

Boletim de Pesquisa e Desenvolvimento 26

ISSN 1516-4675
Dezembro, 2004

**Software AGROSCRE - Apoio à
Avaliação de Tendências de
Transporte de Princípios Ativos
de Agrotóxicos**





ISSN 1516-4675

Dezembro, 2004

Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária
Centro Nacional de Pesquisa de Monitoramento e Avaliação de Impacto Ambiental
Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento

Boletim de Pesquisa e Desenvolvimento 26

Software AGROSCRE - Apoio à Avaliação de Tendências de Trans- porte de Princípios Ativos de Agrotóxicos

Maria Conceição Peres Young Pessoa
Vera Lúcia Ferracini
Aldemir Chaim
Shirlei Scramin

Jaguariúna, SP
2004

Embrapa Meio Ambiente

Rodovia SP 340 - Km 127,5 - Tanquinho Velho
Caixa Postal 69 - Cep.13820-000, Jaguariúna, SP
Fone: (19) 3867-8750
Fax: (19) 3867-8740
www.cnpma.embrapa.br
sac@cnpma.embrapa.br

Comitê de Publicações da Unidade

Presidente: Geraldo Stachetti Rodrigues
Secretário-Executivo: Maria Amélia de Toledo Leme
Secretário: Sandro Freitas Nunes
Membros: Marcelo A. Boechat Morandi, Maria Lúcia Saito, José
 Maria Guzman Ferraz, Manoel Dornelas de Souza,
 Heloisa Ferreira Filizola, Cláudio Cesar de A.
 Buschinelli
Normalização Bibliográfica: Maria Amélia de Toledo Leme
Foto(s) da capa:
Tratamento de ilustrações: Alexandre Rita da Conceição
Edição eletrônica: Alexandre Rita da Conceição

1ª edição**Todos os direitos reservados.**

A reprodução não-autorizada desta publicação, no todo ou em parte, constitui violação dos direitos autorais (Lei no 9.610).

Pessoa, Maria Conceição Peres Young.

Software AGROSCORE - apoio à avaliação de tendências de transporte de princípios ativos de agrotóxicos / Maria Conceição Peres Young Pessoa... [et. al]. - Jaguariúna : Embrapa Meio Ambiente, 2004.

24 p. - (Boletim de Pesquisa e Desenvolvimento / Embrapa Meio Ambiente, ISSN 1516-4675; 26)

1. Programa computacional. 2. Agrotóxicos - Modelos matemáticos. I. Ferracini, Vera Lúcia. II. Chaim, Aldemir. IV. Scramin, Shirlei. V. Título. VI. Série.

CDD 005.304

© Embrapa 2004

Sumário

Resumo	7
Abstract	9
Introdução	10
Material e Métodos	12
Resultados e Discussão	16
Conclusão	21
Referências	22

Software AGROSCRE - Apoio à Avaliação de Tendências de Transporte de Princípios Ativos de Agrotóxicos

Maria Conceição Peres Young Pessoa¹

Vera Lúcia Ferracini²

Aldemir Chaim³

Shirlei Scramin⁴

Resumo

AGROSCRE é um programa computacional elaborado em linguagem Quick Basic 4.5, para facilitar a avaliação de princípios ativos de agrotóxicos pelos métodos de GOSS, pelo índice de GUS e por critérios da EPA – *Environmental Protection Agency*. O método de GOSS indica o potencial de transporte de princípio ativo associado a sedimento ou dissolvido em água e o método de GUS o potencial de lixiviação dos princípios ativos (p.a.). Os critérios da EPA também avaliam essas tendências de transporte. Para a avaliação de um mesmo princípio ativo pelos 3 modelos são necessárias as seguintes informações dos p.a.: constante de adsorção ao carbono orgânico (Koc), meia vida no solo ($t_{1/2}$ solo), meia vida em água ($t_{1/2}$ água), solubilidade em água e constante de Henry (H); sendo que os dados mínimos para rodar pelo menos um dos modelos são Koc e $t_{1/2}$ solo. O programa roda em arquivo executável em qualquer computador tipo PC, em ambiente amigável ao usuário.

PALAVRAS-CHAVE: avaliação de risco; programa computacional; lixiviação; sedimento; água.

