

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA AGRÍCOLA**

**TEORIA DE CONJUNTOS *FUZZY* NO ESTUDO DA
DINÂMICA DA ÁGUA E DE SOLUTOS NO SOLO**

ANDERSON LUIZ DE SOUZA

**CAMPINAS
JULHO DE 2007**

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA AGRÍCOLA**

**TEORIA DE CONJUNTOS *FUZZY* NO ESTUDO DA
DINÂMICA DA ÁGUA E DE SOLUTOS NO SOLO**

Tese de Doutorado submetida à banca
examinadora para obtenção do título de
Doutor em Engenharia Agrícola, na Área de
Concentração Água e Solo.

Anderson Luiz de Souza

ORIENTADOR: Dr. Edson Eiji Matsura

CO-ORIENTADOR: Dr. Jarbas Honório de Miranda

**CAMPINAS
JULHO DE 2007**

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA E ARQUITETURA - BAE -
UNICAMP

So89t Souza, Anderson Luiz
Teoria de conjuntos fuzzy no estudo da
dinâmica da água e de solutos no solo. / Anderson Luiz
de Souza.--Campinas, SP: [s.n.], 2007.

Orientadores: Edson Eiji Matsura; Jarbas
Honório de Miranda
Tese (Doutorado) - Universidade Estadual de
Campinas, Faculdade de Engenharia Agrícola.

1. Lógica difusa. 2. Física do solo. 3. Solos –
Movimento de fertilizantes. 4. Solos - Umidade. 5.
Computação – Matemática. I. Matsura, Edson Eiji. II.
Miranda, Jarbas Honório de. IV. Universidade Estadual
de Campinas. Faculdade de Engenharia Agrícola. V.
Título.

Título em Inglês: Fuzzy sets theory applied in the soil's water and solutes
dynamics

Palavras-chave em Inglês: Fuzzy logic, Soil physics, Soils – Fertilizer
movement, Soil moisture, Computation -
Mathematic

Área de concentração: Água e Solo

Titulação: Doutor em Engenharia Agrícola

Banca examinadora: Eugênio Ferreira Coelho, Alberto Colombo, Paulo
Leonel Libardi e Claudinei Fonseca de Souza

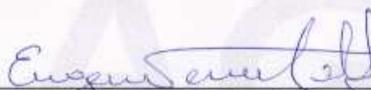
Data da defesa: 26/07/2007

Programa de Pós-Graduação: Engenharia Agrícola

Este exemplar corresponde à redação final da **Tese Doutorado** defendida por **Anderson Luiz de Souza**, aprovada pela Comissão Julgadora em 26 de julho de 2007, na Faculdade de Engenharia Agrícola da Universidade Estadual de Campinas.



**Prof. Dr. Edson Eiji Matsura - Presidente
FEAGRI/UNICAMP**



**Prof. Dr. Eugenio Ferreira Coelho - Membro Titular
Embrapa/Cruz das Almas - BA**



**Prof. Dr. Alberto Colombo - Membro Titular
UFLA/Lavras - MG**



**Prof. Dr. Paulo Leonel Libardi - Membro Titular
ESALQ/USP**



**Prof. Dr. Claudinei Fonseca de Souza - Membro Titular
UNITAL/Taubaté - SP**

Ao meu saudoso pai, Arlindo José de Souza, e a minha querida mãe, Laura de Moura Souza, por todo amor e carinho

DEDICO.

**"Se procurar bem você acaba encontrando.
Não a explicação (duvidosa) da vida,
Mas a poesia (inexplicável) da vida."**

Carlos Drummond de Andrade

AGRADECIMENTOS

Ao meu orientador Prof Dr Edson Eiji Matsura pela confiança, amizade, dedicação e apoio, imprescindíveis para o desenvolvimento deste trabalho.

Ao meu co-orientador Prof Dr Jarbas Honório de Miranda pelo grande apoio, amizade e pela inestimável contribuição no desenvolvimento deste estudo.

Ao Prof Dr Antonio Paz González pelo apoio e orientação ao longo do estágio de doutorado no exterior.

Ao Prof. Dr. Jorge Dafonte Dafonte pelo apoio ao longo do estágio de doutorado no exterior.

A Prof.^a.Dr^a Mariângela Amêndola pela valiosa contribuição na etapa inicial do desenvolvimento deste trabalho.

Aos meus queridos pais Arlindo e Laura pelo amor e grande dedicação.

Aos meus queridos irmãos: Sueli, Solange, Georgina, Sandra, Arlindo e Adilson, pelos grandes exemplos de amor, carinho e união.

Aos meus sobrinhos: Mariana, Cláudia, Paulo, Adilson, Lucas, Rodrigo, Augusto, Gabrielle e ao José João por deixarem a minha vida repleta de amor e de alegria.

Aos amigos de sala Marcio e Douglas pelas sugestões e contribuições para a realização deste trabalho e principalmente pelos momentos alegres durante o desenvolvimento deste trabalho.

Ao amigo Wellington pela amizade e pela valiosa ajuda durante o desenvolvimento deste trabalho.

Aos amigos Laura, Tânia, Vânia , Agmon e Marcelo pelo convívio e companheirismo durante o tempo de doutorado.

A Roberta, Neale, Rogério, Marcão, Mauricio e Mariu, grandes amigos!!!

Aos amigos e funcionários do Laboratório de Hidráulica Túlio e Gelson pelo companheirismo.

A Débora, Lea, Susana, Rosa e Alberto, grandes amigas surgem quando e onde menos esperamos.

A todos amigos galegos.

A todos aqueles que não foram citados, mas que colaboraram para realização deste trabalho.

À FAPESP – Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo, pelo apoio financeiro.

À Coordenação de aperfeiçoamento de pessoal de nível superior –CAPES, pelo apoio financeiro.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – CNPq, pelo apoio financeiro.

À Coordenadoria de Pós-Graduação da Faculdade de Engenharia Agrícola - Universidade Estadual de Campinas.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS.....	XII
LISTA DE TABELAS.....	XV
1. INTRODUÇÃO GERAL.....	1
2.OBJETIVOS	3
2.1 OBJETIVO GERAL.....	3
2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS	3
CAPÍTULO 1: FUNDAMENTOS TEÓRICOS.....	4
1. DINÂMICA DA ÁGUA NO SOLO.....	4
1.1 CONDUTIVIDADE HIDRÁULICA DO SOLO NÃO SATURADO	7
1.1.1 Modelo de van Genuchten.....	8
1.2 DINÂMICA DE SOLUTOS	10
1.3 APLICAÇÕES DA TEORIA DE CONJUNTOS FUZZY A CIÊNCIA DOS SOLOS	14
1.3.1 Teoria dos Conjuntos Fuzzy.....	14
1.3.2 Operações com Conjuntos Fuzzy.....	15
1.3.2.1 Complementar de um Conjunto Fuzzy	15
1.3.2.2 Interseção de Conjuntos Fuzzy.....	16
1.3.2.3 União de Conjuntos Fuzzy	16
1.3.3 Números Fuzzy.....	17
1.3.3.1 Suporte de um Número Fuzzy	17
1.3.3.2 Números Fuzzy Triangulares.....	18
1.3.3.3 Números Fuzzy Trapezoidais	19
1.3.4 Variáveis Lingüísticas.....	20
1.3.5 Regras Fuzzy.....	20
1.3.6 Controladores Fuzzy.....	21
1.3.7 Modelagem Baseada em Regras Fuzzy.....	22
1.3.8 Modelagem Fuzzy em ambiente MATLAB 6.5	22
2. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	23
CAPITULO 2: DESLOCAMENTO MISCÍVEL E AJUSTE DE PARÂMETROS DE TRANSPORTE DE ÍONS NO SOLO	26
1. RESUMO.....	26
2. INTRODUÇÃO.....	26

3. MATERIAL E MÉTODOS	28
3.1 ESTUDO EXPERIMENTAL DO DESLOCAMENTO MISCÍVEL	28
3.2 AJUSTE DAS CURVAS DE ELUIÇÃO.....	31
3.3 PROPRIEDADES DAS FUNÇÕES DE ERRO E DE ERRO COMPLEMENTAR	33
3.4 AJUSTE DOS PARÂMETROS DE TRANSPORTE DE SOLUTOS NO SOLO.....	34
3.4.1 <i>Método de Mínimos Quadrados</i>	34
3.4.2 <i>Método de Newton para a Resolução de Sistemas Não Lineares</i>	36
3.4.3 <i>Aproximação por Diferenças Finitas</i>	38
3.4.4 <i>Implementação do Modelo para o Ajuste dos Parâmetros de Transporte</i>	41
4. RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	44
5. CONCLUSÃO.....	47
6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	47
CAPITULO 3: REFLECTOMETRIA NO DOMÍNIO DO TEMPO APLICADA AO	
MONITORAMENTO DA DINÂMICA DA ÁGUA E DE SOLUTOS EM COLUNAS DE SOLO NÃO	
SATURADO	
1. RESUMO.....	50
2. INTRODUÇÃO.....	51
3. MATERIAL E MÉTODOS	53
3.1 EXPERIMENTO CONDUZIDO NO LABORATÓRIO DE EDAFOLOGIA - UDC	53
3.1.1 <i>Preenchimento da Coluna de Solo com Estrutura Deformada</i>	57
3.1.2 <i>Amostragem da Coluna de Solo com Estrutura Indeformada</i>	58
3.1.3 <i>Curva de Calibração</i>	60
3.2 EXPERIMENTO CONDUZIDO NO LABORATÓRIO DE HIDRÁULICA - FEAGRI	61
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	65
4.1 RESULTADOS OBTIDOS PELA ETAPA 1	65
4.1.1 <i>Coluna de Solo com Estrutura Deformada</i>	65
4.1.2 <i>Coluna de Solo com Estrutura Indeformada</i>	72
4.2 RESULTADOS OBTIDOS PELA ETAPA 2.....	74
4.2.1 <i>Ajuste da Curva de Calibração</i>	74
4.2.2 <i>Ensaio 1</i>	75
4.2.3 <i>Ensaio 2</i>	81
5. CONCLUSÃO.....	83
6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	84

CAPITULO 4: SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA DINÂMICA DA ÁGUA UTILIZANDO O MODELO COMPUTACIONAL HYDRUS-2D.....	87
1. RESUMO.....	87
2. INTRODUÇÃO.....	88
3. MATERIAL E MÉTODOS.....	89
4. RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	93
5. CONCLUSÃO.....	98
6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	98
CAPITULO 5: USO DA TEORIA DE CONJUNTOS <i>FUZZY</i> NO ESTUDO DA DINÂMICA DE ÁGUA E DE SOLUTO NO SOLO.....	100
1. RESUMO.....	100
2. INTRODUÇÃO.....	101
3. MATERIAL E MÉTODOS.....	103
3.1 CONSTRUÇÃO DO MODELO BASEADO REGRAS <i>FUZZY</i>	103
3.1.1 Conjunto de Treinamento.....	104
3.1.2 Construção da Base de Regras <i>Fuzzy</i>	105
3.1.3 Fuzzificação.....	106
3.1.3.1 Método da Contagem.....	106
3.1.4 Inferência.....	107
3.1.5 Defuzzificação.....	108
3.2 ESTUDO DA DINÂMICA DA ÁGUA ATRAVÉS DO MODELO BASEADO EM REGRAS <i>FUZZY</i>	109
3.3 AVALIAÇÃO DO MODELO BASEADO EM REGRAS <i>FUZZY</i>	112
4. RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	113
4.1 CONSTRUÇÃO DO MBRF.....	113
4.2 VALIDAÇÃO DO MBRF.....	118
5. CONCLUSÕES.....	126
6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	127
CONCLUSÃO GERAL.....	129
ANEXO 1.....	130
ANEXO 2.....	133

LISTA DE FIGURAS

CAPÍTULO 1: FUNDAMENTOS TEÓRICOS

Figura 1: Representação de um número <i>fuzzy</i> triangular.....	18
Figura 2: Representação de um número <i>fuzzy</i> trapezoidal.	19
Figura 3: Configuração de um controlador <i>fuzzy</i>	19

CAPÍTULO 2: DESLOCAMENTO MISCÍVEL E PARÂMETROS DE TRANSPORTE DE ÍONS NO SOLO

Figura 1: Esquema para a obtenção experimental da curva de eluição	28
Figura 2: Coluna de solo com carga constante de água com aplicação simultânea da solução	30
Figura 3: Fluxograma do Algoritmo de busca para o Chute inicial $(R, D)^0$	42
Figura 4: Programa para o ajuste dos parâmetros de transporte R e D.	43
Figura 5: Curva de eluição experimental e ajustadas para o íon nitrato no Experimento 1.	45
Figura 6: Curva de eluição experimental e ajustadas para o íon potássio para o ensaio 1 (A), ensaio 2 (B) e para o ensaio 3 (C).	45
Figura 7: Curvas de eluição do íon potássio ajustadas através do Matlab 6.5 para cada um dos ensaios experimentais.	46

CAPÍTULO 3: REFLECTOMETRIA NO DOMÍNIO DO TEMPO APLICADA AO MONITORAMENTO DA DINÂMICA DA ÁGUA E DE SOLUTOS EM COLUNAS DE SOLO NAO SATURADO

Figura 1: Seção Transversal da coluna em cada ponto de monitoramento	54
Figura 2: Extratores e bomba manual de vácuo utilizados na extração de solução das colunas de solo.....	56
Figura 3: Aparato experimental utilizado nos ensaios com coluna deformada e indeformada.	57
Figura 4: Instalação das sondas de TDR e extratores de solução na coluna deformada.	57
Figura 5: Amostragem da coluna indeformada.	58
Figura 6: Cascalhos presentes no solo encontradas ao longo do processo de amostragem.....	59

Figura 7: Cascalhos coincidentes com o borde da coluna	59
Figura 8: Cascalhos no interior das colunas amostradas.	60
Figura 9: Preenchimento da coluna de solos e instalação dos extratores e das sondas de TDR.	61
Figura 10. Coluna de solo equipada com sondas de TDR, extratores de solução e sistema automatizado para aquisição de dados.....	62
Figura 11: Gotejadores utilizados na aplicação da solução à coluna	63
Figura 12. Sistema para a extração simultânea da solução do solo nos diferentes pontos de monitoramento.....	64
Figura 13: Aberturas na parede da coluna e tubo de PVC utilizados na amostragem de solo nos diferentes pontos de monitoramento.....	64
Figura 14: Valores de K_a e C_e para os pares de sondas posicionados nas profundidades de 10 cm (A), 20 cm (B), 30 cm (C) e 40 cm (D).	65
Figura 15: Valores de K_a e C_e registrados a partir da chegada da frente de molhamento para os pares de sondas posicionados nas profundidades de 10 cm (A), 20 cm (B), 30 cm (C) e 40 cm (D).....	67
Figura 16: comportamento do EQ (θ) em função de K_a	69
Figura 17: Valores médios de θ e C_e em cada uma das profundidades avaliadas.	70
Figura 18: Valores de K_a e C_e registrados a partir da chegada da frente de molhamento para os pares de sondas posicionados nas profundidades de 10 cm (A), 20 cm (B), 30 cm (C) e 40 cm (D).....	72
Figura 19: Dados experimentais, curva de calibração ajustada e curva de calibração.....	75
Figura 20: Valores de K_a e C_e registrados a partir da chegada da frente de molhamento para os pares de sondas posicionados nas profundidades de 15 cm (A), 30 cm (B), 45 cm (C), 60 cm (D) e 75 cm (E).....	76
Figura 21: comportamento do EQ (θ) em função de K_a	78
Figura 22: Valores médios de θ e para C_e , nos diferentes pontos de monitoramento ao longo do ensaio experimental	79
Figura 23: Valores médios de θ e para C_e , nos diferentes pontos de monitoramento ao longo do ensaio experimental	82

CAPÍTULO 4: SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA DINÂMICA DA ÁGUA ATRAVÉS DO MODELO COMPUTACIONAL HYDRUS-2D.

Figura 1: Discretização espacial utilizada na simulação numérica da dinâmica da água através do Hydrus-2D.	90
Figura 2: Modelo utilizado para descrição da curva de retenção	93
Figura 3: Escolha das condições de contorno utilizadas nas simulações	93
Figura 4: Resultados numéricos e experimentais da dinâmica da água no solo (Ensaio 1).	93
Figura 5: Resultados numéricos e experimentais da dinâmica da água no solo a partir do primeiro ponto de monitoramento (Ensaio 1).....	94
Figura 6: Resultados numéricos e experimentais da dinâmica da água no solo a partir do primeiro ponto de monitoramento(Ensaio 2).....	96
Figura 7: Resultados numérico da dinâmica da água no solo e valores de K_a obtidos através da técnica de TDR, nas diferentes profundidade de monitoramento (Ensaio 1).....	97
Figura 8: Resultados numérico da dinâmica da água no solo e valores de K_a obtidos através da técnica de TDR, nas diferentes profundidade de monitoramento (Ensaio 2).....	97

CAPÍTULO 5: USO DA TEORIA DE CONJUNTOS *FUZZY* NO ESTUDO DA DINÂMICA DE ÁGUA E DE SOLUTO NO SOLO

Figura 1: Fluxograma do modelo baseado em regras <i>fuzzy</i> proposto.....	111
Figura 2: Fluxograma da sub-rotina do modelo baseado em regras <i>fuzzy</i> proposto.....	112
Figura 3: Conjunto de treinamento utilizado na construção do MBRF.....	113
Figura 4: Gradientes de umidade entre os pares de pontos sobrepostos.	114
Figura 5: <i>Fuzzificação</i> da variável de entrada.	115
Figura 6: Comparação do MBRF e do HYDRUS_2D na simulação da dinâmica da água no solo, sob diferentes vazões de gotejamento.....	119
Figura7: Umidade volumétrica e concentração de potássio experimentais (Ensaio 1) e simulados através do MBRF.	122
Figura 8: Umidade volumétrica e concentração de potássio experimentais (Ensaio 2) e simulados através do MBRF.	125

LISTA DE TABELAS

CAPÍTULO 2: DESLOCAMENTO MISCÍVEL E PARÂMETROS DE TRANSPORTE DE ÍONS NO SOLO

Tabela 1: Parâmetros físico-hídrico do solo utilizado.....	29
Tabela 2 : Parâmetros de Transporte e EQM – Experimento 1.....	44
Tabela 3: Parâmetros de Transporte e EQM – Experimento 2.....	44

CAPÍTULO 3: REFLECTOMETRIA NO DOMÍNIO DO TEMPO APLICADA AO MONITORAMENTO DA DINÂMICA DA ÁGUA E DE SOLUTOS EM COLUNAS DE SOLO NAO SATURADO

Tabela 1: Características físico-hídricas do solo utilizado na Etapa 1.	54
Tabela 2: Características físico– hídricas do solo utilizado na Etapa 2.....	61
Tabela 3:Valores máximos, mínimos e EQM de K_a , θ e C_e paras os pares de sonda posicionados em cada ponto de observação.	68
Tabela 4: Umidades e as concentrações de nitrato nas amostras da solução do solo retiradas pelos extratores de solução nos diferentes pontos de monitoramento.....	71
Tabela 5: Valores máximos, mínimos e EQM de K_a , θ e C_e paras os pares de sonda posicionados em cada ponto de observação.	73
Tabela 6: Valores máximos, mínimos e EQM de K_a , θ e C_e paras os pares de sonda posicionados em cada um dos 5 pontos de observação.	77
Tabela 7: Umidades e as concentrações de potássio nas amostras da solução do solo retiradas pelos extratores de solução nos diferentes pontos de monitoramento.....	80
Tabela 8: Valores máximos, mínimos e EQM de K_a , θ e C_e paras os pares de sonda posicionados em cada um dos pontos de observação.	81
Tabela 9: Umidades e as concentrações de potássio nas amostras da solução do solo retiradas pelos extratores de solução nos diferentes pontos de monitoramento.....	83

CAPÍTULO 4: SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA DINÂMICA DA ÁGUA ATRAVÉS DO MODELO COMPUTACIONAL HYDRUS-2D.

Tabela 1: Parâmetros da curva de retenção	91
Tabela 2: Características físico-hídricas do solo submetido à simulação.	92

CAPÍTULO 5: USO DA TEORIA DE CONJUNTOS *FUZZY* NO ESTUDO DA DINÂMICA DE ÁGUA E DE SOLUTO NO SOLO

Tabela 1: Características físico- hídricas do solo utilizado na Etapa 2.....	104
Tabela 2: Parâmetros da curva de Retenção utilizados	104
Tabela 3: Valores de umidade volumétrica simulados pelo MBRF, obtidos experimentalmente no Ensaio 1 e respectivos erros respectivos erros relativos (ER).....	121
Tabela 4: Concentrações de Potássio simuladas pelo MBRF, obtidas experimentalmente no Ensaio 1 e respectivos erros relativos (ER).....	121
Tabela 5: Valores de umidade volumétrica simulados pelo MBRF, obtidos experimentalmente no Ensaio 2 e respectivos erros relativos (ER).....	124
Tabela 6: Concentrações de Potássio simuladas pelo MBRF, obtidas experimentalmente no Ensaio 2 e respectivos erros relativos (ER).....	124

RESUMO

Conhecer a dinâmica da água e de solutos no solo é condição imprescindível para a produção agrícola sustentável. O sucesso destes modelos numéricos em descrever a dinâmica da água e de solutos no solo está intimamente ligado à precisão com que os parâmetros físico-hídricos, envolvidos nestes processos são determinados. De uma maneira geral, a determinação dos parâmetros de transporte de íons no solo esta associado ao ajuste de modelos teóricos a dados associados a ensaios experimentais de deslocamento miscível. Tal procedimento além dos erros numéricos associados ao ajuste destes parâmetros, também é susceptível a erros experimentais. Sendo assim, mostra-se necessário a proposição de técnicas de modelagem que incorporem, de maneira apropriada as imprecisões intrínsecas ao estudo experimental da dinâmica da água e de soluto no solo. Neste sentido, este trabalho teve como objetivo avaliar o potencial do uso da lógica *fuzzy*, sobretudo de um modelo baseado em regras *fuzzy* (MBRF), na simulação numérica destes processos. A utilização da teoria dos conjuntos *fuzzy* é vantajosa à medida que permite que as incertezas envolvidas na dinâmica da água e de solutos no solo sejam absorvidas pela utilização de conjuntos de regras. A base de regras foi construída a partir de um conjunto de dados teóricos, denominado conjunto de treinamento, obtido a partir da simulação numérica das Equações Diferenciais Parciais que regem as dinâmicas da água no solo. O conjunto de treinamento foi obtido utilizando-se o modelo computacional Hydrus-2D. A construção do MBRF, utilizado para descrever a dinâmica da água no solo na direção vertical foi feita utilizando-se o ambiente computacional MATLAB 6.5. Paralelamente a modelagem da dinâmica da água, o estudo do transporte de potássio no solo foi feito considerando-se apenas o fluxo de massa. Os resultados obtidos pelo MBRF foram comparados com resultados obtidos no estudo experimental da dinâmica da água e de solutos em colunas verticais de solo equipadas com sondas de TDR e extratores de solução. Face aos resultados obtidos, pode-se concluir que, neste trabalho, muito embora os resultados apresentados pelo MBRF na simulação da dinâmica de água e de solutos no solo tenham sido apenas razoáveis, o uso da teoria de conjuntos *fuzzy* aplicada ao estudo destes processos, devido a sua simplicidade de formulação e interpretação, apresentou-se como uma importante ferramenta para auxiliar na tomada de decisão de processos que busquem o uso racional da água e do solo nas atividades agrícolas.

ABSTRACT

To know the water and solute dynamics is a indispensable condition for the sustainable agricultural production. The numeric models success in describe those processes is intimately linked to the precision with the physical- hydric parameters involved in these processes are determineted. In a general way, the determination of the ions transport parameters are obtained by the adjustment of theoretical models to experimental data of miscible displacement studies. Such procedure, besides numerical mistakes, associated to the adjustment of these parameters, is also associated to experimental errors. In this way, the proposition of modeling techniques that incorporate, in an appropriate way, those intrinsic imprecisions are necessary. For this reason, this work's goal is evaluate the rule based *fuzzy* model's (RBFM) potential in the numeric simulation of these processes. The use of the *fuzzy* theory is advantageous once it allows to incorporate the uncertainties involved in the soil water and solutes dynamics using a set of rules. The base of rules was built using a set of theoretical data, denominated training set, obtained by the numeric simulation of the Equations that govern the water dynamics in the soil profile. The training set was obtained using the computational model Hydrus-2D. The construction of the RBFM, used to describe the vertical water dynamics, was done the computational software MATLAB 6.5. Parallel to the water dynamics modeling, a potassium transport study was made considering just the mass flow process. The results obtained with RBFM were compared with experimental data obtained in study of the water and solute dynamics in a vertical soil column, equipped with TDR probes and solution extractors. Face to the obtained results, it can be concluded that, in this work, the presented RBFM wasn't very efficient in describe water and solute dynamics the dynamics. In the other hands, apart of those results, the development of this modeling technique showed a great potential in the soils water and solute dynamics, reinforcing the importance of more investigations in this way.

1. INTRODUÇÃO GERAL

A manutenção da produtividade agrícola em níveis elevados, a fim de se atender a crescente demanda por alimentos, é um dos grandes desafios da atualidade. Neste sentido a utilização de produtos químicos, defensivos agrícolas e fertilizantes, assim como o consumo de água vem se intensificando cada vez mais nas atividades agrícolas.

O transporte destes produtos químicos no solo através da água, para regiões localizadas abaixo do sistema radicular, além de caracterizar um prejuízo econômico, pode comprometer a qualidade da água dos aquíferos subterrâneos. Sendo assim, conhecer as dinâmicas de água e de solutos no solo não saturado é muito importante para a proposição de técnicas e medidas que, além de ganhos econômicos, viabilizem a exploração racional e a preservação dos recursos hídricos.

