

Boletim de Pesquisa e Desenvolvimento

58

ISSN 1679-0456
Dezembro, 2010

ACHA: Avaliação da Contaminação Hídrica por Agrotóxico



ISSN 1679-0456

Dezembro, 2010

**Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária
Embrapa Agropecuária Oeste
Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento**

Boletim de Pesquisa e Desenvolvimento 58

ACHA:
Avaliação da Contaminação
Hídrica por Agrotóxico

Rômulo Penna Scorza Júnior
Filipe Areias Névola
Vinícius Sanches Ayelo

Embrapa Agropecuária Oeste
Dourados, MS
2010

Exemplares desta publicação podem ser adquiridos na:

Embrapa Agropecuária Oeste
BR 163, km 253,6 - Trecho Dourados-Caarapó
Caixa Postal 661 - 79804-970 Dourados, MS
Fone: (67) 3416-9700 - Fax: (67) 3416-9721
www.cpao.embrapa.br
E-mail: sac@cpao.embrapa.br

Comitê de Publicações da Unidade

Presidente: *Guilherme Lafourcade Asmus*
Secretário-Executivo: *Harley Nonato de Oliveira*
Membros: *Alexandre Dinnys Roesse, Claudio Lazzarotto, Éder Comunello, Josiléia Acordi Zanatta, Milton Parron Padovan, Silvia Mara Belloni e Walder Antonio Gomes de Albuquerque Nunes*
Membros suplentes: *Alceu Richetti e Carlos Ricardo Fietz.*

Supervisão editorial e Revisão de texto: *Eliete do Nascimento Ferreira*
Normalização bibliográfica: *Eli de Lourdes Vasconcelos*
Foto da capa: *Edvaldo Sagrilo*
Ilustrações internas: *Rômulo Penna Scorza Júnior*
Editoreção eletrônica: *Eliete do Nascimento Ferreira*

1ª edição
(2010): online

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

CIP-Catálogo-na-Publicação.
Embrapa Agropecuária Oeste.

Scorza Júnior, Rômulo Penna
ACHA: avaliação da contaminação hídrica por agrotóxico / Rômulo Penna Scorza Júnior, Filipe Areias Névola, Vinícius Sanches Ayelo. — Dourados: Embrapa Agropecuária Oeste, 2010.
31 p. : il. color. ; 21 cm. — (Boletim de Pesquisa e Desenvolvimento / Embrapa Agropecuária Oeste, ISSN 1679-0456 ; 58).

1. Lixiviação - Modelagem matemática. 2. Recursos hídricos - Contaminação - Agrotóxicos I. Névola, Filipe Areias. II. Ayelo, Vinícius Sanches. III. Embrapa Agropecuária Oeste. IV. Título. V. Série.

Sumário

Resumo	5
Abstract	7
Introdução	9
Descrição Teórica do Simulador	12
Soluções Numéricas das Equações do Fluxo da Água, Temperatura do Solo e Transporte de Agrotóxico	15
Desenvolvimento e Procedimentos para Uso do ACHA ..	19
Conclusões	28
Agradecimentos	28
Referências	29

ACHA: Avaliação da Contaminação Hídrica por Agrotóxico

Rômulo Penna Scorza Júnior¹
Filipe Areias Névolá²
Vinícius Sanches Ayelo³

Resumo

Modelos matemáticos e simuladores têm sido desenvolvidos para prever a lixiviação de agrotóxicos em solos, permitindo grande economia de tempo e recursos financeiros, além de permitir análises de risco com maior representatividade e confiabilidade. O Brasil ainda não faz uso dessas ferramentas no processo de avaliação de risco e classificação ambiental dos agrotóxicos. Estas ferramentas não são utilizadas pelas autoridades nacionais por não estarem adaptadas às condições brasileiras. O presente trabalho teve como objetivo desenvolver uma ferramenta computacional para simulação da lixiviação de agrotóxicos em cenários agrícolas brasileiros. A ferramenta computacional recebeu o nome de **ACHA**, que se refere ao acrônimo de **A**valiação da **C**ontaminação **H**ídrica por **A**grotóxico. Para simulação do fluxo no solo utilizou-se a equação de Richards e para o transporte de agrotóxicos considerou-se os mecanismos de convecção, dispersão e difusão na fase líquida. A sorção do agrotóxico na fase sólida foi descrita pela isoterma de Freundlich e a degradação por uma equação de primeira ordem. O efeito dos fatores ambientais como temperatura, umidade e profundidade do solo é considerado na simulação da degradação do agrotóxico no solo. Os

⁽¹⁾Engenheiro-Agrônomo, Ph.D., Pesquisador da Embrapa Agropecuária Oeste, Dourados, MS. E-mail:romulo@cpao.embrapa.br

⁽²⁾Bac. em Ciência da Computação, IBM do Brasil, Rod. Jornalista Francisco Aguirre Proença km 09, s/n, 13186-900 Hortolândia, SP. E-mail: filipemkv@gmail.com

⁽³⁾Acadêmico do curso de Ciência da Computação da UEMS, Caixa Postal 351, 79804-970 Dourados, MS. E-mail: vinyayelo@gmail.com

processos de absorção de água e agrotóxicos pelas plantas não são considerados. A ferramenta é composta de três partes: (i) código em Fortran para solução e integração dos modelos matemáticos; (ii) base de dados para armazenamento dos cenários e (iii) interface gráfica para inserção dos dados de entrada e visualização das simulações. Como resultados, a ferramenta é capaz de simular perfis de umidade e concentração do agrotóxico no solo em função do tempo.

Termos para indexação: lixiviação, modelagem matemática e simulação, análise de risco.

ACHA: Assessment of Hydric Contamination by Pesticides

Abstract

Mathematical models and simulators have been developed to predict pesticide leaching in soils. Their use allows great economy of time and financial resources, and risk assessments with more representativeness and reliability. Brazil still does not use these tools in the risk assessment and environmental classification of pesticides. The main reason for not using these tools by the Brazilian authorities is the lack of their development for Brazilian conditions. This work had the aim to develop a computational tool to simulate pesticide leaching in Brazilian agricultural scenarios. The computational tool is named **ACHA**, which is an acronym for Assessment of Hydric Contamination by Pesticides. Richards equation was used to simulate water flow. The mechanisms of convection, dispersion and diffusion in the liquid phase were considered for pesticide transport. Pesticide sorption in the solid phase was described using Freundlich isotherm and degradation by a first order equation. The effect of environmental factors as temperature, moisture and soil depth was considered in the simulation of pesticide degradation in soil. The processes of water and pesticide uptake by plants were not considered. This tool has the following three parts: (i) Fortran code used for the solution and integration of all mathematical models; (ii) database for storage of all scenarios data and (iii) graphical user interface for data input and display of simulation output.

As output, this tool is able to simulate moisture and pesticide concentration profiles as a function of time.

Index terms: leaching, mathematical modeling and simulation, risk assessment.

