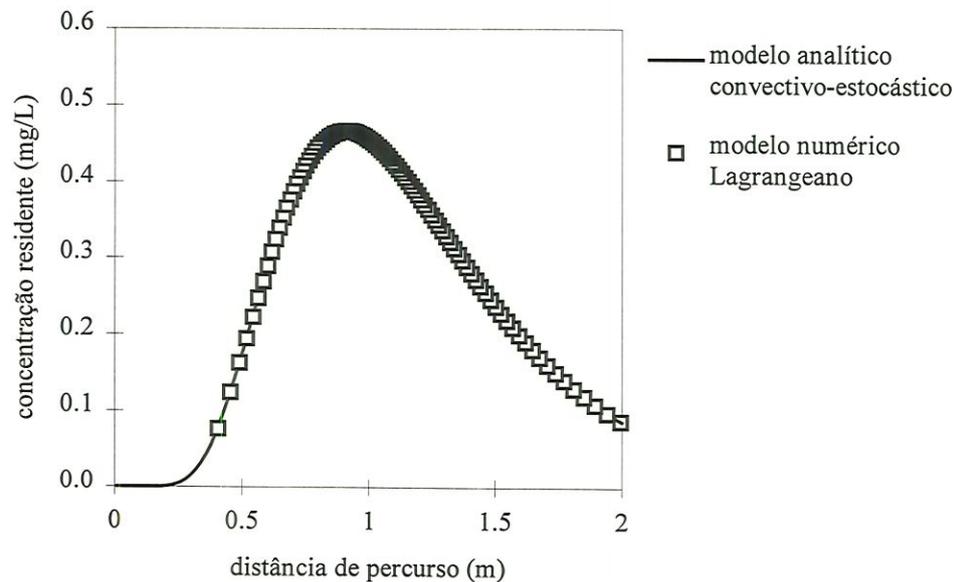


Figura 6.26 - Concentração residente de um soluto conservativo e não-adsorvente, segundo a solução analítica para um processo convectivo-estocástico lognormal (i.e. a eq.(3.15)) e segundo o modelo Lagrangeano lognormal; $t = 200$ dias, $K_{om} = 0 \text{ L kg}^{-1}$, com outros parâmetros dados pela tabela 6.3.

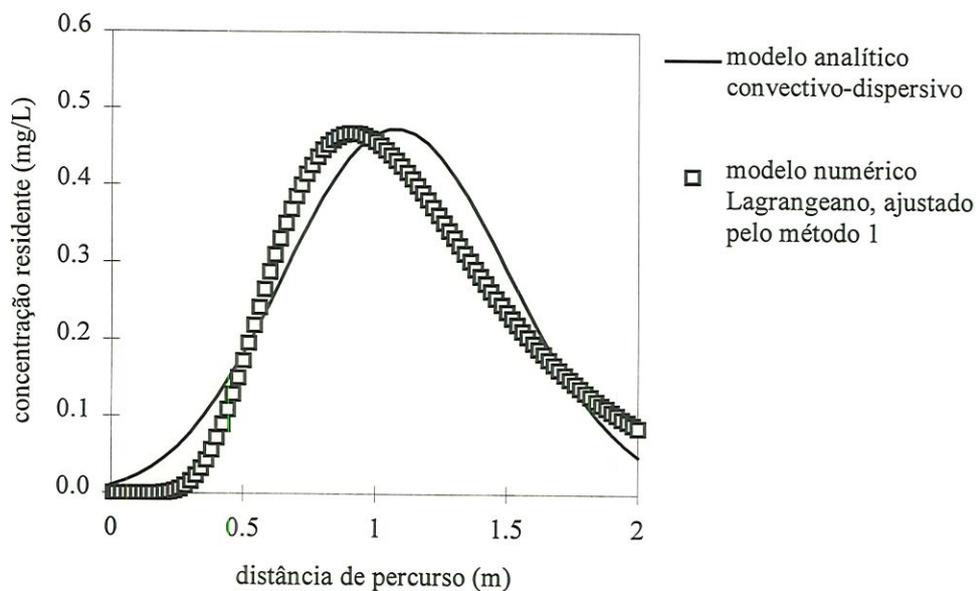


Figura 6.27 - Concentração residente de um soluto conservativo e não-adsorvente, segundo a solução analítica para um processo convectivo-dispersivo (TORIDE et al., 1995) e segundo o modelo Lagrangeano lognormal, ajustado pelo método 1; $\Delta z = 10$ cm, $t = 200$ dias, $K_{om} = 0 \text{ L kg}^{-1}$, com outros parâmetros dados pela tabela 6.3.

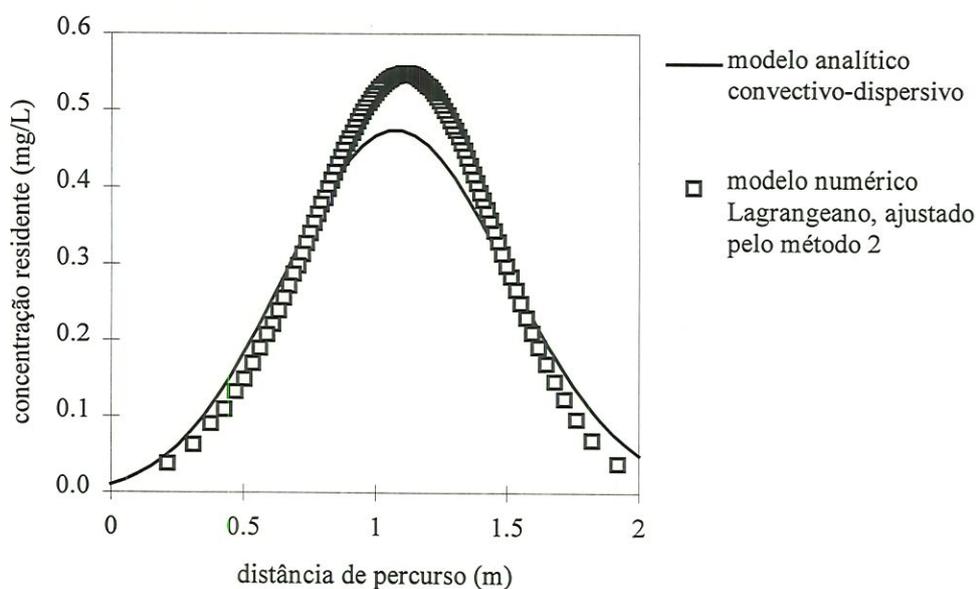


Figura 6.28 - Concentração residente de um soluto conservativo e não-adsorvente, segundo a solução analítica para um processo convectivo-dispersivo (TORIDE et al., 1995) e segundo o modelo Lagrangeano lognormal, ajustado pelo método 2; $\Delta z = 10$ cm, $t = 200$ dias, $K_{om} = 0 \text{ L kg}^{-1}$, com outros parâmetros dados pela tabela 6.3.

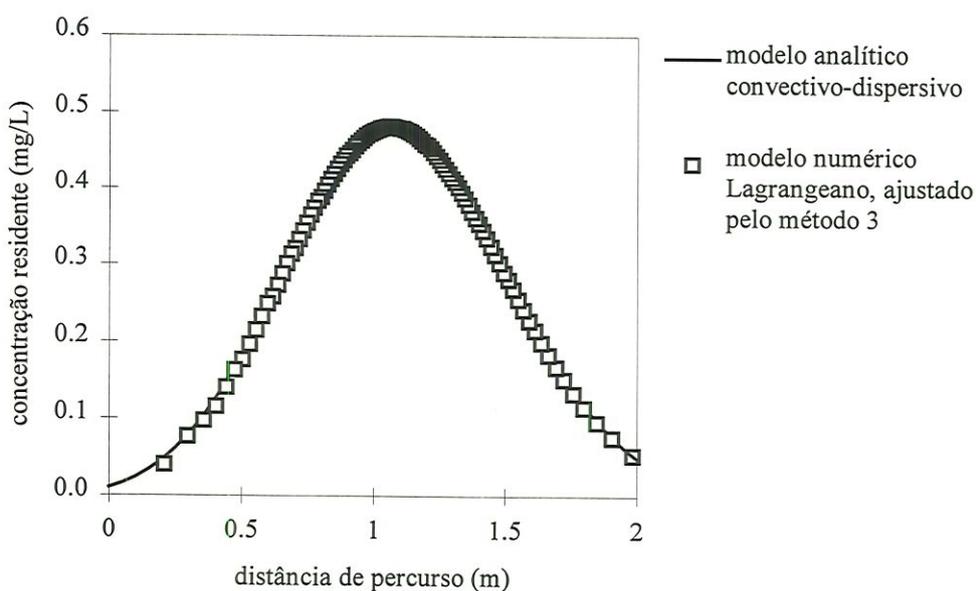


Figura 6.29 - Concentração residente de um soluto conservativo e não-adsorvente, segundo a solução analítica para um processo convectivo-dispersivo (TORIDE et al., 1995) e segundo o modelo Lagrangeano lognormal, ajustado pelo método 3; $\Delta z = 10$ cm, $t = 200$ dias, $K_{om} = 0 \text{ L kg}^{-1}$, com outros parâmetros dados pela tabela 6.3.

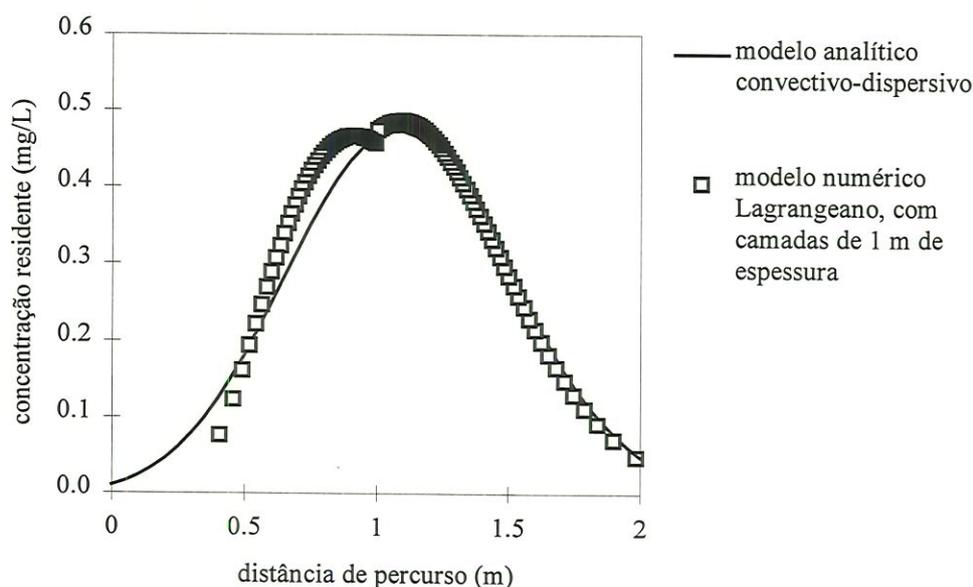


Figura 6.30 - Concentração residente de um soluto conservativo e não-adsorvente, segundo a solução analítica para um processo convectivo-dispersivo (TORIDE et al., 1995) e segundo o modelo Lagrangeano lognormal, ajustado pelo método 3; $\Delta z = 1$ m, $t = 200$ dias, $K_{om} = 0$ L kg⁻¹, com outros parâmetros dados pela tabela 6.3.

A figura 6.31 mostra uma simulação segundo o método 3, para um cenário não-estacionário. Neste caso, a distribuição do tempo de percurso não se aproxima de uma distribuição lognormal. Mesmo assim, o método 3 produz um resultado muito bom. Na verdade, a figura 6.31 é um composto de múltiplas distribuições lognormais. Ou seja, cada amostra “k” pertence a uma distribuição lognormal “k” diferente. A primeira parte da curva apresenta as amostras com a velocidade média do primeiro período, enquanto a segunda parte apresenta as amostras com uma mistura das velocidades médias dos dois períodos considerados.

Mesmo sendo a melhor opção, o método 3 não fornece uma aproximação boa para distâncias de percurso relativamente pequenas. As figuras 6.32 e 6.33 mostram as concentrações simuladas para duas distâncias de percurso: 0.2 e 1.0 m. A figura 6.32 mostra que, para distâncias de percurso pequenos, o terceiro momento central da distribuição do tempo de percurso começa a divergir da distribuição produzida pelo método 3. Isto acontece, mesmo para uma malha muito fina (ou seja, para $\Delta z \ll 10$ cm, os resultados não foram muito diferentes dos resultados apresentados na figura 6.32). Supõe-se que o erro no terceiro momento, não afeta significativamente os primeiros dois momentos

da distribuição do tempo de percurso, na escala de campo. Esta suposição foi testada, aplicando-se o modelo Lagrangeano lognormal a um conjunto de colunas independentes (veja a seção 6.2.2).

