

# **SIMASS - MODELO PARA SIMULAR O TRANSPORTE DE ÁGUA E SOLUTOS NO SOLO I: DESENVOLVIMENTO E TESTE DE SENSIBILIDADE<sup>1</sup>**

**Silvana Nunes da Costa<sup>2</sup>, Mauro Aparecido Martinez<sup>3</sup>, José Helvécio Martins<sup>4</sup>  
& Paulo Afonso Ferreira<sup>5</sup>**

## **RESUMO**

Desenvolveu-se um modelo matemático, denominado SIMASS, para simular o transporte unidimensional de água e soluto no solo, sob condições de escoamento não-permanente. As equações de transporte de água e de solutos, são resolvidas numericamente pelo método de diferenças finitas. O modelo permite, entre outras características, obter-se a distribuição de umidade e de solutos no solo, a utilização de condições de contorno do tipo potencial constante e do tipo fluxo constante, e o uso de duas funções, através das quais se estima a condutividade hidráulica do solo não-saturado. A avaliação do desempenho do SIMASS em simular, sob condições de solo saturado, as curvas de efluentes e os perfis de distribuição de nitrato em colunas de solo, foi realizada comparando-se as simulações realizadas por este com aquelas simuladas, usando-se o modelo CXTFIT, versão 1.0. A sensibilidade do modelo aos valores de  $\Delta z$  (distância entre os pontos simulados) e  $\Delta t$  (intervalo de tempo entre duas simulações) foi analisada e os resultados mostraram desempenho adequado do SIMASS na simulação de curvas de efluente e perfis de distribuição de concentração de nitrato, quando comparado ao CXTFIT. O SIMASS apresenta maior sensibilidade ao valor de  $\Delta z$  na simulação de curvas de efluente e ao valor de  $\Delta t$  na simulação de perfis de distribuição de concentração.

**Palavras-chave:** modelagem, umidade do solo, transporte de solutos, escoamento não-permanente

## **SIMASS - MODEL FOR SIMULATION OF WATER AND SOLUTE TRANSPORT IN THE SOIL I: DEVELOPMENT AND SENSITIVITY ANALYSIS**

## **ABSTRACT**

A mathematical model, named SIMASS, was developed to simulate the one-dimensional water and solute transport in the soil profile under unsteady flow conditions. Both the water and solute transport equations were numerically solved by the finite difference method. Among other characteristics, the model allows the simulation of soil moisture and solute distribution in the soil profile; the utilization of the boundary conditions of the constant potential and the steady flux types; and the use of two functions for estimating the hydraulic conductivity in the unsaturated soil. The SIMASS model was compared to the CXTFIT model for soil-water saturated conditions. Simulations of nitrate breakthrough

<sup>1</sup> Parte da tese doutorado do primeiro autor, parcialmente financiada pela FAPEMIG/CNPq

<sup>2</sup> Pesquisadora Doutora, Bolsista do CNPq, DEAg/CCT/UFPB, Campina Grande, PB, Av. Aprígio Veloso 882, CEP 58109 - 970, Fone: (083) 310-1285, E-mail: silvana@deag.ufpb.br

<sup>3</sup> Professor Titular, Ph.D., Bolsista do CNPq, DEA/UFV, Av. P.H. Rolfs, CEP 36571 - 000, Viçosa, MG, Fone: (031) 899 1910, E-mail: mmauro@mail.ufv.br

<sup>4</sup> Professor Adjunto, Ph.D., DEA/UFV, Av. P.H. Rolfs, CEP 36571-000, Viçosa, MG, Fone: (031) 899 1910

<sup>5</sup> Pesquisador do CNPq, PhD, DEA/UFV, Fone: (031) 899 2735

curves in leaching columns and nitrate distribution profiles from soil columns were obtained in order to verify the SIMASS performance. The SIMASS sensibility to  $\Delta z$  and  $\Delta t$  was analyzed. The results showed an adequate performance of SIMASS in simulating the breakthrough curves and nitrate concentration distribution profiles when compared to CXTFIT and experimental data. The SIMASS model is more sensible to  $\Delta z$  in simulating the breakthrough curves in leaching columns and  $\Delta t$  to simulating the nitrate concentration distribution profiles.

**Key words:** modeling, soil water content, solute transport, unsteady flow

## INTRODUÇÃO

Com o desenvolvimento industrial, os sistemas de produção agrícola vêm passando por uma série de modificações, ao longo dos anos. Uma grande variedade de substâncias químicas tem sido introduzida na agricultura, a fim de fornecer ao solo condições necessárias ao bom desenvolvimento das culturas; por outro lado, o uso de tais substâncias vem causando sérios problemas ao ambiente. Segundo Piffer (1989) a contaminação de áreas agrícolas com pequenas quantidades dessas substâncias pode afetar diretamente o homem e os animais domésticos, os quais podem ingeri-los através dos alimentos e das águas contaminadas, podendo afetar a vida selvagem com a acumulação dos compostos nas cadeias alimentares, provocando distúrbios nos ecossistemas das áreas contaminadas. Desta forma, a importância do estudo do transporte de solutos no solo reside no fato de que, a partir do conhecimento das propriedades e das interações de determinada substância química com o meio e de sua movimentação e persistência no solo, é possível se prever os riscos de contaminação e os impactos que ela pode causar ao meio ambiente.