A dinâmica da água e de solutos no solo está intimamente ligada a parâmetros físico-hídricos do solo, como o potencial mátrico e a condutividade hidráulica. Devido a dificuldades de se avaliar experimentalmente estes parâmetros a utilização de modelos matemáticos mostra-se vantajosa pela rapidez e, em geral, pela precisão dos resultados obtidos.

Matematicamente, a dinâmica da água e de solutos no solo é descrita por meio de Equações Diferenciais Parciais (EDP) não lineares. Tais equações não admitem soluções analíticas. Sendo assim, têm sido o objetivo de muitas pesquisas a proposição e a utilização de métodos numéricos para se obter soluções aproximadas para essas equações.

O sucesso dos modelos numéricos em descrever a dinâmica da água e de solutos no solo está intimamente ligado à precisão com que os parâmetros físico-hídricos que regem esses processos são determinados. Esse tem sido o grande desafio no uso desta metodologia, uma vez que, em geral, tais parâmetros são difíceis de serem determinados e apresentam uma grande variabilidade espacial no solo. Dessa forma, mostra-se necessário à proposição e a utilização de metodologias que se incorporem, de maneira apropriada, as incertezas intrínsecas ao deslocamento da água e de solutos no solo.

Sendo assim, este trabalho teve como objetivo avaliar o potencial da utilização de um modelo baseado em regras *fuzzy*, no estudo da dinâmica da água e de solutos no solo. Para tanto, buscando-se um melhor esclarecimento de todos os procedimentos experimentais e numéricos envolvidos no estudo da dinâmica da água e de soluto no solo proposta neste

trabalho, o mesmo é apresentado em 5 capítulos. Desta forma, este trabalho apresenta-se dividido da seguinte forma:

CAPÍTULO 1: Revisão Bibliográfica

CAPITULO 2: Deslocamento miscível e ajuste de parâmetros de transporte de íons no solo

CAPITULO 3: Reflectometria no domínio do tempo aplicada ao monitoramento da dinâmica da água e de solutos em colunas de solo não saturado

CAPITULO 4: Simulação numérica da dinâmica da água utilizando o modelo computacional Hydrus-2D;

CAPITULO 5: Uso da teoria de conjuntos *fuzzy* no estudo da dinâmica de água e de soluto no solo.

2. OBJETIVOS

2.1 Objetivo Geral

Este trabalho tem como objetivo utilizar a teoria dos conjuntos *fuzzy* no estudo da dinâmica da água e de solutos em colunas de solo não saturado na direção vertical. Para tanto se mostra necessário o cumprimento dos passos descritos no item 2.2

2.2 Objetivos Específicos

1. Conhecer os procedimentos experimentais e numéricos envolvidos no ajuste dos parâmetros de transporte de íons no solo (Capítulo 2);
2. Avaliar, em laboratório, a dinâmica da água e de solutos em colunas de solo não saturado equipada com sondas de TDR e com extratores de solução(Capítulo 3);
3. Utilizar o modelo computacional Hydrus-2D para simular numericamente a dinâmica de água no solo (Capítulo 4);
4. Construir um modelo baseado em regras *fuzzy* e comparar os resultados simulados com dados experimentais da dinâmica da água e de solutos no solo na direção vertical (Capítulo 5);

CAPÍTULO 1: FUNDAMENTOS TEÓRICOS

Com o objetivo de dar suporte aos demais capítulos deste trabalho, no que se segue são apresentadas as fundamentações teóricas associadas à dinâmica da água e de solutos no solo e à Lógica *Fuzzy*.

1. Dinâmica da Água no Solo

A água movimenta-se das regiões de maior potencial para as zonas de menor potencial, desta forma, quando a superfície de solo recebe água pela chuva ou irrigação, esta água movimenta-se no sentido vertical de cima para baixo atingindo as camadas mais profundas. Quando cessa a chuva ou o processo de irrigação é interrompido, a água continua a se redistribuir dentro da matriz do solo, este processo é muito importante uma vez que, juntamente com a evapotranspiração, está intimamente relacionado com a variação do volume de água armazenado no solo (REICHARDT, 1990).

De acordo com LIBARDI (1995), o primeiro modelo matemático utilizado para quantificar o fluxo de um líquido em um meio poroso foi proposto por Henry Darcy em 1856. Este modelo, que descreve a dinâmica de um líquido em um meio poroso saturado, ficou conhecido como Lei de Darcy (Equação 1). O sinal negativo que aparece na Equação 1 deve-se ao fato de que o sentido da densidade de fluxo é oposto ao do gradiente de potencial.

$$\vec{q} = -K_0 \frac{d\phi_t}{dz} \quad (1)$$

em que:

- q = densidade de fluxo de água no solo (LT^{-1});
- K_0 = condutividade hidráulica do solo saturado (LT^{-1});
- ϕ_t = potencial total da água no solo (L);
- z = coordenada vertical de posição (L).

Em 1907, Buckingham propôs o primeiro modelo para quantificar o movimento de uma solução em condição de solo não saturado. Foi Buckingham quem introduziu na ciência

do solo a idéia de que, tanto o potencial mátrico quanto a condutividade hidráulica, estão relacionados com o teor de água no solo. No entanto, como pode ser observado na Equação 2, o modelo proposto por Buckingham despreza o efeito da gravidade.

$$q = -K(\theta) \frac{\partial \phi_m(\theta)}{\partial z} \quad (2)$$

em que:

- q = densidade de fluxo de água no solo (LT^{-1});
- θ = umidade volumétrica do solo (L^3L^{-3});
- $K(\theta)$ = condutividade hidráulica do solo (LT^{-1});
- $\phi_m(\theta)$ = potencial mátrico da água no solo (L);
- z = coordenada vertical de posição (L).

Em 1928, Richards incorporou ao modelo de Buckingham o efeito da gravidade, obtendo-se assim a Equação 3, denominada Equação de Darcy - Buckingham.

$$\vec{q} = -K(\theta) \frac{\partial \vec{\phi}_t(\theta)}{\partial z} \quad (3)$$

onde:

ϕ_t = potencial total da água no solo(L);

Para solos indeformáveis não saturados:

$$\phi_t = \phi_m(\theta) + \phi_z \quad (4)$$

onde:

ϕ_z = potencial gravitacional da água no solo (L).

A Equação da continuidade estabelece que não pode haver criação nem destruição de massa, sendo assim, analisando-se a Equação 5 verifica-se que a variação da umidade em um determinado volume de solo pode ser obtida pela diferença entre a densidade do fluxo que entra através de uma das extremidades deste volume e a densidade de fluxo que sai pela outra extremidade.

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{q} \quad (5)$$

em que:

θ = umidade volumétrica do solo (L^3L^{-3});

q = densidade de fluxo da água no solo (LT^{-1});

t = tempo (T)

Desdobrando-se a Equação (5), segue-se, imediatamente, que:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\left(\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z} \right) \quad (6)$$

em que:

θ = umidade volumétrica (L^3L^{-3});

q_x = densidade de fluxo horizontal da água no solo na direção x (LT^{-1});

q_y = densidade de fluxo horizontal na direção da água no solo y (LT^{-1});

q_z = densidade de fluxo vertical da água no solo na direção z (LT^{-1});

t = tempo (T)

A Equação 3, descrita anteriormente, descreve a densidade de fluxo de um líquido em um meio poroso sob regime estacionário, isto é, as características do fluxo não variam com o tempo, o que não é muito realístico. Sendo assim, em 1931, combinando a Equação da continuidade (Equação 6) com a Equação de Darcy Buckingham (Equação 3), Richards apresentou a equação geral do movimento de um líquido em um meio poroso não saturado e não expansivo (Equação 7), que ficou conhecida como Equação de Richards.

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[K(\theta) \frac{\partial \phi_m}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[K(\theta) \frac{\partial \phi_m}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[K(\theta) \frac{\partial \phi_m}{\partial z} \right] + \frac{\partial K(\theta)}{\partial z} \quad (7)$$

onde:

θ = umidade volumétrica do solo (L^3L^{-3});

t = tempo (T);

$K(\theta)$ = condutividade hidráulica do solo (LT^{-1});

ϕ_m = potencial mátrico da água no solo (L);

q_x = densidade de fluxo horizontal da água no solo na direção x (LT^{-1});

q_y = densidade de fluxo horizontal da água no solo na direção y (LT^{-1});

q_z = densidade de fluxo vertical da água no solo na direção z (LT^{-1});

A Equação de Richards (Equação 7), descreve a dinâmica tridimensional da água no solo. Entretanto, o interesse da presente pesquisa restringe-se a estudar a dinâmica da água no solo na direção vertical. Para tanto considerar-se-á somente a dinâmica da água ao longo da coordenada vertical z. Neste caso, a Equação de Richards pode ser simplificada, resultando na Equação 8:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K(\theta) \frac{\partial \phi_m}{\partial z} \right] + \frac{\partial K(\theta)}{\partial z} \quad (8)$$

1.1 Condutividade Hidráulica do Solo Não Saturado

Como pode ser observado nas Equações 7 e 8, a dinâmica da água no solo está intimamente ligada a parâmetros físico-hídricos do solo, como o potencial mátrico e a condutividade hidráulica. A determinação destes parâmetros, principalmente da condutividade hidráulica no solo não saturado, devido ao seu comportamento não linear em função da umidade, representa uma das maiores dificuldades no estudo deste fenômeno (PREVEDELLO, 1987), (COSTA, 1998) e (STEPHENS e REHFELDT, 1985).

Segundo LIBARDI (1995), a condutividade hidráulica, $K(\theta)$, pode ser entendida como um parâmetro que descreve a intensidade com que a água é transportada através do solo. Sendo assim, segundo o mesmo autor, além de depender da quantidade de água, a condutividade hidráulica está relacionada com todas as propriedades que tem reflexo na geometria porosa do solo.

A principal diferença do escoamento em meio saturado e não saturado deve-se à condutividade hidráulica. Quando o solo está saturado, todos os seus poros estão preenchidos com água e, neste caso, a condutividade hidráulica assume o seu valor máximo, sendo

denominada condutividade hidráulica saturada (K_0). A medida em que a umidade do solo diminui, os seus poros são preenchidos por “ar”, o valor da condutividade hidráulica decresce rapidamente (LIBARDI, 1995) e (REICHARDT, 1990).

A condutividade hidráulica do solo pode ser medida experimentalmente, mediante métodos de laboratório ou de campo. Dentre os métodos de laboratório destacam-se os dos permeâmetros de carga constante e de carga decrescente. Dentre os métodos de campo destaca-se o método do perfil instantâneo (CARVALHO, 2002).

Segundo STEPHENS e REHFELDT (1985), nos estudos da condutividade hidráulica, um grande esforço vem sendo despendido para a sua determinação a partir de características físico-hídricas mais fáceis de serem medidas, uma vez que sua determinação experimental é difícil e demanda muito tempo e dinheiro.

Sendo assim, muitos métodos vêm sendo propostos para o cálculo teórico da condutividade hidráulica não saturada, dentre eles destaca-se o modelo proposto por van Genuchten (CARVALHO, 2002), (COSTA,1998), (PREVEDELLO, 1987) e (PAULLETO, 1986). Sendo assim, devido a sua importância, no que segue, este método será discutido com mais detalhes.

1.1.1 Modelo de van Genuchten

Em seu trabalho, van GENUCHTEN (1980), apresenta uma forma analítica para a determinação da condutividade hidráulica relativa ($K_r = K(\theta)/K_0$), baseada na curva de retenção de água no solo e no modelo de MUALEM (1976). Pelo método de mínimos quadrados é feito um ajuste dos parâmetros das equações não lineares propostas por este autor. Após este ajuste, estas equações podem ser utilizadas para determinar as relações entre o potencial mátrico, ϕ_m , e entre a condutividade hidráulica.

Van Genutchen e Nielsen (citados por PAULETTO, 1986), afirmam que, dentre os modelos mais utilizados para a determinação da condutividade hidráulica não saturada, o modelo proposto por van GENUCHTEN (1980) é o que apresentou maior validade para a maioria dos solos estudados.

No Brasil, o modelo proposto por van GENUCHTEN (1980), vem sendo utilizado no cálculo da condutividade hidráulica de solos com diferentes texturas, como é o caso de MIRANDA (2001), COSTA (1998), entre outros.

Sendo assim, no que segue, é apresentada uma discussão mais detalhada deste modelo. van GENUCHTEN (1980), propõe a seguinte relação entre a umidade do solo e o potencial mátrico, Equação 10:

$$\theta = \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{\left[1 + |\alpha \phi_m|^n\right]^m} \quad (10)$$

onde:

θ = umidade volumétrica do solo ($L^3 L^{-3}$);

θ_r = umidade volumétrica residual do solo ($L^3 L^{-3}$);

θ_s = umidade volumétrica saturada do solo ($L^3 L^{-3}$);

ϕ_m = potencial mátrico da água no solo (L);

α = constante empírica (L^{-1});

m = constante empírica (adimensional);

n = constante empírica (adimensional);

$$m = 1 - \frac{1}{n}$$

Combinando-se a Equação 10 com o modelo de MUALEM (1976), van GENUCHTEN (1980) propõe a seguinte expressão:

$$K(\omega) = K_0 \omega^l \left[1 - \left(1 - \omega^{\frac{1}{m}} \right)^m \right]^2 \quad (11)$$

onde:

$K(\omega)$ = condutividade hidráulica do solo (LT^{-1});

K_0 = condutividade hidráulica do solo saturado (LT^{-1});

m = constante empírica (adimensional);

ϑ = constante empírica (segundo MUALEM (1976), para a maioria dos solos $l = 0,5$);

ω = saturação efetiva (adimensional)

sendo:

$$\omega = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \quad (12)$$

Na Equação 11 a condutividade hidráulica é descrita em função da umidade do solo $K(\theta)$, por outro lado, conforme o interesse, a condutividade hidráulica, a partir de manipulações algébricas das Equações 10 e 11, pode ser descrita em função do potencial mátrico, $K(\phi_m)$ conforme aparece na Equação 13.

$$K(\phi_m) = \frac{\left(1 - \left(\frac{\phi_m}{h_\alpha} \right)^{n-1} \left[1 + \left(\frac{\phi_m}{h_\alpha} \right)^n \right]^{-m} \right)^2}{\left[1 + \left(\frac{\phi_m}{h_\alpha} \right)^n \right]^{m/2}} \quad (13)$$

onde:

$$h_\alpha = \frac{1}{\alpha} \quad (L)$$

1.2 Dinâmica de Solutos

As considerações realizadas nesta seção serão feitas com base nas leituras dos trabalhos de RIVERA (2004), MIRANDA (2001) e COSTA (1998).

O movimento dos solutos no solo deve-se ao movimento de água no solo, aos gradientes de sua concentração na solução do solo e de sua interação com a matriz do solo. Sendo assim, no geral, nos modelos matemáticos que buscam descrever o transporte dos solutos no solo, os parâmetros mais importantes são o fluxo do fluido, o coeficiente de dispersão e o de adsorção ou troca.

O fluxo de massa ou transporte convectivo refere-se ao movimento dos solutos veiculados pela água. Na ausência de difusão, a água e os íons dissolvidos movem-se na mesma taxa. O fluxo de massa pode ser descrito matematicamente pela Equação 14.

$$J_m = q C \quad (14)$$

onde:

J_m = fluxo de massa do soluto no solo ($M L^{-2} T^{-1}$);

q = fluxo de água ($L T^{-1}$);

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

A difusão é um processo espontâneo, resultante do movimento térmico natural de moléculas e íons em solução. Nos solos, este processo tende a diminuir os gradientes de concentração e, em analogia à lei de Fick, pode ser descrito matematicamente na direção vertical, pela da Equação 15.

$$J_d = -\theta D_m \frac{\partial C}{\partial z} \quad (15)$$

onde:

J_d = fluxo de difusão do soluto no solo ($M L^{-2} T^{-1}$);

θ = umidade volumétrica do solo ($L^3 L^{-3}$);

D_m = coeficiente de difusão molecular do soluto na solução do solo ($L^2 T^{-1}$);

z = coordenada vertical de posição (L).

Devido ao caminho tortuoso percorrido pelo fluxo da solução do solo, o valor de D_m no solo é menor que o coeficiente de difusão em água pura (D_0), sendo determinado pela Equação 16.

$$D_m = D_0 \tau \quad (16)$$

onde:

D_m = coeficiente de difusão molecular do soluto na solução do solo ($L^2 T^{-1}$);

D_0 = coeficiente de difusão molecular do soluto em água pura ($L^2 T^{-1}$);

τ = fator de tortuosidade (adimensional).

O processo de dispersão deve-se a variações na velocidade do fluido dentro de cada poro e entre os poros de diferentes formas e tamanhos. Estas variações, causadas tanto pela resistência da matriz do solo quanto pelo avanço da frente de molhamento, fazem com que a movimentação do soluto ocorra sob diferentes taxas.

Macroscopicamente a mistura física causada pela dispersão é semelhante à mistura química causada pela difusão, entretanto, ao contrário da difusão, o processo de dispersão ocorre apenas quando há movimentação da solução. Matematicamente o processo de dispersão é descrito pela Equação 17.

$$J_h = -\theta D_h \frac{\partial C}{\partial z} \quad (17)$$

onde:

J_h = fluxo de dispersão do soluto no solo ($M L^{-2} T^{-1}$);

D_h = coeficiente de dispersão mecânica do soluto na solução do solo ($L^2 T^{-1}$).

Geralmente, o coeficiente de dispersão é assumido como sendo uma função da velocidade do fluido. O valor deste coeficiente pode ser obtido pela relação entre o fluxo de água no solo e a umidade volumétrica, como mostra a Equação 18.

$$D_h = \lambda v^n \quad (18)$$

onde:

λ = dispersividade do meio poroso (L);

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

n = constante empírica (adimensional).

Devido a dificuldade de se isolar os efeitos da difusão e da dispersão, freqüentemente os coeficientes D_m e D_h são considerados aditivos e ao resultados dá-se o nome de coeficiente de dispersão-difusão ou coeficiente de dispersão hidrodinâmico.

$$D = D_m + D_h \quad (19)$$

onde:

D = coeficiente de dispersão hidrodinâmica longitudinal ($L^2 T^{-1}$);

Combinando-se as Equações 14, 15, 17 e 19, obtém-se a Equação que descreve o fluxo de solutos no solo, Equação 20.

$$J_s = -\theta D \frac{\partial C}{\partial z} + q C \quad (20)$$

onde:

J_s = fluxo de solutos no solo ($M L^{-2} T^{-1}$);

Substituindo-se a Equação 20 na Equação da Continuidade, obtém-se, para a direção vertical, a Equação 21.

$$\frac{\partial(\theta C + \rho S)}{\partial t} = -\frac{\partial J_s}{\partial z} \quad (21)$$

onde:

ρ = densidade do solo ($M L^{-3}$)

S = concentração adsorvida ($M(\text{solutos}) M^{-1}(\text{solo})$)

Sendo assim, o transporte de solutos é descrita pela Equação 22.

$$\frac{\partial(\theta C + \rho S)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\theta D \frac{\partial C}{\partial z} - q C \right) \quad (22)$$

Para linearizar a adsorção e o fluxo dinâmico de água em um perfil de solo homogêneo, assume-se que θ e q são constantes no tempo e no espaço e, a partir da Equação 22, obtém-se a Equação 23.

$$R \frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v \frac{\partial C}{\partial z} \quad (23)$$

Sendo:

$$R = 1 + \frac{\rho k}{\theta} \quad (24)$$

onde:

R = fator de retardamento (-);

k = coeficiente empírico de distribuição ($\text{cm}^3 \text{g}^{-1}$).

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

1.3 Aplicações da Teoria de Conjuntos *Fuzzy* a Ciência dos Solos

A teoria de conjuntos *fuzzy*, proposta por ZADEH (1965), pode ser considerada como uma generalização da teoria de conjuntos clássica e surge como uma ferramenta que flexibiliza a utilização da matemática. Segundo MCBRATNEY e ODEH (1997) existe uma grande aplicabilidade de lógica *fuzzy* dentro das Ciências do Solo. Dentre as possíveis aplicações, os mesmos autores citam como exemplos a conciliação a técnicas de geoestatística, à criação de índices de qualidade do solo e à aplicação na modelagem matemática e simulação numérica de processo físicos no solo. Sendo assim, devido ao potencial do uso desta ferramenta, sobretudo no estudo da dinâmica da água e de solutos no solo, serão apresentados a seguir, de uma maneira geral, algumas definições e propriedades associadas à teoria de conjuntos *fuzzy*.

1.3.1 Teoria dos Conjuntos *Fuzzy*

O conceito de conjuntos *fuzzy* foi criado em 1965 por Loft Zadeh. De acordo com ZADEH (1965) um conjunto *fuzzy* é caracterizado por uma função que atribui graus de pertinência a cada um dos seus elementos. A função de pertinência assume valores dentro do intervalo [0,1]. Formalmente, dado um conjunto universo U, A é considerado um subconjunto

fuzzy de U se A é representada por um conjunto de pares ordenados como os que aparecem na Equação 25.

$$A = \{(x, \mu_A(x)); x \in U \mu_A(x) \in [0,1]\} \quad (25)$$

onde:

$\mu_A(x)$ é a função de pertinência que determina com que grau $x \in A$.

Sendo assim, ao contrário da teoria de conjuntos clássica, na qual a função de pertinência assume apenas os valores **zero**, indicando que o elemento não pertence ao conjunto, ou **um**, indicando que o elemento pertence totalmente ao conjunto, na teoria de conjuntos *fuzzy*, os elementos podem estar associados a graus de pertinência entre **zero** e **um** indicando que os mesmos podem pertencer parcialmente a um conjunto. Sendo assim, surge a necessidade de se determinar, através do valor assumido pela função de pertinência, o grau com que os elementos pertencem a um dado conjunto.

Segundo BARDOSSY e DUCKSTEIN (1995), de acordo com as características do conjunto U, os conjuntos *fuzzy* podem ser representados de duas formas distintas: atribuindo-se diretamente a cada elemento de U um grau de pertinência ou definindo-se uma função, a partir da qual, os graus de pertinência podem ser calculados. A primeira forma de representação é apropriada nos casos em que U é um conjunto discreto e a segunda forma é mais utilizada nos casos em que U é um conjunto contínuo.

1.3.2 Operações com Conjuntos *Fuzzy*

Existem distintas maneiras de se definir operações como a interseção e a união entre os conjuntos *fuzzy*. No que se segue é apresentada a forma clássica, proposta por ZADEH (1965), de se realizar tais operações.

1.3.2.1 Complementar de um Conjunto *Fuzzy*

A função de pertinência do complemento $C = A^c$ do conjunto *fuzzy* A é definida segundo a Equação 26.

$$\mu_C(x) = 1 - \mu_A(x) \quad (26)$$

onde:

$\mu_C(x)$ = função de pertinência que determina com que grau $x \in C$;

$\mu_A(x)$ = função de pertinência que determina com que grau $x \in A$.

1.3.2.2 Interseção de Conjuntos *Fuzzy*

A função de pertinência da interseção $D = A \cap B$ de dois conjuntos *fuzzy* A e B é definida pela Equação 27.

$$\mu_D(x) = \min(\mu_A(x), \mu_B(x)) \quad (27)$$

onde:

$\mu_D(x)$ = função de pertinência que determina com que grau $x \in D$;

$\mu_A(x)$ = função de pertinência que determina com que grau $x \in A$;

$\mu_B(x)$ = função de pertinência que determina com que grau $x \in B$;

$\min(\mu_A(x), \mu_B(x))$ = mínimo de $\mu_A(x)$ e $\mu_B(x)$.

1.3.2.3 União de Conjuntos *Fuzzy*

A função de pertinência da união $E = A \cup B$ de dois conjuntos *fuzzy* A e B é definida pela Equação 28.

$$\mu_E(x) = \max(\mu_A(x), \mu_B(x)) \quad (28)$$

onde:

$\mu_E(x)$ = função de pertinência que determina com que grau $x \in E$;

$\mu_A(x)$ = função de pertinência que determina com que grau $x \in A$;

$\mu_B(x)$ = função de pertinência que determina com que grau $x \in B$;

$\max(\mu_A(x), \mu_B(x))$ = máximo de $\mu_A(x)$ e $\mu_B(x)$.

1.3.3 Números *Fuzzy*

Um subconjunto *fuzzy* dos números reais é denominado como número *fuzzy* se:

1. Existe pelo menos um número Real z tal que:

$$\mu_A(z) = 1 \quad (29)$$

2. Para toda seqüência de números Reais (a, b, c) , com $a < c < b$,

$$\mu_C(x) \geq \min(\mu_A(x), \mu_B(x)) \quad (30)$$

A propriedade descrita pela Equação 29, conhecida como normalidade, exige que pelo menos um elemento pertença “completamente” ao conjunto A . Já a condição discreta pela Equação 30, exige que a função de pertinência $\mu_A(x)$ seja convexa.

De acordo com PEDRYCZ e GOMIDE (1998), qualquer função que satisfaça as condições descritas pelas Equações 29 e 30 pode ser tomada com função de pertinência de um número *fuzzy*, entretanto, além de satisfazer tais condições, a escolha de uma função de pertinência deve levar em conta o contexto em que esta será utilizada. Os formatos mais comumente utilizados para as funções de pertinência são os triangulares e os trapezoidais.

1.3.3.1 Suporte de um Número *Fuzzy*

O suporte de um número *fuzzy* A , é definido por um intervalo dentro do qual a função de pertinência assume valores diferentes de zero, matematicamente:

$$Supp(A) = \{x; \mu_A(x) > 0\} \quad (31)$$

Sendo assim, de acordo com as Equações 29, 30 e 31, qualquer número real pode ser descrito como um número *fuzzy* cujo suporte é ele mesmo. Esta representação de um número Real através de um número *fuzzy* é denominada como número *crisp*.