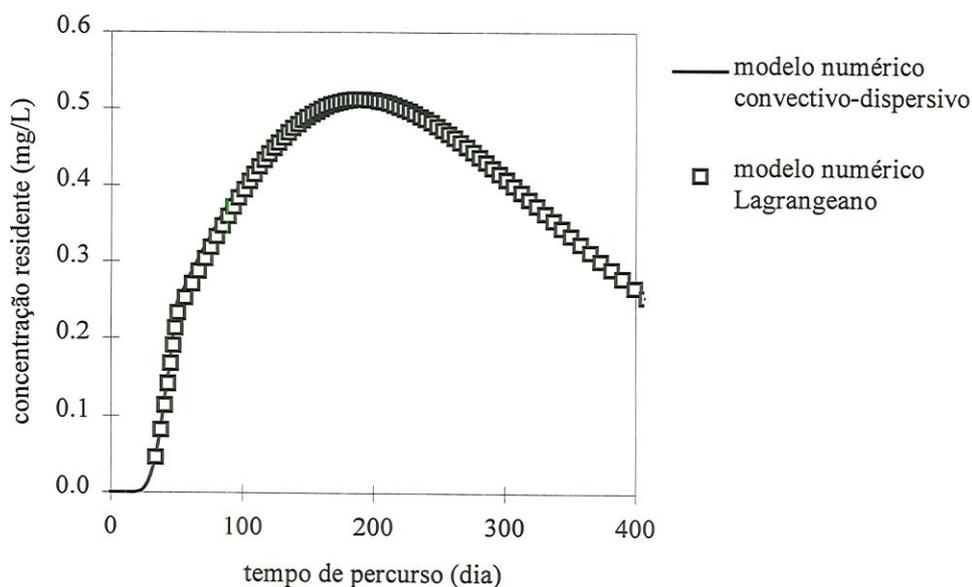


Figura 6.31 - Concentração residente de um soluto conservativo e não-adsorvente, segundo a solução analítica para um processo convectivo-dispersivo (TORIDE et al., 1995) e segundo o modelo Lagrangeano lognormal, ajustado pelo método 3; $\Delta z = 10$ cm, $z = -1.0$ m, $q = -0.002$ m dia⁻¹ para $t \leq 50$ dias, $q = -0.0005$ m dia⁻¹ para $t > 50$ dias, $K_{om} = 0$ L kg⁻¹, com outros parâmetros dados pela tabela 6.3.

A figura 6.34 mostra a concentração residente, para uma isoterma de adsorção não-linear. Como pode ser visto, a frente do soluto não é aproximada com muita precisão. Para uma isoterma Freundlich com $N \neq 1.0$, as amostras com baixas concentrações são retardadas mais do que as amostras com altas concentrações. Isto pode ser verificado, para concentrações diferentes, usando-se a isoterma Freundlich (i.e. a eq.(2.32)) para calcular o valor de $R^k(t)$ na eq.(5.45). O modelo Lagrangeano leva isto em conta, através do uso das eqs.(5.45) e (5.46). Porém, apenas a velocidade média da amostra é corrigida, e não a diferença entre as velocidades do limite inferior e superior da amostra. Portanto, a amostra apresenta uma expansão maior, o que resulta em uma concentração residente mais baixa, o que, por sua vez, resulta em uma velocidade mais baixa.

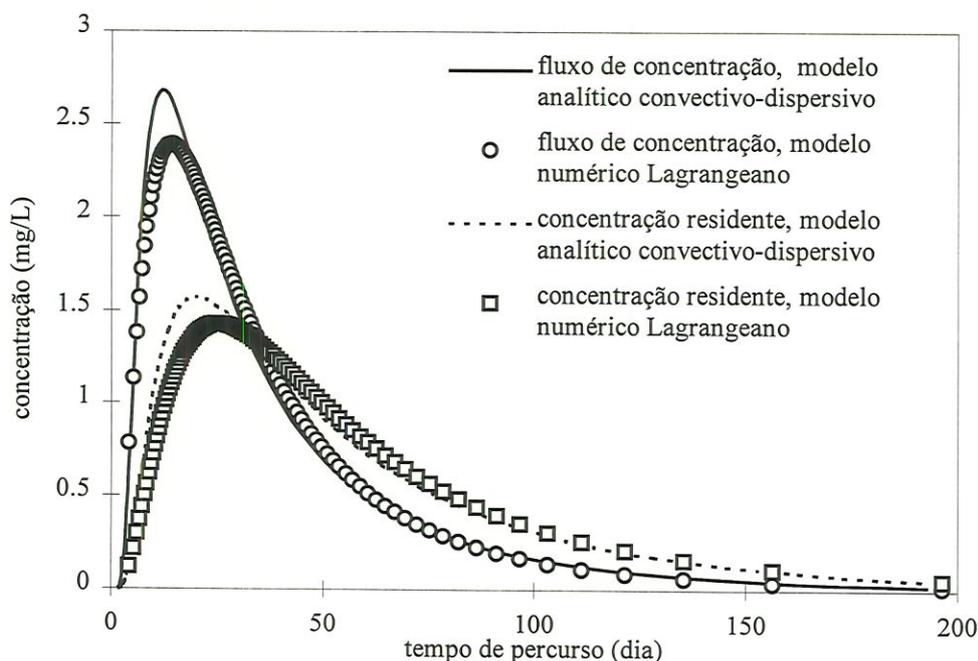


Figura 6.32 - Concentração de um soluto conservativo e não-adsorvente, segundo a solução analítica para um processo convectivo-dispersivo (TORIDE et al., 1995) e segundo o modelo Lagrangeano lognormal, ajustado pelo método 3; $\Delta z = 10$ cm, $z = -20$ cm, $K_{om} = 0$ L kg⁻¹, com outros parâmetros dados pela tabela 6.3.

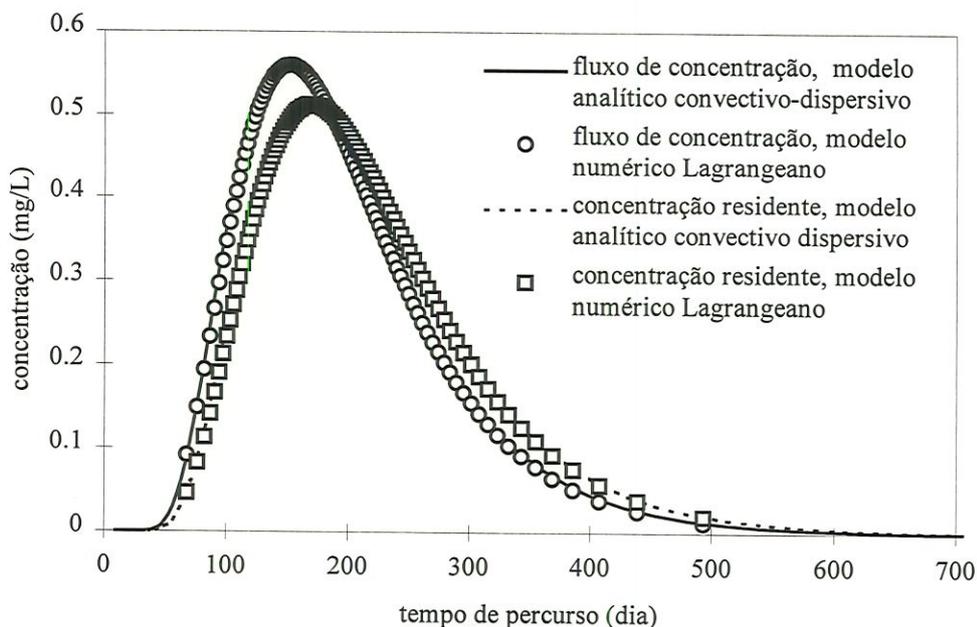


Figura 6.33 - Concentração de um soluto conservativo e não-adsorvente, segundo a solução analítica para um processo convectivo-dispersivo (TORIDE et al., 1995) e segundo o modelo Lagrangeano lognormal, ajustado pelo método 3; $\Delta z = 10$ cm, $z = -100$ cm, $K_{om} = 0$ L kg⁻¹, com outros parâmetros dados pela tabela 6.3.

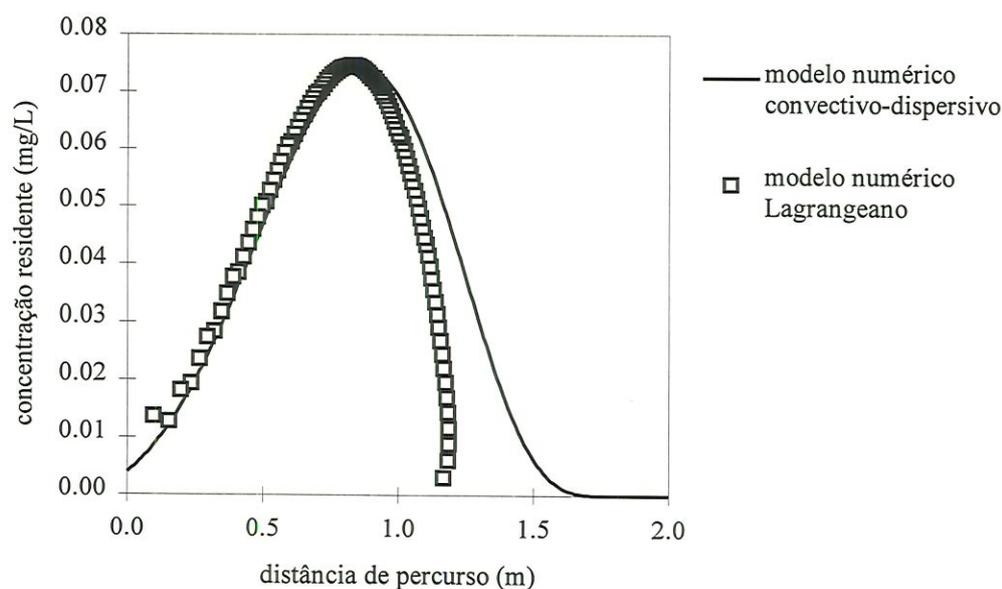


Figura 6.34 - Concentração de um soluto conservativo e adsorvente para um processo convectivo-dispersivo, segundo uma solução numérica Euleriana e segundo o modelo Lagrangeano lognormal, ajustado pelo método 3; $\Delta z = 10$ cm, $t = 1000$ dias, $K_{om} = 50$ L kg⁻¹, $N = 0.8$, com outros parâmetros dados pela tabela 6.3.

Mesmo assim, existe a possibilidade de que os erros, devido ao uso da abordagem de primeira ordem, sejam desprezíveis na escala de campo, quando N não é muito diferente de 1.0 (i.e. entre 0.8 e 1.2). Vários testes numéricos foram realizados para verificar isto, cujos resultados serão apresentados na próxima seção.

6.2.2 Escala de campo

O modelo Lagrangeano lognormal foi usado para simular o transporte de pesticidas em um conjunto de colunas independentes, na escala de campo. As soluções dos modelos Lagrangeanos apresentados no capítulo 5, podem ser empregados na escala de campo, em duas abordagens diferentes: (1) usando-se funções transferência para um modelo convectivo-estocástico lognormal ou (2) usando-se simulações Monte Carlo para um modelo de colunas independentes.

Os testes numéricos realizados na seção anterior, na escala local, podem ser considerados também como testes da primeira abordagem mencionada, na escala de campo. Como foi mostrado nas figuras 6.25 e 6.26, o modelo Lagrangeano lognormal apresenta uma aproximação muito boa, para um processo convectivo-estocástico. Observe que, na

escala de campo, o coeficiente de variação no tempo de percurso do soluto, não é mais derivado de um modelo convectivo-dispersivo local, mas de um modelo convectivo-estocástico regional.

Para testar o modelo Lagrangeano lognormal, para o caso de um modelo de colunas independentes, usando-se simulações Monte Carlo, voltamos ao cenário descrito na seção 6.1.4, baseado nos dados obtidos no campo experimental de Pindorama (SP). Foi suposto que o pesticida foi aplicado somente uma vez por ano, no dia em que foi realizado o plantio do milho (ou seja, no dia 20 de outubro). A tabela 6.5 mostra as propriedades dos pesticidas usados nos testes numéricos da figura 6.36.