Segundo Clemente (1993) nas duas últimas décadas ambientalistas, engenheiros e pesquisadores na área de solos de vários países, têm despertado para o problema de contaminação do sistema solo-água que, em futuro bem próximo, pode agravar-se e chegar a comprometer a vida em algumas regiões do mundo. Agências governamentais e instituições de pesquisa de diferentes países têm conduzido estudos de impacto ambiental e investigações de campo, no sentido de se determinar os níveis de concentração de resíduos químicos em vários ecossistemas, além de avaliar práticas de manejo que possibilitem minimizar os problemas associados ao uso de substâncias químicas na agricultura; entretanto, devido ao alto custo, ao tempo e esforço humano envolvidos nesses estudos, torna-se necessária uma alternativa economicamente viável.

Dentro deste contexto e se considerando os avanços computacionais dos últimos anos, os modelos matemáticos têm surgido como ferramenta viável na avaliação do destino e do comportamento de determinada substância química em ambientes geo-hidrológicos. Países como os Estados Unidos, Canadá, Japão, México, Alemanha, Bélgica e outros, têm desenvolvido vários modelos, visando estudar a contaminação do solo e da água subterrânea. Alguns merecem destaque: PRZM (Carsel et al., 1984), SOLUTE (Beljin, 1985), GLEAMS (Leonard et al., 1987), LEACHM (Wagenet & Hutson, 1989), PESTAFATE (Clemente, 1993), CXTFIT (Parker & van Genuchten, 1984) e WAVE (Vanclouster et al., 1994).

Diante disso, este trabalho teve como objetivo apresentar um modelo matemático/computacional capaz de simular a distribuição de concentração de solutos no perfil do solo sob condições de escoamento não-permanente e vertical e testá-lo para a condição de escoamento em meio saturado, analisando sua sensibilidade aos valores de  $\Delta z$  e  $\Delta t$  utilizados como dados de entrada.

## DESENVOLVIMENTO DO MODELO

O modelo matemático descrito neste trabalho consiste na solução de duas equações diferenciais parciais de segunda ordem, ou seja, na equação do movimento de água no solo e na equação do transporte de solutos. As soluções dessas equações permitem estimar, respectivamente, os valores de potencial matricial de água e de concentração de soluto no perfil do solo. As equações são resolvidas numericamente, pelo método de diferenças finitas.

O movimento da água no solo para a condição de escoamento em um meio poroso isotérmico, isobárico e unidimensional, sob condições de não saturação, pode ser descrito pela equação de Richards 1931 (Bear, 1979; Jury et al., 1991; Vanclouster et al., 1994) a qual, incluindo-se o termo fonte ou sumidouro, resulta em

$$E(h) \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left( k(h) \left[ \frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right] \right) + R \quad (1)$$

em que:

- $E(h)$  - capacidade hídrica específica do solo ( $L^{-1}$ )
- $k(h)$  - condutividade hidráulica do solo não-saturado ( $LT^{-1}$ )
- $h$  - componente do potencial matricial ( $L$ )
- $R$  - fonte ou sumidouro ( $T^{-1}$ )
- $z$  - coordenada vertical, positiva para cima ( $L$ )
- $t$  - tempo ( $T$ )

As condições iniciais e de contorno para a Eq. (1), conforme Figura 1, são dadas por:

$$h(z, 0) = h(z)_{\text{inicial}} \quad \text{para } t = 0 \text{ e } 0 \leq z \leq d \quad (2)$$

$$q = -k(h) \left[ \frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right] \quad \text{para } t > 0 \text{ e } z = 0 \text{ ou } z = d \quad (3)$$

ou

$$h(z, t) = h_c(z, t) \quad \text{para } t > 0 \text{ e } z = 0 \text{ ou } z = d \quad (4)$$

O transporte de solutos no solo sob condições de escoamento não-permanente, considerando-se a isoterma de

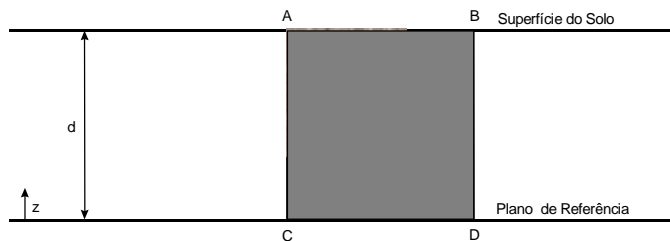


Figura 1. Esquema da região de estudo para simulação

adsorção linear, é dado pela seguinte equação (Jury et al., 1991; van Genuchten & Wierenga, 1986):

$$f_r \frac{\partial \theta C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[ D \theta \frac{\partial C}{\partial z} \right] - \frac{\partial (qC)}{\partial z} \quad (5)$$

em que:

$$f_r = 1 + \frac{\rho_g K_d}{\theta} \text{ - fator de retardamento (adimensional)}$$