1.3.3.2 Números *Fuzzy* Triangulares

Os números *fuzzy* triangulares são baseados em funções de pertinência triangulares caracterizadas por três pontos (\mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c}), onde \mathbf{a} e \mathbf{c} determinam o suporte, e \mathbf{b} é o ponto onde a função de pertinência é igual a um. A Figura 1 Apresenta uma representação de um número *fuzzy* triangular.

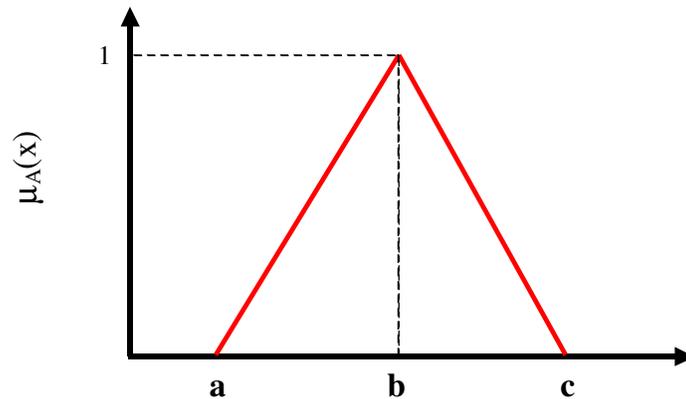


Figura 1: Representação de um número *fuzzy* triangular.

Um número *fuzzy* triangular pode ser descrito, matematicamente, segundo a Equação 32:

$$\mu_A(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } x \leq a \\ \frac{x-a}{b-a} & \text{se } a < x \leq b \\ \frac{c-x}{c-b} & \text{se } b < x \leq c \\ 0 & \text{se } c < x \end{cases} \quad (32)$$

ou , resumidamente, como aparece na Equação 33.

$$A = (a, b, c)_T \quad (33)$$

1.3.3 Números *Fuzzy* Trapezoidais

Os números *fuzzy* trapezoidais são baseados em funções de pertinência trapezoidais caracterizadas por quatro pontos, a , b , c e d , onde a e d determinam o suporte e b e c determinam o intervalo dentro do qual a função de pertinência assume valor igual a “1”.

A Figura 2 exibe uma função de Pertinência trapezoidal onde são destacados os pontos a , b , c e d .

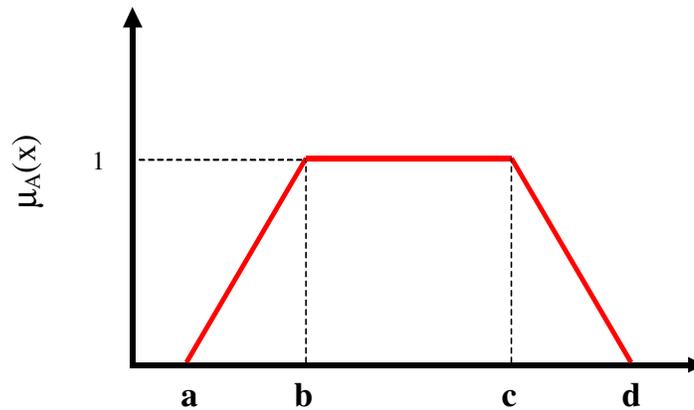


Figura 2: Representação de um número *fuzzy* trapezoidal.

Um número *fuzzy* trapezoidal pode ser descrito, matematicamente, segundo a Equação 34:

$$\mu_A(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } x \leq a \\ \frac{x-a}{b-a} & \text{se } a < x \leq b \\ 1 & \text{se } b \leq x \leq c \\ \frac{d-x}{d-c} & \text{se } c < x \leq d \\ 0 & \text{se } d < x \end{cases} \quad (34)$$

ou, resumidamente, como aparece na Equação 35.

$$A = (a, b, c, d)_R \quad (35)$$

1.3.4 Variáveis Lingüísticas

As variáveis lingüísticas são variáveis cujos valores são palavras, frases e/ou expressões. Frequentemente o conhecimento a respeito de um determinado fenômeno é expresso de forma imprecisa pela utilização de variáveis lingüísticas. Em geral, este tipo de conhecimento não é apropriado para ser processado em computadores, uma vez que, estes operam apenas com informações precisas, geralmente numéricas. Sendo assim mostra-se necessário uma transformação capaz de expressar de forma numérica a imprecisão contida nas informações verbais. Esta transformação é facilmente obtida pela associação dos valores das variáveis lingüísticas a conjuntos *fuzzy* (BARDOSSY e DUCKSTEIN, 1995).

De acordo com BARROS e BASSANEZI (2001), a associação de variáveis lingüísticas a conjuntos *fuzzy* permite que o computador realize cálculos com informações imprecisas, a exemplo do que faz o cérebro humano.

1.3.5 Regras *Fuzzy*

Segundo BARDOSSY e DUCKSTEIN (1995), regras são declarações condicionais ou incondicionais, envolvendo relações entre entradas e saídas. Essas variáveis são conectadas através de operadores lógicos como **e**, **ou**, **então**. Geralmente uma regra segue a seguinte estrutura: **se** premissa(s) **então** consequência(s).

Segundo os mesmos autores, regras são amplamente utilizadas como uma forma de organizar e difundir o conhecimento. Entretanto, algumas vezes, é difícil de se atribuir, quantitativamente, valores as variáveis envolvidas no fenômeno que se queira estudar. Esta dificuldade pode decorrer da imprecisão inerente ao procedimento de medição ou simplesmente pela inexistência de tal procedimento. Por exemplo: ainda não se pode, de maneira precisa, quantificar a intensidade de uma dor de cabeça.

Este problema é resolvido quando se utiliza regra *fuzzy*, ou seja, ao invés de se atribuir valores, variáveis crisp, às relações de entrada e saída utiliza-se variáveis lingüísticas associadas à conjuntos *fuzzy*.

Por serem capazes de absorver as incertezas relacionadas as relações de entrada e saída, na utilização de regras *fuzzy*, diferentemente do caso em que se utiliza variáveis crisp,

uma mesma premissa pode levar a diferentes conseqüências. Por outro lado, para que sejam úteis as regras devem fornecer uma resposta. O mecanismo utilizado para se obter uma única resposta a partir de um conjunto de regras *fuzzy* recebe o nome de sistema de inferência e será discutido posteriormente.

1.3.6 Controladores *Fuzzy*

Um sistema de controle consiste em um algoritmo de controle que, a cada passo, utiliza a informação de entrada juntamente com as informações obtidas em passos anteriores para estabelecer a melhor ação de controle que deve ser aplicada no passo seguinte PEDRYCZ e GOMIDE (1998).

Os controladores *fuzzy*, cuja configuração é apresentada na Figura 3, foram inicialmente propostos por MAMDANI (1974), e buscam, mediante um conjunto de regras *fuzzy*, aqui denominado base de regras, absorver e reproduzir o conhecimento acerca de um determinado processo. Em alguns casos a base de regras pode ser construída a partir do conhecimento de especialistas e/ou a partir de resultados experimentais. Entretanto, para problemas mais complexos, a base de regras deve ser criada a partir de conjuntos de dados teóricos, denominados conjuntos de treinamento.

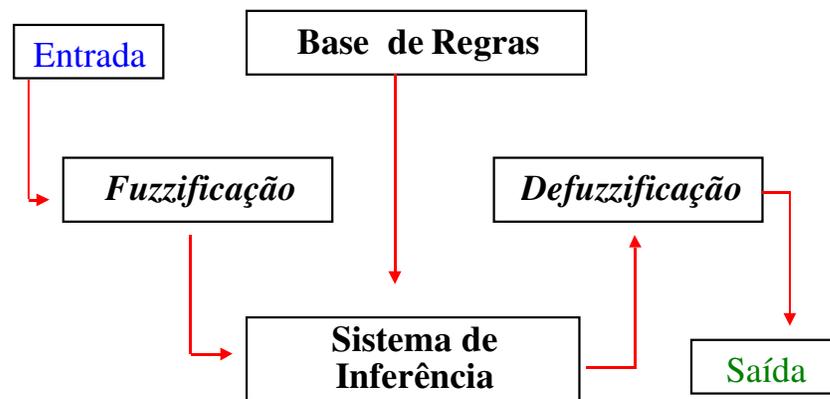


Figura 3: Configuração de um Controlador Fuzzy.

Uma vez construída uma base de regras apropriada, dada um valor de entrada numérica, numa etapa denominada *fuzzificação*, este valor é descrito qualitativamente através

da utilização de variáveis lingüísticas, as quais estão associadas a conjuntos *fuzzy* (BARDOSSY e DUCKSTEIN,1995)

Como já foi dito, uma mesma premissa leva a diferentes conseqüências, em outras palavras, um mesmo valor de entrada pode estar associado, com diferentes graus de pertinência, à diferentes regras. Sendo assim posteriormente a etapa de *fuzzificação*, mostra-se necessário à utilização de um sistema de inferência, a partir do qual obtêm-se uma única resposta. Cabe ressaltar que nesta etapa, a resposta obtida está associada á um conjunto *fuzzy*, sendo assim, mostra-se necessário a transformação desta resposta *fuzzy* em uma resposta numérica. Esta etapa recebe o nome de *defuzzificação*.

1.3.7 Modelagem Baseada em Regras *Fuzzy*

Segundo DOU et al. (1999), a modelagem baseada em regras *fuzzy*, como o próprio nome sugere, busca modelar um determinado fenômeno mediante de uma base de regras *fuzzy*. Este tipo de modelagem apresenta a mesma configuração de um controlador *fuzzy* apresentado anteriormente. Entretanto, diferentemente de um controlador, um modelo baseado em regras *fuzzy* busca apenas descrever um fenômeno, não tendo como objetivo a proposição de ações de controle que interfiram no mesmo (BARDOSSY e DUCKSTEIN,1995).

Por estar baseada em regras que descrevem lingüisticamente a relação de variáveis de entrada e de saída, a modelagem baseada em regras *fuzzy* destaca-se pela sua simplicidade de formulação e interpretação e generalização. O que a torna uma alternativa bastante atrativa para auxiliar o processo de tomada de decisão.

1.3.8 Modelagem *Fuzzy* em ambiente MATLAB 6.5

A modelagem de processos dinâmicos pela teoria de conjunto *fuzzy* é um método iterativo, onde a cada passo no tempo devem ser repetidos todos os procedimentos descritos na Figura 3. Desta forma, mostra-se necessário a elaboração e a implantação de um algoritmo em um ambiente computacional compatível. Para tanto, neste trabalho optou-se por utilizar o ambiente de computação científica MATLAB 6.5. No que segue são apresentadas algumas

características deste software que fundamentaram a escolha do mesmo para o desenvolvimento deste trabalho.

O MATLAB 6.5 é tanto uma linguagem de programação quanto um ambiente de computação técnica que possibilita a análise e visualização de dados, cálculos matemáticos e desenvolvimento de algoritmos, entre outras aplicações. Sua primeira versão foi escrita no final da década de 70 nas Universidades do Novo México e Stanford visando fornecer suporte a cursos de teoria matricial, álgebra linear e análise numérica HANSELMAN e LITTLEFIELD (2003).

Além da alta capacidade de cálculos, o MATLAB 6.5, conta com uma extensa coleção de arquivos dedicados a tratar classes de problemas específicas (*toolbox*). Dentre estes arquivos encontra-se o *Fuzzy Logical Toolbox*. Esta ferramenta concilia a eficiência de cálculos do o MATLAB 6.5 com um interface gráfica bastante amigável, fazendo com que a construção do modelo *fuzzy* neste ambiente seja relativamente simples e de fácil interação com os diferentes tipos de usuário. Uma descrição mais detalhada do *fuzzy logical toolbox*, é apresentada em AMENDOLA et al.(2007).

2. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AMENDOLA, Mariangela; SOUZA, Anderson Luiz e BARROS, Laécio Carvalho. Manual do uso da teoria dos conjuntos *fuzzy* no MATLAB 6.5. Versão 2005 do manual apresentado no Ciclo de Palestras/2004, realizado na FEAGRI/UNICAMP. Disponível em: http://www.ime.unicamp.br/~laeciocb/manual_fuzzy_matlab.pdf. Acesso em 28/06/2007

BARDOSSY,A.; DUCSTEIN, L. ***Fuzzy Rule-Based Modeling with Applications to Geophysical, Biological and Engineerig Systems***. Flórida: CRC, 1995. 232p.

BARROS, L.C.; BASSANEZI, R. C. Introdução à Teoria *Fuzzy*: aplicações em biomatemática: minicurso apresentado no **XV Congresso Latino Americano de Biomatemática**, 29 de out. - 02 de nov. de 2001.

CARVALHO, L. A. Condutividade hidráulica do solo no campo: as simplificações do método do perfil instantâneo. 2002. 86p. (Dissertação de Mestrado) ESALQ- Escola Superior de Agricultura Luiz de Queiroz – USP, Piracicaba/SP.

COSTA, S. N. Desenvolvimento de um modelo computacional para simular o transporte de água e solutos no solo sob condições de escoamento não permanente na vertical. 1998. 145p. (Tese de Doutorado) Universidade Federal de Viçosa– UFV, Viçosa/MG.

DOU, C.; WOLDT, W.; BOGARDI, I. *Fuzzy* rule-based approach to describe solute transport in the unsaturated zone. **Journal of Hydrology**. v. 220 , p. 74-85, 1999.

HANSELMAN, D.; LITTLEFIELD, B. **MATLAB 6.5: Curso completo**. São Paulo : Prentice Hall, 2003. 676p.

LIBARDI, P. L. **Dinâmica da Água no Solo**. Piracicaba: edUSP, 1995. 497p.

MANDANI, E.H. **Application of Fuzzy Algorithms for Control of Simple Dynamic Plant**, Proc. IEE, v. 121, n. 12, 1974

MCBRATNEY, A. B.; ODEH, I. O. A. Application of *fuzzy* sets in soil science: *fuzzy* logic, *fuzzy* measurements and *fuzzy* decisions. **Geoderma**. v.77, p. 85 -113, 1997.

MIRANDA, J. H. Modelo para a simulação da dinâmica de nitrato em colunas verticais de solo não saturado. 2001. 79p. (Tese de Doutorado) ESALQ- Escola Superior de Agricultura Luiz de Queiroz – USP, Piracicaba/SP.

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

PAULLETO, E. A. Determinação da condutividade hidráulica de solos a partir da curva de retenção de água. 1986. 133 p. (Tese de Doutorado) ESALQ- Escola Superior de Agricultura Luiz de Queiroz – USP, Piracicaba/SP.

PEDRYCZ, W. GOMIDE, F. **An introduction to fuzzy sets** : analysis and design. Bradford. Imprensa Cambridge, 1998. 465p.

PREVEDELLO, C. L. Teoria do fluxo da água em solos não saturados: novos conceitos e aplicações. 1987. 264 p. (Tese de Doutorado) ESALQ- Escola Superior de Agricultura Luiz de Queiroz – USP, Piracicaba/SP.

REICHARDT, K. **A Água em Sistemas Agrícolas**. Piracicaba: Manole LTDA, 1990. 270p.

RIVERA, R.N.C. Modelagem da dinâmica da água e do potássio na irrigação por gotejamento superficial. Piracicaba, 2004. 89p. Tese (Doutorado) - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", Universidade de São Paulo.

STEPHENS, D.B.; REHFELDT, K.R. Evaluation of Closed-Form Analytical Models to Calculate Conductivity in Fine Sand. **Soil Sci. Soc. Am. J.** v.49, p. 12- 24.1985

VAN GENUCHTEN, M. T. A Closed-form Equation for predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils. **Soil Sci. Soc. Am. J.** v.44, p. 892-898.1980.

VAN GENUCHTEN, M. T.; NIELSEN, D. R. On describing and predicting the hydraulic properties of unsaturated soils, **Ann. Geophys.**, v.3, p. 595–628, 1985.

ZADEH, L.A. *Fuzzy Sets*. **Information and control**. v.8. 1965. p. 338-353.

CAPITULO 2: DESLOCAMENTO MISCÍVEL E AJUSTE DE PARÂMETROS DE TRANSPORTE DE ÍONS NO SOLO

1. RESUMO

No deslocamento de um fluido por um outro através de um meio poroso, pode haver uma mistura entre os mesmos. Nestes casos, em que o deslocamento é miscível, a perda da nitidez da interface entre o fluido deslocador e o deslocado está relacionada ao processo de difusão, que tende a reduzir os gradientes de concentração e a dispersão, causada pela diferenças das velocidades das partículas líquidas dentro de um mesmo poro e de poros de diferentes tamanhos. Compreender e quantificar a contribuição de tais processos é de fundamental importância nos trabalhos que buscam modelar matematicamente o transporte de íons no solo. Sendo assim a abordagem deste capítulo será sobre um programa computacional utilizando-se o ambiente MATLAB 6.5 para a quantificação dos parâmetros de transporte fator de retardamento (R) e o coeficiente de dispersão (D), mediante o ajuste de um modelo teórico à curvas de eluição obtidas em ensaios experimentais de laboratório do deslocamento miscível.

Foram conduzidos ensaios de deslocamento miscível do íons potássio, em colunas preenchidas com um Latossolo Vermelho Amarelo, fase arenosa (Solo 1), e nitrato, em colunas preenchidas com um CAMBISSOL GLEICO (Solo 2). Para ambos os casos os parâmetros de transporte ajustados pelo programa desenvolvido em Matlab 6.5 assim como a qualidade dos ajustes dos mesmos foram comparados com os resultados obtidos pelo programa Disp (BORGES JUNIOR e FERREIRA, 2006). Os resultados obtidos demonstraram que os programas avaliados apresentaram desempenhos equivalentes. Neste sentido, o programa construído neste capítulo mostrou-se vantajoso, uma vez que a utilização do Matlab 6.5, além de fornecer respostas rápidas e precisas, possibilita ao usuário a utilização de um grande volume de ferramentas numéricas pré-existentes neste software.

2. INTRODUÇÃO

A manutenção da produtividade agrícola em níveis elevados, a fim de se atender à crescente demanda por alimentos e fibras, é um dos grandes desafios da atualidade. Neste

sentido a utilização de produtos químicos, defensivos agrícolas e fertilizantes, assim como o consumo de água vem se intensificando cada vez mais nas atividades agrícolas.

O transporte destes produtos químicos no solo através da água, para regiões localizadas abaixo do sistema radicular, além de caracterizar um prejuízo econômico, pode comprometer a qualidade dos aquíferos subterrâneos. Sendo assim, conhecer as dinâmicas da água e de solutos no solo não saturado é muito importante para a proposição de técnicas e medidas que, além de ganhos econômicos, viabilizem a exploração racional e a preservação dos recursos hídricos.

Neste sentido, segundo BORGES JUNIOR e FERREIRA (2006), muitos estudos vêm buscando descrever, através de modelos matemáticos, os fenômenos envolvidos no transporte íons ao longo do perfil do solo. O sucesso no uso destes modelos está condicionado à qualidade do ajuste de parâmetros, denominados parâmetros de transporte de solutos.

NIELSEN e BIGGAR, (1961) e BIGGAR e NIELSEN, (1962) definiram o deslocamento miscível como o deslocamento de um fluido contendo um traçador pelo mesmo fluido, sem o traçador através de um meio poroso. Tal deslocamento resulta em uma distribuição do traçador que é influenciada pela velocidade microscópica da solução no solo, pelas taxas de difusão e por outras reações químicas. De uma maneira mais geral, o deslocamento miscível pode ser entendido como um processo no qual um fluido se mistura a outro e o desloca ao longo de um meio poroso. Segundo BORGES JUNIOR e FERREIRA (2006) a lixiviação de sais no solo, devido a chuvas ou à irrigação, são exemplos de deslocamento miscível.

Através de estudos de deslocamento miscível é possível estimar-se valores médios da velocidade da água no solo, do coeficiente de dispersão e do fator de retardamento. Desta forma, em trabalhos, cujo objetivo é a modelagem matemática da dinâmica da água e de solutos no solo, a condução de ensaios experimentais de deslocamento miscível e o posterior ajuste de modelos teóricos as curvas de eluição obtidas é uma prática bastante comum na literatura COSTA (1998), MIRANDA, (2001) e RIVERA (2004).

Sendo assim neste trabalho tem como objetivo a construção de um programa computacional em ambiente MATLAB 6.5, com base nas informações de MIRANDA et al. 2006, capaz de resolver o problema de otimização não linear envolvido no ajuste dos parâmetros envolvidos na equação de transporte de solutos no solo.

3. MATERIAL E MÉTODOS

3.1 Estudo Experimental do Deslocamento Miscível

Os estudos experimentais realizados neste trabalho foram conduzidos nos Laboratórios de Edafologia, da Universidade de La Coruña, (Experimento 1) e de Hidráulica e de Irrigação da Faculdade de Engenharia Agrícola -FEAGRI-UNICAMP, (Experimento 2). Em ambos os casos foram conduzidos ensaios de deslocamento miscível (Figura 1).

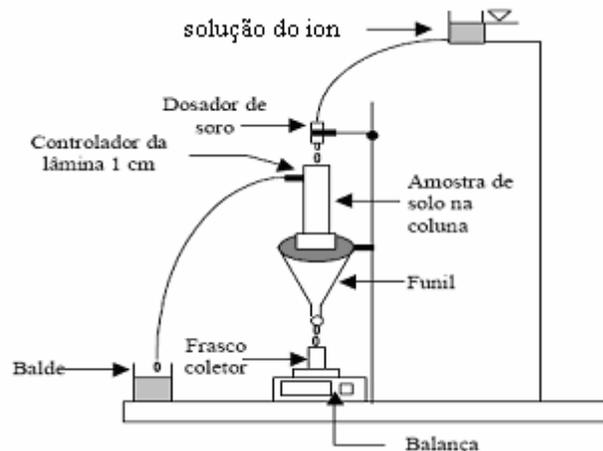


Figura 1: Esquema para a obtenção experimental da curva de eluição (adaptado de MIRANDA e DUARTE , 2001).

No Experimento 1, avaliou-se o deslocamento miscível do íon nitrato, em coluna de PVC de 15 cm de diâmetro e 20 cm comprimento, preenchida com um CAMBISSOL, (Solo 1) localizado nas coordenadas geográficas de 22° 06' de latitude Norte e 7° 26' de longitude Leste no município de Lugo (Galícia / Espanha). No Experimento 2, avaliou-se o deslocamento miscível do íon potássio em coluna de PVC com 7 cm de diâmetro e 19 cm de comprimento preenchida com um Latossolo Vermelho Amarelo, fase arenosa, denominado Série "Sertãozinho", (Solo 2) localizado nas coordenadas geográficas de 22° 43' 14" de latitude Sul e 47° 36' 47" de longitude Oeste, no município de Piracicaba-SP.

Na Tabela 1 são apresentadas as características físico-hídricas dos solos utilizados.

Tabela 1: Parâmetros físico-hídrico do solo utilizado.

Solo	Textura			Densidade		Porosidade (%)	K ₀ cm h ⁻¹
	Areia	Site	Argila	Solo	Partículas		
	g kg ⁻¹			kg dm ⁻³			
1	280	571	149	1,2	2,645	56,52	9,38
2	695	129	185	1,5	2,575	41,74	17,09

Em ambos os casos, o solo utilizado foi coletado na profundidade de 0-20 cm, seco ao ar, passado em peneira com malha de 2 mm e após esta preparação foram utilizados para preencher as respectivas colunas a partir da base, mantendo uma densidade uniforme de 1,2 kg dm⁻³ (Experimento 1), e 1,5 kg dm⁻³ no Experimento 2. Fixou-se, na parte inferior de cada coluna, uma manta sintética a qual permite apenas a passagem da solução, mantendo o solo em seu interior.

Nos dois experimentos, inicialmente as colunas foram saturadas por capilaridade, processo realizado de forma lenta, no qual as colunas foram colocadas dentro de recipientes onde, mediante gotejamento, adicionou-se água destilada até que aproximadamente 2/3 da coluna estivessem submersos. Em seguida, o conjunto foi deixado em repouso durante 24 horas para que se completasse a saturação.

Uma vez saturada as colunas iniciaram-se os ensaios, no qual por 24 horas, utilizando-se um dosador de soro, aplicou-se água destilada às colunas. Esta etapa do experimento teve como objetivo de lixiviar os íons que estejam presentes no solo utilizados no preenchimento das mesmas.

Transcorridas as 24 h e uma vez que o sistema encontrava-se em equilíbrio dinâmico, de forma simultânea, interrompeu-se o fornecimento de água destilada e iniciou-se a aplicação da solução, utilizando-se como fluido deslocador uma solução de nitrato de sódio (NaNO₃), numa concentração de nitrato de 1500 mgL⁻¹ (Experimento 1) e uma solução de nitrato de potássio (KNO₃), numa concentração de Potássio de 1500 mgL⁻¹(Experimento 2).

É importante ressaltar que em ambos os ensaios, por meio de um orifício a 1 cm de altura da camada superficial do solo, com a ajuda de uma mangueira, todo volume de água e/ou solução excedente foi extraído do sistema mantendo-se assim uma carga hidráulica constante de 1 cm (Figura 2).



Figura 2: Coluna de solo com carga constante de água com aplicação simultânea da solução

A partir do momento em que se começou a aplicar a solução deslocadora à coluna iniciou-se a coleta dos volumes de efluentes da mesma. O volume de efluente coletado em cada amostra foi definido em função do volume de poros (VP) descrito pela Equação 1.

$$VP = \alpha V \quad (1)$$

em que:

VP = volume de poros; L^3 ;

α = porosidade do solo em questão, decimal; e

V = volume da coluna, L^3 .