Introdução

Um dos maiores impactos da agricultura na qualidade dos recursos hídricos (água subterrânea e superficial) ocorre devido à possibilidade de contaminação desses com resíduos de agrotóxicos. Infelizmente, têm sido crescentes as evidências sobre a presença de resíduos de agrotóxicos em amostras de água subterrâneas e superficiais em áreas agrícolas ou até mesmo em áreas de captação de água para consumo humano (BROWN; VAN BEINUM, 2009; FILIZOLA et al., 2002; LAABS et al., 2002; SCORZA JÚNIOR et al., 2004;). Diante desse cenário, é urgente avaliar de forma rápida e integrada (permitindo resultados mais conclusivos) os riscos envolvidos na utilização de agrotóxicos na agricultura e suas possíveis consequências aos recursos hídricos.

No Brasil, cabe ao IBAMA realizar a avaliação e classificação ambiental dos agrotóxicos registrados no país (Lei nº 7.809/1989; Decreto Regulamentador nº 98.816/1990 alterado pelo Decreto nº 4.074/2002). Durante esse processo são analisados parâmetros relacionados ao comportamento ambiental dos agrotóxicos, entre eles a sua lixiviação em apenas três classes de solos representativos brasileiros considerando a camada de 0-20 cm (Portaria Normativa nº84/1996). Fica evidente a necessidade de melhorar a representatividade desses testes dada a grande diversidade de solos e climas existentes no Brasil. No entanto, para melhorar essa representatividade, são necessários inúmeros experimentos para concluir sobre a mobilidade desses compostos (dada a grande combinação de cenários envolvendo os diferentes tipos de solos, climas e agrotóxicos atualmente em uso).

Após validação nos diversos cenários, modelos matemáticos e simuladores têm sido utilizados para prever a lixiviação de agrotóxicos em solos, permitindo grande economia de tempo e recursos financeiros, além de permitir análises de risco com maior representatividade e confiabilidade. Esses simuladores foram desenvolvidos e testados, principalmente, em países membros da Comunidade Europeia e nos Estados Unidos (BOESTEN, 2007; LARSBO; JARVIS, 2003; MALONE et al., 2004). Atualmente, esses países usam simuladores como parte do processo de análise de risco de lixiviação de agrotóxicos para fins de registro e renovação. Por exemplo, a Holanda fez em 2004 uma revisão das etapas envolvidas no processo de avaliação da lixiviação de agrotóxicos em solos buscando

melhor adaptação aos procedimentos impostos pela legislação da Comunidade Europeia. A diretiva 91/414/EEC da Comunidade Europeia estabelece que o valor máximo permitido para resíduo de agrotóxicos em águas subterrâneas não deve ultrapassar $0,1 \mu\text{g L}^{-1}$. Assim, a Holanda adotou parte dessa diretiva como legislação nacional (critério), estabelecendo que a concentração em água do lençol freático a 10 m de profundidade não deve ser superior a $0,1 \mu\text{g L}^{-1}$, considerando 90% da área que faz uso do agrotóxico em questão. Esse critério é avaliado através de três diferentes etapas ou níveis de avaliação (“tiers”), que se tornam mais criteriosos à medida que são requeridos. No primeiro e segundo níveis são utilizados os simuladores PEARL (BOESTEN, 2007) e GEOPEARL (TIKTAK et al., 2003), respectivamente. No primeiro nível são avaliados os agrotóxicos com pequeno risco de contaminação do lençol freático através da aplicação de um cenário específico (combinação de um tipo de solo e base de dados meteorológicos de 20, 40 ou 60 anos) e verificando se a concentração simulada a 10 m de profundidade está abaixo de $0,1 \mu\text{g L}^{-1}$. Caso as simulações indiquem que as concentrações estiveram abaixo de $0,1 \mu\text{g L}^{-1}$, o agrotóxico analisado poderá ser registrado. Caso contrário, avança-se para o segundo nível onde se utiliza o simulador GEOPEARL com objetivo de simular a lixiviação do referido agrotóxico e observar se o limite de $0,1 \mu\text{g L}^{-1}$ foi ultrapassado em 90% da área simulada considerando períodos de 20, 40 ou 60 anos. Nesses dois níveis considerados utilizam-se os valores das medianas, que são menos influenciados por valores extremos, quando comparados ao uso das médias. Durante o segundo nível, pode-se utilizar dados observados de lixiviação em laboratório, lisímetros e campo para refinar a avaliação ou até mesmo alguns dados relacionados a programas de monitoramento que indiquem o aparecimento de resíduos no lençol freático. Caso as simulações obtidas no segundo nível indiquem necessidade de mais avaliações, avança-se para o terceiro e último nível, onde são requeridos trabalhos experimentais sobre o comportamento do agrotóxico na camada saturada ou até mesmo resultados de um amplo monitoramento na profundidade de 10 m.

O Brasil ainda não faz uso desses simuladores no processo de avaliação de risco e classificação ambiental dos agrotóxicos. Estas ferramentas computacionais não são utilizadas pelas autoridades nacionais por não estarem adaptadas às condições brasileiras. O presente trabalho teve como objetivo desenvolver este tipo de ferramenta para simulação da lixiviação de agrotóxicos em solos brasileiros, a qual recebeu o nome de **ACHA**, que se refere ao acrônimo de **A**valiação da **C**ontaminação **H**ídrica por **A**grotóxico.

Descrição Teórica do Simulador

Para descrição da grande maioria dos processos do simulador foram considerados modelos matemáticos mecânicos, ou seja, aqueles baseados na descrição dos processos considerando os mecanismos físicos, químicos ou biológicos. Dessa forma, a ferramenta de simulação criada pode ser aplicada em diversas condições edafoclimáticas brasileiras, desde que se tenham os dados de entrada necessários. Além disso, o uso de modelos mecânicos permite melhor capacidade preditiva do simulador quando usado em diferentes situações. O desenvolvimento da ferramenta foi baseado nos simuladores PEARL (BOESTEN, 2007) e SWAP (VAN DAM et al., 2008), amplamente utilizados para simulação da lixiviação de agrotóxicos e fluxo de água em solos, respectivamente. Esses simuladores já foram testados em diversas condições edafoclimáticas, apresentando resultados satisfatórios. A seguir são descritos os principais modelos matemáticos utilizados na ferramenta computacional para descrição dos processos considerados.