$\rho_g$  - massa específica do solo ( $M L^{-3}$ )

$K_d$  - coeficiente de partição do soluto ( $L^3 M^{-1}$ )

$\theta$  - umidade volumétrica ( $L^3 L^{-3}$ )

$C$  - concentração do soluto na solução do solo ( $M L^{-3}$ )

$D$  - coeficiente de dispersão-difusão do soluto no solo ( $L^2 T^{-1}$ )

$q$  - fluxo de água no solo ( $L T^{-1}$ )

Considerando-se que o coeficiente de dispersão-difusão do soluto no solo é representado pelo efeito combinado da difusão iônica com a dispersão mecânica, obtém-se

$$D = D_o + \lambda v \quad (6)$$

em que:

$D_o$  - coeficiente de difusão do soluto em água pura ( $L^2 T^{-1}$ )

$\lambda$  - dispersividade no solo (L)

$v$  - velocidade da solução no solo ( $L T^{-1}$ )

Substituindo-se (6) em (5) resulta

$$f_r \frac{\partial \theta C}{\partial t} = D_o \frac{\partial}{\partial z} \left[ \theta \frac{\partial C}{\partial z} \right] + \lambda \frac{\partial}{\partial z} \left[ q \frac{\partial C}{\partial z} \right] - \frac{\partial (qC)}{\partial z} \quad (7)$$

As condições iniciais e de contorno para a Eq. (7) conforme Figura 1 são dadas por:

$$C(z,0) = C(z)_{\text{inicial}} \text{ para } t = 0 \text{ e } z = 0 \text{ ou } z = d \quad (8)$$

$$qC_0 = qC - (\lambda q + \theta D_o) \frac{\partial C}{\partial z} \text{ para } t > 0 \text{ e } z = 0 \text{ ou } z = d \quad (9)$$

ou

$$C(z,t) = C_c(z,t) \text{ para } t > 0 \text{ e } z = 0 \text{ ou } z = d \quad (10)$$

em que:

$C_o$  - concentração de soluto na solução aplicada ( $z = d$ ) ou no efluente ( $z = 0$ ) ( $M L^{-3}$ )

$C_c$  - concentração de soluto na solução do solo nos contornos da região ( $M L^{-3}$ )

## Solução numérica

A Eq. (1) é uma equação diferencial parcial não-linear de segunda ordem e, como tal, não possui solução analítica. Neste trabalho, a solução da Eq. (1) é obtida, numericamente, pelo método de diferenças finitas. A solução numérica desta equação, sujeita às condições iniciais e de contorno apresentadas anteriormente, requer a utilização de um método iterativo, uma vez que a condutividade hidráulica e a capacidade hídrica específica do solo são dependentes do potencial matricial,  $h$ . Esta solução é obtida em duas etapas; inicialmente, uma primeira estimativa do potencial matricial no tempo ( $t + \Delta t$ ) é obtida usando-se um esquema de discretização implícita com linearização explícita da capacidade hídrica específica do solo, segundo Vancloster et al. (1994); em seguida, faz-se um refinamento desta solução utilizando-se o esquema de discretização implícita pelo método de Crank-Nicolson (Gerald & Wheatley, 1984). Nos dois casos, a solução da Eq. (1) resulta em um sistema tridiagonal de equações que, quando resolvido, fornece o valor de “ $h$ ” em cada nó (profundidade no perfil do solo) no tempo “ $t$ ”, conforme a malha de discretização mostrada na Figura 2.

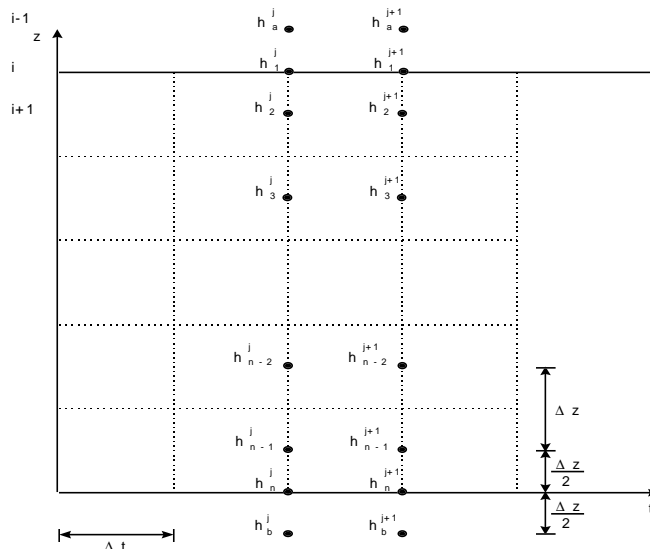


Figura 2. Malha de discretização utilizada na equação de diferenças finitas para solução da equação do movimento de água no solo