Por ser função do VP, de maneira geral, o volume que a ser coletado aumenta proporcionalmente ao aumento do volume da coluna. Sendo assim este fator deve ser levado em conta no planejamento do experimento, pois, a título de exemplo, a utilização de uma coluna com grandes dimensões, preenchida com um solo com baixos valores de condutividade hidráulica resultaria em um experimento que pode ter um tempo de duração incompatível com a necessidade de amostragem de forma contínua. Por esta razão, no Experimento 2, que foi realizado posteriormente ao Experimento 1, foram utilizadas colunas com dimensões menores.

Os volumes de efluente coletados estão diretamente relacionados com o número de pontos ao longo da curva de eluição e conseqüentemente com a qualidade do posterior ajuste do modelo teórico. Neste sentido, no Experimento 1, o volume de efluente coletado a cada amostra foi de 170 mL o que corresponde a, aproximadamente, 0,08 VP. Já no Experimento 2, coletaram-se amostras de 15 mL o que, neste caso, correspondeu a 0,049 VP.

Para se controlar o volume coletado, assumiu-se que as soluções aplicadas tem densidade igual à da água em condições normais de pressão e temperatura, e utilizou-se uma balança eletrônica com uma precisão de 0,01g.

Uma vez que a curva de eluição ou curva de distribuição de efluentes tem como eixo das ordenadas a concentração relativa nos efluente da coluna, ou seja, a razão entre a concentração no efluente (C) e a concentração na solução (C₀) que está sendo aplicada à coluna, os volumes de efluentes foram coletados até que se atingisse a concentração de potássio da solução deslocadora aplicada a coluna, em outras palavras, as amostras foram coletadas até que C C₀⁻¹ fosse igual a “1”.

Durante o experimento, a fim de se determinar o momento em que o ensaio deveria ser interrompido, a concentração de potássio nas amostras de coletadas foram avaliadas mediante o uso de um medidor de íon da marca Horiba específico para o íon potássio.

Posteriormente, as amostras foram levadas ao laboratório onde, no Experimento 1 determinou-se às concentrações de nitrato e no Experimento 2 determinou-se a concentração de potássio. É importante ressaltar que, no caso do Experimento 2, foram feitas três repetições, o que, para este caso, permitiu a avaliação da variabilidade dos parâmetros de transporte ajustados.

3.2 Ajuste das Curvas de Eluição

Neste trabalho, o transporte dos solutos no solo serão descritos pela Equação 2.

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

onde: C = concentração do soluto na solução do solo ($M L^{-3}$); t = tempo (T); z = profundidade do solo (L); R = fator de retardamento (-); D = coeficiente de dispersão hidrodinâmica longitudinal ($L^2 T^{-1}$); v = velocidade da água no poro (q/θ) ($L T^{-1}$);

De acordo com WRAITH e OR (1998), a distribuição da concentração de solutos em uma coluna de solo com uma concentração inicial uniforme, C_i sob equilíbrio dinâmico, a qual será substituída em um tempo “ t ” igual a zero, por uma solução de concentração constante, C_0 , pode ser descrita mediante uma solução analítica da Equação 2.

Esta solução da Equação 1 sujeita as condições iniciais e de contorno descritas pelas Equações 3, 4, 5, é descrita através da Equação 6 (van GENUCHTEN e WIERENGA, 1986)

$$C(x,0) = C_i \quad (3)$$

$$C(0,t) = C_0 \quad (4)$$

$$\frac{\partial C}{\partial x}(\infty,t) = 0 \quad (5)$$

$$\frac{C(x,t) - C_i}{C_0 - C_i} = \frac{1}{2} \operatorname{erfc}\left(\frac{Rx - vt}{\sqrt{4DRt}}\right) + \frac{1}{2} e^{\frac{vx}{D}} \operatorname{erfc}\left(\frac{Rx + vt}{\sqrt{4DRt}}\right) \quad (6)$$

onde: $C(x,t)$ = concentração do soluto no efluente da coluna no tempo t ($M L^{-3}$); C_i = concentração inicial do soluto no solo ($M L^{-3}$); C_0 = concentração do soluto na solução aplicada a coluna ($M L^{-3}$); t = tempo (T); x = comprimento da coluna (L); R = fator de retardamento (-); D = coeficiente de dispersão hidrodinâmica longitudinal ($L^2 T^{-1}$); erfc é a função de erro complementar, descrita pela Equação 7 .

$$\operatorname{erfc}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^{\infty} e^{-y^2} dy \quad (7)$$

Como o próprio nome sugere a $erfc(x)$ é uma função complementar à função de erro ($erf(x)$) descrita pela Equação 8.

$$erf(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-y^2} dy \quad (8)$$

De acordo com WRAITH e OR (1998), nos casos em que C_i é desprezível, uma simplificação da Equação 6, é comumente utilizada em experimentos de deslocamento miscível.

$$\frac{C}{C_0} = \frac{1}{2} erfc\left(\frac{Rx - vt}{\sqrt{4DRt}}\right) \quad (9)$$

Segundo WRAITH e OR (1998), o uso das Equações 6 e 9 como solução analítica da Equação 1, apresentam resultados muito semelhantes em experimentos de deslocamento miscível. Sendo assim, no programa desenvolvido nesse trabalho será considerada apenas a solução simplificada descrita pela Equação 9.

3.3 Propriedades das Funções de Erro e de Erro Complementar

Analisando-se a Equação 8, verifica-se que a função $erf(x)$ é equivalente ao dobro da integral de uma distribuição normal com média zero e variância 0,5. Neste sentido sabe-se que:

$$\frac{1}{2} erfc(\infty) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} e^{-y^2} dy = \frac{1}{2} \quad (10)$$

logo

$$erfc(\infty) = 1 \quad (11)$$

Com base no resultado apresentado na Equação 10, temos que:

$$\operatorname{erf}(x) + \operatorname{erfc}(x) = \operatorname{erf}(\infty) = 1 \quad (12)$$

Conseqüentemente:

$$\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x) \quad (13)$$

Segundo suas respectivas definições, ambas as funções $\operatorname{erf}(x)$ e $\operatorname{erfc}(x)$ só devem ser calculadas nos casos em que $x \geq 0$. Nos casos em que $x < 0$, pode-se utilizar as seguinte propriedade:

$$\operatorname{erf}(-x) = -\operatorname{erf}(x) \quad (14)$$

Combinando as Equações 11 e 12 temos que:

$$\operatorname{erfc}(-x) = 1 + \operatorname{erf}(x) \quad (15)$$

3.4 Ajuste dos Parâmetros de Transporte de Solutos no Solo

Uma vez definida a equação que será tomada como aproximação para a solução da Equação 1, deve-se ajustar os parâmetros presentes na mesma de tal forma que se consiga o melhor ajuste possível.

3.4.1 Método de Mínimos Quadrados

O ajuste dos parâmetros de transporte R e D será feito pelo método de mínimos quadrados. Neste método numérico, busca-se minimizar a soma dos quadrados dos erros (SQE), apresentada na Equação 16 (RUGIERO e LOPES, 1996).

$$F(R,D) = SQE = \sum_{i=1}^k \left(Cr_i - \hat{Cr}_i \right)^2 \quad (16)$$

onde: Cr é a concentração relativa medida no efluente da coluna ; $\frac{C}{C_0}$; \hat{Cr} é a concentração relativa estimada; k é o numero de avaliações da concentração relativa no efluente da coluna ao longo do tempo em que o experimento. foi realizado.

De acordo com GUIDORIZZI (2001) dada uma função, $f(x)$, que admite a primeira e a segunda derivada, num dado ponto P , será ponto de mínimo se:

$$f'(P) = 0 \quad (17)$$

$$f''(P) > 0 \quad (18)$$

Neste sentido, considerando-se a Equação 15, deve-se encontrar os parâmetros R e D , tais que:

$$\frac{\partial F(R,D)}{\partial R} = 0 \quad (19)$$

$$\frac{\partial F(R,D)}{\partial D} = 0 \quad (20)$$

$$\frac{\partial^2 F(R,D)}{\partial R^2} > 0 \quad (21)$$

$$\frac{\partial^2 F(R,D)}{\partial D^2} > 0 \quad (22)$$

Combinando-se as equações 9 e 16 temos:

$$F(R, D) = SQE = \sum_{i=1}^k \left(Cr_i - \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left(\frac{Rx - vt}{\sqrt{4DRt}} \right) \right)^2 \quad (23)$$

A Equação (23) submetida as condições descritas pelas Equações 19, 20, gera o seguinte sistema não linear:

$$\begin{cases} F_1(D, R) = \frac{\partial \sum_{i=1}^k \left(Cr_i - \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left(\frac{Rx - vt}{\sqrt{4DRt}} \right) \right)^2}{\partial R} = 0 \\ F_2(R, D) = \frac{\partial \sum_{i=1}^k \left(Cr_i - \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left(\frac{Rx - vt}{\sqrt{4DRt}} \right) \right)^2}{\partial D} = 0 \end{cases} \quad (24)$$

3.4.2 Método de Newton para a Resolução de Sistemas Não Lineares

A resolução do sistema apresentado pela Equação 24 será obtida pelo método de Newton. Este método segue o mesmo princípio do método de Método de Newton Raphson, porém com as adaptações necessárias, uma vez que trabalha com conjuntos de funções de duas ou mais variáveis para as quais determina-se um **vetor** que seja o **ZERO** das mesmas.

Sendo assim, dado o sistema não linear descrito na Equação 24, assume-se que $F(R, D)$ e suas derivadas são contínuas em um intervalo $[a, b]$. Assume-se ainda que pelo menos uma das soluções de $F(R, D)$ encontre-se em $[a, b]$ (RUGIERO e LOPES, 1996).

O vetor das derivadas parciais de $F_i(R, D)$ é denominado por vetor gradiente, sendo denotado por $\nabla F_i(R, D)$, $i = 1, 2$, onde:

$$\nabla F_i(R, D) = \left[\frac{\partial F_i(R, D)}{\partial R}, \frac{\partial F_i(R, D)}{\partial D} \right], \quad i = 1, 2 \quad (25)$$

A matriz das derivadas parciais de $F_i(R, D)$ é denominada Matriz Jacobiana, Equação

$$J(x) = \begin{bmatrix} \nabla F_1(R, D) \\ \nabla F_2(R, D) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial F_1(R, D)}{\partial R} & \frac{\partial F_1(R, D)}{\partial D} \\ \frac{\partial F_2(R, D)}{\partial R} & \frac{\partial F_2(R, D)}{\partial D} \end{bmatrix} \quad (26)$$

Combinando as Equações 24 e 26 tem-se:

$$J(R, D) = \begin{bmatrix} \nabla F_1(R, D) \\ \nabla F_2(R, D) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 F(R, D)}{\partial R^2} & \frac{\partial^2 F(R, D)}{\partial R \partial D} \\ \frac{\partial^2 F(R, D)}{\partial D \partial R} & \frac{\partial^2 F(R, D)}{\partial D^2} \end{bmatrix} \quad (27)$$

Definida a Matriz Jacobiana, assumindo-se um valor inicial $(R, D)^0$, a cada iteração do método de Newton deve-se resolver o sistema linear descrito pela Equação 28:

$$J((R, D)^k) \Delta(R, D)^k = -F^*((R, D)^k) \quad (28)$$

onde, neste trabalho:

$\Delta(R, D)^k$ é um vetor (2×1) , com os respectivos incrementos dos parâmetros R e D na k-esima iteração. $F^*((R, D)^k)$ é um vetor formado pelas Funções $F_1(R, D)$ e $F_2(R, D)$ calculadas na k-esima iteração.

Substituindo-se as Equações 24 e 27 na Equação 28 chega-se a seguinte expressão:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial^2 F(R, D)}{\partial R^2} & \frac{\partial^2 F(R, D)}{\partial R \partial D} \\ \frac{\partial^2 F(R, D)}{\partial D \partial R} & \frac{\partial^2 F(R, D)}{\partial D^2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta R \\ \Delta D \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} F_1(R, D) \\ F_2(R, D) \end{bmatrix} \quad (29)$$

Em uma situação de convergência, o método de Newton, gera uma seqüência $(R, D)^k$ de vetores que:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} (R, D)^k = (R, D)^* \quad (30)$$

onde: $(R, D)^*$ é a solução do sistema não linear.

Por outro lado, na prática, não é possível de se realizar indefinidas iterações como sugere a Equação 30, sendo assim, como ocorre em qualquer método iterativo, deve-se estabelecer critérios de parada para se aceitar um ponto $(R, D)^k$ como aproximação para solução $(R, D)^*$. Nesta pesquisa foram utilizados dois critérios de parada, o primeiro limitando em 100 o numero de iterações e o segundo é descrito pela Equação (31):

$$\max |\Delta(R, D)^k| \leq 10^{-7} \quad (31)$$

3.4.3 Aproximação por Diferenças Finitas

Para o cálculo das derivadas presentes na Equação 32 utilizou-se o método de diferenças finitas. Segundo (CUNHA, 2000) as aproximações de diferenças finitas são obtidas através da expansão em série de Taylor.

Para se obter a aproximação por diferenças finitas para $F_1(R, D)$ utilizou-se a serie de Taylor em $F(R+h, D)$ e em $F(R-h, D)$, Equações 32 e 33, respectivamente.

$$F(R+h, D) = F(R, D) + h \frac{\partial F(R, D)}{\partial R} + \frac{h^2}{2!} \frac{\partial^2 F(R, D)}{\partial R^2} + \frac{h^3}{3!} \frac{\partial^3 F(R, D)}{\partial R^3} + \dots + \frac{h^n}{n!} \frac{\partial^n F(R, D)}{\partial R^n} + \dots \quad (32)$$

$$F(R-h, D) = F(R, D) - h \frac{\partial F(R, D)}{\partial R} + \frac{h^2}{2!} \frac{\partial^2 F(R, D)}{\partial R^2} - \frac{h^3}{3!} \frac{\partial^3 F(R, D)}{\partial R^3} + \dots + \frac{h^n}{n!} \frac{\partial^n F(R, D)}{\partial R^n} + \dots \quad (33)$$

Subtraindo a Equação 33 da Equação 32 tem-se:

$$F(R+h, D) - F(R-h, D) = 2h \frac{\partial F(R, D)}{\partial R} + \frac{2h^3}{3!} \frac{\partial^3 F(R, D)}{\partial R^3} + \dots \quad (34)$$

Como a expansão em série de Taylor é infinita, na obtenção das aproximações por diferenças finitas deve ser feito um truncamento da mesma, a partir do termo cuja ordem é superior a ordem da derivada que se deseja discretizar.

Tal procedimento faz com que a este método esteja associado um erro numérico denominado erro local de truncamento (ELT), sendo que a ordem do ELT está diretamente associada à ordem da derivada a partir da qual é feito o truncamento.

Portanto, no caso da Equação 34, a serie de Taylor será truncada a partir do termo associado a segunda derivada sendo assim:

$$F(R+h, D) - F(R-h, D) \approx 2h \frac{\partial F(R, D)}{\partial R} \quad (35)$$

Logo, o cálculo de $F_1(R, D)$ será aproximado pela diferença finita centrada apresentada na Equação (36).

$$F_1(R, D) = \frac{\partial F(R, D)}{\partial R} = \frac{F(R+h, D) - F(R-h, D)}{2h} \quad (36)$$

O Processo para se calcular $F_2(R, D)$ é análogo ao que foi apresentado para o cálculo aproximado de $F_1(R, D)$.

$$F_2(R, D) = \frac{\partial F(R, D)}{\partial D} = \frac{F(R, D+h) - F(R, D-h)}{2h} \quad (37)$$

Neste trabalho, o cálculo da Matriz Jacobiana, Equação 27, envolve o cálculo de derivadas de segunda ordem. A aproximação para o cálculo do termo $\frac{\partial^2 F(R, D)}{\partial R^2}$ foi obtida somando-se as Equações 32 e 33.

$$F(R+h, D)+F(R-h, D)=2F(R, D)+\frac{2h^2}{2!} \frac{\partial^2 F(R, D)}{\partial R^2} + \dots \quad (38)$$

Neste trabalho, no caso da Equação 38, a serie de Taylor será truncada a partir do termo associado a segunda derivada sendo assim:

$$F(R+h, D)+F(R-h, D) \approx 2F(R, D)+\frac{2h^2}{2!} \frac{\partial^2 F(R, D)}{\partial R^2} \quad (39)$$

Logo:

$$\frac{\partial^2 F(R, D)}{\partial R^2} \approx \frac{F(R+h, D)-2F(R, D)+F(R-h, D)}{h^2} \quad (40)$$

Num processo análogo ao descrito acima, somando-se $F(R, D+h)$ com $F(R, D-h)$ obtém-se a seguinte aproximação:

$$\frac{\partial^2 F(R, D)}{\partial D^2} \approx \frac{F(R, D+h)-2F(R, D)+F(R, D-h)}{h^2} \quad (41)$$

Para o cálculo das derivadas parciais de segunda ordem presentes na Matriz Jacobiana, utilizou-se a expansão em serie de Taylor, função de 2 variáveis.

$$F(R+h, D+h)=F(R, D)+h \frac{\partial F(R, D)}{\partial R} +h \frac{\partial F(R, D)}{\partial D} +\frac{1}{2!} \left[h^2 \frac{\partial^2 F(R, D)}{\partial R^2} +2h^2 \frac{\partial^2 F(R, D)}{\partial R \partial D} +h^2 \frac{\partial^2 F(R, D)}{\partial D^2} \right] +\dots(42)$$

$$F(R-h, D-h)=F(R, D)-h \frac{\partial F(R, D)}{\partial R} -h \frac{\partial F(R, D)}{\partial D} +\frac{1}{2!} \left[h^2 \frac{\partial^2 F(R, D)}{\partial R^2} +2h^2 \frac{\partial^2 F(R, D)}{\partial R \partial D} +h^2 \frac{\partial^2 F(R, D)}{\partial D^2} \right] +\dots(43)$$

$$F(R+h, D-h) = F(R, D) + h \frac{\partial F(R, D)}{\partial R} - h \frac{\partial F(R, D)}{\partial D} + \frac{1}{2!} \left[h^2 \frac{\partial^2 F(R, D)}{\partial R^2} - 2h^2 \frac{\partial^2 F(R, D)}{\partial R \partial D} + h^2 \frac{\partial^2 F(R, D)}{\partial D^2} \right] + \dots (44)$$

$$F(R-h, D+h) = F(R, D) - h \frac{\partial F(R, D)}{\partial R} + h \frac{\partial F(R, D)}{\partial D} + \frac{1}{2!} \left[h^2 \frac{\partial^2 F(R, D)}{\partial R^2} - 2h^2 \frac{\partial^2 F(R, D)}{\partial R \partial D} + h^2 \frac{\partial^2 F(R, D)}{\partial D^2} \right] + \dots (45)$$

Fazendo-se:

$$F(R+h, D+h) + F(R-h, D-h) - F(R+h, D-h) - F(R-h, D+h) \quad (46)$$

Tem-se que:

$$F(R+h, D+h) + F(R-h, D-h) - F(R+h, D-h) - F(R-h, D+h) = 2h^2 \frac{\partial^2 F(R, D)}{\partial R \partial D} + \dots \quad (47)$$

Fazendo o truncamento a partir dos termos associados às derivas de segunda ordem temos a seguinte aproximação:

$$\frac{\partial^2 F(R, D)}{\partial R \partial D} = \frac{\partial^2 F(R, D)}{\partial D \partial R} \approx \frac{F(R+h, D+h) + F(R-h, D-h) - F(R+h, D-h) - F(R-h, D+h)}{2h^2} \quad (48)$$

3.4.4 Implementação do Modelo para o Ajuste dos Parâmetros de Transporte

Uma vez estabelecidas as aproximações teóricas, desenvolveu-se em ambiente MATLAB 6.5, um programa computacional que, de acordo com os critérios de parada já discutidos, monta e resolve o sistema descrito pela Equação 29.

No ambiente Matlab 6.5 a função de erro, Equação (8) é calculada de acordo com uma rotina interna desenvolvida a partir da metodologia proposta por CODY (1969).

Segundo RUGIERO e LOPES, (1996), a convergência teórica descrita na Equação 30, no caso do método de Newton, é uma convergência local, ou seja, para que exista, o “chute inicial” escolhido deve estar suficientemente próximo da solução exata do sistema não linear que se queira estudar. Neste sentido, no programa desenvolvido neste trabalho, inicialmente

criou-se um algoritmo que a partir de diferentes combinações de R e D, aceita como “chute inicial” aquele par associado ao menor SQE (Figura 3).

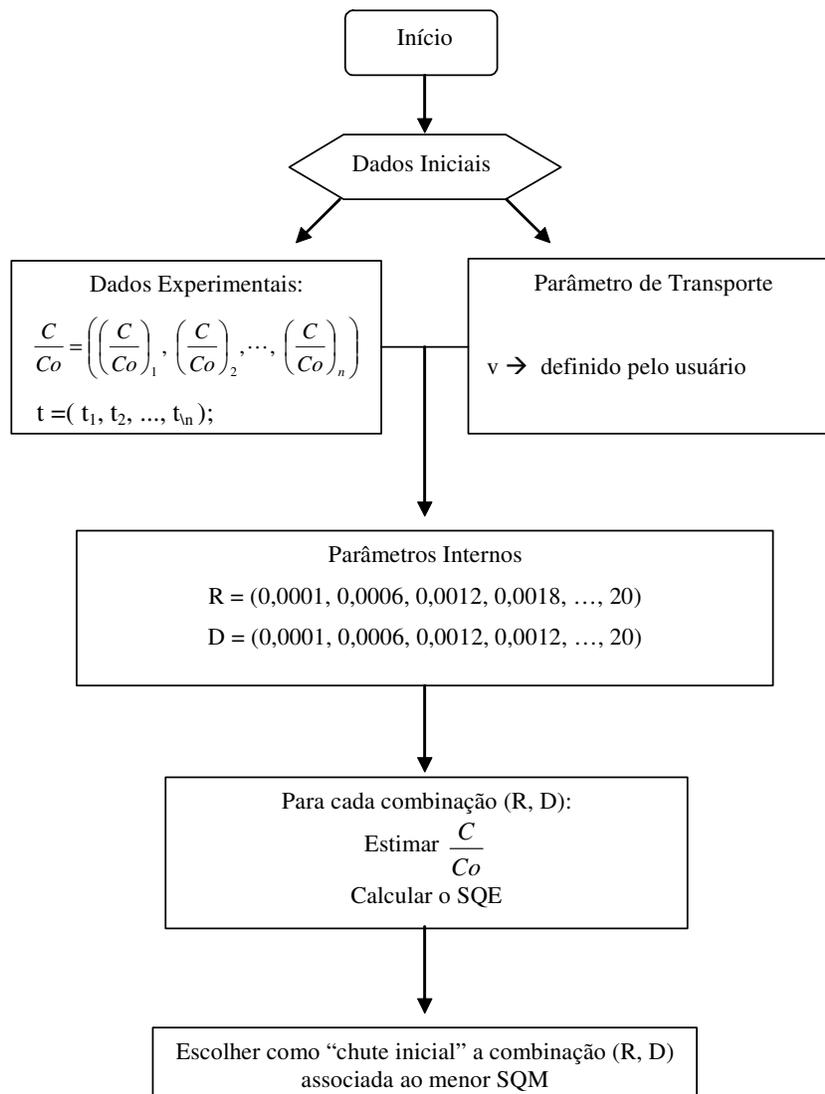


Figura 3: Fluxograma do Algoritmo de busca para o Chute inicial $(R, D)^0$.

O chute inicial, $(R, D)^0$, estabelecido pelo fluxograma apresentado na Figura 3, foi utilizado como dado de entrada no programa principal, no qual, com base no fluxograma apresentado na Figura 4, realiza-se o ajuste por mínimos quadrados dos parâmetros de transporte R e D.

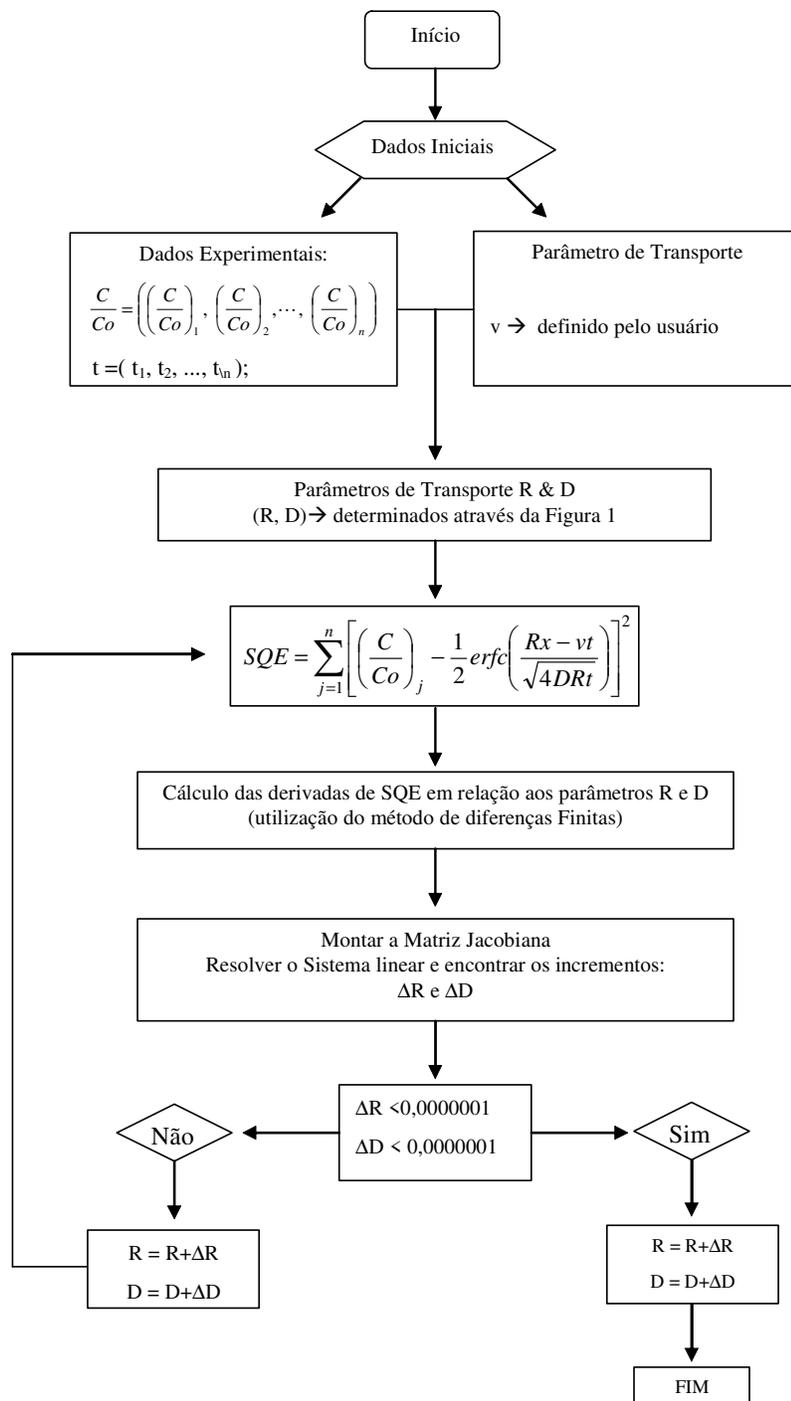


Figura 4: Programa para o ajuste dos parâmetros de transporte R e D.