Tabela 6.5 - Propriedades dos pesticidas usados nos testes numéricos da figura 6.36, para o cenário descrito nas seções 6.1.4 e 6.2.2.

parâmetro	valor	observação ou referência
m_0	1.0 kg ha ⁻¹	na faixa recomendada pelos fabricantes
f_{conc}	0.5	BRIGGS et al. (1982)
T_{ref}	20 °C	BOESTEN (1986)
β_T	0.08 °C ⁻¹	BOESTEN (1986)
θ_{ref}	0.25	VAN DER ZEE & BOESTEN (1991)
β_θ	0.7	BOESTEN (1986)
K_{om}	20 - 160 L kg ⁻¹	VAN DER ZEE & BOESTEN (1991)
N	0.8 - 1.2	CALVET et al. (1980); VAZ (1994)
c_{ref}	1.0 mg L ⁻¹	BOESTEN (1986)
H_{ref}	20 - 160 dias	VAN DER ZEE & BOESTEN (1991)
f_z	veja a figura 6.35	BOESTEN & VAN DER LINDEN (1991); BARBOSA & RIGITANO (1994)
$z_{inc,1}$	-10.0 cm	pesticida incorporado nos primeiros 10 cm do solo
$z_{inc,2}$	0 cm	idem

Como a atividade microbiológica do solo diminui com a profundidade, entende-se que o mesmo comportamento vale para a meia vida. Mesmo para climas temperados, há poucos dados disponíveis na literatura sobre taxas de transformação abaixo da camada agricultável. BOESTEN & VAN DER LINDEN (1991) apresentaram uma revisão dos dados de diferentes autores. Estes dados foram combinados com aqueles de BARBOSA & RIGITANO (1994), que mediram a degradação de aldicarb nos diferentes horizontes de 4 solos diferentes da região de Lavras (MG). Nos modelos numéricos, um perfil de solo de 2.0 m foi dividido em quatro diferentes camadas, com as profundidades 0-30, 30-60, 60-100 e 100-200 cm. Considera-se a primeira camada do perfil como a camada agricultável e, portanto, como representativa das condições de referência (i.e. $f_z = 1.0$, por definição).

Para as outras camadas uma função descontínua foi ajustada aos dados da literatura, como pode ser visto na figura 6.35.

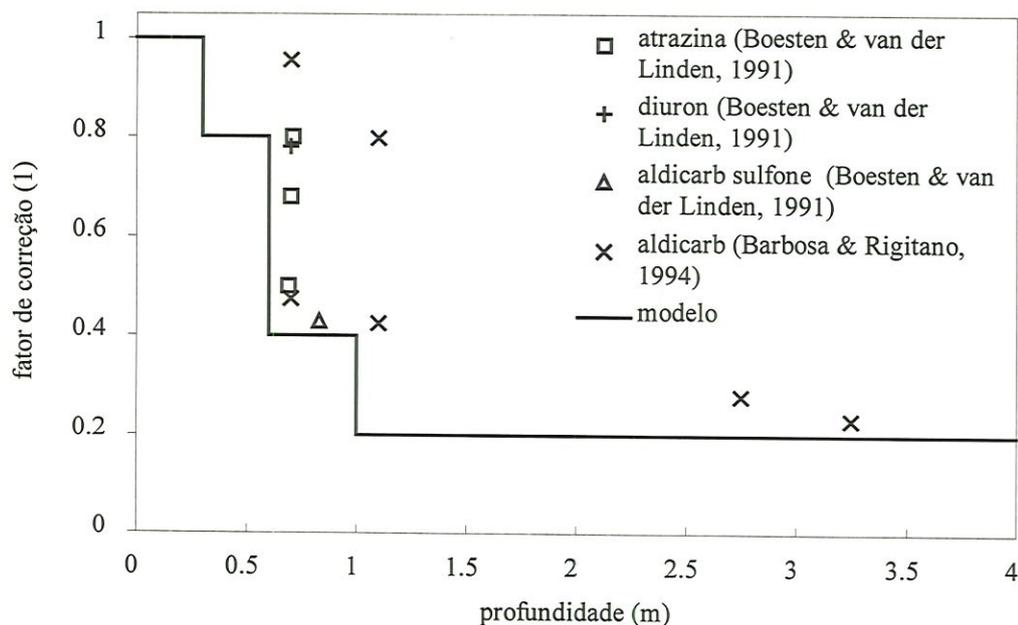


Figura 6.35 - Fator de correção para μ_{ref} , em função da profundidade, ajustado aos dados de BOESTEN & VAN DER LINDEN (1991) e BARBOSA & RIGITANO (1994).

A temperatura do solo foi simplesmente extrapolada linearmente a partir da superfície para o interior do solo. Supõe-se que a temperatura na superfície seja igual à temperatura do ar, medida na estação meteorológica em Pindorama, além de se supor que o gradiente de temperatura no solo fosse constante e igual a $3 \text{ }^\circ\text{C m}^{-1}$.

Dentro do conjunto de colunas independentes, 6 parâmetros foram considerados aleatórios: θ_s , K_s , o produto $m_{om} K_{om}$, H_{ref} , Γ_z e P_t ; conforme apresentado na tabela 6.6. Foi empregada uma amostra por coluna de solo, ou seja, por “rodada” Monte Carlo. Qualquer correlação entre os parâmetros aleatórios pode ser incorporada no modelo. Neste caso, supõe-se que a correlação entre os parâmetros aleatórios é desprezível. Além disto, assume-se que as propriedades das diferentes camadas de solo estão perfeitamente correlacionadas.

Na literatura encontram-se valores mínimos e máximos de 0 até 200 L kg^{-1} para K_{om} e de 0 até 200 dias para H_{ref} (VAN DER ZEE & BOESTEN, 1991). Portanto, os seguintes valores médios foram usados para os testes numéricos: $E\{K_{om}\} = 20, 60, 100, 140$ e 180 L

kg^{-1} , enquanto $E\{H_{\text{ref}}\} = 20, 60, 100, 140$ e 180 dias, resultando-se em uma série de 25 combinações diferentes. Para as médias de θ_s e K_s foram sempre usados os valores constantes da tabela 6.1 (solo C), com cada série de 25 combinações repetida para 3 valores de N : 0.8, 1.0 e 1.2. Isto representa a faixa de N encontrada na literatura, para a maioria dos pesticidas (CALVET et al., 1980; VAZ, 1994). O expoente de Freundlich N não foi considerado aleatório, para poder comparar melhor os desempenhos dos modelos lineares (i.e. $N = 1$) e não-lineares (i.e. $N \neq 1$). Além disto, não foram encontrados dados na literatura sobre a variabilidade espacial de N .

Tabela 6.6 - Coeficientes de variação (CV) dos parâmetros aleatórios, usados nos testes numéricos para o cenário descrito nas seções 6.1.4 e 6.2.2.

parâmetro	CV		distribuição	referência
	0-60 cm	> 60 cm		
θ_s	5 %	5 %	lognormal	VIEIRA et al. (1992)
K_s	73 %	44 %	lognormal	CASTRO, O. M. (com. Pessoal)
$m_{\text{om}} K_{\text{om}}$	50 %	50 %	normal	VAN DER ZEE & BOESTEN (1991)
H_{ref}	10%	10 %	normal	WALKER & BROWN (1983)
Γ_z	—	—	uniforme	veja a seção 5.5.2
P_t	—	—	uniforme	idem

Em seguida são apresentadas como foram realizadas as simulações Monte Carlo (veja a seção 3.3.2). Em primeiro lugar, foram gerados valores aleatórios para os parâmetros θ_s , K_s , $m_{\text{om}} K_{\text{om}}$, H_{ref} , Γ_z e P_t . Em segundo lugar, foi simulado o fluxo de água no interior de cada coluna de solo, usando-se o modelo numérico, apresentado na seção 4.3 e o cenário apresentado na seção 6.1.4. Isto resultou em uma matriz de eventos ambientais diferente para cada coluna de solo. Em terceiro lugar, foi usada a matriz de eventos ambientais para simular a massa residual de pesticida que atinge a profundidade de controle de 1.0 m, com o modelo numérico Lagrangeano lognormal ajustado a cada 10 cm a um processo convectivo-dispersivo.

É oportuno ressaltar que a precipitação total, durante o ano de 1992, ficou muito próxima da precipitação anual média, registrada na estação climatológica de Pindorama. Portanto, as condições meteorológicas do ano 1992 foram repetidas durante 10 anos, assumindo-se que uma amostra de pesticida demora, no máximo, 10 anos para atingir a profundidade de controle de 1.0 m. Além disto, o pesticida foi aplicado somente no

primeiro ano. Supõe-se que a massa residual desta única aplicação é representativa da lixiviação média do pesticida por ano. Esta suposição foi, por sua vez, baseada na suposição de que a aplicação do pesticida em um dado ano, não afeta a lixiviação do pesticida aplicado no ano seguinte. Para a maioria dos pesticidas usados atualmente, esta é uma suposição razoável, porque eles são biodegradáveis (ou seja, eles não se acumulam na camada agricultável) e eles apresentam uma isoterma de adsorção quase linear (ou seja, a velocidade de percurso do pesticida não depende muito da concentração residente). No caso do modelo numérico Lagrangeano, um cenário com uma única aplicação, permite usar apenas uma amostra por “rodada” Monte Carlo com o modelo numérico Lagrangeano. Neste caso, o modelo torna-se muito eficiente em termos de tempo gasto no computador.

O modelo numérico Euleriano, apresentado na seção 2.2.1, foi usado para verificar os resultados obtidos com o modelo numérico Lagrangeano. O modelo Euleriano empregou uma malha de 25 nós. Para ambos os modelos, foi empregado uma amostragem estratificada do tipo ALH, durante as simulações Monte Carlo. Para um número m baixo de parâmetros, IMAN & HELTON (1985) sugerem um número n de “rodadas” entre $2m$ e $5m$. No caso da tabela 6.6, $m = 6$, o que resulta em um número de “rodadas” entre 12 e 30. Baseado neste critério, foi adotado o número de 30 simulações.

A figura 6.36 mostra a média de amostragem (veja a eq.(A.17)) da massa residual para uma profundidade de controle de 1.0 m. Como pode ser visto, a aproximação para o caso linear é muito boa (erro relativo na lixiviação por ano <1%). Para os casos não-lineares, a aproximação apresenta um erro relativo da ordem de 30% da lixiviação por ano.

Os experimentos numéricos mostraram que o esforço computacional *por passo no tempo*, para seguir uma amostra no modelo Lagrangeano, é aproximadamente igual ao tempo gasto para calcular a concentração residente em um nó de um modelo numérico Euleriano. Portanto, quando os passos no tempo do modelo Lagrangeano e do modelo Euleriano são iguais, a velocidade de processamento do modelo Lagrangeano é igual à velocidade de processamento de um modelo Euleriano com um único nó. Além disto, o modelo Lagrangeano é menos restritivo para o passo no tempo, o que resulta em uma solução numérica ainda mais rápida. Para o caso linear, o modelo Lagrangeano apresentou uma solução 250 vezes mais rápida do que um modelo numérico Euleriano com 25 nós, apresentado na seção 2.2.1, enquanto que para o caso não-linear, o modelo foi mais rápido

cerca de 50 vezes. Os modelos numéricos Lagrangeanos lineares e não-lineares apresentam velocidades diferentes de processamento, devido às diferenças de definição das amostras. No caso linear, uma amostra apresenta apenas um limite de probabilidade e a sua concentração residente não precisa ser calculada. No caso não-linear, uma amostra apresenta dois limites de probabilidade e a sua concentração residente precisa ser calculada para cada passo no tempo (veja a introdução da seção 5.5).