¹ Matemática Aplicada, PhD., Embrapa Meio Ambiente, Rod. SP 340, Km 127,5 Cx Postal 69 - Jaguariúna, SP. young@cnpma.embrapa.br

² Química, PhD, Embrapa Meio Ambiente, Rod. SP 340, Km 127,5 Cx Postal 69 - Jaguariúna, SP. veraf@cnpma.embrapa.br

³ Eng. Agrônomo, MSc., Embrapa Meio Ambiente, Rod. SP 340, Km 127,5 Cx Postal 69 - Jaguariúna, SP. aldemir@cnpma.embrapa.br

⁴ Farmácia Bioquímica, PhD., Embrapa Meio Ambiente, Rod. SP 340, Km 127,5 Cx Postal 69 - Jaguariúna, SP. scramin@cnpma.embrapa.br

AGROSCORE software - A tool for evaluating the transport tendencies of pesticide active ingredients

Abstract

AGROSCORE is a computer program developed in Quick Basic 4.5 language to help the evaluation of active ingredients of pesticides by GOSS Method, GUS index and *Environmental Protection Agency* –EPA criterions. GOSS Method indicates the potential of active ingredient transport associated to sediment or dissolved in water and the GUS Index provides the lixiviation potential. EPA´s criterions also evaluate tendencies to transport. For evaluate a same active ingredient using the three models is necessary information about: adsorption constant to organic carbon, soil half-life, water half-life, water solubility , Henry constant; the minimum data to run at least one model is Koc and $t_{1/2}$ soil. The software runs in executable file in PC computers, in a friendly environment to user.

KEY WORDS: risk evaluation; software; lixiviation; sediment; water.

Introdução

O sistema de produção agrícola adotado nos últimos anos tem sido altamente dependente do uso de agroquímicos (agrotóxicos, fertilizantes e outros insumos) para assegurar produtividade, expondo o agroecossistema a risco de transporte de agrotóxicos aplicados nas culturas para áreas não alvo (FILIZOLA et al., 2002).

A estrutura química do princípio ativo (p.a.) do agrotóxico governa a sua dinâmica no ambiente, tais como a sua eficácia e eficiência no controle das pragas e doenças das culturas, sua mobilidade e sua degradabilidade.

O comportamento do agrotóxico no ambiente é orientado basicamente pelos processos de retenção, transformação e transporte. Os processos de retenção são resultantes da interação entre o p.a e a partícula do solo, podendo ser reversíveis ou não. São freqüentemente descritos como adsorção. Esses processos podem retardar ou acelerar o movimento do produto em diferentes profundidades do solo influenciando, dessa forma, na sua disponibilidade e interação com outros processos, principalmente os relacionados a transformações bioquímicas e a erosão. Os processos de transformação podem ser de natureza química (catálise, fotoquímica) ou biológica (microorganismos), encontrados naturalmente no ambiente ou induzidos. Alguns agrotóxicos sofrem transformações bioquímicas em decorrência da ação de microorganismos degradadores ou metabolizadores das moléculas dos princípios ativos dos produtos. As transformações bióticas resultam geralmente na degradação da molécula original tendendo a diminuir a sua toxicidade, muito embora o processo também possa gerar moléculas mais tóxicas que a original. Os principais processos que favorecem o transporte de agrotóxicos são volatilização, lixiviação, escoamento superficial (ou "run-off") e evaporação (CHENG, 1990).

No que se refere a aplicação de agrotóxicos e o meio ambiente, especial atenção tem sido dada para a qualidade das águas superficial e subterrânea. Buscam-se orientações corretas de aplicação dos agrotóxicos e de sua avaliação de eficiência, de forma que sejam formuladas para atender também aos ciclos hidrológicos locais (CHAIM et al., 2002; CHAIM et al., 1999) .

Alguns trabalhos brasileiros estão avaliando o potencial de contaminação das águas brasileiras por agrotóxicos utilizando modelos matemáticos e simulação de sistemas (PARÁIBA & PULINO, 2002; PESSOA et al., 1999). Entretanto, vários

simuladores fazem uso de modelos matemáticos apresentados como índices ou como intervalos matemáticos, tais como o Índice de GUS, os critérios da EPA- *Environmental Protection Agency* e o Método de GOSS. Iniciativas brasileiras regionais apontam a facilidade de uso desses métodos e os benefícios advindos de seus resultados (FERRACINI et al., 2001). Os parâmetros de entrada desses modelos são: K_{oc} (em mL/g), t_{1/2} solo (em dias), t_{1/2} água (em dias), solubilidade em água (em mg/L) e Constante de Henry (em Pa.m³.mol⁻¹). Esses parâmetros são importantes porque:

- a) o K_{oc} é fator preditivo da biodisponibilidade do agrotóxico, uma vez que os produtos hidrofóbicos (insolúveis em água) podem ligar-se reversivelmente ao conjunto de carbono orgânico. O valor K_{oc} mede a tendência que um composto químico tem de sofrer partição entre a fase sólida e a solução do solo no sistema solo-água. Assim, como K_{oc} mede a quantidade de carbono orgânico adsorvido ao solo, é útil para estimar: a extensão em que um soluto orgânico sofrerá partição no solo quando a água movimentar-se através do perfil do solo; o grau em que os compostos químicos adsorverão na superfície do solo; a partição durante o escoamento superficial; a partição em sedimentos aquosos.
- b) a t_{1/2} – é útil para a comparação da persistência relativa de diferentes agrotóxicos no ambiente. Assim, são importantes para o entendimento do potencial impacto no solo ou na água.
- c) a solubilidade em água afeta o equilíbrio da partição pelo controle das concentrações no meio difuso ar/água, como também afeta as velocidades de processos de transferência como a **evaporação** do agrotóxico que está presente no solo ou na água para o ar, ou a **absorção**, pelo peixe, do produto que está presente na água. Assim, ela é um indicativo da facilidade do princípio ativo em lixiviar (BLANCO, 1979).
- d) a constante da Lei de Henry –é a relação da pressão parcial do soluto no ar em equilíbrio com a concentração na água – expressa em Pa.m³.mol⁻¹ ou em atm.m³.mol⁻¹ - e descreve a partição do agrotóxico entre o ar e a água que é essencialmente um balanço das solubilidades do agrotóxico entre o ar e a água (SUNTIO et al., 1988; SHIU, 1990). A constante da lei de Henry vai definir a tendência de um agrotóxico em volatilizar da solução para o ar, sendo que um alto valor para esta constante favorece a **volatilização** e os produtos que tenham baixo valor para esta constante podem persistir no solo ou na água.

Alguns desses parâmetros são fortemente influenciados pela temperatura do ambiente local e, como frequentemente são disponibilizados na literatura internacional para valores médios, muitas vezes as avaliações podem não refletir a situação local específica do local onde são aplicados. Outra limitação é a dificuldade para utilizar esses modelos por aqueles que não estejam acostumados a utilizar planilhas eletrônicas ou familiaridade e disponibilidade de acesso a linguagens de programação.

Novos trabalhos estão disponibilizando os parâmetros necessários para uso desses modelos no ambiente brasileiro, facilitando a investigação do potencial de transporte de princípios ativos em diferentes localidades do país. Cita-se também que novos produtos comerciais estão sendo apresentados no mercado contendo novos princípios ativos e esses também deverão ser investigados em termos de seu potencial de transporte no ambiente nacional.

Os mais de 450 princípios ativos de grande parte dos agrotóxicos em uso no Brasil poderiam ser avaliados por meio desses métodos, no intuito de subsidiar a priorização de produtos para monitoramento "in loco" e de orientar investigações subsequentes nas matrizes onde esses compostos apresentem maior potencial de serem encontrados (solo ou água), visando a detecção de níveis de resíduos de produtos com maior potencial de contaminação de recursos hídricos. Dessa forma, esse trabalho apresenta um programa computacional que facilita a avaliação de princípios ativos de agrotóxicos por meio de métodos internacionalmente reconhecidos.

Material e Métodos

A) Métodos Utilizados nos Procedimentos do Programa

Método para avaliação de potencial de lixiviação de agrotóxicos para água subterrânea:

Utilizou-se o método de GUSTAFSON (1989). Esse método calcula o **índice de GUS** para cada princípio ativo mediante o fornecimento de valores de coeficiente de adsorção ao carbono orgânico (K_{oc}) e de meia vida ($t_{1/2}$) do produto no solo de acordo com a Eq.1.

$$GUS = \log(t_{1/2} \text{ solo}) \times (4 - \log(K_{oc})) \quad (\text{Eq.1})$$

onde:

$t_{1/2}$ solo = meia vida do produto no solo; K_{oc} = coeficiente de adsorção ao carbono orgânico.

Posteriormente, o valor de GUS obtido para cada p.a. foi classificado em uma das categorias, definidas por faixas pré-estabelecidas, conforme atenção aos seguintes intervalos :

- a) **GUS** $\leq 1,8$ = > Não sofre lixiviação;
- b) $1,8 < \text{GUS} < 2,8$ = > Faixa de Transição;
- c) $\text{GUS} \geq 2,8$ = > Provável Lixiviação.

Método para avaliação do potencial de transporte de agrotóxicos associado a sedimento ou dissolvido em água – avaliação para águas superficial e subterrânea.

Para essa avaliação foi utilizado o método proposto por GOSS (1992), que faz uso dos mesmos parâmetros utilizados para o cálculo do índice de GUS já discutido, e de solubilidade do p.a. em água. Esse método reúne um conjunto de cláusulas de regras, apresentadas nos intervalos matemáticos fornecidos a seguir, para classificar o produto em “**Alto Potencial**”, “**Médio Potencial**” e “**Baixo Potencial**” de transporte em água, associado a sedimento ou dissolvido.

a) Regras para classificação do potencial de transporte do princípio ativo associado a sedimento

a.1). *Alto potencial:*

Regra 1 : Cláusula1: $t_{1/2}$ solo ≥ 40 dias E Cláusula 2: $K_{oc} \geq 1000 \text{ mL.g}^{-1}$ **OU**