Buscando-se avaliar o desempenho do programa desenvolvido neste trabalho, os valores dos parâmetros ajustados utilizando-se a referida rotina computacional, foram comparados com os resultados obtidos pelo *software* Disp (BORGES JUNIOR e FERREIRA, 2006).

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Na Tabela 2 e 3 são apresentados para o Experimento 1, e para os três ensaios realizados no Experimento 2, os valores dos parâmetros de transporte ajustados, e os respectivos erros médios quadráticos (EQM) obtidos utilizando-se o Matlab 6.5 e do programa Disp (BORGES JUNIOR e FERREIRA, 2006).

Tabela 2 : Parâmetros de Transporte e EQM – Experimento 1.

Programa	v cm min⁻¹	D cm² min⁻¹	R	EQM
Disp	0,276	1,284	1,28	0,00180
Matlab	0,276	1,176	1,05	0,00170

Tabela 3: Parâmetros de Transporte e EQM – Experimento 2.

Ensaio	Programa	v cm min⁻¹	D cm² min⁻¹	R	EQM
1	Disp	0,6846	2,512	2,303	0,00100
	Matlab	0,6846	2,190	2,029	0,00100
2	Disp	0,7014	0,994	2,181	0,00036
	Matlab	0,7014	0,876	2,094	0,00034
3	Disp	0,6514	0,474	2,131	0,00059
	Matlab	0,6514	0,414	2,126	0,00057

A partir das Tabelas 2 e 3 pôde-se verificar, em ambos os experimentos realizados neste capítulo, as diferenças entre os parâmetros ajustados pelo Matlab 6.5 e pelo modelo Disp (BORGES JUNIOR e FERREIRA, 2006), foram pouco significativas. Observou-se também, através do EQM, que, apesar destas diferenças, ambos os programas apresentaram desempenhos bastante semelhantes, ajustando-se bem aos dados experimentais.

Tais resultados podem ser constatados através das Figuras 5 e 6(A, B e C) onde são apresentadas, respectivamente, para o Experimento 1 e para os ensaios 1, 2 e 3 do Experimento 2 as curvas de eluição ajustadas pelo Matlab 6.5, pelo Disp e as obtidas experimentalmente.

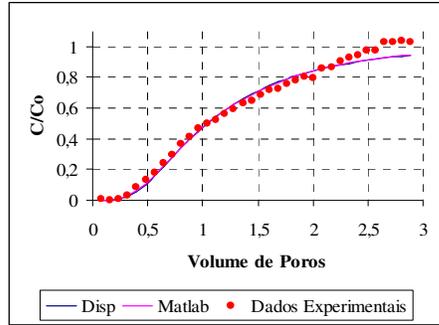
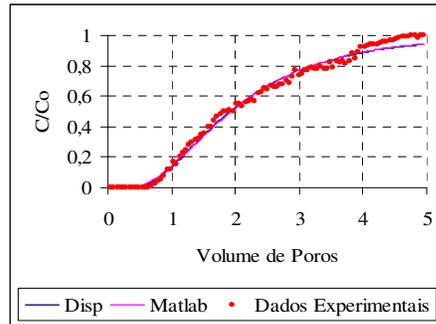
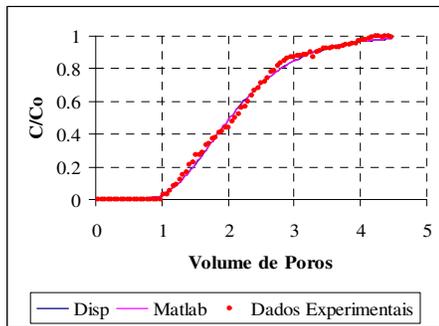


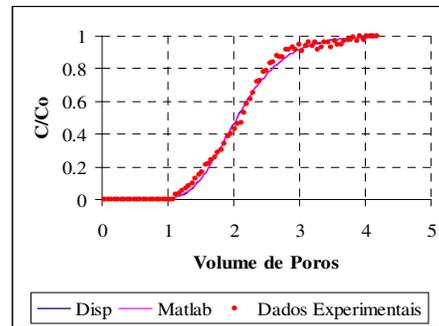
Figura 5: Curva de eluição experimental e ajustadas para o íon nitrato no Experimento 1.



(A)



(B)



(C)

Figura 6: Curva de eluição experimental e ajustadas para o íon potássio para o ensaio 1 (A), ensaio 2 (B) e para o ensaio 3 (C).

Analisando-se as Figuras 6 (A), (B) e (C) pôde-se verificar que, embora estes três ensaios tenham sido conduzidos com o mesmo solo, sob mesmas condições, as respectivas curvas de eluição obtidas experimentalmente apresentaram comportamentos distintos entre si.

Buscando-se uma melhor visualização da diferença de comportamento das curvas ajustadas, na Figura 7 são apresentadas, em um mesmo gráfico, as curvas de Eluição ajustadas

para um dos 3 ensaios associados ao Experimento 2. Como neste trabalho os modelos avaliados apresentaram desempenhos semelhantes e bastante satisfatórios, optou-se por apresentar na Figura 6 apenas as curvas ajustadas utilizando-se o programa desenvolvido no ambiente Matlab 6.5.

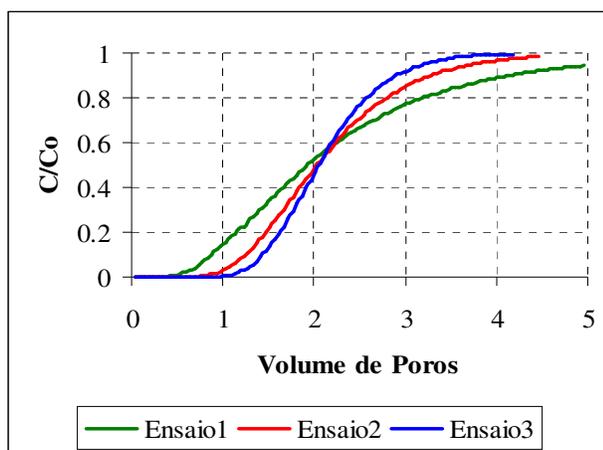


Figura 7: Curvas de eluição do íon potássio ajustadas pelo do Matlab 6.5 para cada um dos ensaios experimentais.

Pela da Figura 7, verificou-se mais uma vez que o ensaio 1 apresentou um comportamento bastante distinto dos demais. Já os ensaios 2 e 3 apresentaram padrões de comportamento similares, comportamento em “S”. Nota-se que na curva associada ao ensaio 2 a variação da concentração relativa do potássio no efluente da coluna é mais lenta que a apresentada pela curva associada ao ensaio 3. Tal comportamento indica que o processo de dispersão hidrodinâmica foi mais acentuado no ensaio 2, fato que foi traduzido pelos valores de “D” ajustados.

Por outro lado, caso o meio poroso utilizado em cada um dos ensaios fosse equivalente, uma vez que a velocidade de água nos poros é maior no ensaio 2, de acordo com NIELSSEN e BIGGAR(1961), esperaria-se uma inversão da posição das curvas associadas aos ensaios 2 e 3. Em outras palavras, em um mesmo meio poroso o ensaios conduzidos com velocidade mais baixas apresentariam uma maior difusividade.

5. CONCLUSÃO

Pôde-se verificar que os valores dos parâmetros de transporte, fator de retardamento (R) e coeficiente de dispersão (D), ajustados utilizando-se o programa Disp e o programa construído no ambiente Matlab 6.5 foram bastante próximos e, em ambos os casos, as curvas obtidas ajustaram-se bem aos dados experimentais. Sendo assim, pode-se concluir que os dois modelos avaliados neste capítulo apresentaram resultados equivalentes.

A construção do modelo no ambiente Matlab 6.5 mostrou-se vantajosa à medida que, além de fornecer respostas rápidas e precisas, possibilita ao usuário a utilização de um grande volume de ferramentas numéricas já disponíveis neste software.

As curvas de eluição obtidas experimentalmente demonstram que, mesmo utilizando-se o mesmo solo sob as mesmas densidades no preenchimento das colunas, houve diferença entre os meios porosos utilizados, esta diferença, possivelmente esta associada à acomodação do solo no interior das colunas. Tal resultado ressalta que uma das grandes dificuldades associadas a determinação dos parâmetros encontra-se na condução dos ensaios experimentais que precedem o seu ajuste.

6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BIGGAR, J.W.; NIELSEN, D.R. Miscible displacement: II. Behavior of Tracers. **Soil Science Society of America**, v.26, n.2, p.125-128, 1962.

BORGES JUNIOR, J. C. F.; P. A. FERREIRA. Equações e programa computacional para cálculo do transporte de solutos no solo. **Revista Brasileira de Eng. Agrícola e Ambiental**. v. 10, n. 3, p.604-611, 2006.

CODY, W. J., "Rational Chebyshev Approximations for the Error Function," **Math. Comp.**, pgs. 631-638, 1969

COSTA, S. N. Desenvolvimento de m modelo computacional para simular o transporte de água e solutos no solo sob condições de escoamento não permanente na vertical. 1998. 145p. (Tese de Doutorado) Universidade Federal de Viçosa– UFV, Viçosa/MG.

CUNHA, M. C. C. **Métodos Numéricos**. 2ed. Campinas: Editora da Unicamp, 2000. 265p.

GENUCHTEN, M.T. Van; WIERENGA, P.J. Solute dispersion coefficients and retardation factors. In: BLACK, C.A. (Ed.) *Methods of soil analysis*. **Madison: Soil Science Society of America**, 1986. p.1025-54. (American Society of Agronomy, 9)

GUIDORIZZI, H. L., **Um curso de Cálculo**, V. 1, Livros Técnicos e Científicos Ed. Ltda, 5 ed. (2001).

MIRANDA, J. H. Modelo para a simulação da dinâmica de nitrato em colunas verticais de solo não saturado. 2001. 79p. (Tese de Doutorado) ESALQ- Escola Superior de Agricultura Luiz de Queiroz – USP, Piracicaba/SP.

MIRANDA, J. H.; DUARTE, S. N. Modelo para simulação da dinâmica de nitrato em colunas verticais de solo não saturado. **Revista Brasileira de Eng. Agrícola e Ambiental**. v. 6, n. 2, p.235-241, 2002.

MIRANDA, J.H.; DUARTE; S. N.; LIBARDI, P. L.; FOLEGATTI, M.V. Simulação do deslocamento de potássio em colunas verticais de solo não saturado. In: XXXIII Congresso Brasileiro de Engenharia Agrícola (CONBEA), 2004, Caderno de Resumos.

MIRANDA, J. H.; COLOMBO, A.; LIBARDI, P. L. Modelo computacional para ajuste de curvas de distribuição de concentração de efluentes. In: XXXV Congresso Brasileiro de Engenharia Agrícola (CONBEA), 2006, Caderno de Resumos.

NIELSEN, D.R.; BIGGAR, J.W. Miscible displacement in soils: I. Experimental Information. **Soil Science Society of America**, v.25, n.1, p.1-5, 1961.

RIVERA, R.N.C. Modelagem da dinâmica da água e do potássio na irrigação por gotejamento superficial. Piracicaba, 2004. 89p. Tese (Doutorado) - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", Universidade de São Paulo.

RUGGIERO, M. A. G.; LOPES, V. L. R. **Cálculo Numérico:** aspectos teóricos e computacionais. 2ed. São Paulo: MAKRON Books, 1996. 406p.

WRAITH, J.M.; OR, D. Nonlinear parameter estimation using spreadsheet software. **Journal of Natural Resources** 27: 13-19, 1998.

CAPITULO 3: REFLECTOMETRIA NO DOMÍNIO DO TEMPO APLICADA AO MONITORAMENTO DA DINÂMICA DA ÁGUA E DE SOLUTOS EM COLUNAS DE SOLO NÃO SATURADO

1. RESUMO

Conhecer a dinâmica da água e de solutos no solo é condição imprescindível para a produção agrícola sustentável. A avaliação experimental desses processos em condições de campo mostra-se bastante difícil, razão pela qual, a condução de estudos em laboratório, utilizando-se colunas de solos, é uma pratica bastante comum na literatura. Tal procedimento permite que a dinâmica da água e de solutos seja avaliada em uma situação que, embora artificial, viabilize um maior controle e entendimento destes processos.

Comumente, a avaliação da concentração de solutos ao longo da coluna de solo é feita pela utilização de pastas saturadas, metodologia destrutiva que não permite que a dinâmica de solutos no solo seja avaliada sucessivamente em um mesmo ponto de monitoramento. Neste sentido, a proposição e a utilização de metodologias não destrutivas que possibilitem o monitoramento contínuo da dinâmica da água e de solutos representam um importante avanço nesses estudos.

Sendo assim, este capítulo tem como objetivo projetar e avaliar o potencial da aquisição de dados por sondas de TDR (reflectometria no domínio do tempo) inseridas em colunas de solo não saturado com aplicação voltada ao estudo da dinâmica da água e de solutos no solo.

O estudo experimental apresentado neste capítulo foi dividido em duas etapas. Numa etapa inicial (Etapa 1), desenvolvida no Laboratório de Edafologia da Universidade da Corunha (La Corunha – Espanha), foram utilizadas colunas de aço inox de 22 cm de diâmetro e 50 cm de comprimento equipada com 8 sondas de TDR e 4 extratores de solução. Na segunda etapa (Etapa 2), desenvolvida no Laboratório de Irrigação e hidráulica e da Faculdade de Engenharia Agrícola (FEAGRI-UNICAMP), os ensaios experimentais foram conduzidos em uma coluna de acrílico de 35 cm de diâmetro interno e 105 cm de comprimento equipada com 12 sondas de TDR e com 6 extratores de solução.

Em cada uma destas etapas foram conduzidos dois ensaios, sendo que na Etapa 1 monitorou-se a dinâmica do nitrato em uma coluna de solo deformado, preenchida com terra fina seca ao ar (TFSA), bem como, em uma coluna de solo indeformado. Na etapa 2 monitorou-se, nos dois ensaios realizados, a dinâmica do potássio em colunas preenchidas com TFSA.

Nos ensaios conduzidos com TFSA os resultados obtidos demonstram que o desenho experimental proposto neste trabalho permitiu que a dinâmica da água e de solutos fosse avaliado ao longo do tempo de uma maneira bastante satisfatória. Já no ensaio conduzido em coluna de solo indeformada, os resultados obtidos foram comprometidos pelo fato de que o solo utilizado neste caso era bastante heterogêneo possuindo uma grande quantidade de cascalhos ao longo do seu perfil.

2. INTRODUÇÃO

Devido às dificuldades inerentes ao estudo experimental da dinâmica de água e de solutos no solo, em condições de campo, a condução destes estudos em laboratório ou em ambientes protegidos, utilizando-se colunas preenchidas com terra fina seca ao ar é uma prática bastante recorrente na literatura. Tal procedimento permite que a dinâmica da água e de solutos seja avaliada em uma condição controlada, permitindo um melhor entendimento deste processo. No Brasil, como pode ser visto no trabalho de RIVERA (2004), MIRANDA (2001) e em COSTA (1998), de maneira geral, a avaliação da dinâmica de água e solutos em colunas de solo é feita mediante a extração de amostras de solo e posteriores quantificações das respectivas umidades gravimétricas e das concentrações dos íons de interesse, mediante o uso da técnica da pasta saturada. Esta técnica destrutiva não admite a re-amostragem de um mesmo ponto, inviabilizando a avaliação da dinâmica de água e solutos ao longo da coluna de maneira contínua (SILVA et al., 2005).

Neste sentido o uso técnica da reflectometria no domínio do tempo (TDR) em estudos da dinâmica de água e de solutos no solo demonstra um grande potencial, uma vez que, segundo COELHO e ARRUDA (2001), esta técnica destaca-se justamente por ser um método não destrutivo, que não utiliza radiação ionizante o que é bastante preciso, podendo ser

acoplado a multiplicadores, possibilitando a construção de um sistema de aquisição automática de dados em intervalos de tempo pequenos, da ordem de alguns segundos.

De um modo geral, a técnica da TDR baseia-se no sensível efeito da umidade do solo sobre a velocidade de pulsos de microondas em cabos condutores (guia) envoltos pelo solo. Tal fenômeno deve-se à diferença entre as constantes dielétricas, K , da água, do ar e do solo. O ar possui valor mínimo igual a “1”, o solo variando entre 3-5 e a água o valor máximo de “81”. A constante K medida no volume de solo é denominada de constante dielétrica aparente, K_a (SOUZA et al., 2001).

Segundo os mesmos autores, o equipamento da TDR é formado basicamente por um testador de cabos e um sensor com hastes metálicas ligados entre si por um cabo coaxial, medindo o tempo gasto para que um pulso eletromagnético se desloque do início ao fim da guia de comprimento conhecido. A K_a da matriz do solo afeta a velocidade do pulso, sendo assim, conhecendo-se o tempo de deslocamento do pulso pode-se determinar a umidade volumétrica do solo.

DALTON et al. (1984) avaliando o uso da TDR para a estimativa do conteúdo de água em solos condutivos demonstraram que o sinal refletido, além de informações acerca do tempo de trânsito do pulso, contém informações relativas à dissipação da energia eletromagnética que podem ser usadas para avaliar a condutibilidade elétrica média e, conseqüentemente, a salinidade do solo. OR e JONES (2001), afirmam que a técnica da TDR, que além determinar o conteúdo de água, é também uma metodologia bastante precisa para determinar a condutividade elétrica no solo e em outros meios porosos.

A calibração de equações que relacionem, para cada tipo de solo, a condutividade elétrica com a concentração de solutos no solo vem sendo o objetivo de muitos trabalhos que propõem a utilização da TDR para a avaliação do movimento de solutos no solo, como é o caso de WARD et al. (1995), NADLER et al. (1999), BEJAT et al.(2000) e SOUZA et al. (2008).

COELHO e ARRUDA (2001), SOUZA et al. (2001), e TOPP et al. (1980) destacam o custo como sendo a principal desvantagem da técnica de TDR. TOMMASELLI, (2001), afirma que, outra dificuldade na utilização desta técnica deve-se a necessidade de calibração tanto para a determinação da umidade quanto para a determinação de um íon de interesse, tal é trabalhosa e que tem se mostrado dependente dos diferentes tipos de solo. Por outro lado,

SOUZA et al (2001) afirmam que tal inconveniente é aceitável quando comparado com as vantagens apresentadas relação as outras técnicas.

Devido as suas vantagens, muitos estudos tem utilizado a técnica de TDR para avaliar a dinâmica de água e de solutos em colunas de solo MUNOZ-CARPENA et al. (2005), RITTER et al. (2003), NISSEN et al. (2000), VANCLOOSTER et al. (1995) entre outros. De uma maneira geral, os resultados apresentados nos trabalhos descritos acima, demonstram que o uso da técnica de TDR mostrou-se bastante eficiente no monitoramento da dinâmica da água e de solutos em diferentes tipos de solo. Sendo assim, este capítulo tem como objetivo avaliar a dinâmica de solutos em colunas de solo não saturado monitoradas com TDR.

3. MATERIAL E MÉTODOS

Para um melhor entendimento dos ensaios experimentais desenvolvidos neste trabalho os mesmos serão apresentados em duas etapas:

Etapa 1: experimento conduzido no Laboratório de Edafologia-Universidade da Corunha-Espanha e;

Etapa 2: experimento conduzido no Laboratório de hidráulica da Faculdade de Engenharia Agrícola (FEAGRI-UNICAMP).

3.1 Experimento Conduzido no Laboratório de Edafologia - UDC

Nesta etapa foram conduzidos dois ensaios experimentais: um com estrutura deformada e outro com estrutura do solo indeformada. Em ambos os casos, forma utilizadas colunas de aço inox de 22 cm de diâmetro e 90 cm de altura fixadas a um suporte metálico.

Embora as colunas apresentassem 90 cm de altura, como conseqüência de dificuldades experimentais, principalmente ao que se refere a amostragem de colunas indeformadas, nos respectivos ensaios, as mesmas foram preenchidas com solo a uma altura de 50 cm.

Nesta etapa, as colunas foram preenchidas utilizando-se um CAMBISSOL, segundo a classificação da FAO localizado no município de A Pastoriza, 43° 14'3'' latitude 7° 18'42'' longitude, Lugo-Espanha. Na Tabela 1 são apresentadas as características físico-hídricas do solo utilizado nesta etapa do trabalho.

Tabela 1: Características físico-hídricas do solo utilizado na Etapa 1.

Textura			Densidade		Porosidade (%)	K_0 cm h^{-1}
Areia	Silte	Argila	Solo	Partículas		
g kg^{-1}			kg dm^{-3}			
280	571	149	1,2	2,65	56,52	9,38

O deslocamento da água e de solutos ao longo da coluna foi monitorado em quatro profundidades: 10 cm, 20 cm, 30 cm e 40 cm. Cada um dos pontos de monitoramento foi equipado com 2 sondas de TDR da marca Campbell com 3 hastes de 7,5 cm de comprimento e 1 extrator de solução (Figura 1).

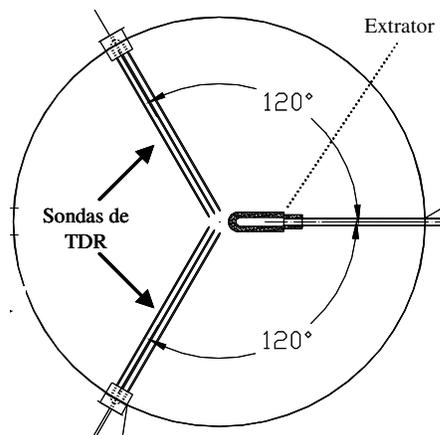


Figura 1: Seção Transversal da coluna em cada ponto de monitoramento

As sondas de TDR foram acopladas a um multiplexador SDMX50 conectado a o reflectométrômetro TDR100. Foram feitas leituras de K_a e de C_e a cada 5 min. Através do *software loggernet* tais leituras foram enviadas para um *notebook* onde foram armazenadas. Além de permitir o armazenamento, o *software* também permitiu a visualização dos dados à medida em que foram sendo obtidos.

Os extratores de solução utilizados neste trabalho foram construídos utilizando-se cápsulas porosas e mangueiras do tipo cristal de 7,5 mm de diâmetro externo e com 2 mm de

espessura. Depois de inseridas nas cápsulas, as mangueiras eram fixadas utilizando-se adesivo epóxi.

Uma vez preenchidas com solo e devidamente equipada com as sondas de TDR e com os extratores de solução, processos que, posteriormente, serão discutidos com maiores detalhes, deu-se início aos ensaios experimentais.

Em cada um dos ensaios aplicou-se à coluna, com uma vazão constante de $0,5 \text{ L h}^{-1}$ uma solução de NaNO_3 numa concentração de nitrato de 1350 mg L^{-1} . Afim de promover o deslocamento homogêneo da frente de molhamento, a solução de NaNO_3 foi aplicada à coluna de solo através de um aparato construído utilizando-se uma coluna de PVC de 15 cm de diâmetro e 30 cm de altura. Na base desta coluna foi fixado uma malha de nylon que teve como objetivo fornecer suporte a uma chapa, também de PVC, com o diâmetro ligeiramente menor que o da coluna utilizada. Esta chapa foi perfurada, semelhantemente a um chuveiro, sendo devidamente acomodada à base da coluna. Uma vez acomodada, adicionou-se sobre a mesma uma camada de 10 cm de areia fina lavada.

A aplicação de uma vazão relativamente baixa às colunas teve como objetivo evitar-se que, ao longo de todo experimento, se formasse uma coluna de água na superfície do material que preenchia a coluna.

Como não se podia avaliar visualmente o deslocamento da frente de molhamento, paralelamente as leituras automatizadas de K_a e de C_e , as extrações da solução do solo foram feitas de forma sistematizada, ou seja, a cada 20 min, a partir do início do experimentos foram feitas tentativas de amostragem da solução do solo.