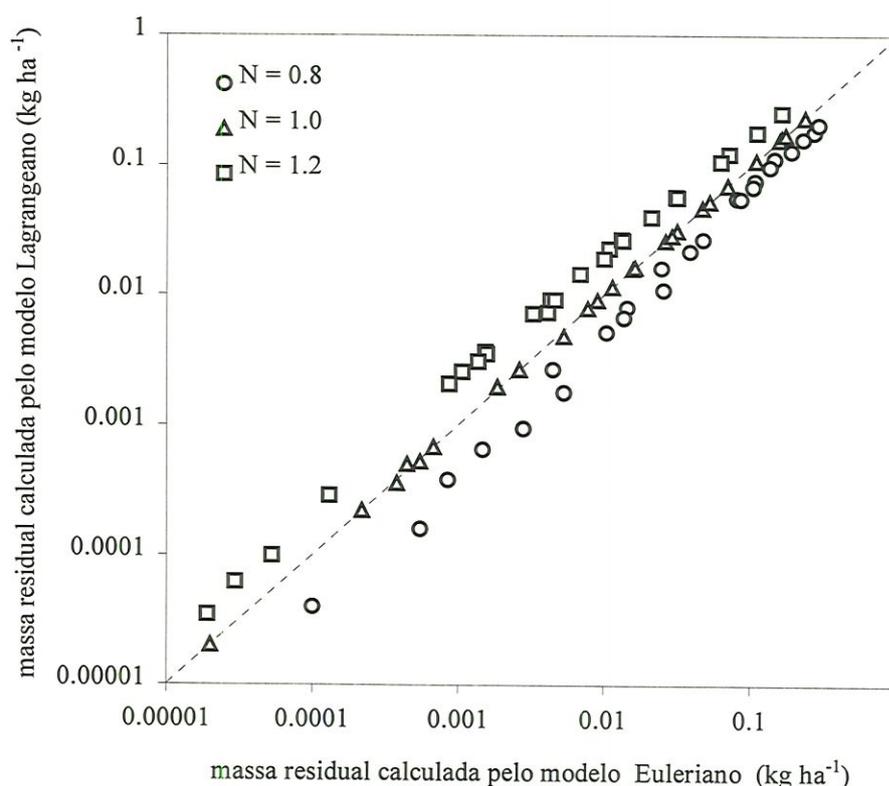


Figura 6.36 - Comparação entre os modelos numéricos Eulerianos e Lagrangeanos, em termos da média de amostragem da massa residual, para uma profundidade de controle de 1.0 m e o cenário descrito nas seções 6.1.4 e 6.2.2; N = o expoente de Freundlich.

Resumindo-se, a parte mais importante desta tese foi o desenvolvimento de técnicas numéricas rápidas que podem ser aplicadas em análises estocásticas do transporte de solutos no solo, através de simulações do tipo Monte Carlo. Em estudos de impactos ambientais na escala regional, a área de estudo é geralmente dividida em “células de grade” ou, alternativamente, em polígonos, representando-se os vários “pedotops” (KÚTILEK & NIELSEN, 1994, p.330). Neste caso, cada “pedotop” deve ser considerado como um

conjunto de colunas independentes, porque cada parâmetro de entrada apresenta uma certa média e variância de amostragem dentro de cada “pedotop”. As técnicas numéricas apresentadas nesta teste, foram desenvolvidas para modelos de colunas independentes e, portanto, podem ser empregadas para calcular a lixiviação de pesticidas de cada “pedotop” (ESKES & CRESTANA, 1996; ESKES & CRESTANA, 1997). Na escala regional, a área de estudo (por exemplo, uma microbacia) pode conter milhares de “pedotops”. Neste caso, a alta velocidade de processamento das técnicas numéricas desenvolvidas e apresentadas neste trabalho significa uma grande vantagem.

7. CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

7.1 CONCLUSÕES

Supondo-se que a densidade de fluxo entre dois nós é constante, durante um passo no tempo, e que a condutividade hidráulica não-saturada segue uma função do tipo exponencial, foi possível derivar a média uniforme. Essa média é uma função do coeficiente empírico r , que pode ser usado para otimizar a condutividade média entre dois nós de um modelo numérico de transporte de água. Para a infiltração de água no solo, a média dinâmica apresentou o melhor desempenho, que corresponde à média uniforme com $r = 0$.

Tradicionalmente, a média geométrica foi sempre considerada a melhor opção para simular o fluxo de água no solo com um modelo numérico. Por exemplo, do artigo bem conhecido de CELIA et al. (1990), p.1495, pode-se citar: "...the geometric mean (...) is usually a better choice than the arithmetic mean, (when) used to define the values of $K_{i\pm 1/2}$...". Provavelmente, a preferência pela média geométrica tem sido baseada no fato de que, em uma escala logarítmica, tal média está situada exatamente no valor médio entre dois valores (veja a figura 4.3). Porém, os resultados e as análises apresentados na seção 6.1.1 mostraram que a média geométrica é a pior escolha, dentro as opções testadas, para simular o fluxo de água em um meio poroso não-saturado.

A diferença em desempenho entre a média geométrica e a média dinâmica, no caso da infiltração de água em um solo seco, foi bastante grande. A média dinâmica permitiu adotar uma distância 10 vezes maior entre os nós, o que resultou em uma simulação 40 vezes mais rápida, para alguns dos cenários testados.

O testes numéricos provaram que o método Newton-Raphson, conforme foi apresentado na seção 4.2.1, é muito eficiente para resolver o modelo de PARLANGE et al.

(1982). No máximo, foram necessárias 6 iterações para reduzir até o limite de 10^{-3} o erro relativo no fluxo cumulativo simulado. Além disto, foi demonstrado que o modelo de PARLANGE et al. (1982) pode ser empregado com uma camada superficial de água. A possibilidade de armazenar água na superfície do solo resulta em valores mais altos de infiltração.

Também foi demonstrado que um modelo empírico de evaporação pode ser definido como uma condição de contorno do tipo Cauchy, usando-se uma função empírica Ψ . Foi mostrado que a função Ψ quase não depende de K_s , nem de θ_s , ou das condições iniciais ou de contorno. Portanto, Ψ é uma função bastante genérica e precisa ser calibrada uma única vez para um modelo de colunas independentes, onde K_s e θ_s são variáveis aleatórias.

Para o cenário escolhido, o uso da média dinâmica em um modelo numérico de diferenças finitas com uma malha grossa, em combinação com o uso dos modelos empíricos apresentados na seção 4.2, resultou em uma simulação aproximadamente 100 vezes mais rápida do que um modelo numérico convencional usando uma malha fina.

Deve-se acrescentar ainda que foram desenvolvidos vários modelos numéricos Lagrangeanos para a simulação do transporte de solutos no solo. As conclusões em relação a estes modelos, são as seguintes:

7.1.1) Foi demonstrado, na seção 6.2.1, que uma aproximação de primeira ordem no cálculo da concentração de soluto, mantém a mesma precisão, independentemente da velocidade da amostra;

7.1.2) Foram apresentados vários métodos para ajustar o modelo Lagrangeano lognormal a um processo convectivo-dispersivo. Um resultado surpreendente foi que a soma das distribuições lognormais de cada camada (método 2, seção 5.1.4), não apresentou o resultado desejado. Aparentemente, este método não corrigiu, mas acumulou o erro no terceiro momento da distribuição convectivo-dispersiva. Foi demonstrado que a melhor opção encontra-se no uso de uma distribuição lognormal diferente para cada amostra (método 3, seção 5.1.4). Mesmo assim, para pequenas distâncias de percurso, o terceiro momento central da distribuição de tempo de percurso começou a divergir da distribuição produzida pelo método 3, mesmo para uma malha muito fina. Porém, para o cenário

empregado na seção 6.2.2, foi constatado que o erro no terceiro momento, não afetou significativamente a média da massa residual de pesticidas, na escala de campo;

7.1.3) Para uma isoterma de adsorção não-linear, a frente de soluto não foi aproximada com muita precisão pelo modelo Lagrangeano lognormal, conforme mostrado na figura 6.34. Isto deveu-se ao fato de que apenas a velocidade média da amostra foi corrigida, e não a diferença entre as velocidades dos limites inferior e superior da amostra;

7.1.4) Na seção 6.2.2, o modelo Lagrangeano lognormal foi usado para simular o transporte de pesticidas em um conjunto de colunas independentes, na escala de campo. Para o caso linear, o modelo Lagrangeano apresentou uma solução 250 vezes mais rápida do que um modelo numérico Euleriano com 25 nós, enquanto que para o caso não-linear, o modelo foi de 50 vezes mais rápido. O modelo apresentou um erro relativo menor do que 1% na lixiviação média, para o caso linear, e um erro relativo de 30% para os casos não-lineares testados.

7.1.5) O modelo numérico Lagrangeano lognormal, apresentado na seção 5.1.3, pode ser empregada em um modelo de função-transferência ou em um modelo de colunas independentes. Desta maneira, o modelo poderá ser usado para calcular a lixiviação de pesticidas de cada “pedotop” em um estudo na escala regional. Neste caso, a alta velocidade de processamento apresenta uma grande vantagem. O modelo ainda não foi encontrado na literatura. Ele quase não apresenta restrições quanto aos parâmetros de entrada. Por isso, é mais universal do que, por exemplo, o modelo não-estacionário de JURY et al. (1990), que foi baseado no conceito de funções-transferência semi-analíticas.

7.2 TRABALHOS FUTUROS

No capítulo 4 foi apresentada uma análise extensa da média uniforme, tanto no que se refere à dependência do potencial matricial, quanto ao que se refere à dependência da distância. Somente uma pequena parte deste trabalho foi aplicada na simulação da lixiviação de pesticidas, conforme mostrado no capítulo 6. Desta forma, é relevante considerar o trabalho sobre a média uniforme, porque outros pesquisadores na área de simulação de fenômenos de transporte, poderão usa-lo como ponto de partida.

Por exemplo, os modelos numéricos para simular o fluxo não-saturado de gás, água e petróleo no interior de uma formação geológica heterogênea, tornam-se muito mais eficientes, quando a condutividade não-saturada entre os nós é calculada com uma expressão do tipo da eq.(4.32). Para estes modelos bi- e tridimensionais, o ganho em termos de tempo gasto no computador deverá ser ainda maior do que no caso unidimensional apresentado neste trabalho. Portanto, seria interessante realizar experimentos numéricos comparando-se a eq.(4.32), ou expressões alternativas baseadas na média uniforme, com uma solução obtida através da integração numérica da eq.(4.6).

Ao invés de se usar a eq.(4.32) em um modelo numérico convencional, com nós fixos no espaço, poder-se-ia usar uma média uniforme segmentada em um modelo com nós móveis. Neste caso, seriam usados vários segmentos, cada um deles apresentando um valor β constante, para descrever simultaneamente: (1) a variação de K_s com s e (2) a variação de K_r com h . Neste caso, é oportuno observar que a transformação de Kirchhoff (PAN & WIERENGA, 1997) pode ser empregada para cada segmento, acrescentando-se ainda que a técnica de Newton-Raphson pode ser usada para localizar as extremidades (i.e. os nós móveis) de cada segmento no espaço.

Existem também aplicações interessantes da média uniforme para modelos de transporte saturados, tal como os modelos hidráulicos de água subterrânea. Devido ao fato da eq.(4.25) não depender do potencial matricial, a média harmônica ponderada pode ser calculada *a priori*, ou seja antes de calcular o potencial matricial. Neste sentido, uma alternativa seria descrever a heterogeneidade espacial em um meio poroso saturado através da eq.(4.30), o que resultaria no valor correto para o coeficiente r da média uniforme, ou seja, da eq.(4.14).

No capítulo 5, foram desenvolvidos vários modelos numéricos Lagrangeanos para a simulação do transporte de solutos no solo. A idéia de simular o transporte de solutos em meios porosos, através de uma amostra definida por limites de probabilidade, é inédita. Porém, neste trabalho, apenas o caso unidimensional foi apresentado. Um trabalho futuro interessante poderá ser feito para o caso multidimensional. Vale notar que, no caso unidimensional, uma amostra é um intervalo de probabilidade expandindo-se; no caso bidimensional um retângulo expandindo-se; e no caso tridimensional um cubo expandindo-

se. No caso multidimensional, a redução no tempo gasto no computador deve ser ainda maior, do que as reduções registradas, neste trabalho, para o caso unidimensional.

Os modelos Lagrangeanos apresentados foram desenvolvidos para aplicações de soluto na forma de um pulso do tipo delta Dirac. No caso multidimensional, isto significa que os modelos podem ser usados apenas para fontes pontuais de soluto. Para fontes não-pontuais, muitas amostras são necessárias para simular o transporte de soluto. Neste caso, a técnica numérica Lagrangeana apresentada não necessariamente apresenta uma velocidade de processamento maior do que um modelo Euleriano. Para evitar o uso de muitas amostras, outros modelos Lagrangeanos poderão ser desenvolvidos, baseados em uma forma diferente do pulso de aplicação (por exemplo, a função de Heaviside).