Regra 2: Cláusula1: $t_{1/2}$ solo ≥ 40 dias E Cláusula 2: $K_{oc} \geq 500 \text{ mL.g}^{-1}$ E Cláusula3: Solubilidade em água $\leq 0,5 \text{ } \mu\text{g.mL}^{-1}$

a.2.) *Baixo potencial:*

Regra 1 : Cláusula única: $t_{1/2}$ solo ≤ 1 dia; **OU**

Regra 2: Cláusula1: $t_{1/2}$ solo ≤ 2 dias E Cláusula 2: $K_{oc} \leq 500 \text{ mL.g}^{-1}$; **OU**

Regra 3: Cláusula1: $t_{1/2}$ solo ≤ 4 dias E Cláusula 2: $K_{oc} \leq 900 \text{ mL.g}^{-1}$ E Cláusula 3: Solubilidade em água $\geq 0,5 \text{ } \mu\text{g.mL}^{-1}$ **OU**

Regra 4: Cláusula1: $t_{1/2}$ solo ≤ 40 dias E Cláusula2: $K_{oc} \leq 500 \text{ mL.g}^{-1}$ E Cláusula 3: Solubilidade em água $\geq 0,5 \text{ } \mu\text{g.mL}^{-1}$; **OU**

Regra 5: Cláusula1: $t_{1/2}$ solo ≤ 40 dias E Cláusula2: $K_{oc} \leq 900 \text{ mL.g}^{-1}$ E Cláusula3: Solubilidade em água $\geq 2,0 \text{ } \mu\text{g.mL}^{-1}$

a.3) Médio Potencial:

Caso não atenda a nenhuma das regras de a.1) e nenhuma das regras de a.2).

b) Regras para classificação do potencial de transporte do princípio ativo dissolvido em água.

b.1) Alto potencial:

Regra 1: Cláusula1: $t_{1/2}$ solo > 35 dias E Cláusula2: $K_{oc} < 100.000 \text{ mL.g}^{-1}$ E Cláusula3: Solubilidade $\geq 1 \text{ } \mu\text{g.mL}^{-1}$ **OU**

Regra 2: Cláusula1: $K_{oc} \leq 700 \text{ mL.g}^{-1}$ E Cláusula2: $10 \leq \text{Solubilidade} \leq 100 \text{ } \mu\text{g.mL}^{-1}$

b.2) Baixo potencial:

Regra 1: Cláusula única: $K_{oc} \geq 100.000 \text{ mL.g}^{-1}$ **OU**

Regra 2: Cláusula1: $t_{1/2}$ solo ≤ 1 dia E Cláusula 2: $K_{oc} \geq 1.000 \text{ mL.g}^{-1}$ **OU**

Regra 3: Cláusula1: $t_{1/2}$ solo < 35 dias E Cláusula2: Solubilidade $< 0,5 \text{ } \mu\text{g.mL}^{-1}$

b.3) Médio Potencial:

Caso não atenda a nenhuma das regras de b.1) e nenhuma das regras de b.2).

Método para avaliação do potencial de transporte de princípios ativos pelos critérios da EPA

O potencial de transporte de agrotóxicos, pelas características próprias aos seus respectivos princípios ativos também podem ser avaliados usando os critérios de *screening* da *Environmental Protection Agency* (EPA) (COHEN et al., 1995). Os princípios ativos que obedecerem às inequações abaixo, oferecem maior potencial de risco de transporte e, conseqüente tendência a contaminação principalmente de águas:

- a) solubilidade em água $> 30 \text{ mg.L}^{-1}$;
- b) coeficiente de adsorção à matéria orgânica: $K_{oc} < 300-500 \text{ mL.g}^{-1}$;
- c) ~~constante de Henry:~~ $K_p < 10^{-2} \text{ Pa.m}^3.\text{mol}^{-1}$;
- d) meia vida no solo ($t_{1/2}$ solo): $> 14-21$ dias;
- e) meia vida na água ($t_{1/2}$ água) > 175 dias.

Neste critério, também devem ser consideradas as condições de campo, que favorecem a percolação no solo, ou seja, se : a) pluviosidade anual $> 250 \text{ mm}$; b) presença de solo poroso; e c) existe de aquífero não confinado.

B) Obtenção das Informações de Entrada do Programa

Os parâmetros necessários para a avaliação dos princípios ativos pelo software AGROSCORE, foram obtidos de bases de dados de agrotóxicos (Projeto 11.1999.222-01 da Embrapa Meio Ambiente), em consulta a literaturas científica nacional e internacional (WAUCHOP et al., 1992; NOFZIEGER & HORNSBY, 1994; SUNTIO et al, 1988; EXTTOXNET, 2001).

C) Exemplo Prático de Utilização do Programa

Para efeito de teste do programa AGROSCORE, foram inicialmente avaliados os seguintes princípios ativos cujas informações foram encontradas nas literaturas citadas.