A equação de discretização, segundo Vancloster et al. (1994) para obtenção da primeira estimativa do potencial matricial, considerando-se os pontos igualmente espaçados ( $3 \leq i \leq n-2$ ) é dada por:

$$E_i^j \left( \frac{h_i^{j+1} - h_i^j}{\Delta t} \right) = \frac{k_{i-1/2}^j \left[ \frac{h_{i-1}^{j+1} - h_i^{j+1}}{\Delta z} + 1 \right] - k_{i+1/2}^j \left[ \frac{h_i^{j+1} - h_{i+1}^{j+1}}{\Delta z} + 1 \right]}{\Delta z} + R_i \quad (11)$$

Escrevendo-se a Eq. (11) para os pontos  $3 \leq i \leq n-2$ , obtém-se um sistema tridiagonal de equações lineares, dado por:

$$a_i h_{i-1}^{j+1} + b_i h_i^{j+1} + d_i h_{i+1}^{j+1} = e_i \quad (12)$$

Equações semelhantes para os demais pontos da malha de discretização ( $i = 1$ ,  $i = 2$ ,  $i = n-1$  e  $i = n$ ) são apresentadas

detalhadamente em Costa (1998). O sistema de equações resultante é resolvido pelo método do algoritmo de Thomas.

A equação de discretização utilizada para o refinamento da solução obtida a partir da Eq. (1) é dada por

$$E_i \left( \frac{h_i^{j+1} - h_i^j}{\Delta t} \right) = k_i^j \frac{1}{2} \left[ \frac{h_{i+1}^j - 2h_i^j + h_{i-1}^j}{\Delta z^2} \right] + k_i^{j+1} \frac{1}{2} \left[ \frac{h_{i+1}^{j+1} - 2h_i^{j+1} + h_{i-1}^{j+1}}{\Delta z^2} \right] + \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{k_{i+1}^j - k_{i-1}^j}{2\Delta z} \right) + \frac{1}{2} \left( \frac{k_{i+1}^{j+1} - k_{i-1}^{j+1}}{2\Delta z} \right) \right] \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{h_{i+1}^j - h_{i-1}^j}{2\Delta z} \right) + \frac{1}{2} \left( \frac{h_{i+1}^{j+1} - h_{i-1}^{j+1}}{2\Delta z} \right) \right] - \frac{1}{2} \left[ \frac{k_{i+1}^j - k_{i-1}^j}{2\Delta z} \right] + \frac{1}{2} \left[ \frac{k_{i+1}^{j+1} - k_{i-1}^{j+1}}{2\Delta z} \right] + R_i \quad (13)$$

A Eq. (13) resulta em um sistema de equações não lineares, que é resolvido iterativamente pelo método de Gauss-Seidel, como apresentado em Costa (1998).

A solução das Eq. (11) e (13) é dependente dos valores de E(h) e k(h) os quais são função do potencial matricial. Vários métodos apresentados na literatura permitem estimar esses parâmetros a partir da curva de retenção de umidade no solo. Neste modelo, as funções de Brooks & Corey (1964) e de van Genuchten (1980) são utilizadas como apresentado em Costa (1998).

O fluxo de água no solo, considerando-se a distribuição de potencial matricial obtida com a solução da equação do movimento de água no solo, é calculado usando-se a equação de Darcy:

$$q = -k(h) \left[ \frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right] \quad (14)$$

A solução da equação de transporte de solutos foi obtida utilizando-se um esquema de discretização implícita pelo método de Crank-Nicolson, resultando na seguinte equação:

$$R \left( \frac{\theta_i^{j+1} c_i^{j+1} - \theta_i^j c_i^j}{\Delta t} \right) = \left[ \frac{\alpha}{2} \left( \frac{q_{i+1}^j - q_{i-1}^j}{2\Delta z} \right) + \frac{\alpha}{2} \left( \frac{q_{i+1}^{j+1} - q_{i-1}^{j+1}}{2\Delta z} \right) \right] \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{c_{i+1}^j - c_{i-1}^j}{2\Delta z} \right) + \frac{1}{2} \left( \frac{c_{i+1}^{j+1} - c_{i-1}^{j+1}}{2\Delta z} \right) \right] + \frac{\alpha q_i^j}{2} \left( \frac{c_{i+1}^j - 2c_i^j + c_{i-1}^j}{\Delta z^2} \right) + \frac{\alpha q_i^{j+1}}{2} \left( \frac{c_{i+1}^{j+1} - 2c_i^{j+1} + c_{i-1}^{j+1}}{\Delta z^2} \right) + \frac{1}{2} \left( \frac{q_{i+1}^j c_{i+1}^j - q_{i-1}^j c_{i-1}^j}{2\Delta z} \right) - \frac{1}{2} \left( \frac{q_{i+1}^{j+1} c_{i+1}^{j+1} - q_{i-1}^{j+1} c_{i-1}^{j+1}}{2\Delta z} \right) \quad (15)$$

Escrevendo-se a Eq. (15) para os pontos  $3 \leq i \leq n-2$ , obtém-se um sistema tridiagonal de equações lineares, dado por:

$$a_i h_{i-1}^{j+1} + b_i h_i^{j+1} + d_i h_{i+1}^{j+1} = e_i \quad (16)$$

Analogamente à equação do movimento de água no solo, a solução da Eq. (15) resulta em um sistema tridiagonal de equações lineares. A discretização detalhada da equação de transporte de solutos pode ser vista em Costa (1998).