O caso não-linear para o modelo Lagrangeano lognormal ainda apresenta um desafio a ser resolvido e pelo que tudo indica constitui-se em uma interessante sugestão de trabalho futuro.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ABBOT, M.B. et al. (1986). An introduction to the European hydrological system - Système hydrologique Européen, SHE.1. History and philosophy of a physically-based distributed modeling system. *J. Hydrol.*, v.87, p.45-59.
- ABRAMOWITZ, M.; STEGUN, I.A. (1970). *Handbook of Mathematical Functions*. Dover Publishing Co., New York.
- ADDISCOTT, T.M. (1977). A simple computer model for leaching in structured soils. *J. Soil Sci.*, v.28, p.554-563.
- ADDISCOTT, T.M.; WAGENET, R.J. (1985). Concepts of solute leaching in soils: A review of modeling approaches. *J. Soil Sci.* v.36, p.411-424.
- AMOOZGARD-FARD, A.; NIELSEN, D.R.; WARRICK, A.W. (1982). Soil solute concentration distributions for spatially varying pore water velocities and apparent diffusion coefficients. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, v.46, p.3-9.
- AZIZ, K.; SETTARI, A. (1979). *Petroleum Reservoir Simulation*. Applied Science Publishers, Londres.
- BARBOSA, T.M.L.; RIGITANO, R.L. de O. (1994). Influencia da classe e profundidade do solo na degradacao do insecticida- nematicida Aldicarbe. *Pesq. Agropec. bras.*, Brasilia, v.29, n.6, p.955-960.
- BEAR, J.; PARKER, J.; DOUGHERTY, D. (1994). *Modeling of flow and contaminants in the subsoil*. D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, Holanda.
- BEAR, J.; VERRUIJT, A (1987). *Modeling groundwater flow and pollution*. D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, Holanda.
- BEESE, F.; WIERENGA, P.J. (1980). Solute transport through soil with adsorption and root water uptake computed with a transient and a constant-flux model. *Soil Sci.*, v.129, n.4., p.245-252.
- BELMANS, C.; FEDDES, R.A.; WESSELING, J.G. (1983). Simulation model of the water balance of a cropped soil: SWATRE. *J. Hydrol.*, v.63, p.271-286
- BIGGAR, J.W.; NIELSEN, D.R. (1967). Miscible displacement and leaching phenomena. *Agronomy*, v.11. p.254-274.
- BLACK, T.A.; GARDNER, W.R.; THURTELL, G.W. (1969). The prediction of evaporation, drainage and soil water storage for a bare soil. *Soil Sci. Soc. Amer. Proc.*, v.33., p.655-660.
- BOESTEN, J.J.T.I. (1986). *Behavior of herbicides in soil: Simulation and experimental assessment*. Ph.D. thesis, Inst. For Pesticide Res., Wageningen, Holanda.
- BOESTEN, J.J.T.I. (1991). Sensitivity analysis of a mathematical model for pesticide leaching to groundwater. *Pestic. Sci.*, v.31, p.375-388.
- BOESTEN, J.J.T.I. (1993). *Users manual for version 2.3 of PESTLA*. Interne Mededeling 275. DLO Winand Staring Centre, Wageningen, Holanda.

- BOESTEN, J.J.T.I., & A.M.A. VAN DER LINDEN, 1991. Modeling the influence of sorption and transformation on pesticide leaching and persistence. *J. Environ. Qual.* v.20, p.425-435.
- BRESLER, E.; DAGAN, G. (1979). Solute dispersion in unsaturated heterogeneous soil at field scale. 2. Applications. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, v.43, p.468-472.
- BRESLER, E.; DAGAN, G. (1983a). Unsaturated flow in spatially variable fields. 2. Application of water flow models to various fields. *Water Resour. Res.*, v.19, p.421-428.
- BRESLER, E.; DAGAN, G. (1983b). Unsaturated flow in spatially variable fields. 3. Solute transport models and their application to two fields. *Water Resour. Res.*, v.19, p.421-428.
- BRIGGS, G.G.; BROMILOW, R.H.; EVANS, A.A. (1982). Relationships between lipophilicity and root uptake and translocation of non-ionised chemicals by barley. *Pestic. Sci.*, v.13, p.495-504.
- BROOKS, R.H.; CORY, A.T. (1964). Hydraulic properties of porous media. *Hydrology paper 3*, Colorado State Univ., Fort Collins.
- BUTTERS, G.L.; JURY, W.A. (1989). Field scale transport of bromide in an unsaturated soil. 2. Dispersion modeling. *Water Resour. Res.*, v.25, n.7, p.1575-1581.
- CALHEIROS, R. de O. (1992). Sistema radicular de quatro culturas em solo Glei Pouco Humico da regio de Londrina, PR. *R. Bras. Ci. Solo*, v.16, p.299-307.
- CELIA, M.A.; BOULOUTAS, E.T.; ZARBA, R.L. (1990). A general mass-conservative numerical solution for the unsaturated flow equation. *Water Resour. Res.*, v.26, n.7, p.1483-1496.
- CNPMS (1994). *Relatorio Tecnico Anual Do Centro Nacional de Pesquisa de Milho e Sorgo. 1992 - 1993*. Sete Lagoas, MG., ISSN 0101-1251.
- COHEN, S.Z. et al. (1984). Potential pesticide contamination of ground water from agricultural uses. In: Treatment and disposal of pesticide wastes. *ACS Symp. Ser.*, v.259, p.297-325.
- CORRADINI, C.; MELONE, F.; SMITH, R.E. (1994). Modeling infiltration during complex rainfall sequences. *Water Resour. Res.*, v.30, n.10, p.2777-2784.
- CRESSIE, N. A. C. (1993). *Statistics for spatial data, Revised Edition*. John Wiley & Sons Inc., New York.
- CRESTANA, S. coord. (1990). Projeto temático "Transporte, previsão do destino e balanço de pesticidas no solo". São Carlos-SP. *Projeto temático FAPESP no. 90/3773-7*.
- CURI, Nilton, coord. (1993). *Vocabulário de ciência do solo*. Campinas-SP, Sociedade Brasileira de Ciência do Solo.
- DAGAN, G. (1984). Solute transport in heterogeneous porous formations. *J. Fluid. Mech.*, p.145, v.151-177.
- DAGAN, G. (1987). Theory of solute transport by groundwater. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, v.19, p.183-215.
- DAGAN, G. (1989). *Flow and transport in porous formations*. Springer-Verlag, Alemanha.
- DAGAN, G.; BRESLER, E. (1979). Solute dispersion in unsaturated heterogeneous soil at field scale. 1. Theory. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, v.43, p.461-467.

- DAGAN, G.; BRESLER, E. (1983). Unsaturated flow in spatially variable fields. 1. Derivation of models of infiltration and redistribution. *Water Resour. Res.*, v.19, p.413-420.
- ELLSWORTH et al. (1991). A three-dimensional field study of solute transport through unsaturated layered porous media. 1. Methodology, mass recovery and mean transport. *Water Resour. Res.*, v.27, p.951-965.
- EMANS, H.J.B.; BEEK, M.A.; LINDERS, J.B.H.J. (1992). *Evaluation system for pesticides (ESPE) vol 1. Agricultural pesticides*. National Institute for Public Health and Environmental Protection, Bilthoven, Holanda.
- ESKES, S.J.T.; CRESTANA, S. (1996). Uma abordagem estocástica para quantificar a lixiviação de pesticidas no solo em uma escala de bacia hidrográfica. In: SIMPÓSIO DE CIÊNCIAS DA ENGENHARIA AMBIENTAL, 1; SIMPÓSIO DO CURSO DE CIÊNCIAS DA ENGENHARIA AMBIENTAL, 3, São Carlos-SP. *Anais...* São Carlos: USP-EESC-CRHEA, p.86-88.
- ESKES, S.J.T.; CRESTANA, S. (1997). Um método estocástico eficiente para determinar a lixiviação de solutos em solos em uma escala de campo. In: SIMPÓSIO NACIONAL DE INSTRUMENTAÇÃO AGROPECUÁRIA-SIAGRO, 1., São Carlos-SP, nov. 1996. *Anais...* São Carlos: EMBRAPA-CNPQ, p.227-232
- FEDDES, R.A.; BRESLER, E.; NEUMAN, S.P. (1974). Field test of a modified numerical model for water uptake by root systems. *Water Resour. Res.*, v.10, n.6, p.1199-1206.
- FEDDES, R.A.; KOWALIK, P.J.; ZARADNY, H. (1978). *Simulation of field water use and crop yield*. PUDOC, Wageningen, Holanda.
- FLURY, M. (1996). Experimental evidence of transport of pesticides through field soils - a review. *J. Environ. Qual.*, v.25, p.25-45.
- FREEZE, R.A. (1975). A stochastic-conceptual analysis of one-dimensional groundwater flow in nonuniform homogeneous media. *Water Resour. Res.*, v.11, p.725-741.
- FRIED, J.J. (1975). *Groundwater pollution*. Elsevier Science, New York.
- GARDNER, H.R. (1959). Solution of the flow equation for the drying of soils and other porous media. *Soil Sci. Soc. Am. Proc.*, v.23, p.228-232.
- GARDNER, H.R. (1973). Prediction of evaporation from homogeneous soil based on the flow equation. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, v.37, n.4, p.513-516.
- GARDNER, H.R. (1974). Prediction of water loss from a fallow field soil based on soil water flow theory. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, v.38, n.3, p.379-382.
- GARDNER, W.R. (1958). Some steady state solutions of the unsaturated moisture flow equation with applications to evaporation from a watertable. *Soil Sci.*, v.85, p.228-323.
- GINN, T.R.; SIMMONS, C.S.; WOOD, B.D. (1995). Stochastic-convective transport with non-linear: Biodegradation with microbial growth. *Water Resour. Res.*, v.31, n.11, p.2689-2700.
- GREEN, W. A.; AMPT, G. A. (1911). Studies on soil physics: 1. The flow of air and water through soils. *J. Agric. Sci.*, v.4, p.1-24.
- HALLBERG, G.R. (1989). Pesticide pollution of ground water in the humid United States. *Agric. Ecosyst. Environ.*, v.26, p.299-367.

- HAVERKAMP et al. (1977). A comparison of numerical simulation models for one-dimensional infiltration. *Soil Sci. Soc. Am. J.* v.41, p.285-294.
- HIMMELBLAU, D.M. (1970). *Process Analysis by Statistical Methods*. Sterling Swift Publishing Co., Mancheca, Texas.
- HORNUNG, U. (1977). A numerical method for the simulation of unsteady groundwater flow in both saturated and unsaturated soils. *Soil Sci.*, v.124, p.140-144.
- HUTSON, J.L.; R.J. WAGENET (1995). A multiregion model describing water flow and solute transport in heterogeneous soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, v.59, p.743-751.
- HUTSON, J.L.; WAGENET, R.J. (1993). A pragmatic field scale approach for modelling pesticides. *J. Environ. Qual.*, v.22, p.494-499.
- IMAN, R.L.; CONOVER, W.J. (1980). Small sample sensitivity analysis techniques for computer models, with an application to risk assessment. *Communications in Statistics*, v.A9, p.1749-1842.
- IMAN, R.L.; CONOVER, W.J. (1982). A distribution free approach to inducing rank correlations among input variables. *Communications in statistics*, v.B11, p.311-334.
- IMAN, R.L.; HELTON, J.C. (1985). *A comparison of uncertainty and sensitivity analysis techniques for computer models*. Intern. Report. NUREGICR-3904, SAND 84-1461. Sandia National Laboratories, Albuquerque, New Mexico.
- JANSSEN, P.H.M; HEUBERGER, P.S.C.; SANDERS, R. (1992). *UNCSAM 1.1: a software package for sensitivity and uncertainty analysis*. Report no 959101004, NIPHEP, Bilthoven, Holanda.
- JURY, W.A. (1982). Simulation of solute transport using a transfer function model. *Water Resour. Res.*, v.18, p.363-368.
- JURY, W.A.; DYSON, J.S; BUTTERS, G.L. (1990). A transfer function model of field scale solute transport under transient water flow. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, v.54, p.327-331.
- JURY, W.A.; ROTH, K. (1990). *Transfer functions and solute movement through soil: theory and applications*. Birkhäuser Verlag, Basel.
- JURY, W.A.; SCOTTER, D.R. (1994). A unified approach to stochastic-convective transport problems. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, v.58, p.1327-1336.
- KHAN, A.U.H. (1988). *A laboratory test of the dispersion scale effect*. PhD Thesis, University of California, Riverside.
- KHAN, A.U.H.; JURY, W.A. (1990). A laboratory test of the dispersion scale effect in column outflow experiments. *J. Contam. Hydrol.*, v.5, p.119-132.
- KIM, C.P.; STRICKER, J.N.M.; TORFS, P.J.J.F (1996). An analytical framework for the water budget of the unsaturated zone. *Water Resour. Res.*, v.32, n.12, p.3475-3484.
- KOVÁCS, Z.L. (1996). *Teoria da probabilidade e processos estocásticos*. Edição Acadêmica, USP, São Paulo.
- KUNG, S.K.J. (1988). Preferential flow in sandy soils: mechanisms and influences. *Abstract, Amer. Soc. Agron. Nat. Meeting*, Anaheim, CA.
- KÚTILEK, M.; NIELSEN, D.R. (1994). *Soil hydrology*, Catena Verlag, Alemanha