Tabela 1. Informações sobre os (p.a.) testados pelo Programa AGROSCORE.

princípio ativo	solubilidade em água (mg/L)	Koc (mL/g)	KH (Pa.m ³ .mol ⁻¹)	t _{1/2} solo (dias)	t _{1/2} água (dias)
Tebuthiuron RQ Ribeirão	2600 [4]	46,4 [2]	1,21E-05 [5]	365 [1]	395 [4]
Tebuthiuron – LVd Ribeirão	2600 [4]	76,2 [2]	1,21E-05 [5]	365 [1]	395 [4]
Tebuthiuron-I.Vef Ribeirão	2600 [4]	138,0 [2]	1,21E-05 [5]	365 [1]	395 [4]
Tebuthiuron médio literatura	2500 [3]	80 [3]	1,21E-05 [5]	360[3]	80 [6]
Dimethoate	39800[3,4]	20[3,6]	1,0640E-05 [5]	7[3,6]	68[4]
Triflumizole	18,0[4]	1244 [4]	5,1986E-05 [5]	23[4]	116[4]
Metalaxyl	8400[3,6]	50	0,000298946[5]	70	1000

Fonte das informações: [1] Mello Filho *et al.*, (1985); [2] Dornelas de Souza *et al.*, (1997); [3] Ware, (1992) - (*Pesticide Properties Database*); [4] PAN – <http://www.pesticideinfo.org> ; [5]valores calculados a partir de *Interactive PhysProp DatabaseDemo/SRC* - <http://esc.syrres.com/interkow/physdemo.htm>; [6] EXTTOXNET - <http://exttoxnet.orst.edu/pips/tebutiu.htm>

Resultados e Discussão

O programa gerado em linguagem Quick Basic 4.5 necessita de 11K de memória para rodar em modo executável.

As telas principais do programa são apresentadas nas figuras abaixo.

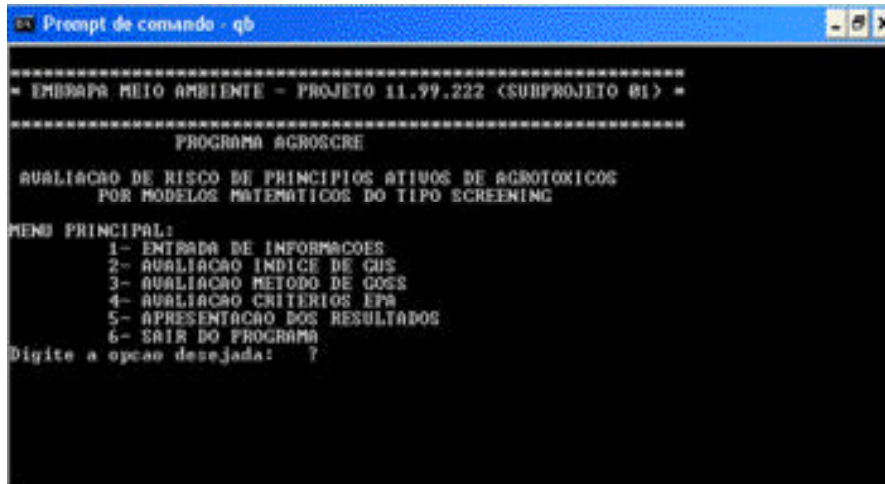


Fig. 1. Tela de entrada de dados do Programa AGROSCRE.