O fluxo da água no solo foi considerado unidimensional, vertical e transiente e descrito utilizando a equação de Darcy. A combinação da equação de Darcy com a de continuidade resulta na conhecida equação de Richards, dada por:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = C(h) \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial [K(h) (\frac{\partial h}{\partial z} + 1)]}{\partial z} \dots\dots\dots (1)$$

onde q é a umidade volumétrica do solo ($\text{cm}^3 \text{cm}^{-3}$), t é o tempo (dia), C é a capacidade hídrica específica do solo (cm^{-1}), K é a condutividade hidráulica em meio não saturado (cm dia^{-1}), h é o potencial da água no solo (cm) e z é a profundidade (cm). A equação de Richards (equação 1) é utilizada para o cálculo da umidade volumétrica do solo (q) ao longo do perfil do solo nos diferentes tempos. A relação entre a umidade do solo e o seu potencial (curva de retenção) foi descrita através do modelo de Van Genuchten (1980), dado por:

$$\theta(h) = \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{(1 + |\alpha h|^n)^{1-1/n}} \dots\dots\dots (2)$$

onde q_r é a umidade volumétrica residual ($\text{cm}^3 \text{cm}^{-3}$), q_s é a umidade volumétrica saturada ($\text{cm}^3 \text{cm}^{-3}$) e α (cm^{-1}) e n (-) são parâmetros obtidos após ajuste do

modelo aos dados observados da curva de retenção. Já a relação entre condutividade hidráulica em meio não saturado e o potencial da água no solo foi descrita através do modelo de Mualem (1976), dado por:

$$K(h) = K_s \frac{((1+|\alpha h|^n)^{1-1/n} - |\alpha h|^{n-1})^2}{(1+|\alpha h|^n)^{(1-1/n)(\lambda+2)}} \dots\dots\dots (3)$$

onde K_s é a condutividade hidráulica em meio saturado (cm dia⁻¹) e l (-) é um parâmetro obtido após ajuste do modelo aos dados observados.

O processo de absorção de água pelas raízes das plantas não foi considerado nessa versão do simulador. A taxa de evapotranspiração potencial diária foi estimada com base no modelo de Penman-Monteith (VAN DAM et al., 1997).

A temperatura do solo foi calculada através da combinação entre a Lei de Fourier e a equação de conservação de calor no solo, dada por:

$$C_h \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial(\lambda_h \frac{\partial T}{\partial z})}{\partial z} \dots\dots\dots (4)$$

onde C_h é a capacidade térmica do solo (J cm⁻³ °C⁻¹), T é a temperatura do solo (°C) e λ_h é a condutividade térmica (J cm⁻¹ °C⁻¹ dia⁻¹).

A concentração total do agrotóxico no solo, C^* (g cm⁻³), foi definida pela soma das concentrações nas fases sólida e líquida, dada por:

$$C^* = \theta \cdot C_L + \rho \cdot X \dots\dots\dots (5)$$

onde C_L é a concentração do agrotóxico na fase líquida do solo (g cm⁻³), ρ é a densidade aparente do solo (g cm⁻³) e X é a concentração do agrotóxico na fase sólida do solo (g g⁻¹). A sorção do agrotóxico na fase sólida do solo foi descrita utilizando a isoterma de Freundlich, dada por:

$$X = K_F \cdot C_L^N \dots\dots\dots (6)$$

onde K_F é o coeficiente de Freundlich (cm³ g⁻¹) e N é o expoente do modelo de Freundlich.

O fluxo de massa do agrotóxico no solo, J ($\text{g cm}^{-2} \text{dia}^{-1}$) foi descrito considerando os mecanismos de convecção, dispersão e difusão na fase líquida, dado por:

$$J = q \cdot C_L - D_L \cdot \frac{\partial C_L}{\partial z} \dots\dots\dots (7)$$

onde q é a densidade do fluxo de água (cm dia^{-1}) e D_L é o coeficiente de dispersão hidrodinâmica ($\text{cm}^2 \text{dia}^{-1}$). O coeficiente D_L é calculado através da seguinte equação:

$$D_L = L_{dis} \cdot |q| + \xi_L \cdot D_W \dots\dots\dots (8)$$

onde L_{dis} é a dispersividade (cm), D_W é o coeficiente de difusão do agrotóxico na água ($\text{cm}^2 \text{dia}^{-1}$) e ξ_L é um coeficiente de tortuosidade adimensional para difusão do agrotóxico em meio líquido.

A taxa de degradação do agrotóxico no solo, R_T ($\text{g cm}^3 \text{dia}^{-1}$) foi descrita através de uma equação de primeira ordem dada por:

$$R_T = \frac{dc^*}{dt} = k \cdot C^* \dots\dots\dots (9)$$

onde k é o coeficiente da taxa de degradação do agrotóxico no solo (dia^{-1}). O efeito dos fatores ambientais (temperatura, umidade e profundidade) na degradação do agrotóxico no solo foi calculado por:

$$k = f_T \cdot f_\theta \cdot f_z \cdot \frac{\ln(2)}{DT50_{REF}} \dots\dots\dots (10)$$

onde f_T , f_θ e f_z são coeficientes de redução adimensionais para contabilizar o efeito da temperatura, umidade e profundidade do solo, respectivamente. $DT50_{REF}$ é o valor de meia-vida do agrotóxico nas condições de referência, ou seja, solo coletado nos primeiros 30 cm de profundidade e incubado a 20 °C e umidade volumétrica correspondente ao potencial mátrico de 10 kPa. O coeficiente de redução devido ao efeito da temperatura, f_T , foi calculado através da equação de Arrhenius dada por:

$$f_T = \exp \left[-\frac{U}{G} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{REF}} \right) \right] \dots\dots\dots (11)$$

onde U é a energia de ativação (kJ mol^{-1}), G é a constante universal dos gases ($\text{kJ mol}^{-1} \text{K}^{-1}$), T é a temperatura do solo (K) e T_{REF} é T nas condições de referência (K), ou seja, a 20 °C. Com relação ao efeito da umidade do solo, o coeficiente de redução no coeficiente de degradação do agrotóxico foi calculado por:

$$f_\theta = \min \left[1, \left(\frac{\theta}{\theta_{REF}} \right)^B \right] \dots\dots\dots (12)$$

onde “min” significa o menor valor, q_{REF} é a umidade volumétrica correspondente a 10 kPa, ou seja, na condição de referência, e B é uma constante. Com base na equação 12, não há influência da umidade do solo na degradação do agrotóxico quando o solo está com umidade superior a q_{REF} . O fator f_z não é definido por uma equação. No entanto, seus valores podem ser especificados para cada horizonte do solo.

A equação de conservação de massa do agrotóxico no solo, utilizada para cálculo das concentrações e transporte do agrotóxico ao longo do perfil do solo nos diferentes tempos, é dada por:

$$\frac{\partial C^*}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(q \cdot C_L - D_L \frac{\partial C_L}{\partial z} \right) - R_T \dots\dots\dots (13)$$

Soluções Numéricas das Equações do Fluxo da Água, Temperatura do Solo e Transporte de Agrotóxico

Para simulação do fluxo da água, temperatura e transporte do agrotóxico ao longo do perfil do solo nos diferentes tempos, é necessária a solução das equações diferenciais parciais 1, 4 e 13. Para tal, utilizou-se o Método de Diferenças Finitas (MDF), também chamado de Método de Aproximação por Diferenças Finitas. O MDF pode ser utilizado em discretizações implícitas ou explícitas, que envolvem, respectivamente, aproximações implícitas ou explícitas das derivadas parciais.