- LAAT, P.J.M. de (1980). Model for unsaturated flow above a shallow water-table, applied to a regional sub-surface flow problem. *Agric. Res. Rep.* 895, Wageningen., Holanda.
- LAW, A. M.; KELTON, W. D. (1991). *Simulation modeling and analysis*, 2nd edition, McGraw-Hill.
- LEISTRA, M. (1978). Computed redistribution of pesticides in the root zone of an arable crop. *Plant Soil*, v.49, p.569-580.
- LEISTRA, M.; BOESTEN, J.J.T.I. (1989). Pesticide contamination of ground water in western Europe. *Agric. Ecosyst. Environ.* v.26, p.369-389.
- MCKAY, M.D.; BECKMAN, R.J.; CONOVER, W.J. (1979). A comparison of three methods for selecting values of input variables in the analysis of output from a computer. *Technometrics*, v.21, p.239-245.
- MERTEN, G.H.; MIELNICZUK, J. (1991). Distribuição do sistema radicular e dos nutrientes em Latossolo Roxo sob dois sistemas de preparo de solo. *R. Bras. Ci. Solo*, v.15, p.369-374.
- MILLY, P.C.D (1986). An event-based simulation model of moisture and energy fluxes at a bare soil surface. *Water Resour. Res.*, v.22, n.12, p.1680-1692.
- NICHOLS, P.H.; WALKER, A.; BAKER, R.J. (1982). Measurements and simulation of the movement and degradation of atrazine and metribuzin in a fallow soil. *Pestic. Sci.*, v.13, p.484-494.
- NIELSEN, D.R., BIGGAR, J.W.; ERH, K.T. (1973). Spatial variability of field-measured soil-water properties. *Hilgardia*, v.42, p.215-259.
- NIELSEN, D.R.; BIGGAR, J.W. (1962). Miscible Displacement. 3. Theoretical considerations. *Soil Sci. Soc. Am. Proc.*, v.26, p.216-221.
- NIMAH, M.N.; HANKS, R.J. (1973). Model for estimating soil water, plant and atmosphere interrelations. I. Description and sensitivity. *Soil Sci. Soc. Am. Proc.*, v.37, p.522-527.
- NOVÁK, V. (1987). Estimation of soil water extraction patterns by roots. *Agric. Water Mgt.*, n.12, p.271-278.
- OLIVEIRA, F.A. de, SILVA, J.J.S.; CAMPOS, T.G. da S. (1993). Evapotranspiração e desenvolvimento radicular do milho irrigado. *Pesq. Agropec. bras.*, v.28, n.12, p.1407-1415.
- PAN, L.; WIERENGA, P.J. (1997). Improving numerical modeling of two-dimensional water flow in variably saturated, heterogeneous porous media. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, v.61, n.2., p.335-346
- PAPOULIS, A. (1965). *Probability, random variables and stochastic processes*. Mc-Graw-Hill, New York.
- PARKER, J.C.; VAN GENUCHTEN M.Th. (1984). Flux-averaged and volume-averaged concentrations in continuum approaches to solute transport. *Water Resour. Res.*, v.20, p.866-872.
- PARLANGE, J.Y. et al. (1982). The three parameter infiltration equation. *Soil Sci.*, v.133, p.337-341.
- PENMAN, H.L. (1948). Natural evaporation from open water, bare soil and grass. *Proc. R. Soc. London, Ser. A*, v.193, p.120-146.

- PERSICANI, D. (1993). Atrazine leaching into groundwater: comparison of five simulation models. *Ecol. Modelling*, v.70, p.239-261.
- PHILIP, J. R. (1969). *Theory of infiltration, in Advances in Hydrosience*, V. T. Chow ed., Academic, San Diego, p.215-305.
- POSADAS, A. D.; CRESTANA, S. (1993). Aplicação da teoria fractal na caracterização do fenômeno "fingering" em solos não saturados. *R. bras. Ci. Solo*, v.17, n.1, p.1-8.
- PRADO, Hélio do (1995). *Manual de classificação de solos do Brasil, 2a ed.*, FUNEP, Jaboticabal.
- PRASSAD, R. (1988). A linear root water uptake model. *J. of Hydrol.*, v.99, p.297-306.
- PRESS, W.H. et al. (1994). *Numerical recipes in FORTRAN, second edition*, Cambridge University Press.
- PROTOPAS, A.L.; BRAS, R.L. (1991). The one-dimensional approximation for infiltration in heterogeneous soil during nonsteady water flow. *Water Resour. Res.*, v.27, p.1019-1027.
- RATHFELDER, K.; ABRIOLA, L. M. (1994). Mass conservative numerical solutions of the head-based Richards equation, *Water Resour. Res.*, v.30, n.9, p.2579-2586.
- REYNOLDS, W.D.; ELRICK, D.E.; TOPP, G.C. (1983). A reexamination of the constant head well permeameter method for measuring saturated hydraulic conductivity above the water table. *Soil Sci.*, v.136, p.250-268.
- RIJTEMA, P. E. (1965). *An analysis of actual evapotranspiration*. Agric. Res. Rep. 659. Pudoc. Wageningen.
- ROTH, K. (1989). *Stofftransport im wasserungesättigten Untergrund natürlicher, heterogener Böden unter Feldbedingungen*. ETH-Diss 8907, Zürich, Switzerland.
- RUSSO, D. (1991). Stochastic analysis of simulated vadose-zone solute transport in a vertical cross-section of heterogeneous soil during nonsteady water flow. *Water Resour. Res.*, v.22, p.243-247.
- RUSSO, D.; BRESLER, E. (1981). Soil hydraulic properties as stochastic processes, I. An analysis of field spatial variability. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, v.45, p.682-687.
- SILVA, C.L.A. et al. (1994). Modelagem da Precipitação efetiva na cultura do Milho. *Pesq. Agropec. bras.*, v.29, n.6, p.929-937.
- SIMMONS, C.S. (1982). A stochastic-convective transport representation of dispersion in one dimensional porous media systems. *Water Resour. Res.*, v.18, p.1193-1214.
- SIMMONS, C.S. (1986). Scale dependent effective dispersion coefficients for one-dimensional solute transport. *Proc. of 6th. Ann. AGU Front Range Branch Hydrology Days.*, Hydrol. Days Pub., Fort Collins.
- SIMMONS, C.S.; GINN, T.R.; WOOD, B.D. (1995). Stochastic-convective transport with nonlinear reaction: Mathematical framework. *Water Resour. Res.*, v.31, n.11, p.2675-2688.
- SMITH, R.E.; CORRADINI, C.; MELONE, F. (1993). Modeling infiltration for multistorm runoff events. *Water Resour. Res.*, v.29, n.1, p.133-144.
- SMITH, R.E.; HEBBERT, R.H.B. (1979). A Monte Carlo analysis of the hydrologic effects of spatial variability of infiltration. *Water Resour. Res.*, v.15, p.419-429.

- SMITH, R.E.; PARLANGE, J.Y. (1978). A parameter-efficient hydrologic infiltration model. *Water Resour. Res.*, v.14, n.3, p.533-538.
- STEIN, M. (1987). Large sample properties of simulations using Latin Hypercube Sampling. *Technometrics*, v.29, p.143-151.
- TAYLOR, G.I. (1953). The dispersion of soluble matter flowing through a capillary tube. *Proc. Lon. Math. Soc., Ser. A*, v.219, p.189-203.
- TORIDE, N.; LEIJ, F.J.; VAN GENUCHTEN, M.Th. (1995). *The CXTFIT code for estimating transport parameters from laboratory or field tracer experiments v.2.0*. Research Report No. 137, U.S Salinity Laboratory, Riverside.
- TUCCI, C.E.M. (ed.) (1993). *Hidrologia*, EDUSP, São Paulo-SP.
- VAN DER ZEE, S.E.A.T.M.; BOESTEN, J.J.T.I. (1991). Effects of soil heterogeneity on pesticide leaching to groundwater. *Water Resour. Res.*, v.27, p.3051-3063.
- VAN GENUCHTEN, M.Th. (1980). A closed form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, v.44, p.892-898.
- VAN GENUCHTEN, M.Th.; WIERENGA, P.J (1974). *Simulation of one-dimensional solute transport in porous media*. New Mexico State University's Agric. Exp. Stn. Bull. 628.
- VAN OMMEN, H.C. et al. (1989). Experimental and theoretical analysis of solute transport from a diffuse source of pollution. *J. Hydrol.*, v.105, p.225-251.
- VAZ, C.M.P. (1994). *Método eletroanalítico para a determinação de atrazina em água e solução do solo*. Tese (Doutorado) - USP/CENA, Piracicaba-SP.
- VIEIRA, D.B.; LOMBARDI, F. Neto; SANTOS, R.P dos (1994). Análise das intensidades máximas de chuva em Pindorama (SP). *R. bras. Ci. Solo*, v.18, p.255-260.
- VIEIRA, S.R.; CASTRO O.M. de; TOPP, G.C. (1992). Spatial variability of some soil physical properties in three soils of São Paulo, Brazil. *Pesq. agropec. bras.*, v.27, n.2, p.333-341.
- VIEIRA, S.R.; HATFIELD, J.L.; NIELSEN, D.R; BIGGAR, J.W. (1983). Geostatistical theory and application to variability of some agronomical properties. *Hilgardia*, v.51, n.3.
- VIEIRA, S.R.; NIELSEN, D.R.; BIGGAR, J.W. (1981). Spatial variability of field-measured infiltration rate. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, v.45, p.1040-1048.
- WAGENET, R.J.; HUTSON J.L. (1986). Predicting the fate of non-volatile pesticides in the unsaturated zone, *J. Environ Qual.* v.12, p.315-322.
- WALKER, A.; BROWN, P. (1983). Spatial variability in herbicide degradation rates and residues in soil. *Crop Prot.*, v.2, n.1, p.17-25.
- WARD, A.L. et al. (1995). Field and undisturbed column measurements for predicting transport in unsaturated layered soil. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, v.59.
- WIERENGA, P.J. (1977). Solute distribution profiles computed with steady-state and transient flow models. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, v.41, p.1050-1055.
- WILDING, L.P. (1985). Spatial variability: it's documentation, accomodation and implication to soil surveys. In: D.R. Nielsen & J. Bouma (Eds.): *Soil Spatial Variability*. Pudoc, Wageningen.

- WILSON, G.V.; JARDINE, P.M.; GWO, J.P. (1992). Modeling the hydraulic properties of a multiregion soil. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, v.56, p.1731-1737.
- WIND, G.P.; W. VAN DOORNE (1975). A numerical model for the simulation of unsaturated vertical flow of moisture in soils. *J. Hydr.*, v.24, p.1-20.

APÊNDICE A

CONCEITOS BÁSICOS DE ESTATÍSTICA

Este apêndice apresenta alguns conceitos básicos da teoria da probabilidade e da estatística, empregados neste trabalho. Para uma introdução mais profunda sobre a teoria da probabilidade, veja PAPOULIS (1965) ou KOVÁCS (1996). Para uma introdução sobre o uso de técnicas estatísticas em simulações, veja LAW & KELTON (1991). Para uma introdução sobre estatística espacial, veja CRESSIE (1993).

Uma variável aleatória real pode ser definida como uma função, cujo domínio é um espaço amostral e cujo contradomínio é um subconjunto dos reais. Para uma variável aleatória real X assim caracterizada (além de certas restrições elaboradas por KOVÁCS, 1996, p.18) pode-se definir uma “função de densidade de probabilidade”, $f(X)$. Nesta tese, a função $f(X)$ é também chamada de “distribuição”, o que é uma expressão mais abreviada.