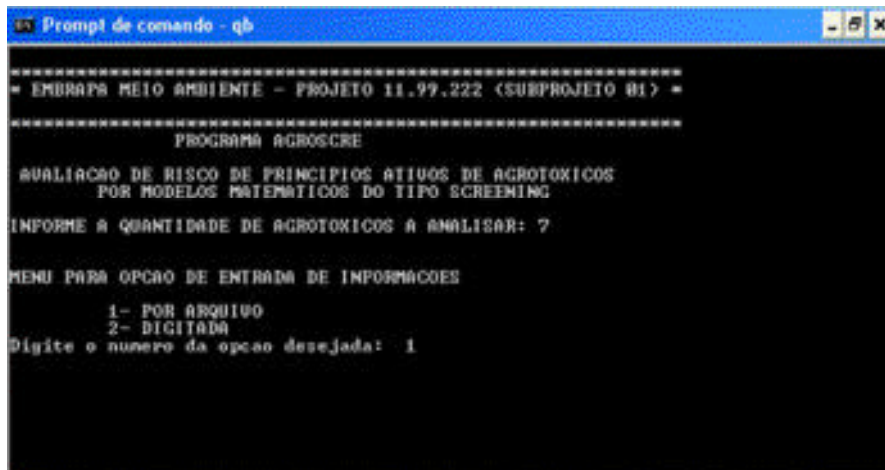
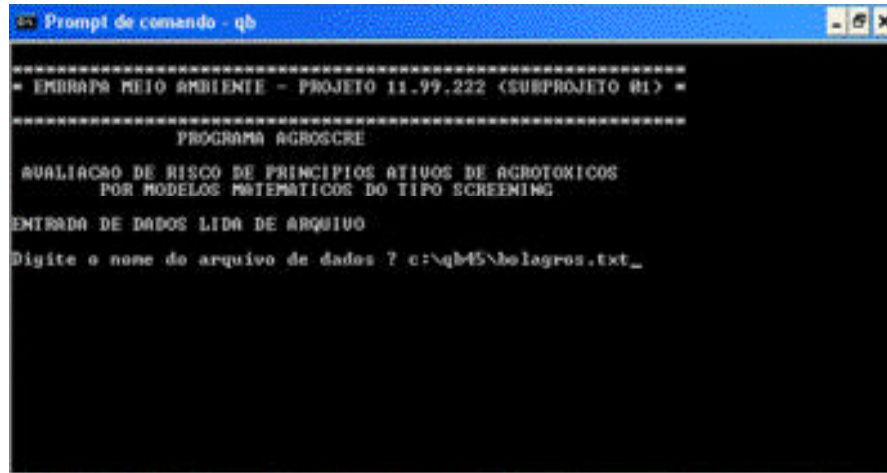
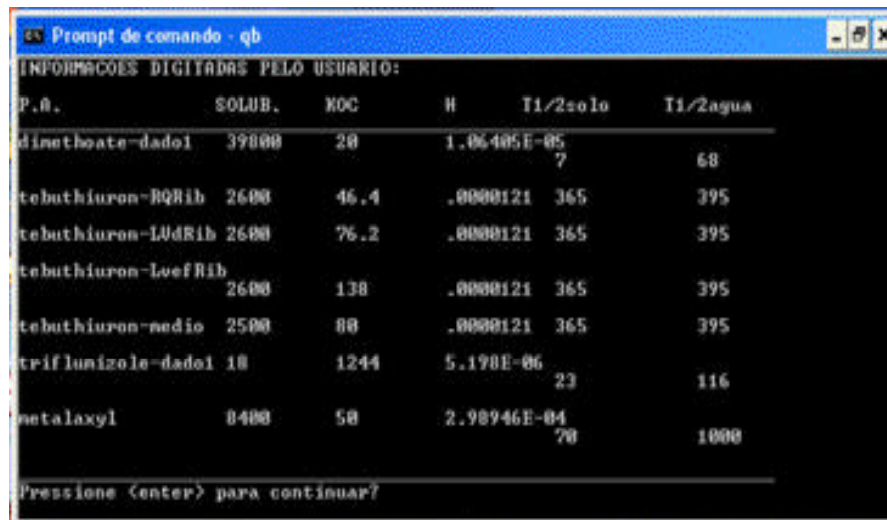


Fig. 2. Tela de interface com usuário para a definição da quantidade de princípios ativos a serem analisados e de escolha de formato de entrada de dados



a) opção de entrada de dados digitada pelo usuário.



b) dados digitados em arquivo informado pelo usuário.

Fig. 3. Exemplo de entrada de dados lida por arquivo: a) nome do arquivo digitado pelo usuário; b) valores lidos do arquivo informado.

The screenshot shows a command prompt window titled 'Prompt de comando - qb'. The text inside the window is as follows:

```

AVALIACAO DE RISCO DE PRINCIPIOS ATIVOS DE AGROTÓXICOS
POR MODELOS MATEMÁTICOS DO TIPO SCREENING

Escolha apresentacao dos dados (1= impresso/ 2= tela/ 3=arquivo)? 2
RESULTADOS PARA OS PRINCIPIOS ATIVOS ANALISADOS:

P.A.          GUS\valor    GOSS_SED    GOSS_DIS    EPA
-----
dinethoate-dado1  T \ 2.28      B           M           NL
tebuthiuron-RQRib  L \ 5.98      M           A           L
tebuthiuron-LVdRib  L \ 5.43      M           A           L
tebuthiuron-LvefRib  L \ 4.77      M           A           L
tebuthiuron-medio  L \ 5.37      M           A           L
triflunizole-dado1  NL\ 1.23      M           M           NL
metaxyl          L \ 4.25      M           A           L

Pressione <enter> para continuar?
    
```

Fig. 4. Resultados fornecidos pelo programa AGROSCRE para os dados lido do arquivo digitado, onde: GUS\VALOR= resultado da avaliação do potencial de lixiviação pelo índice de GUS (onde L= Lixívia; NL= Não Lixívia; T= Faixa de transição); GOSS_SED= potencial do p.a. ser transportado por sedimento (onde B= Baixo, M= Médio e A= Alto); GOSS_DIS= potencial do p.a. ser transportado dissolvido em água (onde B= Baixo, M= Médio e A= Alto); e EPA = avaliação pelo critério da EPA (onde NA= Não Avaliado por falta de informações; A= Alto, M= Médio e B= Baixo).

Saída do programa para os dados da Tabela 1.