Um programa computacional, denominado SIMASS - Simulação do Movimento de Água e Solutos no Solo, em linguagem Delphi, foi desenvolvido para implementar as soluções numéricas obtidas anteriormente. O modelo permite, entre outras opções, o uso de diferentes funções para estimar a condutividade hidráulica do solo em condições de não saturação,

a escolha de diferentes condições de contorno e a simulação do movimento de água e soluto, tanto na condição de solo saturado quanto não-saturado. O modelo, que futuramente incorporará outros processos que ocorrem no sistema solo-água-planta como, por exemplo, a extração de água e solutos pela planta, é potencialmente útil para simular o melhor manejo de aplicação de fertilizantes ao solo e os riscos de contaminação de águas subterrâneas. A Figura 3 apresenta a tela de entrada do SIMASS, mostrando opção de escolha das condições de contorno e do modelo a ser utilizado na determinação da condutividade hidráulica do solo. A Figura 4 apresenta a tela do SIMASS, mostrando a saída de dados em termos de distribuição de concentração de químico no perfil do solo ao longo do tempo.



Figura 3. Tela do SIMASS mostrando opção de escolha das condições de contorno e do modelo a ser utilizado na determinação da condutividade hidráulica do solo

	Perfil para J = 1	Perfil para J = 2	Perfil para J = 3	Perfil para J = 4,2
1	11,2403	11,0069	11,0069	25,5463
2	11,2014	10,2036	10,2036	25,4703
3	1,0648	6,7504	11,5478	11,5478
4	0,1048	1,6702	3,7803	3,7803
5	0,0678	0,9664	1,8378	1,8378
6	0,0348	0,0741	0,2538	0,2538
7	0,0024	0,0101	0,0038	0,0038
8	0,0004	0,0025	0,0017	0,0017
9	0,0001	0,0004	0,0003	0,0003
10	0,0000	0,0001	0,0000	0,0000
11	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
12	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
13	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
14	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
15	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
16	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
17	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
18	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
19	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
20	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

Figura 4. Tela do SIMASS mostrando a saída de dados em termos de distribuição de concentração de químico no perfil do solo ao longo do tempo

Os parâmetros de transporte (fator de retardamento,  $f_r$ , e coeficiente de dispersão-difusão,  $D$ ) utilizados para realização do teste de sensibilidade foram determinados experimentalmente a partir de curvas de efluente, obtidas de ensaios de mobilidade de nitrato em colunas de lixiviação. Curvas de efluente foram traçadas a partir do conhecimento da concentração relativa ( $C/C_0$ ), plotada no eixo vertical, e dos respectivos volumes de poros, expressos em tempo necessário para passarem através das colunas, no eixo horizontal.

Os parâmetros de transporte do nitrato foram obtidos a partir das curvas de efluente experimental de cada coluna. Utilizou-se o programa computacional CXTFIT (Parker & van Genuchten, 1984) que, a partir da relação  $C/C_0$  versus tempo ou volume de poros observados, processa o ajuste dos parâmetros  $f_r$  e  $D$  pelo método da inversão dos mínimos quadrados. No modelo CXTFIT, a equação de transporte de solutos é resolvida analiticamente.

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

A avaliação do desempenho do modelo SIMASS em simular curvas de efluente e perfis de distribuição de nitrato no solo, sob condições de solo saturado, foi feita comparando-se os valores simulados por este com aqueles simulados usando-se o modelo CXTFIT, desenvolvido por Parker & van Genuchten (1984). O modelo CXTFIT foi selecionado para ser utilizado como modelo comparativo, porque apresenta solução analítica da equação de transporte de solutos e, por isso, apresenta resultados mais realísticos.

Os parâmetros de transporte de nitrato, utilizados como dados de entrada do programa, foram obtidos experimentalmente usando-se colunas de lixiviação (Costa, 1998).