Certas propriedades de uma função de densidade de probabilidade podem ser definidas através dos seus “momentos”. O n -ésimo momento de X é definido como:

$$M\{X^n\} = \int_{-\infty}^{\infty} X^n f(X) dX. \quad (\text{A.1})$$

O n -ésimo momento central de x é definido como:

$$M_c\{X^n\} = \int_{-\infty}^{\infty} (X - M\{X\})^n f(X) dX. \quad (\text{A.2})$$

O primeiro momento também é chamado de “média” ou “valor esperado”:

$$E\{X\} = \int_{-\infty}^{\infty} X f(X) dX = M\{X\}. \quad (\text{A.3})$$

O segundo momento central também é chamado de “variância”:

$$\text{Var}\{X\} = \int_{-\infty}^{\infty} (X - M\{X\})^2 f(X) dX = M\{X^2\} - (M\{X\})^2. \quad (\text{A.4})$$

O coeficiente de variação é definido como:

$$CV\{X\} = \frac{\sqrt{\text{Var}\{X\}}}{E\{X\}}. \quad (\text{A.5})$$

Supõe-se que a soma de duas variáveis aleatórias X_1 e X_2 produz uma variável aleatória Y . Para a média e a variância da variável Y , pode-se escrever:

$$E\{Y\} = E\{X_1\} + E\{X_2\} \quad (\text{A.6})$$

$$\text{Var}\{Y\} = \text{Var}\{X_1\} + \text{Var}\{X_2\} + 2 \text{Cov}\{X_1, X_2\} \quad (\text{A.7})$$

onde

$$\begin{aligned} \text{Cov}\{X_1, X_2\} &= M\{(X_1 - M\{X_1\})(X_2 - M\{X_2\})\} \\ &= M\{X_1 X_2\} - M\{X_1\}M\{X_2\} \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

é a covariância de X_1 e X_2 . A covariância está relacionada ao coeficiente de correlação, $\rho\{X_1, X_2\}$, como:

$$\rho\{X_1, X_2\} = \frac{\text{Cov}\{X_1, X_2\}}{\sqrt{\text{Var}\{X_1\}\text{Var}\{X_2\}}}. \quad (\text{A.9})$$

Portanto, pode-se escrever a eq.(A.7) como:

$$\text{Var}\{Y\} = \text{Var}\{X_1\} + \text{Var}\{X_2\} + 2\rho\{X_1, X_2\}\sqrt{\text{Var}\{X_1\}\text{Var}\{X_2\}}. \quad (\text{A.10})$$

As funções de densidade de probabilidade, empregadas neste trabalho, são a distribuição normal e a distribuição lognormal. A distribuição normal, também chamada de distribuição Gaussiana, é definida como:

$$f(X) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{X - \mu}{\sigma}\right)^2\right] \quad (\text{A.11})$$

com

$$E\{X\} = \mu \quad (\text{A.12})$$

e

$$\text{Var}\{X\} = \sigma^2. \quad (\text{A.13})$$

Além disto, a distribuição lognormal é definida como:

$$f(X) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma t} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\ln(X) - \mu}{\sigma}\right)^2\right] \quad (\text{A.14})$$

com

$$E\{X\} = \exp\left(\mu + \frac{\sigma^2}{2}\right) \quad (\text{A.15})$$

e

$$\text{Var}\{X\} = \exp(2\mu + \sigma^2) \left[\exp(\sigma^2) - 1 \right] = (E\{X\})^2 \left[\exp(\sigma^2) - 1 \right]. \quad (\text{A.16})$$

A função de densidade de probabilidade de uma variável de saída, X , pode ser determinada através de simulações Monte Carlo. Isto envolve a geração sequencial de parâmetros de entrada de um modelo determinístico e soluções determinísticas subsequentes da equação do modelo para cada realização dos parâmetros de entrada. Como cada solução X_i é uma resposta igualmente provável do sistema, a função de densidade de probabilidade dos dados de saída reflete as propriedades estocásticas de previsão do modelo. Para n realizações X_i , a média de amostragem e a variância de amostragem são definidas como (LAW & KELTON, 1991, p. 282):

$$\hat{\mu}(n) = \frac{\sum_{i=1}^n X_i}{n} \quad (\text{A.17})$$

$$\hat{\sigma}^2(n) = \frac{\sum_{i=1}^n (X_i - \hat{\mu}(n))^2}{n-1} \quad (\text{A.18})$$

onde

X_i = realização i da variável de saída X ,

$\hat{\mu}(n)$ = estimativa para a média de amostragem de n realizações de X_i e

$\hat{\sigma}^2(n)$ = estimativa para variância de amostragem de n realizações de X_i .

APÊNDICE B

DERIVAÇÃO DOS PRIMEIROS DOIS MOMENTOS DA DISTRIBUIÇÃO NORMAL TRUNCADA

Observe que, neste apêndice, usa-se uma notação mais abreviada do que a adotada no capítulo 5, ou seja: $z(t) \equiv z$, $\tilde{\mu}_z(t) \equiv \tilde{\mu}$, $\tilde{\sigma}_z(t) \equiv \tilde{\sigma}$ e $\xi_z(t) \equiv \xi$.

A definição do n-ésimo momento de uma função de densidade de probabilidade é dada pela eq.(A.1) e a definição da distribuição normal é dada pela eq.(A.11). Portanto, o primeiro momento da distribuição normal, truncada em $z = 0$, pode ser calculado como:

$$\begin{aligned}
 M\{z\} &= \frac{\int_{-\infty}^0 \frac{z}{\sqrt{2\pi\tilde{\sigma}}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z-\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}\right)^2\right] dz}{N\left(-\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}\right)} = \frac{\int_{-\infty}^{-\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}} \frac{\tilde{\mu} + \tilde{\sigma}\tilde{\chi}}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\tilde{\chi})^2\right] d\tilde{\chi}}{N\left(-\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}\right)} \\
 &= \tilde{\mu} + \frac{\int_{-\infty}^{-\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}} \frac{\tilde{\sigma}\tilde{\chi}}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\tilde{\chi})^2\right] d\tilde{\chi}}{N\left(-\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}\right)} = \tilde{\mu} + \frac{-\frac{\tilde{\sigma}}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\tilde{\chi})^2\right] \Big|_{-\infty}^{-\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}}}{N\left(-\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}\right)} \\
 &= \tilde{\mu} - \frac{\frac{\tilde{\sigma}}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}\right)^2\right]}{N\left(-\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}\right)} = \tilde{\mu} - \tilde{\sigma}\xi, \tag{B.1}
 \end{aligned}$$

onde ξ é definido pela eq.(5.12), no capítulo 5. Além disto, o segundo momento é:

$$M\{(z)^2\} = \frac{\int_{-\infty}^0 \frac{z^2}{\sqrt{2\pi\tilde{\sigma}}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z-\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}\right)^2\right] dz}{N\left(-\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}\right)}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\int_{-\infty}^{\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}} \frac{(\tilde{\mu})^2 + 2\tilde{\mu}\tilde{\sigma}\tilde{\chi} + (\tilde{\sigma}\tilde{\chi})^2}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\tilde{\chi})^2\right] d\tilde{\chi}}{N\left(-\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}\right)} \\
&= (\tilde{\mu})^2 + \frac{\int_{-\infty}^{\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}} \frac{2\tilde{\mu}\tilde{\sigma}\tilde{\chi}}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\tilde{\chi})^2\right] d\tilde{\chi} + \int_{-\infty}^{\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}} \frac{(\tilde{\sigma}\tilde{\chi})^2}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\tilde{\chi})^2\right] d\tilde{\chi}}{N\left(-\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}\right)} \\
&= (\tilde{\mu})^2 + \frac{-\frac{2\tilde{\mu}\tilde{\sigma}}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\tilde{\chi})^2\right] \Big|_{-\infty}^{\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}} + (\tilde{\sigma})^2 \int_{-\infty}^{\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}} \frac{\tilde{\chi}^2}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\tilde{\chi})^2\right] d\tilde{\chi}}{N\left(-\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}\right)} \\
&= (\tilde{\mu})^2 + \frac{-\frac{2\tilde{\mu}\tilde{\sigma}}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}\right)^2\right] + (\tilde{\sigma})^2 \int_{-\infty}^{\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}} \frac{\tilde{\chi}^2}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\tilde{\chi})^2\right] d\tilde{\chi}}{N\left(-\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}\right)}.
\end{aligned}$$

(B.2)

A integral da eq.(B.2) pode ser avaliada como:

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}} \frac{\tilde{\chi}^2}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\tilde{\chi})^2\right] d\tilde{\chi} &= \int_{-\infty}^{\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}} \frac{-\tilde{\chi}}{\sqrt{2\pi}} d\left(\exp\left[-\frac{1}{2}(\tilde{\chi})^2\right]\right) \\
&= \frac{-\tilde{\chi}}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\tilde{\chi})^2\right] \Big|_{-\infty}^{\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}} + \int_{-\infty}^{\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\tilde{\chi})^2\right] d\tilde{\chi} \\
&= \frac{\tilde{\mu}/\tilde{\sigma}}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}\right)^2\right] + N\left(-\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}\right).
\end{aligned}$$

(B.3)

Substituindo-se a eq.(B.3) na eq.(B.2), obtém-se:

$$\begin{aligned}
M\{(z)^2\} &= \\
&= (\tilde{\mu})^2 + \frac{-\frac{2\tilde{\mu}\tilde{\sigma}}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}\right)^2\right] + (\tilde{\sigma})^2 \left\{ \frac{\tilde{\mu}/\tilde{\sigma}}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}\right)^2\right] + N\left(-\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}\right) \right\}}{N\left(-\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}\right)} \\
&= (\tilde{\mu})^2 + \frac{-\frac{2\tilde{\mu}\tilde{\sigma}}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}\right)^2\right] + \frac{\tilde{\mu}\tilde{\sigma}}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}\right)^2\right] + (\tilde{\sigma})^2 N\left(-\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}\right)}{N\left(-\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}\right)} \\
&= (\tilde{\mu})^2 - \frac{\frac{\tilde{\mu}\tilde{\sigma}}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}\right)^2\right]}{N\left(-\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}\right)} + (\tilde{\sigma})^2 = (\tilde{\mu})^2 - \tilde{\mu}\tilde{\sigma}\xi + (\tilde{\sigma})^2. \tag{B.4}
\end{aligned}$$

Portanto, a média e a variância são, pelas suas definições através das eqs.(A.3) e (A.4):

$$E\{z\} = M\{z\} = \tilde{\mu} - \tilde{\sigma}\xi \tag{B.5}$$

e

$$\begin{aligned}
\text{Var}\{z\} &= M\{(z)^2\} - (M\{z\})^2 \\
&= (\tilde{\mu})^2 - \tilde{\mu}\tilde{\sigma}\xi + (\tilde{\sigma})^2 - (\tilde{\mu} - \tilde{\sigma}\xi)^2 \\
&= (\tilde{\sigma})^2 + E\{z\} \tilde{\sigma}\xi. \tag{B.6}
\end{aligned}$$

APÊNDICE C

DERIVAÇÃO DA DISTÂNCIA DE PERCURSO DE UM PROCESSO CONVECTIVO-DISPERSIVO, PARA UM PERFIL SEMI-INFINITO

Observe que, neste apêndice, usa-se uma notação mais abreviada do que a adotada no capítulo 5, ou seja: $z(t) \equiv z$, $\tilde{\mu}_z(t) \equiv \tilde{\mu}$, $\tilde{\sigma}_z(t) \equiv \tilde{\sigma}$ e $\tilde{\chi}_z(t) \equiv \tilde{\chi}$.