Na Tabela 1 e na saída apresentada pelo AGROSCRE foram apresentados valores diferentes para um tebuthiuron disponíveis na literatura. AGROSCRE possibilitou avaliar tebuthiuron para informações resultantes de dados específicos para a área de Ribeirão Preto (para RQ= antiga Areia Quartzosa; LVd = antigo Latossolo Vermelho-Amarelo e Lvef= antigo Latossolo Roxo) e para dado médio do princípio ativo frequentemente citado em literatura internacional e utilizado como referência nas bases de dados de simuladores.

A avaliação disponibilizada pelo programa mostra que tebuthiuron apresenta, **em todos os casos**, grande potencial para lixiviação pelo índice de GUS, médio potencial de ser transportado por sedimentos e alto potencial de ser transportado dissolvido em água pelo método de GOSS e alto potencial de lixiviação pelo critério da EPA. Desse modo, embora para um caso particular, percebe-se que os

valores calculados "in loco" estão viabilizando resultados semelhantes, embora esperado inicialmente que a influência dos valores de Koc pudessem representar alterações nos resultados por estarem variando na faixa de 46,4 a 138,0 mL/g.

Para o valor apresentado para dimethoate, o programa indica que o produto permanece em faixa de transição para lixiviação pelo índice de GUS, baixo potencial de transporte associado a sedimento e médio potencial de transporte dissolvido em água, embora não apresenta potencial de lixiviação pelo método da EPA. Tais evidências ressaltam que potencialmente uma contaminação ocorreria na matriz água, muito embora com menor possibilidade.

Na avaliação para triflumizole foi evidenciado que não existiria risco de lixiviação pelos métodos da EPA e pelo índice de GUS, muito embora o método de GOSS tenha indicado um médio potencial para transporte em sedimento e em água, provavelmente pelo valor de Koc e de t $\frac{1}{2}$ água fornecidos. Mesmo assim, avaliando os resultados obtidos pelos 3 modelos em conjunto, o produto não seria priorizado para monitoramentos locais.

Metalaxyl apresentou potencial de risco de contaminação por lixiviação pelos métodos da EPA e pelo índice de GUS, corroborando com o alto potencial de transporte dissolvido em água evidenciado pelo método de GOSS.

Diante das observações para os produtos avaliados, percebe-se que tebutiuron e metalaxyl deveriam ser priorizados para monitoramentos locais.

AGROSCORE mostra-se de grande potencial para uso em avaliação dos princípios ativos em diferentes regiões, com vistas ao estabelecimento de prioridades de monitoramento e de pesquisas subsequentes mais avançadas. Também dá indicativos de onde o produto deve ser encontrado, água ou sedimento, subsidiando o usuário com mais uma orientação útil para a futura escolha de métodos para fins de avaliação de resíduos.

CONCLUSÕES

1. Foi disponibilizado um programa computacional, **AGROSCORE**, para avaliação de princípios ativos de agrotóxicos pelos métodos de GOSS, índice de GUS e critérios da EPA.
2. O programa apresenta grande portabilidade e ocupa pouco espaço de memória para ser executado em modo " stand alone";
3. O programa utiliza como entrada de dados, informações que são disponibilizadas por bases de dados de princípios ativos de agrotóxicos tais como, Koc, $t_{1/2}$ solo, $t_{1/2}$ água, solubilidade e constante de Henry.
4. O programa diminui o tempo gasto por usuários para a obtenção de resultados pelos métodos nele inseridos, uma vez que permite avaliar grande quantidade de informações em curto espaço de tempo;
5. O programa facilita a avaliação de princípios ativos a medida que as entradas de dados solicitadas forem sendo disponibilizadas localmente e, assim, fornecendo informações do comportamento de p.a. mais fidedignas à realidade local do produtor.
6. Testes realizados para dados de Ribeirão Preto, SP e médio de literatura para o princípio ativo tebuthiuron não evidenciou diferenças nos resultados de avaliação potencial final de transporte do produto. Para os exemplos fornecidos, registra-se que mereceriam maior atenção em monitoramentos locais tebuthiuron e metalaxyl, caso utilizados.