### Desempenho e análise de sensibilidade do modelo ao valor de $\Delta z$

Na Figura 5 são apresentadas as curvas de efluente simuladas pelos modelos SIMASS e CXTFIT. Observa-se que, quando o valor de  $\Delta z$  diminuiu, o modelo SIMASS mostrou melhor desempenho relativamente ao CXTFIT, apresentando ligeira superestimação, exceto para tempos acima dos quais a relação  $C/C_0$  assume valores iguais ou superiores a 0,5; este resultado ocorre, possivelmente, devido ao fato de que o CXTFIT trabalha com solução analítica da equação de transporte de solutos, enquanto o SIMASS trabalha com solução numérica, na qual as derivadas  $\partial C/\partial z$  são aproximadas por diferenças finitas, isto é, por  $\Delta C/\Delta z$ . A condição de contorno na extremidade inferior da coluna, para os casos de simulação de curvas de efluente, considera  $\partial C/\partial z = 0$ ; portanto, a possível explicação para este comportamento é que, no início da aplicação da solução, os gradientes de concentração no ponto de coleta do efluente (contorno inferior) são pequenos e, conseqüentemente,  $\Delta C/\Delta z$  aproxima-se melhor de  $\partial C/\partial z$ . A medida em que o tempo passa, esses gradientes aumentam e o efeito do valor de  $\Delta z$  torna-se mais evidente.

Os perfis de distribuição de concentração do nitrato, simulados pelos modelos SIMASS e CXTFIT, considerando-se os tempos de 10, 30, 60 e 90 min após o início de aplicação da solução, são apresentados na Figura 6. Observa-se que os resultados de perfil de distribuição da concentração de nitrato apresentaram melhor desempenho em comparação com o CXTFIT, quando o valor de  $\Delta z$  aumentou, sendo este efeito

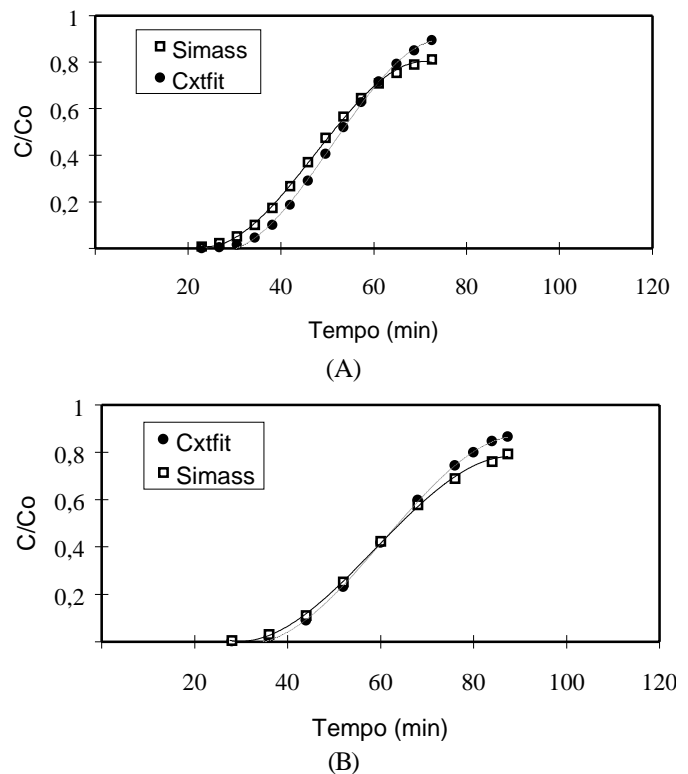


Figura 5. Curvas de efluente simuladas pelo SIMASS e CXTFIT para  $\Delta t=2$  min,  $\Delta z=1$  cm (A),  $\Delta z=0,375$  cm (B) considerando-se  $f_r = 1,67$  e  $D = 0,23$

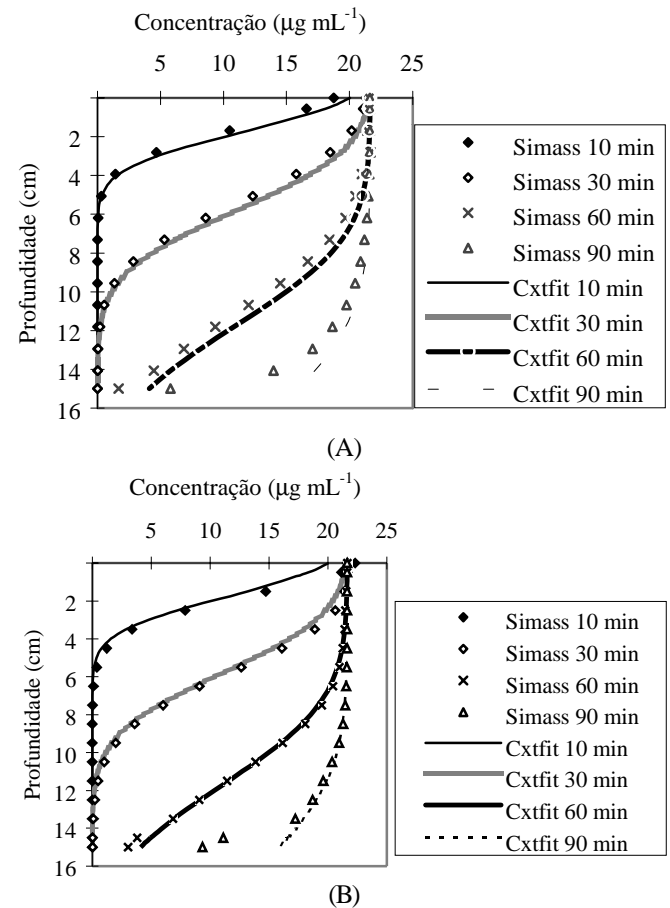


Figura 6. Distribuição de concentração de nitrato simulada pelo SIMASS e CXTFIT, considerando-se  $\Delta t=1$  min e  $\Delta z=0,375$  cm (A)  $\Delta z=1$  cm (B) para  $f_r = 1,75$  e  $D = 0,20$