Uma solução acurada da equação de Richards (equação 1) não é fácil por causa dos seguintes fatores: (i) sua natureza hiperbólica; (ii) não linearidade das funções que relacionam (h) e $K(h)$, conforme mostrado pelas equações 2 e 3; (iii) possibilidade de rápidas alterações nas condições de fronteira na superfície do solo, por exemplo, chuvas intensas seguidas por altas temperaturas favorecendo elevadas taxas de evapotranspiração. Diante desses fatores, a solução dessa equação pode ser fortemente influenciada pelo procedimento utilizado na malha de discretização. No entanto, Vam Dam e Feddes (2000) desenvolveram um MDF alternativo para solução da equação 1 utilizando discretização implícita com linearização explícita, utilizada no simulador SWAP (VAN DAM et al., 2008). No desenvolvimento da ferramenta computacional utilizou-se o método proposto por Van Dam et al. (2008), resultando na malha de discretização espacial e temporal da equação 1, conforme mostrado na Figura 1, e seu desdobramento matemático dado por:

$$C_i^{j+1,p-1}(h_i^{j+1,p} - h_i^{j+1,p-1}) + (\theta_i^{j+1,p-1} - \theta_i^j) =$$

$$\frac{\Delta \tau^j}{\Delta x_i} \left[K_{i-1/2}^j \left(\frac{h_{i-1}^{j+1,p} - h_i^{j+1,p}}{\Delta x_u} \right) + K_{i-1/2}^j - \right.$$

$$\left. K_{i+1/2}^j \left(\frac{h_i^{j+1,p} - h_{i+1}^{j+1,p}}{\Delta x_l} \right) - K_{i+1/2}^j \right] \dots \dots \dots (14)$$

onde j se refere ao incremento do tempo (dia), i é a posição do nó na malha de discretização (cm), p é a ordem de interação, $\Delta t^j = t^{j+1} - t^j$, $\Delta z_u = z_{p-1} - z_p$, $\Delta z_i = z_i - z_{i+1}$ (detalhes na Figura 1) e Δz_l é a espessura do compartimento. Para a solução numérica da equação (14), sujeita às condições de contorno, foi utilizado um método iterativo, já que K e C são dependentes de h . O método iterativo foi feito em duas etapas, usando-se diferenças finitas. Na primeira etapa obtém-se a estimativa de h e, na segunda, faz-se um refinamento dessa solução. Em ambas as etapas, as soluções das equações fornecem um sistema tridiagonal de equações que, resolvido pelo algoritmo de Thomas (PRESS et al., 1989), fornece o valor de h em cada nó, ou seja, em cada profundidade no perfil do solo no tempo t , conforme malha de discretização utilizada.

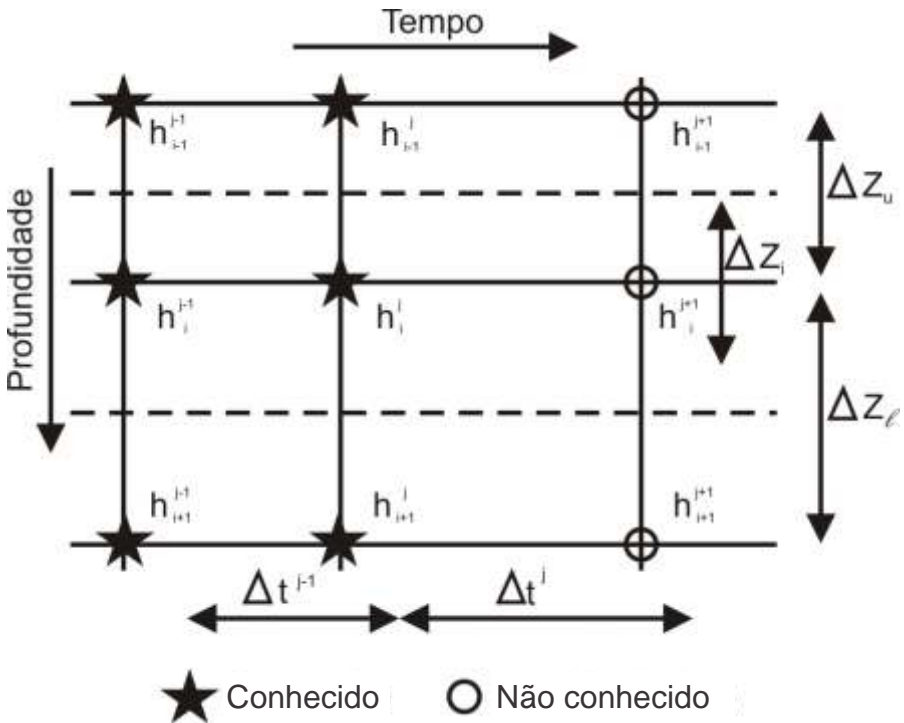


Figura 1. Malha de discretização espacial e temporal para solução da equação de Richards (equação 1).

Fonte: Adaptado de Kroes e Van Dam (2003).

A discretização da equação 4 foi realizada da mesma forma que a equação 1, dada por:

$$C_i^{j+1}(T_i^{j+1} - T_i^j) = \frac{\Delta t^j}{\Delta z_i} \left[\lambda_{i-1/2}^{j+1/2} \frac{T_{i-1}^{j+1} - T_i^{j+1}}{\Delta z_u} - \lambda_{i+1/2}^{j+1/2} \frac{T_i^{j+1} - T_{i+1}^{j+1}}{\Delta z_i} \right] \dots\dots (15)$$

onde j se refere ao incremento do tempo (dia), i é a posição do nó na malha de discretização (cm), $\Delta z_u = z_{i-1} - z_i$, $\Delta z_i = z_i - z_{i+1}$ (detalhes na Figura 1) e Δz_i é a espessura do compartimento. Para a solução numérica da Equação (15) utilizou-se o MDF com discretização implícita, conforme Wesseling et al. (1998). Como os coeficientes C_h e λ_h não são afetados por T , a equação 15 tem natureza linear. A aplicação da equação 15 para cada nó resulta em um sistema tridiagonal de equações, que foi resolvido pelo algoritmo de Thomas (PRESS et al., 1989) e, assim, gerando os valores de T para cada nó no tempo t .