Referências

- BLANCO, H. G. Destino, comportamento e resíduos de herbicidas no solo. **O Biológico**, São Paulo, v. 45, n.11-12, p. 225-248, 1979.
- CHAIM, A.; MAIA, A. H. N.; PESSOA, M. C. P. Y.; HERMES, L. C. **Método alternativo para estimar deposição de agrotóxico com uso de papel sensível a água**. Jaguariúna: Embrapa Meio Ambiente, 1999. 34 p. (Embrapa Meio Ambiente. Circular Técnica, 1).
- CHAIM, A.; PESSOA, M. C. P. Y.; CAMARGO, J. C.; HERMES, L. C. Comparison of microscopic method and computational program for pesticide deposition evaluation spraying. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, Brasília, v. 37, n. 4, p. 493-496, 2002.
- CHENG, H. H. Pesticides in soil environment – an overview. In: CHENG, H. H. (Ed.). **Pesticides in the soil environment: processes, impact and modeling**. Madison: Soil Science Society of America, 1990. p. 1-5.
- COHEN, S. Z.; WAUCHOPE, R. D.; KLEIN, A. W.; EADSPORTH, C. V.; GRANCY, R. Offsite transport of pesticides in water – mathematical models of pesticide leaching and runoff. **Pure and Applied Chemistry**, London, v. 67, p. 2109-2148, 1995.
- EXTOXNET. **Pesticide information profiles**. Disponível em: < <http://ace.orst.edu/info/extoxnet> > . Acesso em: 24 out. 2001.
- FERRACINI, V. L.; PESSOA, M. C. P. Y.; SILVA, A. de S.; SPADOTTO, C. A. Análise de risco de contaminação das águas subterrâneas e superficiais da região de Petrolina (PE) e Juazeiro (BA). **Pesticidas: Revista Ecotoxicológica e Meio Ambiente**, Curitiba, v. 11, p. 1-16, jan./dez. 2001.
- FILIZOLA, H.; FERRACINI, V. L.; SANS, L. M. A.; GOMES, M. A. F.; FERREIRA, C. J. A. Monitoramento e avaliação do risco de contaminação por pesticidas em água superficial e subterrânea na região de Guaira. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, Brasília, v. 37, n. 5, p. 659-667, 2002.

GOSS, D. W. Screening procedure for soils and pesticides for potential water quality impacts. **Weed Technology**, Champaign, v. 6, n. 3, p. 701-708, 1992.

GUSTAFSON, D. I. Groundwater ubiquity score: a simple method for assessing pesticide leachability. **Environmental Toxicology and Chemistry**, Elmsford, v. 8, n. 4, p. 339-357, 1989.

MELLO FILHO, A.T. de; ROCHA, C. L.; SILVA, S. A. da; HONDA, T. Estudos de lixiviação e degradação de tebutiuron em solos do Estado de São Paulo e Alagoas. **Stab**, Piracicaba, v. 2, p. 747-751, 1985.

NOFZIGER, D. L; HORNSBY, A. G. **CMLS-94**: chemical movement in layered soils. Oklahoma: University of Florida, 1994. 76 p.

PARAIBA, L. C.; PULINO, P. Pesticide dispersion-advection equation with soil temperature effect. **Environmetrics**, Chichester, v. 14, n. 3, p. 323-337, 2003.

PESSOA, M. C. P. Y; LUCHIARI JUNIOR., A.; FERNANDES, E. N.; LIMA, M. A. de. **Principais modelos e simuladores usados em análise de impacto ambiental das atividades agrícolas**. Jaguariúna: Embrapa-CNPMA, 1997. 87 p. (Embrapa-CNPMA. Documentos, 8).

PESSOA, M. C. P. Y.; SILVA, A. de S.; CHAIM, A.; LOPES, P. R. C.; GOMES, M. A. F.; SOARES, J. M. **Risco de contaminação das águas subterrâneas do Submédio São Francisco por agrotóxicos utilizados nas culturas de cana-de-açúcar e banana**: uma avaliação por simulação de sistemas. Jaguariúna: Embrapa Meio Ambiente, 1999a. p.1-4. (Embrapa Meio Ambiente. Pesquisa em Andamento, 3).

PESSOA, M. C. P. Y.; GOMES, M. A. F.; SOUZA, M. A. D. de; CERDEIRA, A. L.; NICOLELLA, G.; MONTICELLI, A. Simulação do movimento de herbicidas utilizados no monocultivo de cana-de-açúcar em latossolos da área de recarga do aquífero Botucatu (Guarani) em Ribeirão Preto, SP. **Revista Científica Rural**, Bagé, v. 4, n. 1 p. 15-24, 1999b.

SHIU, W. Y.; MA, K. C.; SEIBER, J. N.; WAUCHOPE, R. D. Solubilidade of pesticide chemicals in water. Part I: environmental physical chemistry. **Reviews of Environmental Contamination and Toxicology**, New York, v. 116, p. 1-11, 1990.

SUNTIO, L. R.; SHIU, W. Y.; MACKAY, D.; SEIBER, J. N.; GLOTFELTY, D. Critical reviews of Henry's law constants for pesticides. **Reviews of Environmental Contamination and Toxicology**, New York, v. 103, p. 1-59, 1988.

WAUCHOPE, R. D.; BUTTLER, T. M.; HORNSBY, A. G.; AUGUSTIJN-BECKERS, P. W. M.; BURT, J. P. The SCS/ARS/CES pesticides properties database for environmental decision-making. **Reviews of Environmental Contamination and Toxicology**, New York, v. 123, p. 1-6, 1992.

Embrapa

Meio Ambiente

Ministério da Agricultura,
Pecuária e Abastecimento