mais evidente para os tempos de 60 e 90 min após o início da aplicação, quando ocorre melhor desempenho do SIMASS; entretanto, os resultados mostram, em geral, que o modelo SIMASS apresentou pouca sensibilidade à variação de  $\Delta z$ , em todas as simulações de perfil de distribuição de concentração realizadas, provavelmente devido aos pequenos valores de  $\Delta z$  utilizados.

Analisando-se as Figuras 5 e 6, observa-se que a sensibilidade do SIMASS ao valor de  $\Delta z$  é mais importante quando se simula curvas de efluente, uma vez que o valor da concentração de solutos é simulado em um ponto situado em um contorno da região estudada.

#### Desempenho e análise de sensibilidade do modelo ao valor de $\Delta t$

Na Figura 7 as curvas de efluente simuladas pelo SIMASS e pelo CXTFIT são apresentadas, considerando-se diferentes valores de  $\Delta t$ . Observa-se que os resultados das curvas de efluente simuladas pelo SIMASS, tanto para  $\Delta t = 5$  min quanto para  $\Delta t = 2$  min, apresentaram-se bem próximo daqueles obtidos aplicando-se o CXTFIT. A maior diferença percentual observada entre os resultados simulados pelos dois modelos foi de aproximadamente 8% mas, em geral, os resultados obtidos com a utilização de  $\Delta t = 2$  min sugerem um desempenho ligeiramente melhor, quando comparados àqueles obtidos com a aplicação do CXTFIT.

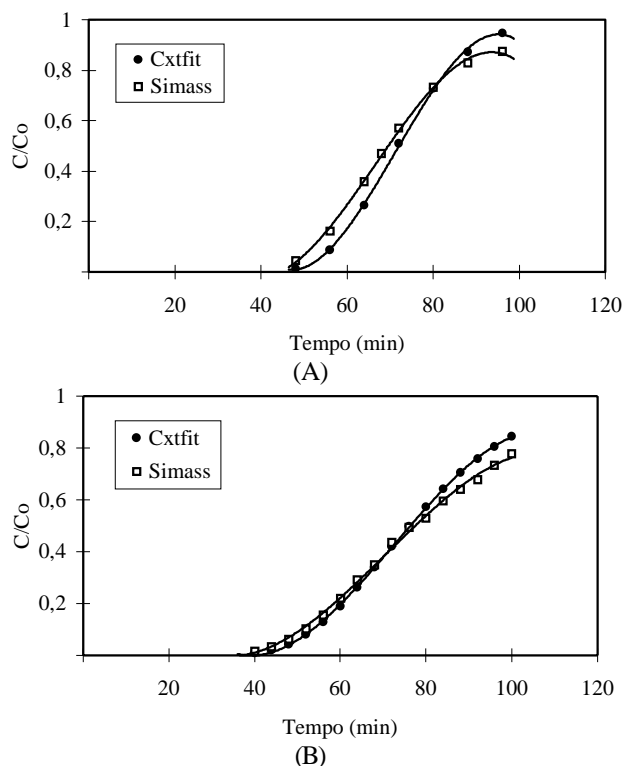


Figura 7. Curvas de efluente observadas e simuladas pelo SIMASS e CXTFIT, considerando-se  $\Delta t = 5$  min (A),  $\Delta t = 2$  min (B) e  $\Delta z = 0,375$  cm para  $fr = 1,75$  e  $D = 0,20$

A Figura 8 apresenta os perfis de distribuição da concentração de nitrato. Observa-se que, exceto para os perfis referentes ao tempo de dez minutos, os resultados obtidos com a aplicação do SIMASS apresentaram melhor desempenho quando o valor de  $\Delta t$  decresceu de 2 para 1 min, comparativamente ao CXTFIT, indicando que o modelo SIMASS é bastante sensível à variação de  $\Delta t$ , em simulação de perfis de distribuição de concentração de soluto.