As extrações de solução foram feitas utilizando-se uma bomba manual de vácuo, da marca Soil Moisture, e presilhas. Através da bomba de vácuo estabelecia-se a tensão de 80 Kpa e, utilizando-se as presilhas as mangueiras foram bloqueadas, num intervalo de tempo de 10 min, afim de que a tensão aplicada fosse mantida no seu interior.

Na Figura 2 é exibido o conjunto, extratores, bomba de vácuo e presilhas, utilizado na extração de solução das colunas de solo.



Figura 2: Extratores e bomba manual de vácuo utilizados na extração de solução das colunas de solo.

O conjunto coluna de solo e o seu suporte metálico, permaneceram, durante todo o experimento, posicionados em cima de uma balança eletrônica da marca Kern com uma capacidade de 100 kg com uma precisão de 1g. Assumindo-se que a solução aplicada às colunas tem densidade igual à da água em condições normais de pressão e temperatura, foi possível, através da variação da massa registrada pela balança, o controle da vazão aplicada a coluna.

Os ensaios foram conduzidos até que a frente de molhamento atingisse as sondas posicionadas a 40 cm de profundidade, o que levou 6 horas e 55 min, na coluna indeformada e 14 horas e 55 min, na coluna deformada. Na Figura 3 é apresentada uma vista geral do aparato experimental utilizado nos ensaios com coluna deformada e indeformada.



Figura 3: Aparato experimental utilizado nos ensaios com coluna deformada e indeformada.

3.1.1 Preenchimento da Coluna de Solo com Estrutura Deformada

No ensaio com solo não estruturado, a coluna foi preenchida com TFSA, até a altura de 50 cm, mantendo-se uma densidade constante de $1,2 \text{ kg dm}^{-3}$, densidade comum aos solos galegos em condições de campo. Com ajuda de um funil e uma mangueira, o preenchimento da coluna, foi feito a partir de sua base em camadas de 10 cm. Em cada uma destas camadas foram instalados os extratores de solução e as sondas de TDR conforme mostra a Figura 4.

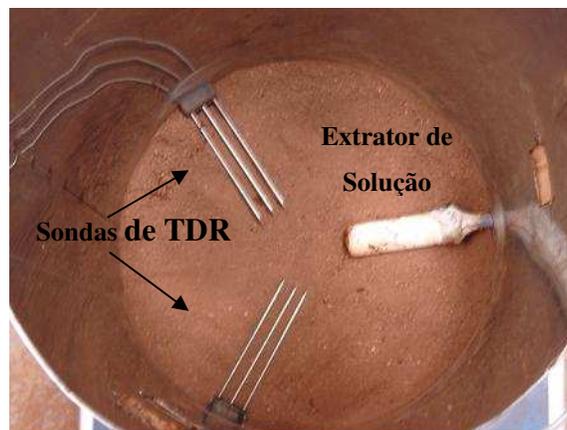


Figura 4: Instalação das sondas de TDR e extratores de solução na coluna deformada.

3.1.2 Amostragem da Coluna de Solo com Estrutura Indeformada

Para a amostragem da coluna indeformada, foram abertas trincheiras no solo de tal maneira que ficasse exposto um monólito com uma seção quadrada com, aproximadamente 40 cm de aresta (Figura 5A). A coluna metálica era posicionada no centro deste monólito e era cravada ao mesmo (Figura 5B).

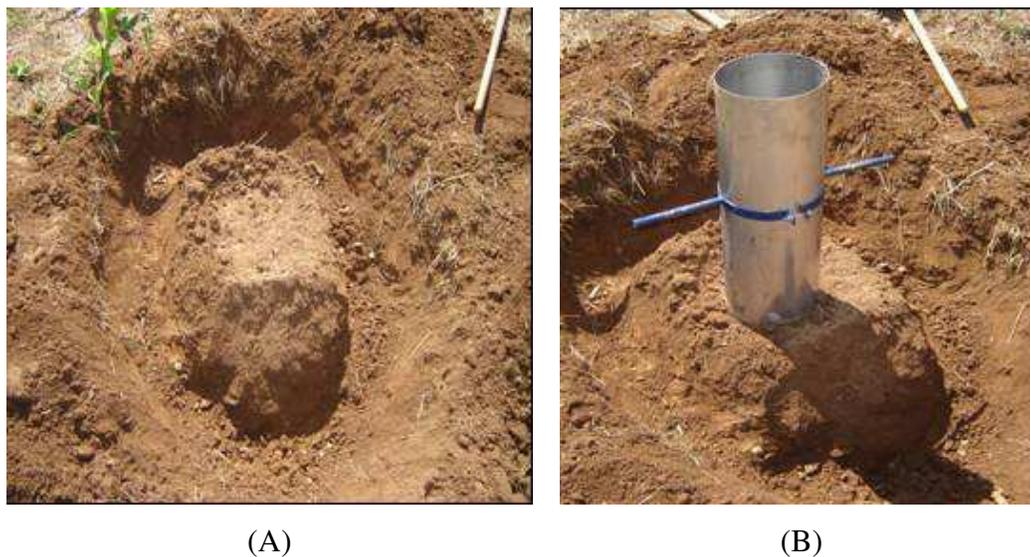


Figura 5: Amostragem da coluna indeformada.

Em geral, os solos galegos são pouco profundos e apresentam uma grande quantidade de cascalhos (Figuras 6A e 6B). Tais cascalhos, dificultaram bastante a retirada das amostras, pois em muitas das tentativas tais cascalhos coincidiam com as bordas da coluna o que impossibilitava o seu cravamento (Figura 7).



(A)

(B)

Figura 6: Cascalhos presentes no solo encontradas ao longo do processo de amostragem.



Figura 7: Cascalhos coincidentes com o borde da coluna

Devido a grande concentração de cascalhos no perfil do solo, nos casos em que se conseguia retirar as colunas indeformadas, tais amostras apresentavam uma grande quantidade de cascalhos no seu interior. Buscando-se um meio mais homogêneo, escolheu-se a coluna que, aparentemente possuía a menor quantidade de cascalhos no seu interior. Tal seleção foi feita avaliando-se a base das colunas amostradas (Figura 8).

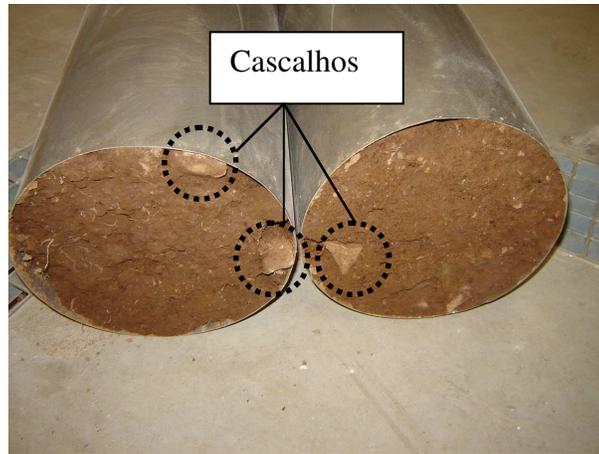


Figura 8: Cascahos no interior das colunas amostradas.

Uma vez selecionada a coluna, deu-se início ao processo de instalação das sondas de TDR e dos extratores de solução. Através de janelas previamente abertas na parede da coluna, introduziam-se as sondas de TDR. Para instalação dos extratores de solução, em cada uma das quatro profundidades pré-determinadas, inicialmente, utilizando-se trado com o mesmo diâmetro das cápsulas, retiravam-se amostras de solo até que o orifício aberto na coluna estivesse suficientemente profundo para a acomodação dos extratores de solução. A partir de então, parte do solo retirado era umedecido e, juntamente com a cápsula porosa, era re-introduzido no interior da coluna. Tal procedimento teve como objetivo proporcionar um acomodamento mais íntimo entre a cápsula porosa e o solo da coluna. Após a instalação as janelas onde se encontravam as sondas de TDR e os extratores de solução foram devidamente vedadas com silicone.

3.1.3 Curva de Calibração

Uma vez que os resultados obtidos por LOPEZ et al. (2005) demonstram que, para solos com características semelhantes as do utilizado nesta etapa deste trabalho, as curvas de calibração obtidas foram bastante semelhantes à proposta por TOPP et al. (1980). As estimativas da umidade volumétrica a partir dos valores de K_a , foram obtidas utilizando-se a curva de calibração proposta por este último autor.

3.2 Experimento Conduzido no Laboratório de Hidráulica - FEAGRI

Com base na experiência adquirida na etapa 1, nos dois experimentos conduzidos nesta etapa optou-se pela utilização de colunas deformadas. Em cada um dos experimentos utilizou-se uma coluna de acrílico de 35 cm de diâmetro interno e 105 cm de comprimento. Escolheu-se o acrílico pois, além de ser um material inerte, permite a avaliação visual da acomodação do solo e da frente de molhamento. As colunas foram preenchidas com TFSA proveniente de um LATOSSOLO VERMELHO Amarelo, fase arenosa, denominado Série “Sertãozinho”, localizado nas coordenadas geográficas de 22° 43’ 14” de latitude Sul e 47° 36’ 47” de longitude Oeste, no município de Piracicaba-Brasil. Na Tabela 2 são apresentadas as características físico-hídricas deste solo.

Tabela 2: Características físico- hídricas do solo utilizado na Etapa 2.

Textura			Densidade		Porosidade	K ₀
Areia	Site	Argila	Solo	Partículas		
g kg ⁻¹			kg dm ⁻³		(%)	cm h ⁻¹
695	129	185	1,5	2,575	41,74	17,09

As colunas foram preenchidas a partir da base, mantendo-se uma densidade uniforme de 1,5 kg dm⁻³. O deslocamento da água e de solutos foi monitorado em seis profundidades: 15 cm, 30 cm, 45cm, 60 cm e 90 cm. Cada um dos pontos de monitoramento foi equipado com 2 sondas de TDR, um extrator de solução e uma janela que possibilita a retirada de amostras de solo ao final do experimento (Figura 9).



Figura 9: Preenchimento da coluna de solos e instalação dos extratores e das sondas de TDR.

Foram utilizados um total de 12 sondas de TDR, construídas no laboratório de hidráulica da Faculdade de Engenharia Agrícola (Feagri- Unicamp), com três hastes de 15 cm de comprimento, 0,3 cm de diâmetro e com um espaçamento de 2,5 cm. Semelhantemente aos ensaios realizados na Etapa 1, utilizou-se um multiplexador SDMX50 conectado a um TDR100, a partir do qual, a cada minuto, foram feitas leituras dos valores de K_a e de C_e . Os 4 extratores de solução utilizados nesta etapa do trabalho foram construídos de maneira semelhante à descrita na Etapa 1. Na Figura 10 é apresentada a coluna de solo equipada com as sondas de TDR, extratores de solução e o sistema automatizado para aquisição de dados.



Figura 10. Coluna de solo equipada com sondas de TDR, extratores de solução e sistema automatizado para aquisição de dados.

Durante o período de 8 horas e 10 minutos aplicou-se a coluna, com uma vazão constante de $2,7 \text{ L h}^{-1}$ (Ensaio 1) e $3,0 \text{ L h}^{-1}$ (Ensaio 2), uma solução de KNO_3 numa concentração de potássio de 1500 mg L^{-1} . Em ambos os experimentos, a vazões foram aplicadas mediante a utilização de 4 gotejadores distribuídos na superfície da mesma (Figura 11). A diferença das vazões aplicadas nos dois ensaios foi devida aos gotejadores utilizados, uma vez que os mesmos trabalharam sob uma pressão relativamente baixa.



Figura 11: Gotejadores utilizados na aplicação da solução à coluna

Utilizando-se um reservatório com uma graduação de 4 L, o controle da vazão ao longo de cada experimento foi feita mediante consecutivas avaliações da variação do volume da solução do reservatório em função do tempo.

Como o deslocamento da frente de molhamento pôde ser acompanhado visualmente, no primeiro ensaio experimental, com exceção do último ponto de monitoramento, onde, devido à baixa umidade, não se pôde extrair uma amostra. Nesse caso, toda vez que a frente de molhamento encontrava-se em uma profundidade intermediária a dois pontos de monitoramento consecutivos, procedia-se as extrações de amostras da solução do solo. Em outras palavras, quando à frente de molhamento encontrava-se entre 15 e 30 cm, foi extraída uma amostra da solução do solo no primeiro ponto de monitoramento. Quando à frente de molhamento encontrava-se entre 30 e 45cm de profundidade, eram extraídas amostras do primeiro e do segundo ponto de monitoramento e assim sucessivamente até que a frente de molhamento atingisse o sexto ponto de monitoramento quando era encerrado o ensaio. No segundo ensaio, as amostras da solução do solo foram extraídas nos mesmos tempos do primeiro ensaio.

Os extratores utilizados nesta etapa do trabalho foram construídos de forma equivalente aos utilizados na Etapa 1. Por outro lado a extração de solução foi feita utilizando-se um sistema composto por uma bomba de vácuo com motor elétrico e 6 quitassatos (Figura 12). Este sistema mostrou-se mais eficiente que o utilizado na Etapa 1 pois permitiu que um vácuo de 60 kPa fosse aplicado simultaneamente nos diferentes pontos de monitoramento.



(A)



(B)

Figura 12. Sistema para a extração simultânea da solução do solo nos diferentes pontos de monitoramento.

Ao final de ambos os experimentos, como pode ser visto na Figura 13, através de aberturas preexistentes na parede da coluna, posicionadas nas 6 profundidades de monitoramento, com a ajuda de um tubo de PVC, foram retiradas amostras de solo a partir das quais determinou-se a umidade gravimétrica e, utilizando-se a técnica da pasta saturada eram determinadas também as concentrações de K.



Figura 13: Aberturas na parede da coluna e tubo de PVC utilizados na amostragem de solo nos diferentes pontos de monitoramento.

A fim de se obter uma estimativa da umidade volumétrica a partir dos valores obtidos para K_a foi ajustada uma curva de calibração segundo a metodologia descrita por TOMMASELLI, (2001).

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Serão apresentados, na seqüência, os resultados obtidos nos ensaios experimentais conduzidos neste capítulo e, a exemplo do que foi feito na seção anterior e serão apresentados e discutidos separadamente para as Etapas 1 e 2.

4.1 Resultados Obtidos pela Etapa 1

4.1.1 Coluna de Solo com Estrutura Deformada

Com o objetivo de avaliar a consistência dos equipamentos utilizados na pesquisa, foram obtidos os valores de K_a e C_e registrados ao longo de 14 horas e 55 minutos, do experimento conduzido com TFSA, para os pares de sondas instalados nas profundidades de 10 cm, 20 cm, 30 cm e 40 cm (Figura 14).

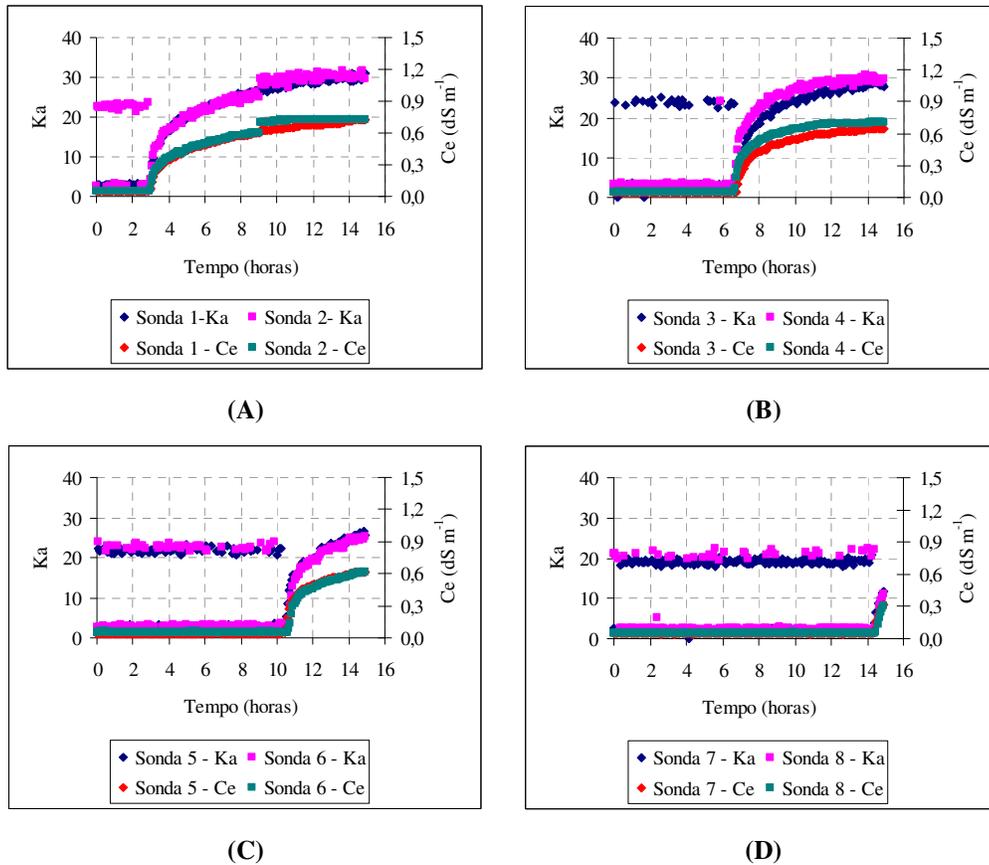


Figura 14: Valores de K_a e C_e para os pares de sondas posicionados nas profundidades de 10 cm (A), 20 cm (B), 30 cm (C) e 40 cm (D).

Analisando-se a Figura 14 (A) pôde-se verificar que inicialmente existe uma oscilação bastante significativa dos valores de Ka. Entretanto, 2 horas e 55 minutos transcorridas após o início do experimento, as leituras de Ka se estabilizaram apresentando comportamentos bastante semelhante para as sondas 1 e 2. Tais oscilações nos valores de Ka também puderam ser observadas nas outras três profundidades monitoradas, sendo que o tempo para estabilização das leituras foram de 6,58, 10,25 e 14,33 horas para as respectivas profundidades de 20, 30 e 40 cm.

A oscilação das leituras dos valores de Ka deve-se ao fato de que inicialmente o solo encontra-se com baixos valores de umidade volumétrica ($\theta = 6,12\%$) tal umidade conciliada à falta de estrutura do solo faz com que o contato entre a sonda de TDR e o solo, que deve ser bastante íntimo, não seja ideal. Com a chegada da frente de molhamento, independentemente da profundidade, as leituras estabilizam-se, pois o aumento da umidade do solo promove um melhor contato entre as sondas e o solo.

De uma maneira geral, independentemente da profundidade monitorada, as leituras de Ce registradas ao longo de todo o experimento foram bastante consistentes, demonstrando que este parâmetro é menos sensível a interface sondas-matriz do solo. Numa etapa inicial as leituras de Ce são praticamente constantes e a partir de um determinado momento apresentam um comportamento crescente. Os momentos em que as leituras de Ce deixam de ser constantes variam com a profundidade coincidindo com os momentos em que as leituras de Ka se estabilizam. Tal constatação reforça a hipótese de que tal comportamento este condicionado à chegada da frente de molhamento.

Em todos os ensaios conduzidos neste capítulo as sondas de TDR apresentaram a mesma variação nas leituras de Ka antes da chegada da frente de molhamento. Uma vez que se tem como objetivo avaliar o deslocamento da água e dos solutos aplicados às colunas de solo, processo que só tem início com a chegada da frente de molhamento, neste e nos demais ensaios, as leituras de Ka e Ce registradas antes deste momento foram desprezadas.

Sendo assim, buscando-se se uma melhor interpretação da consistência dos resultados obtidos, na Figura 15 apresenta-se, para o experimento anteriormente descrito, para os pares de sondas posicionados nas profundidades de 10 cm (A), 20 cm (B), 30 cm (C) e 40 cm (D) os valores obtidos nas leituras de Ka e Ce registrados a partir da chegada da frente de molhamento.

Através da Figura 15 verifica-se que, de uma maneira geral, as leituras de K_a e de C_e registradas para um par de sondas instaladas numa mesma profundidade apresentaram comportamentos bastante semelhantes. Tais resultados além de evidenciar a consistência do equipamento utilizado, também demonstram as homogeneidades do meio poroso utilizado e do deslocamento da frente de molhamento ao longo do mesmo.

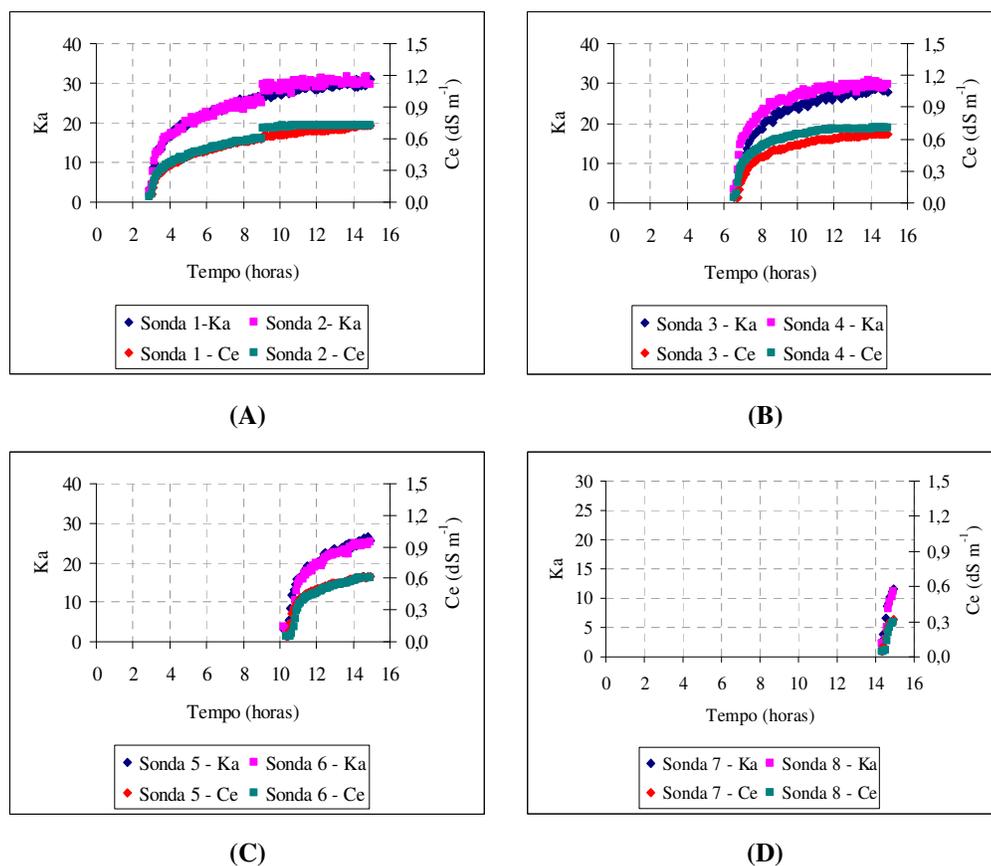


Figura 15: Valores de K_a e C_e registrados a partir da chegada da frente de molhamento para os pares de sondas posicionados nas profundidades de 10 cm (A), 20 cm (B), 30 cm (C) e 40 cm (D).

A Equação 1, apresenta a equação proposta por TOPP et al. (1980), utilizada neste etapa para descrever a umidade volumétrica (θ) em função de K_a .

$$\theta = 0,00000431 K_a^3 - 0,000551 K_a^2 + 0,0292 K_a - 0,0531 \quad (1)$$

Na Tabela 3 são apresentados, para cada par de sondas em cada uma das 4 profundidades monitoradas, os valores máximos, mínimos e o Erro Quadrático Médio (EQM) de K_a , C_e e θ .

Tabela 3. Valores máximos, mínimos e EQM de K_a , θ e C_e para os pares de sonda posicionados em cada ponto de observação.

Profundidade (cm)	Sondas	K_a			θ (%)			C_e (dS m ⁻¹)		
		Máximo	Mínimo	EQM	Máximo	Mínimo	EQM	Máximo	Mínimo	EQM*
10	1	30,96	3,28	1,28	55,69	14,309303	1,09	0,73	0,06	1,3
	2	31,56	2,76		56,13	12,964424		0,73	0,05	
20	3	29,57	2,77	8,52	54,62	12,981886	16,09	0,65	0,05	7,7
	4	30,63	3,24		55,44	14,197768		0,71	0,05	
30	5	26,44	2,90	3,37	51,96	13,325666	11,69	0,62	0,05	2,5
	6	25,22	2,72		50,82	12,842649		0,61	0,05	
40	7	11,65	2,76	3,97	32,53	12,955699	21,39	0,32	0,05	3
	8	11,06	2,25		31,45	11,605966		0,30	0,05	

EQM= Erro Quadrático Médio; EQM* (valores multiplicados por 10⁻⁵)

Pela Tabela 3 pode-se observar que, para K_a , em cada uma das profundidades avaliadas, os pares de sondas tiveram comportamentos semelhantes apresentando EQMs relativamente baixos. O ponto de monitoramento localizado a 20 cm de profundidade se destaca dos demais, apresentando o maior EQM (8,52), tal resultado já era esperado pois, avaliando-se a Figura 14, verifica-se claramente na Figura 14 (B) que as curvas de K_a obtidas a partir do par de sondas instalados nesta profundidade não se sobrepõem. Este comportamento pode estar associado a uma desuniformidade do deslocamento da frente de molhamento, o que por sua vez, pode ter ocorrido em função de uma desuniformidade da compactação do solo nesta camada.

Para C_e , os EQMs obtidos foram bastante baixos, indicando que a medida deste fator é pouco influenciado pela interface entre a haste das sondas de TDR e o solo. Para este fator, a profundidade associada ao maior EQM também é a de 20 cm, tal resultado reforça a hipótese de uma desuniformidade do deslocamento da frente de molhamento nesta camada.