A malha de discretização espacial utilizada para solução da equação 13 é mostrada na Figura 2. Para tal, utilizou-se o MDF com discretização explícita, consistindo em duas etapas. Na primeira etapa é utilizado um método iterativo para a estimativa de C_L (equação 16) e na segunda é feita a estimativa de C (equações 17, 18 e 19). As equações usadas foram:

$$C_L = \frac{C^*}{\theta + \rho \cdot K_F \cdot C_L^{N-1}} \dots\dots\dots (16)$$

$$\frac{\partial C^*}{\partial t} = \frac{J_{i-1/2}^j - J_{i+1/2}^j}{\Delta z_i} - R_{T_i}^j \dots\dots\dots (17)$$

$$J_{i-1/2}^j = q_{i-1/2}^j C_{L_{i-1/2}}^j - [D_{L_{i-1/2}}^j] \frac{C_{L_{i-1}}^j - C_{L_i}^j}{\Delta z_{i-1/2}} \dots\dots\dots (18)$$

$$C_{L_{i-1/2}}^j = \frac{\delta z_i (C_L)_{i-1}^j + \delta z_{i-1} (C_L)_i^j}{\delta z_i + \delta z_{i-1}} \dots\dots\dots (19)$$

onde j se refere ao incremento do tempo (dia), i é a posição do nó na malha de discretização (cm) e as distâncias Δz e δz são mostradas na Figura 2.

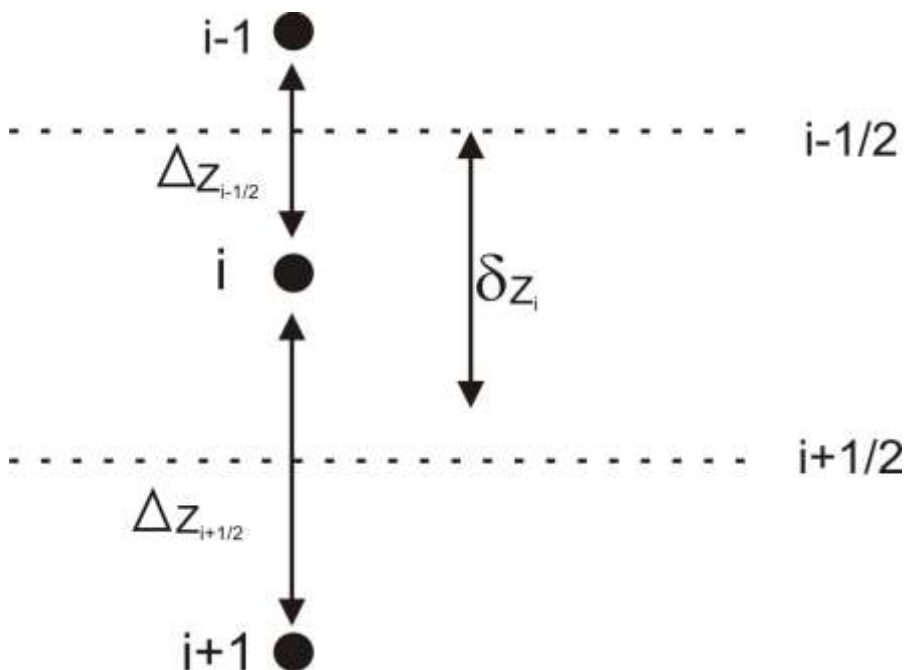


Figura 2. Malha de discretização espacial e temporal para solução da equação de conservação de massa do agrotóxico no solo (equação 13).

Fonte: adaptado de Leistra et al. (2002).

Desenvolvimento e Procedimentos para Uso do ACHA

Para elaboração do sistema, dividiu-se a ferramenta computacional em três partes: (i) implementação do código para tradução dos modelos matemáticos em linguagem computacional; (ii) banco de dados para armazenamento das informações e (iii) interface gráfica para inserção dos dados, execução da ferramenta e visualização dos resultados.

A linguagem de programação utilizada na implementação, integração dos modelos matemáticos e solução numérica das equações no simulador foi a FORTRAN 90, utilizando-se o ambiente Visual Studio 2008 Professional Edition[®]. A ferramenta de banco de dados utilizada foi a PostgreSQL, que é gratuita, robusta e possibilita o armazenamento de grande quantidade de informações de maneira íntegra e consistente. A interface gráfica foi implementada em JAVA, sendo utilizada como metodologia na elaboração do projeto a modelagem através dos modelos da UML (*Unified Modeling Language*) e parte do processo RUP (*Rational Unified Process*).

O código em FORTRAN possui 2.865 linhas de programação, divididas em várias subrotinas. A simulação da lixiviação de agrotóxicos, para cada dia, foi dividida em duas etapas principais. Na primeira etapa é feita a simulação do fluxo da água e da temperatura do solo e na segunda a simulação da lixiviação do agrotóxico propriamente dita. Um “laço” é responsável por percorrer todos os dias do período da simulação realizando essa alternância entre fluxo da água e temperatura do solo com a lixiviação do agrotóxico. Essa ordem foi adotada, já que para uma correta simulação da lixiviação de agrotóxicos há necessidade de simular primeiramente o fluxo da água e a temperatura do solo, processos com forte influência na lixiviação e degradação do agrotóxico no solo. Este “laço” coordena toda a simulação.

A interface gráfica foi organizada em “abas”, ou seja, vários painéis dentro de um painel principal, conforme mostrado na tela de abertura da ferramenta (Figura 3) e no detalhe das abas (Figura 4). As abas estão dispostas (da esquerda para a direita) na ordem em que o usuário deverá inserir os dados, o que tornou o uso bastante dedutivo.

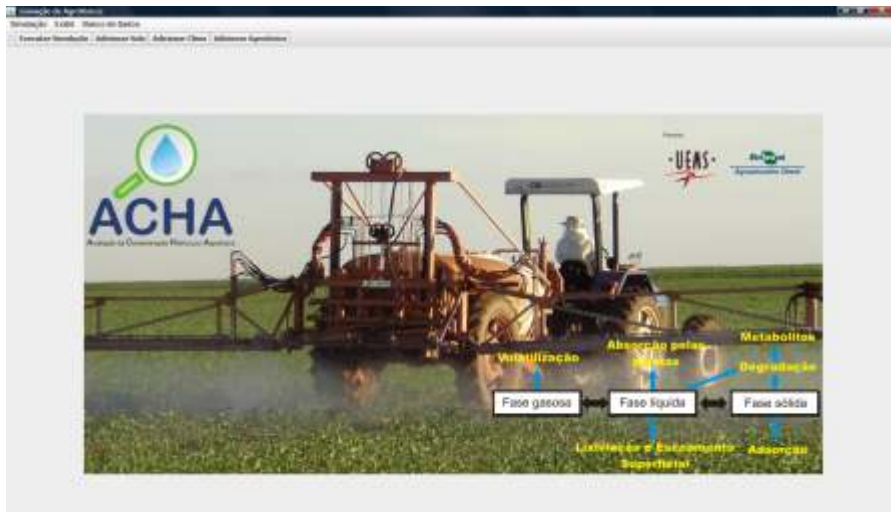


Figura 3. Tela principal do ACHA com as abas no canto superior esquerdo.