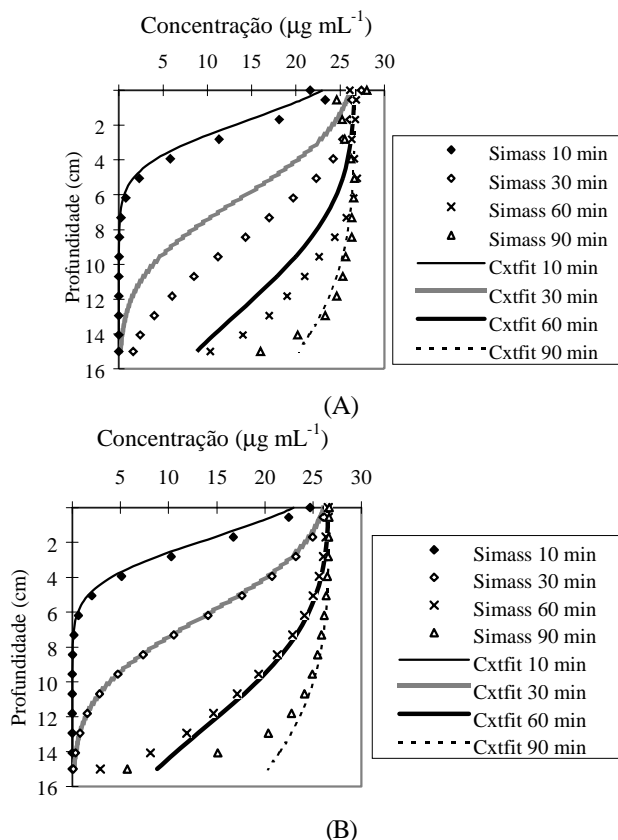


Figura 8. Distribuição de concentração de nitrato considerando-se  $\Delta z = 0,375$  cm,  $\Delta t = 2$  min (A),  $\Delta t = 1$  min (B) para  $fr = 1,67$  e  $D = 0,36$

## CONCLUSÕES

Os resultados apresentados permitem concluir que o modelo SIMASS apresenta um bom desempenho comparado ao CXTFIT, podendo o mesmo ser utilizado na simulação de curvas de efluente e na distribuição de concentração de solutos, para a condição de escoamento em meio saturado e regime de escoamento não-permanente.

O modelo SIMASS foi sensível aos valores de  $\Delta z$  (na simulação de curvas de efluentes) e  $\Delta t$  (na simulação de perfis de distribuição de concentração) indicando a necessidade de se escolher adequadamente esses parâmetros.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BEAR, J. **Hydraulics of groundwater**. New York: McGraw-Hill Book Company, 1979. 569p.
- BELJIN, M.S. **Solute program package**. Indianapolis: International Ground Water Modeling Center. 1985. 163p.
- BROOKS, R.H.; COREY A.T. **Hydraulic properties of porous media**. Fort. Collins: Colorado State University, 1964. Hydrology paper 3
- CARSEL, R.F.; SMITH, C.N.; MULKEY, L.A.; DEAN, J.D.; JOWISE, P. **User's manual for the pesticide root zone model (PRZM)**. Release 1 EPA-600/3-84-109. Athens, GA: U.S. EPA. 1984.
- CLEMENTE, R.S.; PRASHER, S.O.; BARRINGTON, S.F. Pestfate, a new pesticide fate and transport model: model development and verification. **Transaction of the ASAE**, St. Joseph, v.36, n.2, 1993. p.357-367.

- COSTA, S.N. **Desenvolvimento de um modelo numérico para simulação do transporte de água e solutos no solo, sob condições de escoamento não-permanente na vertical.** Viçosa: UFV, 1998. 153p. Tese Doutorado
- GERALD, C.F.; WHEATLEY, P.O. **Applied numerical analysis.** Massachusetts: Addison-Wesley Publishing Company, 1984. 579p.
- JURY, W.A.; GARDNER, W.R.; GARDNER, W.H. **Soil physics.** Leuven: John Wiley and Sons, 1991. 328p.
- LEONARD, R.A.; KNISEL, W.G.; STILL, D.A. GLEAMS: Groundwater loading effects of agricultural management systems. **Transaction of the ASAE**, St. Joseph, v.30, n.5, p.1403-1418, 1987.
- PARKER, J.C.; VAN GENUCHTEN, M.Th. **Determining transport parameters from laboratory and field tracer experiments.** Virginia: Virginia Agricultural Experiment Station, 1984. 96p. Bulletin, 84-3
- PIFFER, R. **Movimento e degradação de Aldicarb e Sulfona de Aldicarb em dois diferentes solos.** Lavras: ESAL, 1989. 99p. Dissertação Mestrado
- VANCLOOSTER, M.; VIAENE, P.; CHRISTIAENS, K. **A mathematical model for simulating water and agrochemicals in the soil and vadose environment.** Institute for Land and Water Management Leuven: K atholieke Universiteit Leuven, Belgium. 1994.
- van GENUCHTEN, M.Th. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. **Soil Science Society American Journal**, Madison, v. 44, p.892-898, 1980.
- van GENUCHTEN, M.Th.; WIERENGA, P.J. Solute dispersion coefficients and retardation factors. In: KLUTE, A. (ed.). **Methods of soil analysis: Part 1 - Physical and mineralogical methods**, Madison: Soil Science Society of American, 1986. p.1025-1054.
- WAGENET, R.J.; HUSTON, J.L. LEACHM: Leaching Estimation and Chemistry Model. Version 2. Center for Environmental Research, Cornell University, Ithaca, NY. 1989.