A umidade volumétrica (θ) apresenta valores de EQM relativamente altos, que tendem a aumentar com a profundidade monitorada. Tal comportamento justifica-se pelo fato de que

θ correlaciona-se com K_a de uma forma não linear, conseqüentemente o erro quadrático de θ , $EQ(\theta)$, também é função não linear de K_a .

Para se avaliar o comportamento não linear entre o $EQ(\theta)$ e K_a foram montados dois conjuntos de valores para K_a : no primeiro conjunto com 38 elementos, os valores de K_a variaram uniformemente de 2 a 39. No segundo conjunto, também com 38 elementos, os valores de K_a variam uniformemente de 3 a 40. Tais conjuntos representam uma situação hipotética na qual os valores de K_a registrados por um par de sondas instaladas numa mesma profundidade de monitoramento apresentam, sistematicamente, uma diferença de 1 unidade nas respectivas leituras de K_a . Uma vez estabelecidos os conjuntos de valores de K_a , utilizando-se a Equação 1 calculou-se, as respectivas umidades volumétricas, posteriormente, calculou-se os EQs associados as estimativas das mesmas. Na Figura 16 é apresentado o comportamento do $EQ(\theta)$ em função de K_a .

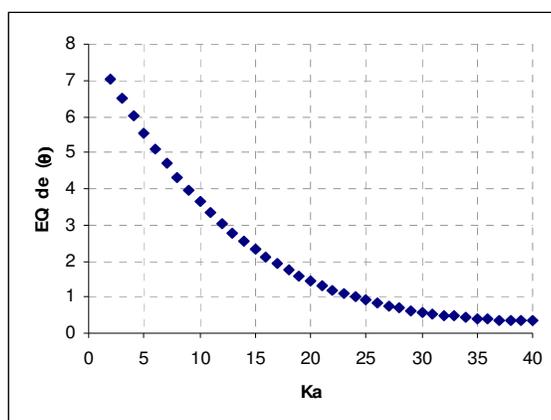


Figura 16: Comportamento do $EQ(\theta)$ em função de K_a .

Analisando-se a Figura 16, verifica-se que, para curva de calibração utilizada, mesmo fixando-se o erro nas consecutivas leituras de K_a , o $EQ(\theta)$, dentro da faixa avaliada neste trabalho, tende a diminuir com o aumento de K_a . Pelas características do experimento, as camadas mais superficiais da coluna tendem a apresentar maiores teores de umidade, e, conseqüentemente, maiores valores de K_a , tal comportamento justifica o fato de que, para θ , o EQM apresenta uma tendência de aumentar com a profundidade.

Com base nestes resultados, considerando-se que grande parte do EQM de θ é explicado mais pelas características da curva de calibração utilizada do que pela consistência

do equipamento, optou-se por trabalhar com os valores médios de θ e C_e em cada uma das profundidades avaliadas (Figura 17).

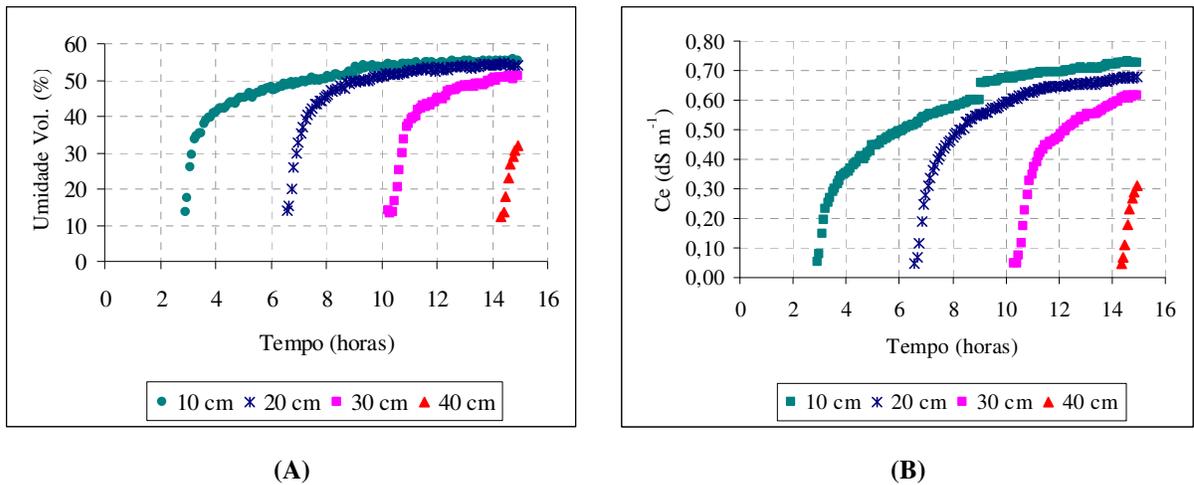


Figura 17: Valores médios de θ e C_e em cada uma das profundidades avaliadas.

Através da Figura 17 (A) pôde-se verificar que a frente de molhamento levou 2,92 horas para atingir o primeiro ponto de monitoramento, 3,66 horas para deslocar-se do primeiro ao segundo ponto de monitoramento, 3,67 para deslocar-se do segundo ao terceiro ponto de monitoramento e 4,08 horas para deslocar-se do terceiro ao quarto ponto de monitoramento.

Uma vez que a solução foi aplicada à coluna com uma vazão constante e a distância percorrida pela frente de molhamento para atingir cada um destes pontos estava fixa em 10 cm esperava-se, numa situação ideal, onde a acomodação do solo fosse homogênea, que o tempo levado para frente de molhamento atingir cada um destes pontos fosse constante. Por outro lado, os resultados apresentados na Figura 17 (A) sugerem que houve uma variação da densidade de fluxo a longo da coluna, tal variação pode estar associado a um gradiente da densidade do solo ao longo da profundidade. Mesmo com todos os cuidados tomados no preenchimento da coluna é possível que o peso do solo tenha compactado mais as camadas próximas à base da coluna.

Pela Figura 17(A) pôde-se verificar também que houve um certo paralelismo das curvas de umidade indicado a não ocorrência de fluxos preferências e indicando também que o conjunto de sensores instalados na coluna tiveram pouca ou nenhuma interferência na dinâmica da água.

Avaliando-se as curvas obtidas para Ce, (Figura 17 (B)), verifica-se, que as curvas de Ce apresentaram padrões de comportamento bastante semelhante aos dos apresentados para a umidade, (Figura 17 (B)). Tal resultado indica que houve pouca interação entre o íon de nitrato e a matriz do solo, sendo o fluxo de massa o principal processo responsável pelo deslocamento deste íon.

Na Tabela 4 são apresentadas os valores de umidade e as concentrações de nitrato avaliadas a partir das amostras da solução do solo retiradas pelos extratores de solução instalados nos diferentes pontos de monitoramento. A estratégia de amostragens sistemáticas a cada 20 minutos, inicialmente proposta, não foi viável. Sendo assim os tempos de amostragem foram determinados com base nas leituras de K_a e Ce feitas pelos pares de sonda instalados em cada uma das profundidades de monitoramento.

Tabela 4: Umidades do solo e concentrações de nitrato nas amostras da solução do solo retiradas nos pontos de monitoramento em diferentes tempos.

Profundidade (cm)	Tempo (horas)									
	9,92		10,92		11,92		13,50		14,92	
	θ (%)	NO ₃ (mg l ⁻¹)	θ (%)	NO ₃ (mg l ⁻¹)	θ (%)	NO ₃ (mg l ⁻¹)	θ (%)	NO ₃ (mg l ⁻¹)	θ (%)	NO ₃ (mg l ⁻¹)
10	53,85	1248,13	53,08	1360,28	54,94	1438,73	54,99	1479,33	55,29	1405,50
20	50,58	1301,03	51,88	1446,85	53,44	1462,28	53,72	1478,68	54,54	1447,45
30	-	-	25,11	-	43,35	1413,98	48,108	1518,30	50,47	1528,68
40	-	-	-	-	-	-	-	-	12,41	-

Pela da Tabela 4 pode-se verificar que as extrações de solução foram feitas 2,42, 3,52, 5,07, 6,63 e 8,15 horas após o início do experimento. Os valores de umidade preenchidos na coluna indicam que as profundidades em que se avaliou os mesmos já havia sido atingida pela frente de molhamento e, sendo assim, somente nestes casos pode-se extrair a solução do solo para posterior quantificação da concentração do nitrato. Nos casos destacados em negrito os valores de umidade não foram suficientemente grandes para permitir a extração da solução do solo.

Os resultados apresentados na Tabela 4 demonstram que a dinâmica da água e do nitrato foram avaliadas ao longo do tempo de uma maneira satisfatória, deve-se ressaltar que o sistema utilizado para a extração de amostras da solução do solo, sobretudo a utilização da

bomba manual de vácuo, condicionou a retirada de amostras à umidades relativamente elevadas, tal limitação não possibilitou a obtenção um gradiente maior das concentrações do íon de interesse.

4.1.2 Coluna de Solo com Estrutura Indeformada

A Figura 18, representa os valores obtidos para os pares de sondas posicionados nas profundidades de 10 cm (A), 20 cm (B), 30 cm (C) e 40 cm (D) os valores de Ka e Ce registrados ao longo das 6, 92 horas do experimento.

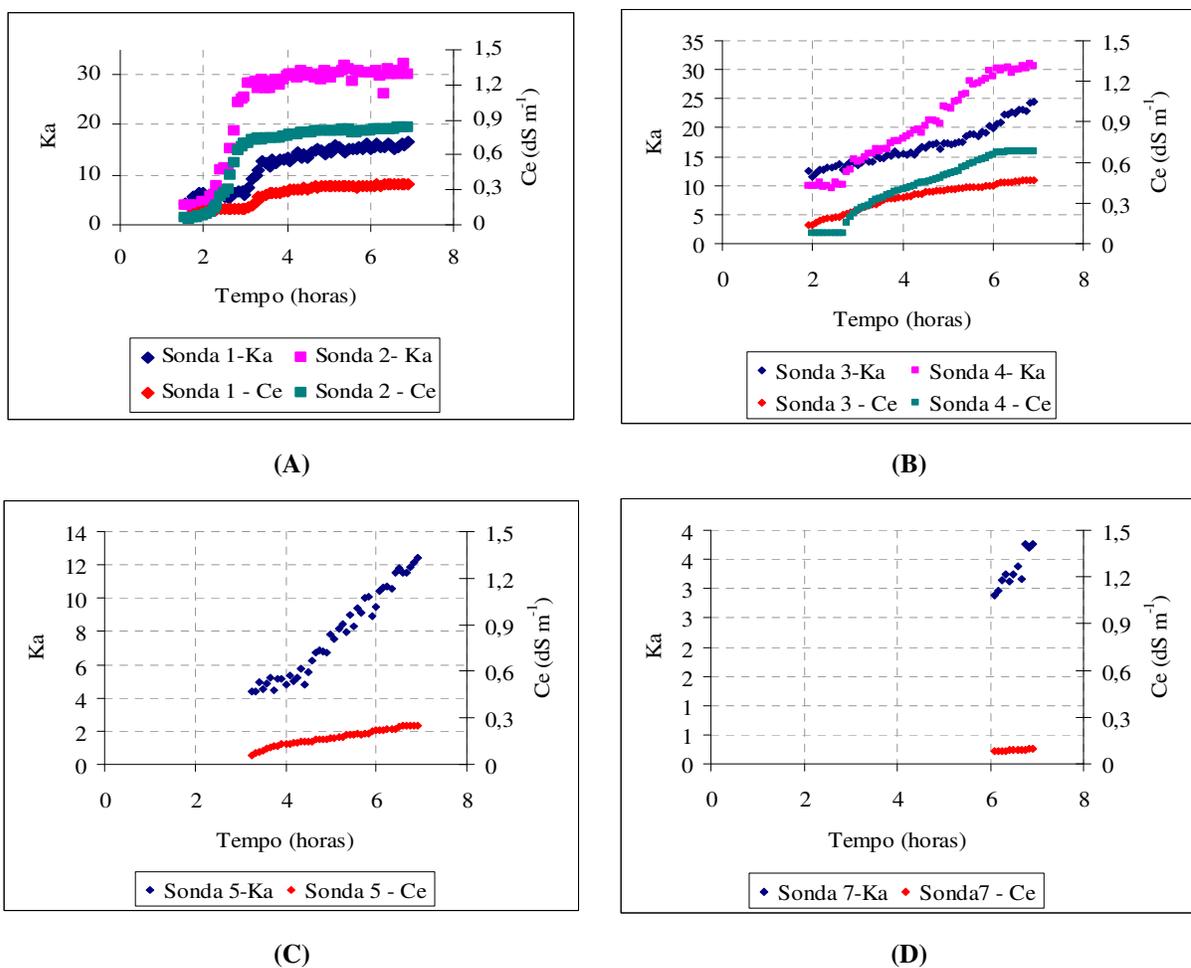


Figura 18: Valores de Ka e Ce registrados a partir da chegada da frente de molhamento para os pares de sondas posicionados nas profundidades de 10 cm (A), 20 cm (B), 30 cm (C) e 40 cm (D).

Analisando-se a Figura 18 (A e B), pode-se verificar que houve uma grande diferença entre as leituras de Ka e de Ce registradas pelos pares de sondas instaladas nas respectivas profundidades. Pode-se constatar que independentemente da profundidade, as sondas pares, posicionadas na mesma posição radial, apresentam maiores valores de Ka, tal resultado demonstra uma desuniformidade no deslocamento da frente de molhamento, que pode ter sido causada pela existência de camadas de impedimento, associadas a alta concentração de cascalhos, e pela possível existência de caminhos preferenciais. A hipótese da existência de caminhos preferenciais é reforçada pelo fato de que neste experimento, a solução de NaNO₃ foi aplicada com a mesma vazão do experimento descrito na seção 3.1.1, entretanto o tempo que a frente de molhamento levou para alcançar a profundidade de 40 cm foi de 6 horas, tempo que corresponde a menos da metade do observado no experimento descrito anteriormente.

As Figuras 18 (C e D), apresentam apenas as leituras realizadas 5 e 7, isto deve-se ao fato que as sondas 6 e 8 não puderam ser instaladas, nas respectivas profundidades de 30 e 40 cm, devido a presença de cascalhos nas posições pré estabelecidas para sua instalação.

A exemplo do que já foi discutido na seção 3.1.1, nesta seção as estimativas de θ a partir das leituras de Ka será feita utilizando-se a Equação 1. Na Tabela 5 são apresentados os valores máximos, mínimos e EQM de Ka, θ e Ce para os pares de sonda posicionados em cada ponto de observação.

Tabela 5. Valores máximos, mínimos e EQM de Ka, θ e Ce para os pares de sonda posicionados em cada ponto de observação.

Profundidade (cm)	Sondas	Ka			θ (%)			Ce (dS m ⁻¹)		
		Máximo	Mínimo	EQM	Máximo	Mínimo	EQM	Máximo	Mínimo	EQM
10	1	16,65	4,30	197,91	40,64	16,89	299,3	0,35	0,06	0,00184
	2	32,32	3,64		56,68	15,24		0,83	0,05	
20	3	24,50	11,61	29,58	50,12	5,31	35,9	0,47	0,14	0,00018
	4	31,09	9,55		55,79	5,31		0,68	0,08	
30	5	12,43	4,41	-	33,91	17,16	-	0,25	0,06	-
	6	-	-		-	-		-	-	
40	7	3,76	2,88	-	15,54	13,28	-	0,1	0,08	-
	8	-	-		-	-		-	-	

Como pode ser visto na Tabela 5, os EQMs calculados para K_a , C_e e θ são bastante elevados, o que, por sua vez, é reflexo da alta heterogeneidade do solo. Com base nestes valores, a utilização da média das leituras feitas pelos pares de sondas instaladas numa mesma profundidade não é razoável o que demonstra uma limitação do esquema experimental utilizado, sobretudo ao que se refere às extrações de solução, uma vez que, a cada profundidade foi instalado um único extrator e, nesta situação de heterogeneidade, as concentrações de nitrato determinadas a partir de amostras retiradas neste ponto podem não ser representativas do meio.

4.2 Resultados Obtidos pela Etapa 2

4.2.1 Ajuste da Curva de Calibração

Através da Figura 19 pode-se observar que a curva de calibração proposta ajusta-se bem aos dados experimentais, apresentando um coeficiente de determinação de 97,6 %. Já a curva de calibração proposta por TOPP et al. (1980) superestima a umidade volumétrica ao longo de toda a amplitude de K_a avaliada neste trabalho. Neste sentido, nos dois ensaios experimentais conduzidos nesta etapa deste trabalho, foi utilizada a curva de calibração apresentada na Equação 2.

$$\theta = 0,0034 K_a^3 - 0,2232 K_a^2 + 5,7554 K_a - 25,519 \quad (2)$$

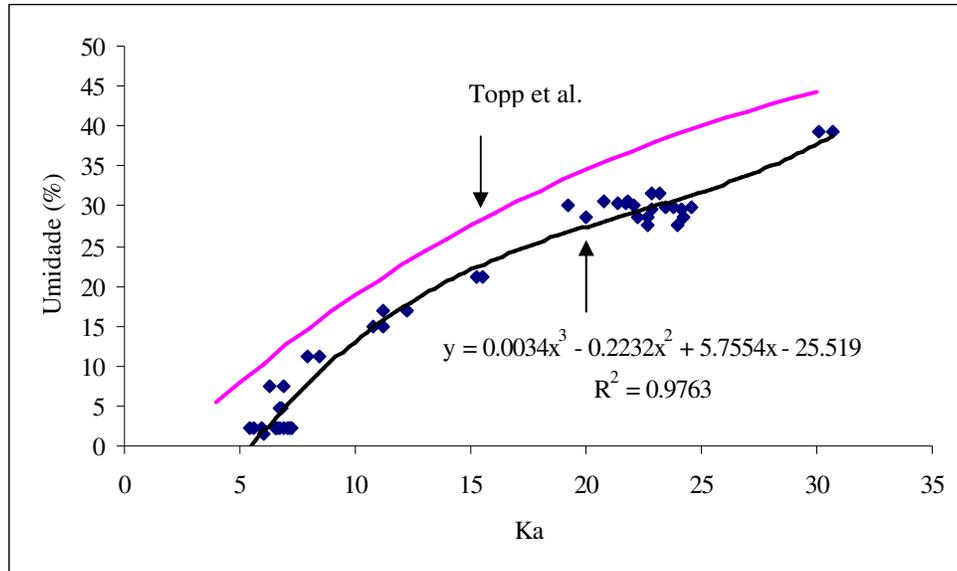


Figura 19: Dados experimentais, curva de calibração ajustada e curva de calibração.

4.2.2 Ensaio 1

Pela Figura 20, apresenta-se, para os pares de sondas posicionados nas profundidades de 15 cm (A), 30 cm (B), 45 cm (C), 60 cm (D) e 75 cm (E), os valores de Ka e Ce registrados ao longo das 8,2 horas do experimento.

Analisando-se as Figuras 20 (A), (B), (C) e (D) verifica-se que as leituras de Ka e Ce registradas pelos pares de sondas instalados em cada uma destas profundidades apresentaram comportamentos bastante semelhante, indicando um deslocamento homogêneo da frente de molhamento.

A utilização de uma coluna de acrílico permitiu que o deslocamento da frente de molhamento fosse acompanhado visualmente o que, além de possibilitar a constatação de que a frente de molhamento foi bastante uniforme, também possibilitou identificar o momento em que a mesma atingiu cada um dos pontos de monitoramento. Verificou-se posteriormente que, para cada uma das profundidades monitoradas, a partir do instante em que a chegada da frente de molhamento era identificada visualmente as leituras de Ka e de Ce se estabilizavam reforçando-se assim, não só a eficiência do esquema experimental proposto na detecção da chegada a frente de molhamento, mas também da eficiência do mesmo no monitoramento da dinâmica da água e do íon de potássio ao longo da coluna.

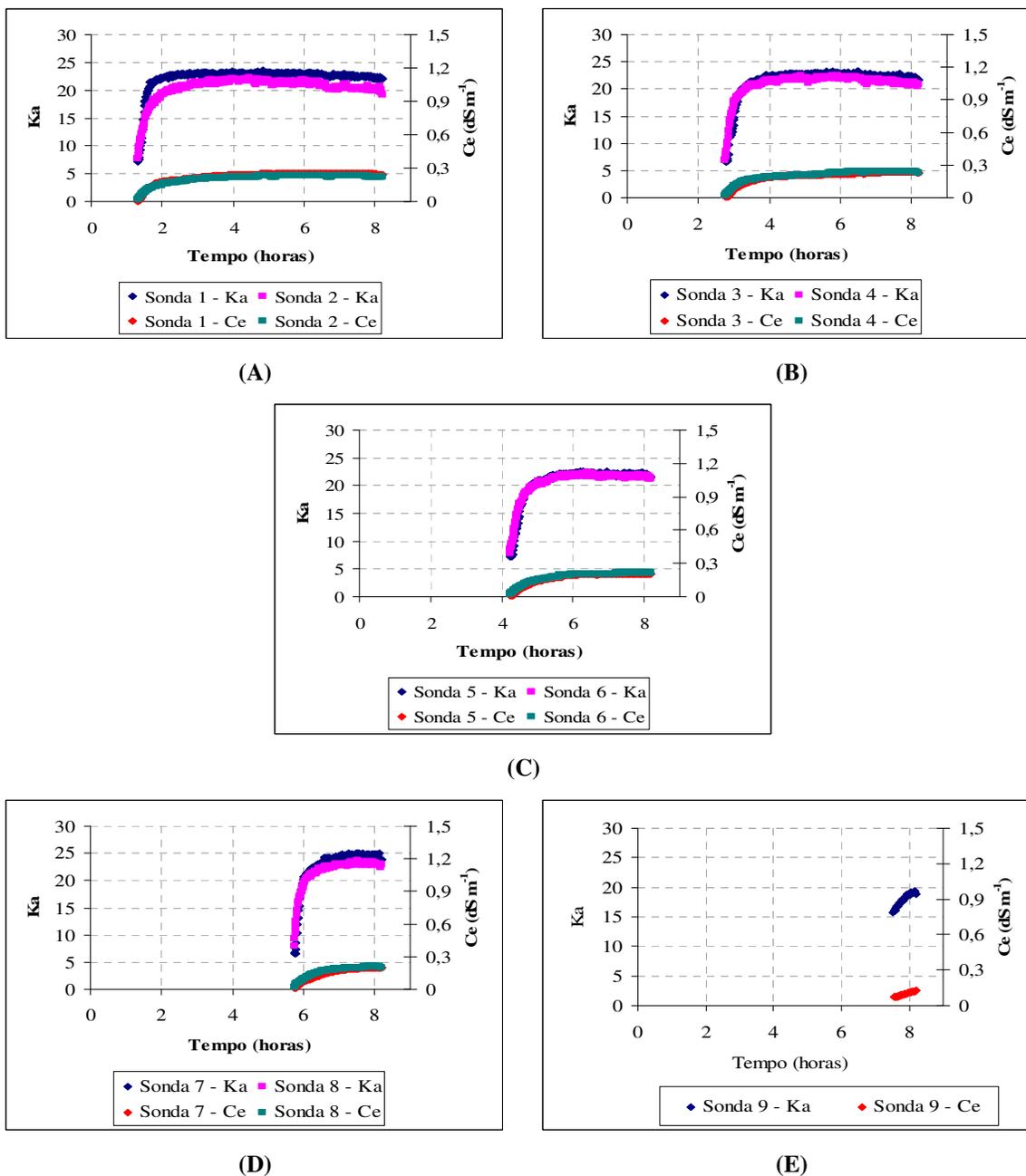


Figura 20: Valores de K_a e C_e registrados a partir da chegada da frente de molhamento para os pares de sondas posicionados nas profundidades de 15 cm (A), 30 cm (B), 45 cm (C), 60 cm (D) e 75 cm (E)

A Figura 20 (E) apresentou apenas as leituras realizadas pela sonda 9, verificar-se ainda que as leituras de K_a e de C_e feitas através desta sonda iniciam com valores mais elevados que os das demais figuras. Isto deve-se ao fato que os dois canais do multiplexador

aos quais as sondas associadas a este ponto de monitoramento estavam instaladas apresentaram problemas de funcionamento. Sendo assim, ao longo do experimento, verificou-se que as leituras de K_a e de C_e associados as sondas 9 e 10, instaladas na profundidade de 75 cm estavam bastante instáveis. Inicialmente atribuiu-se tal comportamento a falta de estrutura e a baixa umidade do solo, $\theta = 2,24\%$, entretanto quando, visualmente, detectou-se que a frente de molhamento havia atingido este ponto de monitoramento, ao contrário do que vinha acontecendo anteriormente, não houve a estabilização das leituras.

Sendo assim constatou-se que havia problemas com o equipamento. Identificado o problema, prontamente conectaram-se as sondas a outros canais do multiplexador, verificou-se assim que apenas as leituras realizadas pela sonda 9 se estabilizaram.

Uma vez que visualmente a frente de molhamento deslocava-se uniformemente, e em função do comportamento apresentado pelos pares de sondas instalados nas demais profundidades monitoradas, considerou-se a as leituras feitas através da sonda 9, foram representativas da profundidade em que encontrava-se instalada. Na Tabela 6 são apresentados, para cada par de sondas, em cada uma das 5 profundidades monitoradas, os valores máximos, mínimos e o Erro Quadrático Médio (EQM) de K_a , C_e e θ .

Tabela 6. Valores máximos, mínimos e EQM de K_a , θ e C_e para os pares de sonda posicionados em cada um dos 5 pontos de observação.