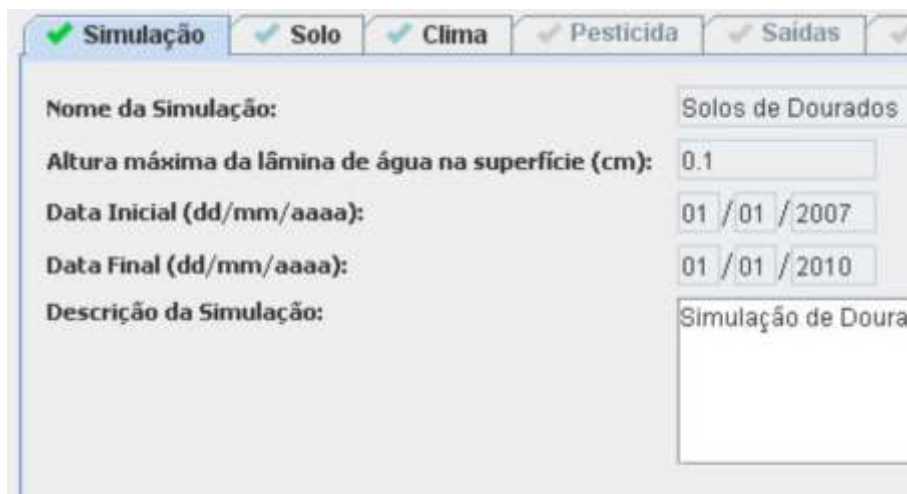


Figura 4. Detalhe mostrando a aba principal da interface no momento de incluir nova simulação.

Para configurar uma simulação há necessidade de preencher todas as abas (**Simulação, Solo, Clima e Agrotóxico**). Na aba **Simulação** são inseridos os dados gerais como, como, por exemplo, o nome da simulação e o período a ser simulado (Figura 4). Quando a aba **Simulação** é validada (todos os dados de entrada referentes a esta aba são inseridos ou recuperados do banco de dados), as abas **Solo, Clima e Agrotóxico** ficam disponíveis para receberem outros dados de entrada.

A aba **Solo** é formada por várias sub-abas, conforme mostrado na Figura 5. Na sub-aba *Geometria* insere-se o número de horizontes do solo a ser simulado, o número de compartimentos (camadas) em cada horizonte e a espessura ou tamanho de cada compartimento. Após isso, o simulador calculará automaticamente a espessura de cada compartimento numérico. Após validação da sub-aba *Geometria*, as sub-abas *Atributos Químicos e Físicos*, *Parâmetros de Van Genuchten* e *Condições Iniciais* ficam aptas para uso (Figura 5).

Na sub-aba *Atributos Químicos e Físicos* são inseridas informações sobre a textura do solo (% de argila e % de areia), teor de matéria orgânica, densidade do solo e dispersividade (Figura 6). Já na sub-aba *Parâmetros de Van Genuchten* são inseridos os valores dos parâmetros dos modelos descritos nas equações 2 e 3, que se referem à relação entre a umidade do solo e o seu potencial (curva de retenção) e à relação entre condutividade hidráulica em meio não saturado e o potencial da água no solo, respectivamente. Com relação à sub-aba *Condições Iniciais*, são inseridos os valores das condições iniciais do solo relativos à umidade volumétrica e temperatura, para todos os compartimentos numéricos.

Para facilitar a recuperação dos dados, as informações de solo podem ser salvas no banco de dados de solos. Assim, durante a criação de uma nova simulação (cenário), pode-se escolher o tipo de solo a ser usado.

Na aba **Clima** são inseridos os valores diários dos dados meteorológicos como, por exemplo, chuva, temperatura máxima e mínima, umidade, vento, radiação solar e evapotranspiração de referência (Figura 7). No caso do usuário inserir os valores de evapotranspiração de referência, deve-se usar -99 para os valores de umidade, vento e radiação para que o simulador entenda como valores a serem desconsiderados, já que não há necessidade de estimá-la usando o método de Penman-Monteith.



Figura 5. Detalhe mostrando a aba Solo com a sub-aba Geometria.

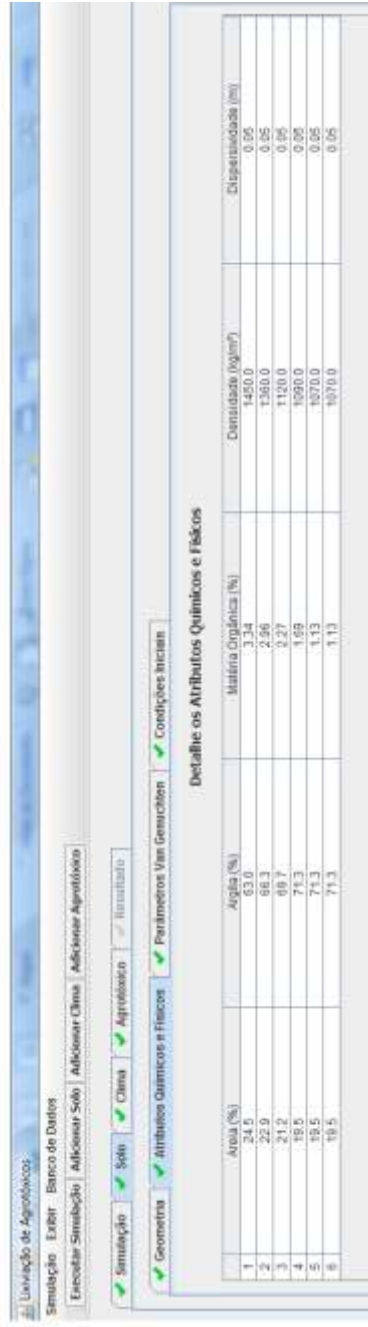


Figura 6. Detalhe mostrando a sub-aba Atributos Químicos e Físicos.

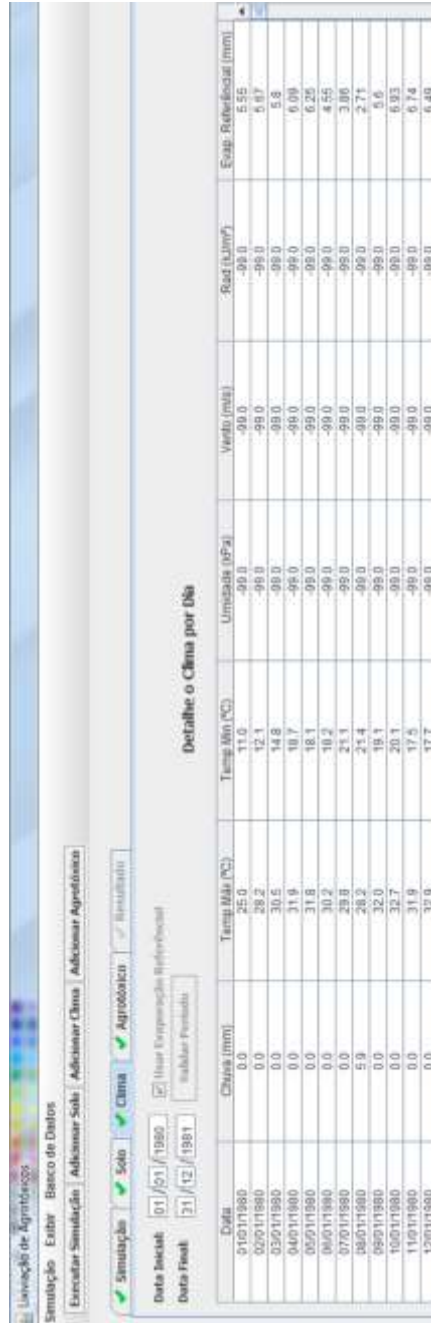


Figura 7. Detalhe mostrando a aba Clima.