A probabilidade que uma partícula de soluto adicionada em $t = 0$ na entrada $z = 0$ atinja, num tempo t , uma profundidade menor ou igual a z , é dada por:

$$\begin{aligned}
 P[\xi \geq z | \xi \leq 0] &= \frac{\int_z^0 \frac{1}{\sqrt{2\pi\tilde{\sigma}}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\xi - \tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}\right)^2\right] d\xi}{N\left(-\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}\right)} \\
 &= \frac{\int_{\frac{z-\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}}^{\frac{-\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\tilde{\chi})^2\right] d\tilde{\chi}}{N\left(-\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}\right)} \\
 &= \frac{\int_{\frac{\tilde{\chi}}{\tilde{\sigma}}}^{\frac{-\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\tilde{\chi})^2\right] d\tilde{\chi}}{N\left(-\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}\right)} \\
 &= \frac{\int_{-\infty}^{\frac{-\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\tilde{\chi})^2\right] d\tilde{\chi} - \int_{-\infty}^{\frac{\tilde{\chi}}{\tilde{\sigma}}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\tilde{\chi})^2\right] d\tilde{\chi}}{N\left(-\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}\right)}
 \end{aligned}$$

$$= \frac{N\left(-\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}\right) - N(\tilde{\chi})}{N\left(-\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}\right)} \quad (\text{C.1})$$

com

$$\tilde{\chi} = \frac{z - \tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}. \quad (\text{C.2})$$

A eq.(C.1) pode ser escrita como (usando-se o símbolo P para $P[\xi \geq z | \xi \leq 0]$):

$$N(\tilde{\chi}) = (1 - P) N\left(-\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}\right) \quad (\text{C.3})$$

ou

$$\tilde{\chi} = N^{-1}\left[(1 - P) N\left(-\frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}\right)\right]. \quad (\text{C.4})$$

Com as eqs.(C.2) e (C.4), a distância de percurso z , é facilmente obtida, ou seja:

$$z = \tilde{\mu} + \tilde{\sigma}\tilde{\chi}. \quad (\text{C.5})$$

APÊNDICE D

MÉDIA E VARIÂNCIA DE UM PROCESSO CONVECTIVO-DISPERSIVO, PARA UM PERFIL SEMI-INFINITO

Para um processo convectivo-dispersivo, os primeiros dois momentos da distribuição da distância de percurso, são (JURY & ROTH, 1990, p. 181):

$$M\{z(t)\} = \sqrt{\frac{Dt}{\pi}} \exp(-a^2 t) + \frac{D}{2v} \left[(1 + 4a^2 t) \operatorname{erfc}(-a\sqrt{t}) - \operatorname{erfc}(a\sqrt{t}) \right] \quad (\text{D.1})$$

e

$$M\{(z(t))^2\} = \left(\frac{2D}{v} + vt \right) \sqrt{\frac{Dt}{\pi}} \exp(-a^2 t) + \left(\frac{D}{v} \right)^2 \left[\operatorname{erfc}(a\sqrt{t}) + (8a^4 t^2 + 8a^2 t - 1) \operatorname{erfc}(-a\sqrt{t}) \right] \quad (\text{D.2})$$

com

$$a = \frac{v}{2\sqrt{D}} \quad (\text{D.3})$$

onde

$\operatorname{erfc}(\)$ = função erro complementar (ABRAMOWITZ & STEGUN, 1970).

Portanto, a média e a variância são, a partir das suas definições dadas pelas eqs.(A.3) e (A.4):

$$E\{z(t)\} = M\{z(t)\} \quad (\text{D.4})$$

e

$$\operatorname{Var}\{z(t)\} = M\{(z(t))^2\} - (M\{z(t)\})^2. \quad (\text{D.5})$$

Observe que todas as equações também podem ser escritas em função de $\omega = vt$, ou de $\varpi = |v|t$, através da substituição de $D = \lambda|v|$ nas eqs.(D.1), (D.2) e (D.3).

APÊNDICE E

DERIVAÇÃO DO COEFICIENTE DE VARIAÇÃO DA DISTRIBUIÇÃO LOGNORMAL SEGUNDO O MÉTODO 2

No modelo lognormal, os tempos de percurso estão perfeitamente correlacionados, ou seja, $\rho\{X_1, X_2\} = 1$ na eq.(A.10). Portanto, para a variância no modelo lognormal pode-se escrever:

$$\begin{aligned} \text{Var}\{t^k(s + \Delta s) - t_0^k\} &= \text{Var}\{t^k(s) - t_0^k\} \\ &+ \text{Var}\{t^k(s + \Delta s) - t^k(s)\} \\ &+ 2\sqrt{\text{Var}\{t^k(s) - t_0^k\}\text{Var}\{t^k(s + \Delta s) - t^k(s)\}}. \end{aligned} \quad (\text{E.1})$$

Substituindo-se as eqs.(5.23), (5.29), (5.35) e (5.36) na eq.(E.1), obtém-se uma equação parabólica para $\eta_{\Delta t}^k(s)$, no intervalo $[s, s + \Delta s]$:

$$\left(\int_s^{s+\Delta s} \frac{d\zeta}{|\bar{u}_t^k(\zeta)|} \right)^2 \left(\eta_{\Delta t}^k(s) \right)^2 + 2 \sqrt{\int_s^{s+\Delta s} \frac{2\lambda^k(\zeta)}{(\bar{u}_t^k(\zeta))^2} d\zeta} \int_s^{s+\Delta s} \frac{d\zeta}{|\bar{u}_t^k(\zeta)|} \eta_{\Delta t}^k(s) - \int_s^{s+\Delta s} \frac{2\lambda^k(\zeta)}{(\bar{u}_t^k(\zeta))^2} d\zeta = 0. \quad (\text{E.2})$$

Com $\bar{u}_t^k(s)$ e $\lambda^k(s)$ constantes no intervalo $[s, s + \Delta s]$, a eq.(E.2) torna-se:

$$\Delta s \left(\eta_{\Delta t}^k(s) \right)^2 + |\bar{u}_t^k(s)| \sqrt{8 \int_0^s \frac{\lambda^k(\zeta)}{(\bar{u}_t^k(\zeta))^2} d\zeta} \eta_{\Delta t}^k(s) - 2\lambda^k(s) = 0. \quad (\text{E.3})$$

Com o limite $\Delta s \rightarrow 0$, a eq.(E.3) torna-se:

$$\eta_{\Delta t}^k(s) = \frac{\lambda^k(s)}{|\bar{u}_t^k(s)| \sqrt{\int_0^s \frac{2\lambda^k(\zeta)}{(\bar{u}_t^k(\zeta))^2} d\zeta}} = \frac{\lambda^k(s)}{|\bar{u}_t^k(s)| \sqrt{\text{Var}\{t^k(s) - t_0^k\}}}. \quad (\text{E.4})$$

Devido ao limite $\Delta s \rightarrow 0$, a eq.(E.4) é somente válida para passos Δs relativamente pequenos. Para passos grandes no espaço, por exemplo, em simulações descontínuas, é mais correto resolver a eq.(E.3) para cada passo Δs . A eq.(E.3) é uma equação parabólica que apresenta dependência implícita em s . Portanto, o emprego de um método iterativo para determinar a raiz da eq.(E.3) é necessário. Para evitar isto, assume-se que são desprezíveis os efeitos da não-estacionaridade e não-homogenidade do fluxo de água, no valor de $\eta_{\Delta}^k(s)$.

Ou seja, *na média*, $(\bar{u}_t^k(s))^2 \int_0^s \lambda^k(\zeta) / (\bar{u}_t^k(\zeta))^2 d\zeta \approx \int_0^s \lambda^k(\zeta) d\zeta$. Com esta suposição a eq.(E.3) torna-se:

$$\Delta s (\eta_{\Delta t}^k(s))^2 + \sqrt{8 \int_0^s \lambda^k(\zeta) d\zeta} \eta_{\Delta t}^k(s) - 2\lambda^k(s) \approx 0. \quad (\text{E.5})$$

A eq.(E.5) apresenta uma equação parabólica explícita, que pode ser resolvida com facilidade, para cada passo Δs .

APÊNDICE F

DERIVAÇÃO DO COEFICIENTE DE VARIAÇÃO DA DISTRIBUIÇÃO LOGNORMAL SEGUNDO O MÉTODO 3

Neste caso, supõe-se que o movimento da amostra k é independente de todas as outras amostras e que o tempo de percurso desta amostra apresenta uma distribuição lognormal, para qualquer distância de percurso. Ou seja, para a distância de percurso s , pode-se escrever:

$$t^k(s) - t_0^k = \Delta t^\circ \exp[\mu_t^k(s) + \sigma_t^k(s)\chi_t^k] \quad (\text{F.1})$$

onde

Δt° = uma unidade de tempo no sistema de unidades desejado (dia).

Substituindo-se a eq.(5.21) na eq.(F.1), obtém-se:

$$t^k(s) - t_0^k = E\{t^k(s)\} G_t^k(s) \quad (\text{F.2})$$

com

$$G_t^k(s) = \exp\left[\sigma_t^k(s)\chi_t^k - \frac{(\sigma_t^k(s))^2}{2}\right] \quad (\text{F.3})$$

$$\sigma_t^k(s) = \sqrt{\ln\left(1 + (\eta_t^k(s))^2\right)} \quad (\text{F.4})$$

$$\eta_t^k(s) = CV\{t^k(s)\} \quad (\text{F.5})$$

onde

μ_t^k , σ_t^k = coeficientes da distribuição lognormal do tempo de percurso, para distância de percurso s , da amostra k (1),

G_t^k = tempo de percurso normalizado da amostra k (1) e

η_t^k = coeficiente de variação no tempo de percurso da amostra k (1).

Para um passo no tempo, durante o período de percurso da amostra k, pode-se escrever:

$$\begin{aligned} \Delta t^k(s) &= t^k(s + \Delta s) - t^k(s) \\ &= E\{t^k(s + \Delta s) - t_0^k\} G_t^k(s + \Delta s) - E\{t^k(s) - t_0^k\} G_t^k(s). \end{aligned} \quad (\text{F.6})$$

Para um processo convectivo-dispersivo, pode-se substituir a eq.(5.35) na eq.(F.6). Isto resulta em:

$$\begin{aligned} \Delta t^k(s) &= G_t^k(s + \Delta s) \int_0^{s+\Delta s} \frac{d\zeta}{|\bar{u}_t^k(\zeta)|} - G_t^k(s) \int_0^s \frac{d\zeta}{|\bar{u}_t^k(\zeta)|} \\ &= G_t^k(s + \Delta s) \int_s^{s+\Delta s} \frac{d\zeta}{|\bar{u}_t^k(\zeta)|} + (G_t^k(s + \Delta s) - G_t^k(s)) \int_0^s \frac{d\zeta}{|\bar{u}_t^k(\zeta)|}. \end{aligned} \quad (\text{F.7})$$

Com $\bar{u}_t^k(s) \approx$ constante no intervalo $[s, s + \Delta s]$, obtém-se:

$$\Delta t^k(s) = G_t^k(s + \Delta s) \frac{\Delta s}{|\bar{u}_t^k(s)|} + (G_t^k(s + \Delta s) - G_t^k(s)) \int_0^s \frac{d\zeta}{|\bar{u}_t^k(\zeta)|}. \quad (\text{F.8})$$

Por definição, $|u_t^k(s)| = \Delta s / \Delta t^k(s)$, quando $u_t^k(s) \approx$ constante no intervalo $[s, s + \Delta s]$.

Portanto, dividindo-se por Δs e substituindo-se $|u_t^k(s)| = \Delta s / \Delta t^k(s)$, a eq.(F.8) torna-se:

$$\frac{1}{|u_t^k(s)|} = \frac{G_t^k(s + \Delta s)}{|\bar{u}_t^k(s)|} + \left(\frac{G_t^k(s + \Delta s) - G_t^k(s)}{\Delta s} \right) \int_0^s \frac{d\zeta}{|\bar{u}_t^k(\zeta)|}. \quad (\text{F.9})$$

Rearranjando-se a eq.(F.9), obtém-se:

$$u_t^k(s) = \frac{\bar{u}_t^k(s)}{G_{\Delta t}^k(s)} \quad (\text{F.10})$$

com

$$G_{\Delta t}^k(s) = G_t^k(s + \Delta s) + |u_t^k(s)| \left(\frac{G_t^k(s + \Delta s) - G_t^k(s)}{\Delta s} \right) \int_0^s \frac{d\zeta}{|\bar{u}_t^k(\zeta)|} \quad (\text{F.11})$$

Assume-se que são desprezíveis os efeitos da não-estacionaridade e não-homogeneidade do fluxo de água, no valor de $\eta_t^k(s)$ e, portanto, no valor de $G_t^k(s)$. Com esta suposição, pode-se escrever a eq.(F.11) como:

$$G_{\Delta t}^k(s) \approx G_t^k(s + \Delta s) + \frac{s}{\Delta s} (G_t^k(s + \Delta s) - G_t^k(s)). \quad (\text{F.12})$$

Observe que a eq.(F.10) é igual à eq.(5.31), ou seja, a solução para um processo convectivo-estocástico. Para um processo convectivo-dispersivo, as eqs.(F.3), (F.4), (F.5) e (F.12) têm que ser empregadas para ajustar o modelo lognormal.