Na aba **Agrotóxico** são inseridos os dados referentes aos processos de degradação, sorção e transporte do agrotóxico (Figura 8). Com relação à degradação, são inseridas as seguintes informações: (i) constante do modelo de Walker (constante B na equação 12); (ii) temperatura e umidade de referência para degradação; (iii) coeficiente de degradação do agrotóxico e (iv) energia de ativação (constante U na equação 11). Para sorção, são inseridas as seguintes informações: (i) coeficiente de partição e (ii) expoente de Freundlich. Para o transporte é inserido o coeficiente de difusão na água. Outras informações importantes inseridas na aba **Agrotóxico** são com relação à aplicação do agrotóxico. Essas informações são: (i) dose aplicada; (ii) profundidade de incorporação e (iii) data de aplicação. O simulador permite incluir várias aplicações de um mesmo agrotóxico durante o período a ser simulado. No entanto, para simular vários agrotóxicos, há necessidade de criar diferentes simulações, sendo essas específicas para o agrotóxico a ser considerado.

Importante mencionar que, uma vez inseridos os dados de uma simulação, esta poderá ser salva e executada. Assim, ficará armazenada no banco de dados com todos os dados de entrada. Caso seja necessário, poderá ser recuperada a qualquer momento e os dados inseridos podem ser editados. Esse mesmo procedimento de recuperação dos dados pode ser usado para recuperar as informações de solo, clima e agrotóxicos. Por exemplo, uma vez criado um “novo” solo com os devidos dados de entrada, este pode ser aberto e usado em qualquer simulação a ser executada.

A aba **Resultado** se refere à visualização dos resultados gerados de uma simulação, sendo estes textuais ou através de gráficos (Figura 9). A aba **Resultado** é composta das sub-abas *Simulado* e *Observado*. Na sub-aba *Simulado* são apresentados os valores simulados, enquanto na sub-aba *Observado* há a possibilidade de inserir os valores observados (medidos no campo) para comparação visual com os valores simulados. Os resultados são apresentados por dia, com a possibilidade de alternar entre os dias pela aba de rolagem no canto superior direito (Figura 9). O simulador gera resultados de umidade do solo e concentração dos agrotóxicos nas diferentes profundidades do solo nas diferentes datas da simulação, além de acúmulo e escoamento de água na superfície do solo.

Um dos recursos importantes do simulador é a apresentação dos resultados na forma de gráficos. Ao selecionar a tecla “Ver Gráfico” na aba **Resultado**, são gerados dois gráficos, sendo o primeiro para visualização da umidade do solo (Figura 10A) e o segundo da concentração do agrotóxico ao longo do perfil do solo (Figura 10B).



Figura 8. Detalhe mostrando a aba **Agrotóxico**.

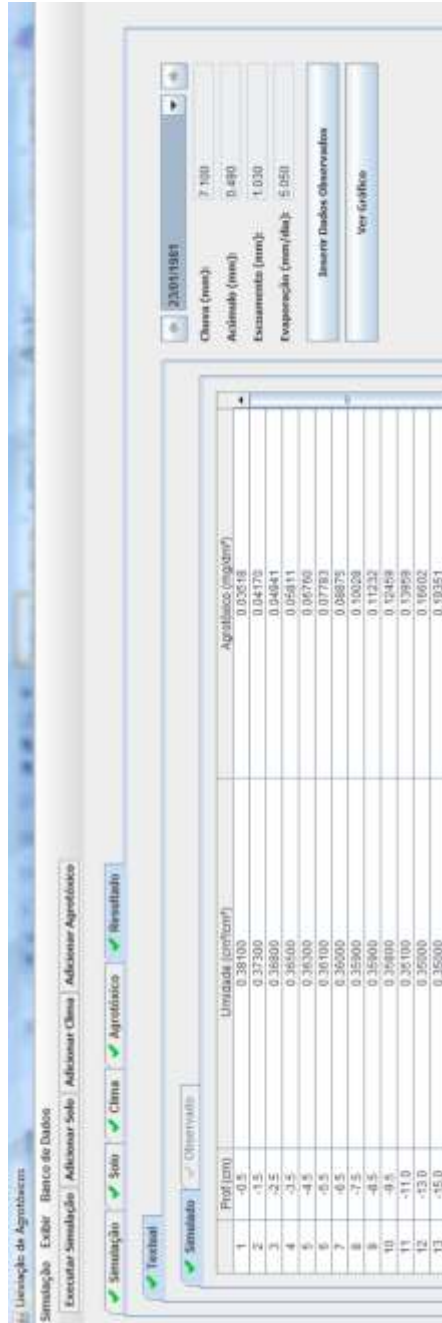
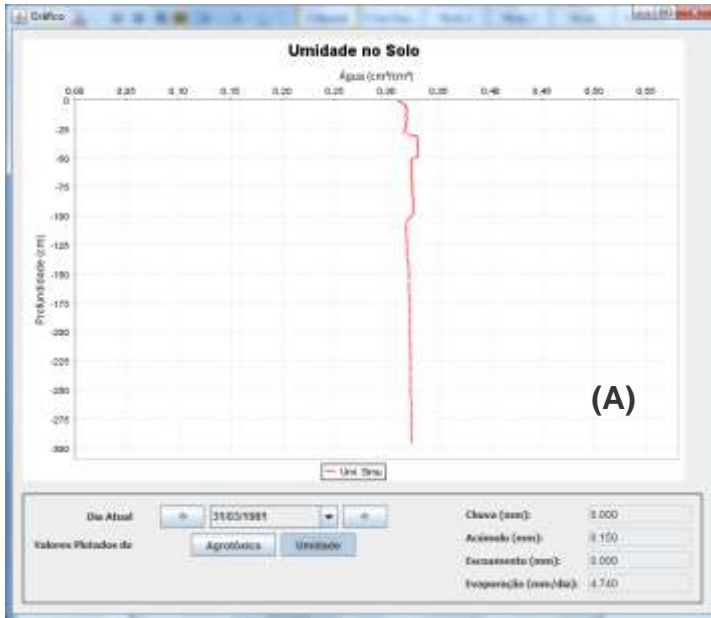
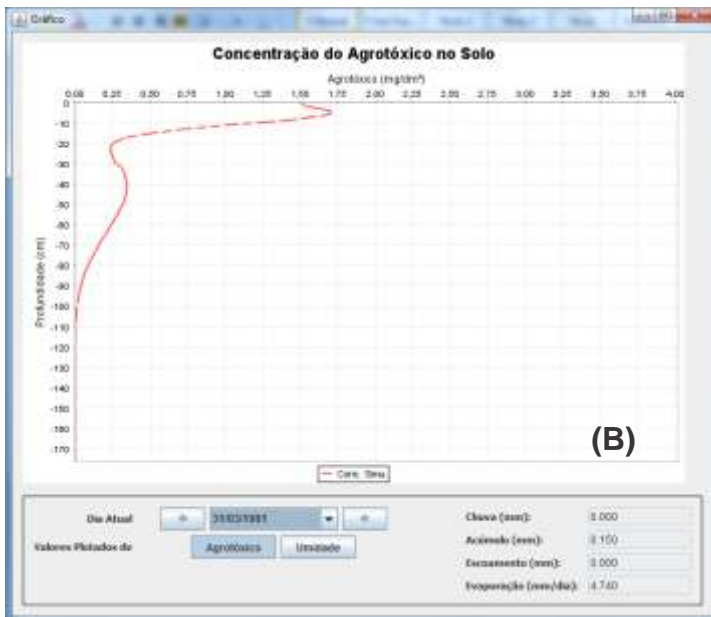


Figura 9. Detalhe mostrando a aba Resultado.



(A)



(B)

Figura 10. Visualização gráfica dos resultados da simulação.

Conclusões

Os modelos matemáticos que descrevem o processo de lixiviação de agrotóxicos em solos foram traduzidos para uma linguagem computacional e integrados, permitindo o desenvolvimento do simulador ACHA.

O simulador ACHA permite a simulação da lixiviação de agrotóxicos em diferentes cenários brasileiros de clima e solo.

Há necessidade de testar o simulador por meio da comparação entre valores observados e simulados de perfis de umidade e concentrações de agrotóxicos no perfil do solo em diferentes cenários brasileiros.

Agradecimentos

Aos professores Raquel Marcia Müller e Rubens Barbosa Filho, do curso de Ciência da Computação da Universidade Estadual de Mato Grosso do Sul - UEMS, pelas discussões iniciais para elaboração da ferramenta computacional. Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - CNPq (Edital MCT/CNPq/CT-HIDRO/SEAP-PR n° 35/2007 - Uso e Conservação da Água no Meio Rural) - pelo auxílio financeiro (Processo 551696/2007-9).

Referências

BOESTEN, J. J. T. I. Simulation of pesticide leaching in the field and in zero-tension lysimeters. **Vadose Zone Journal**, Madison, v. 6, n. 4, p. 793-804, 2007.

BROWN, C. D.; VAN BEINUM, W. Pesticide transport via sub-surface drains in Europe. **Environmental Pollution**, Barking, v. 157, n. 12, p. 3314-3324, Dec. 2009.

FILIZOLA, H. F.; 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, DF, v. 37, n. 5, p. 659-667, maio 2002.

KROES, J. G.; VAN DAM, J. C. **Reference manual SWAP version 3.0.3**. Alterra Report 773, Wageningen, The Netherlands. 2003.

LAABS, V.; AMELUNG, W.; PINTO, A. A.; WANTZEN, M.; SILVA, C. J.; ZECH, W. Pesticides in surface water, sediment, and rainfall of the Northeastern Pantanal Basin, Brazil. **Journal of Environmental Quality**, Madison, v. 31, n. 5, p. 1636-1648, Sept. 2002.

LARSBO, M.; JARVIS, N. **MACRO 5.0**: model of water flow and solute transport in macroporous soil. Technical description. 2003. Disponível em <ftp://www.slu.se/macro.doc>

LEISTRA, M.; VAN DER LINDEN, A. M. A.; BOESTEN, J. J. T. I.; TIKTAK, A.; VAN DER BERG, F. **PEARL model for pesticide behavior and emissions in soil-plant systems**: description of the processes. Wageningen: Alterra, 2002. (Alterra report, 13).

MALONE, R. W.; AHUJA, L. R.; MA, L.; WAUCHOPE, R. D.; MA, Q.; ROJAS, K. W. Application of the Root Zone Water Quality Model (RZWQM) to pesticide fate and transport: an overview. **Pest Management Science**, Sussex, v. 60, n. 3, p. 205-221, Mar. 2004.

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

PRESS, W. H.; FLANNERY, B. P.; TEUKOLSKY, S. A.; VETTERLING, W. T. **Numerical recipes**: the art of scientific computing. Cambridge : Cambridge University Press, 1989. 702 p.

SCORZA JÚNIOR, R. P.; SMELT, J. H.; BOESTEN, J. J. T. I.; HENDRIKS, R. F. A.; VAN DER ZEE, S. E. A. T. M. Preferential flow of bromide, bentazon, and imidacloprid in a Dutch clay soil. **Journal of Environmental Quality**, Madison, v. 33, n. 4, p. 1473-1486, July 2004.

TIKTAK, A.; VAN DER LINDEN, A. M. A.; BOESTEN, J. J. T. I. **The GeoPEARL model**: model description, applications and manual. Bilthoven: RIVM, 2003. (RIVM Report, 716601007).

VAN DAN, J. C.; FEDDES, R. A. Simulation of infiltration, evaporation and shallow groundwater levels with Richards' equation. **Journal of Hydrology**, Amsterdam, v. 233, v.1/4, p. 72-85, June 2000.

VAN DAM, J. C.; GROENENDIJK, P.; HENDRIKS, R. F. A.; KROES, J. G. Advances of modeling water flow in variably saturated soils with SWAP. **Vadose Zone Journal**, Madison, v. 7, n. 2, p. 640-653, 2008.

VAN DAM, J. C.; HUYGEN, J.; WESSELING, J. G.; FEDDES, R. A.; KABAT, P.; VAN WALSUM, P. E. V.; GROENENDIJK, P.; VAN DIEPEN, C. A. **Theory of SWAP version 2.0:** simulation of water flow, solute transport and plant growth in the soil-water-atmosphere-plant environment. Wageningen: Wageningen Agricultural University, 1997. 167 p. (Wageningen Agricultural University. Report, 71).

VAN GENUCHTEN, M. Th. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v. 44, n. 5, p. 892-898, Sept./Oct. 1980.

WESSELING, J. G.; KROES, J. G.; METSELAAR, K. **Global sensitivity analysis of the Soil-Water-Atmosphere-Plant (SWAP) model.** Wageningen: Alterra, 1998. 67 p. (Alterra report, 160).

Embrapa

Agropecuária Oeste

**Ministério da
Agricultura, Pecuária
e Abastecimento**