Profundidade (cm)	Sondas	K_a			θ (%)			C_e (dS m ⁻¹)		
		Máximo	Mínimo	EQM	Máximo	Mínimo	EQM	Máximo	Mínimo	EQM*
15	1	23,54	7,07	4,17	30,63	5,22	3,53	0,25	0	3,79
	2	22,26	7,67		29,50	7,03		0,23	0,02	
30	3	23,2	6,544	1,25	30,33	3,59	2,10	0,24	0,01	1,58
	4	22,48	6,892		29,69	4,66		0,24	0,02	
45	5	22,6	7,15	0,37	29,79	5,46	1,11	0,2	0,01	1,31
	6	22,33	7,73		29,56	7,20		0,21	0,02	
60	7	25,13	6,532	2,62	32,12	3,49	4,77	0,2	0,01	4,11
	8	23,69	7,98		30,77	7,92		0,21	0,02	
75	9	19,31	15,66	-	26,79	22,79	-	0,13	0,07	-

EQM= Erro Quadrático Médio; EQM* (valores multiplicados por 10⁻⁶)

Os valores dos EQMs associados à K_a e à θ de C_e , apresentados na Tabela 6, são relativamente baixos, confirmando a hipótese de que tanto o meio poroso, quanto o deslocamento da frente de molhamento ao longo do mesmo são bastante homogêneos.

Para se avaliar o EQM associado a θ , analogamente ao que foi feito para a obtenção da Figura 15, criou-se dois conjuntos de valores para K_a : no primeiro conjunto com 20 elementos, os valores de K_a variam uniformemente de 6 a 25. No segundo conjunto, também com 20 elementos, os valores de K_a variam uniformemente de 7 a 26.

Uma vez estabelecidos os conjuntos de valores de K_a , utilizando-se a Equação 2 calculou-se, as respectivas umidades volumétricas, posteriormente, calculou-se os EQs associados as diferenças das estimativas de cada um dos conjuntos. Na Figura 21 é apresentado o comportamento do EQ (θ) em função de K_a .

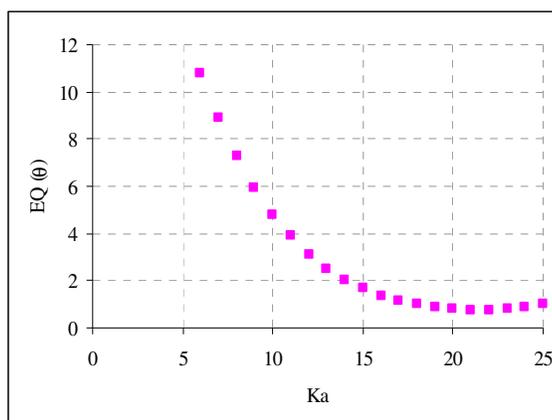


Figura 21: Comportamento do EQ (θ) em função de K_a .

Avaliando-se a Figura 21, verifica-se que, analogamente ao que acontece quando utiliza-se a Equação de Topp et al. (1980), a utilização da curva de calibração descrita pela Equação 2, mesmo fixando-se o erro nas consecutivas leituras de K_a , o EQ (θ), dentro da faixa avaliada, tende a diminuir com o aumento de K_a .

Muito embora as curvas apresentadas nas Figuras 16 e 21 apresentem comportamentos semelhantes, os valores do EQM para apresentados na Tabela 6, são significativamente menores. Tal resultado deve-se ao fato de que, como pode ser visto na Figura 21, independentemente da profundidade, as diferenças dos valores de K_a registrados pelos pares de sondas instaladas num mesmo ponto de monitoramento foi mais acentuada quando o solo estava mais úmido.

Devido a similaridade dos resultados dos pares de sondas, optou-se por trabalhar com os valores médios. A Figura 22 apresenta os valores médios de θ e para C_e , nos diferentes pontos de monitoramento ao longo do ensaio experimental. Através desta figura, pode-se verificar que a frente de molhamento atingiu as profundidades de 15, 30, 45, 60 cm com os respectivos tempos de 1,32, 2,75, 4,23 e 5,73 horas após o início do experimento. Como, na chegada da frente de molhamento à profundidade de 75 cm, o par de sondas instalados apresentavam problemas, não foi possível determinar-se através dos equipamentos utilizados, o instante em que a mesma atingiu tal profundidade. Pode-se verificar também que à frente de molhamento levou 1,32 horas para atingir o primeiro ponto de monitoramento, 1,43 horas para deslocar-se do primeiro ao segundo ponto de monitoramento, 1,48 horas para deslocar-se do segundo ao terceiro ponto de monitoramento e 1,5 horas para deslocar-se do terceiro ao quarto ponto de monitoramento. Uma vez que a distância percorrida pela frente de molhamento foi a mesma, 15 cm, as variações nos tempos descritos acima estão associados a desuniformidade na compactação do solo ao longo da coluna. Entretanto, os tempos estão bastante próximos, indicando que está desuniformidade foi pequena esta associada, sobretudo, a falta de estrutura e ao peso do próprio solo que fazem com que as camadas mais profundas fiquem mais adensadas.

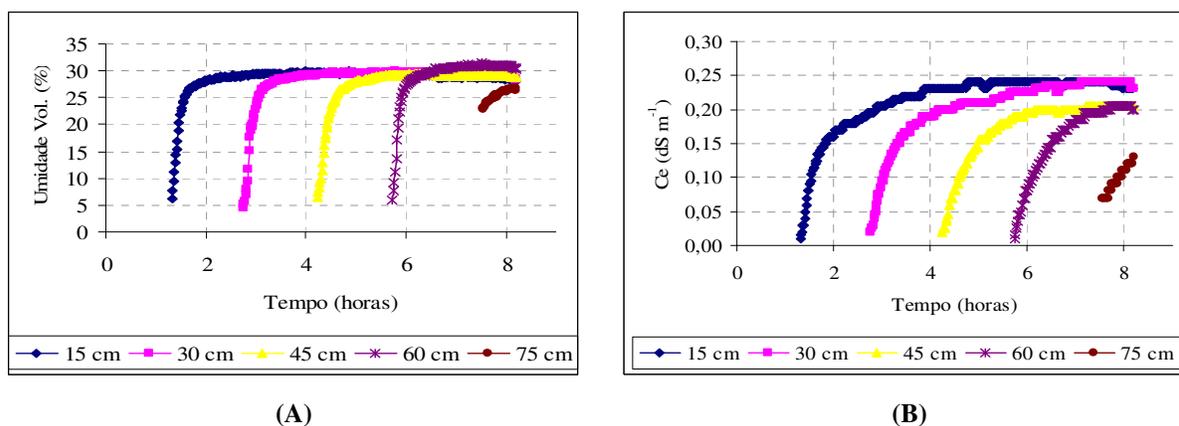


Figura 22: Valores médios de θ e para C_e , nos diferentes pontos de monitoramento ao longo do ensaio experimental

Através da Figura 22 (A), observa-se que a forma com que frente de molhamento atingiu cada um dos pontos de monitoramento foi bastante homogênea, sendo o paralelismo das curvas de umidade um indicador de que a mesma deslocou-se de forma bastante uniforme

ao logo da coluna, reforçando a hipótese de que o preenchimento da mesma foi feito de maneira bastante homogênea. Também se verificou, que as curvas de C_e além de apresentarem um comportamento distinto das curvas de umidade, chegando ao patamar de maneira mais lenta, apresentam comportamentos distintos entre si, para estas curvas não existe paralelismo, sendo que o tempo que cada uma delas leva para chegar ao patamar tende a aumentar com a profundidade. Estes resultados indicam que, ao deslocar-se pela coluna, parte do K que estava em solução, fica retido no solo.

Na Tabela 7 são apresentadas as umidades e as concentrações de potássio avaliadas a partir das amostras da solução do solo retiradas pelos extratores de solução instalados nos diferentes pontos de monitoramento.

Tabela 7: Umidades do solo e concentrações de potássio nas amostras da solução do solo retiradas nos pontos de monitoramento em diferentes tempos.

Profundidade (cm)	Tempo (horas)									
	2,41		3,53		5,10		6,63		8,13	
	θ (%)	C (mg L ⁻¹)	θ (%)	C (mg L ⁻¹)	θ (%)	C (mg L ⁻¹)	θ (%)	C (mg L ⁻¹)	θ (%)	C (mg L ⁻¹)
15	28,81	15	29,24	660	29,28	1200	28,82	1282,5	28,34	1320
30	-	-	28,33	75	29,16	30	29,24	390	28,58	1065
45	-	-	-	-	28,07	30	29,17	30	28,79	30
60	-	-	-	-	5,96	-	30,25	15	30,53	15
75	-	-	-	-	-	-	2,13	-	26,64	15

Analisando-se a Tabela 7 verifica-se que a estratégia de amostragem seguida neste ensaio permitiu que nos diferentes tempos de amostragens se obtivesse gradientes das concentrações de potássio ao longo da coluna. Tais resultados são bastante interessantes, sobretudo em estudos que tenham como objetivo a avaliação modelos matemáticos relacionados ao transporte deste íon no solo.

4.2.3 Ensaio 2

Este ensaio, com exceção da vazão aplicada, apresenta características idênticas aos do descrito na Seção 3.2.1. Na Tabela 8 são apresentados, para cada par de sondas, em cada uma das profundidades monitoradas, os valores máximos, mínimos e o Erro Quadrático Médio (EQM) de Ka, Ce e θ .

Tabela 8. Valores máximos, mínimos e EQM de Ka, θ e Ce para os pares de sonda posicionados em cada um dos pontos de observação.

Profundidade (cm)	Sondas	Ka			θ (%)			Ce (dS m ⁻¹)		
		Máximo	Mínimo	EQM	Máximo	Mínimo	EQM	Máximo	Mínimo	EQM
15	1	24,2	7,2	1,39	31,3	5,7	1,48	0,24	0,01	0,0691
	2	23,4	7,8		30,5	7,4		0,25	0,01	
30	3	23,5	6,5	1,57	30,6	3,5	3,05	0,23	0,03	1,23
	4	24,6	8,4		31,6	9,0		0,26	0,02	
45	5	24,1	9,0	0,95	31,1	10,7	0,99	0,22	0,02	0,049
	6	23,3	7,5		30,4	6,4		0,22	0,02	
60	7	26,3	7,2	0,86	33,3	5,5	1,15	0,23	0,01	0,048
	8	25,2	8,1		32,2	8,2		0,23	0,02	
75	9	23,5	7,3	1,44	30,6	6,0	1,76	0,22	0,01	0,25
	10	23,0	6,9		30,1	4,6		0,21	0,02	
90	11	18,6	7,2	1,21	26,2	5,6	4,85	0,09	0,03	1,11
	12	15,7	6,5		22,9	3,3		0,06	0,00	

Através dos resultados apresentados na Tabela 8, pode-se verificar que os valores dos EQMs para Ka, Ce e para θ foram baixos. Tais resultados, como já discutido na seção 3.2.1, devem-se a uniformidade do meio poroso e do deslocamento da frente de molhamento ao longo do mesmo.

O tempo de duração deste experimento foi pré-estabelecido em 8,2 horas, sendo igual ao tempo total do ensaio descrito na seção 3.2.2.E como no presente experimento, a solução foi aplicada à coluna como uma vazão ligeiramente maior, este tempo foi suficiente para que a

frente de molhamento chegasse a profundidade de 90.cm É importante ressaltar que, a frente de molhamento não atingiu a base da coluna.

Devido a similaridade dos resultados dos pares de sondas, optou-se por trabalhar com os valores médios. A Figura 23 apresenta os valores médios de θ e para C_e , nos diferentes pontos de monitoramento ao longo do ensaio experimental.

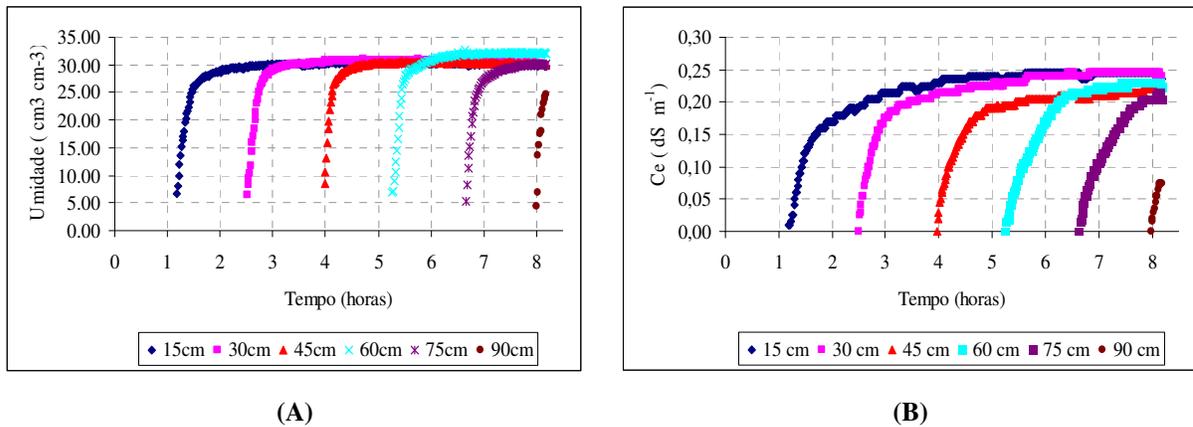


Figura 23: Valores médios de θ e para C_e , nos diferentes pontos de monitoramento ao longo do ensaio experimental

Através desta figura, pode-se se verificar que a frente de molhamento atingiu as profundidades de 15, 30, 45, 60, 75 e 90 cm com os respectivos tempos de 1,1, 2,53, 3,98, 5,34 e 7,96 horas após o início do experimento. A frente de molhamento levou 1,1 horas para atingir o primeiro ponto de monitoramento, 1,43 horas para deslocar-se do primeiro ao segundo ponto de monitoramento, 1,45 horas para deslocar-se do segundo ao terceiro ponto de monitoramento e 1,36 horas para deslocar-se do terceiro ao quarto ponto de monitoramento e 2,62 horas para deslocar-se do quarto ao quinto ponto de monitoramento. Mais uma vez as variações nos tempos descritos acima estão associados a desuniformidade na compactação do solo ao longo da coluna que esta associada, a falta de estrutura e ao peso do próprio solo que fazendo com que as camadas mais profundas fiquem mais adensadas. De uma maneira geral, com exceção da camada situada a 90 cm de profundidade, a variação nos tempos do deslocamento da frente de molhamento é relativamente pequena e estão coerentes como os resultados apresentados na seção 3.2.1.

Os comportamentos das curvas de umidade, Figura 23 (A), e de Ce, (Figura 23 (B)), são bastante semelhantes aos já discutidos na seção 3.2.1 indicando a consistência dos resultados obtidos nos dois ensaios conduzidos nesta etapa deste trabalho.

Na Tabela 9 são apresentadas as umidades e as concentrações de potássio avaliadas a partir das amostras da solução do solo retiradas pelos extratores de solução instalados nos diferentes pontos de monitoramento.

Tabela 9: Umidades e as concentrações de potássio nas amostras da solução do solo retiradas pelos extratores de solução nos diferentes pontos de monitoramento.

Profundidade (cm)	Tempo (horas)									
	2.41		3.53		5.10		6.63		8.13	
	θ (%)	C (mg L ⁻¹)	θ (%)	C (mg L ⁻¹)	θ (%)	C (mg L ⁻¹)	θ (%)	C (mg L ⁻¹)	θ (%)	C (mg L ⁻¹)
15	29,43	150	29,95	990	30,35	1305	30,17	1425	29,92	1425
30	2,74	-	30,11	45	30,72	15	30,50	720	30,01	1155
45	5,21	-	4,93	-	30,25	45	30,26	30	30,10	30
60	5,31	-	6,16	-	5,30	-	32,18	22,5	32,10	15
75	3,82	-	3,58	-	3,41	-	2,13	-	30,00	60

Os resultados apresentados na Tabela 9 permitem concluir que a dinâmica do potássio seja avaliada em diferentes momentos e em diferentes profundidades ao longo do ensaio experimental e, considerando-se a diferença das vazões aplicadas, são bastante consistentes com os apresentados na Tabela 7.

5. CONCLUSÃO

Em um meio poroso homogêneo, o desenho experimental utilizado possibilitou verificar que a dinâmica da água e de solutos no solo seja avaliada, ao longo do tempo, de uma maneira bastante satisfatória.

A condução deste ensaio em colunas de acrílico apresentou-se bastante vantajosa, uma vez que, além de se tratar de um material inerte, resistente, possibilita a identificação de possíveis problemas de acomodação do solo e o acompanhamento visual da frente de molhamento ao longo da mesma.

O grande volume de informações geradas por meio do uso da técnica de TDR, possibilitou a construção de uma malha espaço-temporal refinada que, por sua vez, representa uma importante ferramenta na proposição e validação de modelos matemáticos que tenham como objetivo a simulação numérica da dinâmica da água e de solutos no solo.

6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BEJAT, L.; PERFECT, E.; QUINSENBERRY, V.L.; COYNE, M.S.; HASZLER, G.R. Solute transport as related to soil structure in unsaturated intact soil blocks. *Soil Science Society of America Journal*. v.64, p.818-826, 2000.

COELHO, E. F.; ARRUDA, F. B. Aplicações da técnica de TDR: manejo da água no solo. **Aplicações da técnica de TDR na agricultura**. p. 129-145, Campinas,2001

COSTA, S. N. Desenvolvimento de m modelo computacional para simular o transporte de água e solutos no solo sob condições de escoamento não permanente na vertical. 1998. 145p. (Tese de Doutorado) Universidade Federal de Viçosa– UFV, Viçosa/MG.

DALTON, F. N.;HERKELRATH, W. N.; RAWLING, O. S.; RHOADS, J. D. Time domain reflectometry: simultaneous measurement of soil water content and electrical conductivity with a single probe. *Science*. n. 224, p. 989-900, 1984.

MIRANDA, J. H. Modelo para a simulação da dinâmica de nitrato em colunas verticais de solo não saturado. 2001. 79p. (Tese de Doutorado) ESALQ- Escola Superior de Agricultura Luiz de Queiroz – USP, Piracicaba/SP.

MUÑOZ-CARPENA, R.; REGALADO, C. M.; RITTER, A.; ALVAREZ-BENEDI, J.; SOCORRO, A. R. TDR estimation of electrical conductivity and saline solute concentration in a volcanic soil. *Geoderma*. v.124, p. 399- 413, 2005.

NADLER, A.; GAMLIEL, A.; PERETZ, I. Practical aspects of salinity effect on TDR-measurement water content: a field study. *Soil Science Society of America Journal*. v.63, p.1070-1076, 1999.

NISSEN, H. H.; MOLDRUP, P.; KACHNOSKI, R. G. Time Domain Reflectometry Measurements of solute Transport across a soil layer boundary. *Soil Science Society of America Journal*. v.64, p.62-74, 2000

OR, D.; JONES, S. B. Extending TDR measurements range in saline soils using frequency-domain methods. **Aplicações da técnica de TDR na agricultura**. p. 114-127, Campinas, 2001.

RITTER, A.; MUÑOS-CAPERNA, R.; REGALADO, C. M.; SOCORRO, A. R. Caracterización del transporte de solutos em suelos volcánicos agrícolas mediante TDR y simulación inversa.. **Estúdios de la zona no saturada del suelo**. v. VI, p. 19-24, 2003.

RIVERA, R.N.C. Modelagem da dinâmica da água e do potássio na irrigação por gotejamento superficial. Piracicaba, 2004. 89p. Tese (Doutorado) - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", Universidade de São Paulo.

SILVA, T. S. M.; COELHO, E. F.; PAZ, V. P. S.; VELLAME, L. M.; SANTANA, G. S. Teor de potássio na solução do solo com uso da técnica de reflectometria no domínio do tempo. **Irriga**. v. 10, n. 4, p.393-402, 2005.

SOUZA, C. F.; MATSURA, E.E.; TESTEZLAF, R. Experiência do laboratório de hidráulica, hrrrigação e drenagem na faculdade de engenharia agrícola/ UNICAMP no uso da técnica de TDR. **Aplicações da técnica de TDR na agricultura**. p. 147-176, Campinas, 2001.

SOUZA, C. F.; FOLEGATTI, M. V.; MATSURA, E. E., OR, D. Calibração da reflectometria no domínio do tempo (TDR) para a estimativa da concentração da solução no solo. **Engenharia Agrícola**. v. 26, n. 1, p.282-291, 2006.

TOMMASELLI, J. T. G. Critérios para calibração de sondas de TDR. **Aplicações da técnica de TDR na agricultura**. p. 85 -114, Campinas, 2001.

TOPP, G.C.; DAVIS, J.L.; ANNAN, A.P. Electromagnetic determination of soil water content: measurements in coaxial transmission lines. *Water resources Research*. v.16, p.574-582, 1980.

VANCLOOSTER, M.; MALLANTS, D.; VANDERBORGHT, J.; DIELS, J.; ORSHOVEN, J. V.; FEYEN, J. Monitoring solute transport in a multi-layered sandy lysimeter using time domain reflectometry. *Soil Science Society of America Journal*. v.59, p.337-344, 1995.

WARD, A.L.; KACHANOSKI, R.G.; ELRICK, D. E. Analysis of water and solute transport away from a point source. *Soil Science Society of America Journal*. v.59, p.699-706, 1995.

CAPITULO 4: SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA DINÂMICA DA ÁGUA UTILIZANDO O MODELO COMPUTACIONAL HYDRUS-2D.

1. RESUMO

Matematicamente, a dinâmica da água no solo é modelada através de uma Equação Diferencial Parcial (EDP) de segunda ordem, não linear. Como não existe solução analítica para este tipo de equação, mostra-se necessário o estabelecimento de algumas simplificações de origem teórica e/ou o a utilização de métodos numéricos para a busca de uma solução aproximada para a mesma. Mediante aos avanços dos recursos computacionais dos últimos anos, muito esforço vem sendo dedicado à resolução numérica das equações que regem a dinâmica de água e de solutos no solo. Sendo assim vem crescendo cada vez mais a proposição de modelos computacionais para simular numericamente estes fenômenos. Dentre os modelos computacionais disponíveis na literatura, o modelo Hydrus-2D vem se destacando pela precisão dos resultados obtidos e também pela sua interface gráfica que possibilita uma boa interação com os diferentes tipos de usuários. Sendo assim, com o objetivo de se avaliar o desempenho deste modelo, e conseqüentemente dar suporte à construção do conjunto de treinamento que será utilizado no Capítulo 5, nesta etapa deste trabalho o modelo computacional Hydrus-2D foi utilizado para simular a dinâmica da água no solo na direção vertical. Os resultados obtidos numericamente foram comparados com os resultados obtidos nos dois ensaios experimentais conduzidos na segunda etapa do Capítulo 3. Através dos resultados obtidos pode-se se verificar que, nas diferentes profundidades avaliadas, as curvas numéricas e as observadas experimentalmente foram bastante semelhantes no que se refere ao deslocamento vertical da frente de molhamento, por outro lado, muito embora ambas as curvas tenham se estabilizado com valores de umidade relativamente próximos, as curvas obtidas experimentalmente atingiram estes patamares com maior velocidade. Dado que as curvas experimentais de umidade foram obtida, de maneira indireta, a partir de leituras da constante dielétrica aparente (K_a) obtida pela técnica da reflectometria no domínio do tempo (TDR), tais resultados podem ser justificados a medida em que parte da discordância existente entre os dados experimentais e numéricos esta associado ao ajuste da curva de calibração utilizada.

2. INTRODUÇÃO

O Hydrus-2D (SIMUNEK et al.,1999) é um modelo computacional que simula escoamentos bidimensionais de água, movimento de calor, e transporte de solutos em meios variavelmente saturados possibilita a implementação de uma cadeia extensa de condições de contorno e heterogeneidades do solo.

Especificamente, para a resolução numérica da equação de Richards, o Hydrus-2D utiliza o método de elementos finitos de Galerkin, sendo a discretização espacial feita através de uma malha triangular. Maiores detalhes sobre os procedimentos numéricos utilizados por este modelo estão disponíveis em SIMUNEK et al.(1999).

A versatilidade deste modelo, associada a precisão dos resultados obtidos fazem com que, recentemente, o mesmo venha sendo amplamente utilizado na literatura internacional.

SKAGGS et al. (2004), utilizaram o Hydrus-2D para simular a distribuição de umidade em um sistema de irrigação sub-superficial, onde foram feitas simulações em que o gotejador se encontrava à 6cm de profundidade, e submetido a três vazões distintas. Quando comparados com dados de ensaios experimentais, conduzidos sob as mesmas condições em um solo franco arenoso, de acordo com os autores, os resultados obtidos foram bastante próximos.

CLOTE et al. (2003), descreveram resultados do estudo de uma simulação projetada para destacar os impactos das propriedades do solo no transporte de água e solutos na irrigação por gotejamento sub-superficial. Este estudo dirigiu-se a influência das propriedades hidráulicas do solo, frequência de irrigação, tempo de aplicação de nutriente em amostras úmidas e distribuição de solutos. As simulações foram feitas com o Hydrus-2D para analisar o fluxo da água e o transporte de solutos nos sistemas de irrigação por gotejamento. De acordo com os autores o Hydrus-2D descreveu de maneira satisfatória os sistemas de irrigação por gotejamento apresentando-se como uma importante ferramenta que pode contribuir com o processo de tomada de decisão no que se refere ao dimensionamento e ao manejo deste tipo de sistema.

Com o objetivo de propor o uso de modelos numéricos como uma ferramenta que auxilie no dimensionamento e no manejo de sistemas de irrigação, ARBAT et al. (2003) utilizaram o modelo o Hydrus_2D para simular a dinâmica da água aplicada no solo através da

irrigação por gotejamento. Os dados simulados foram comparados com os resultados de 4 experimentos conduzidos sob diferentes vazões de gotejamento. De acordo com os autores, o modelo gerou resultados muito similares da distribuição de água no solo, com boa correlação com os resultados experimentais.

SOUZA (2002) avaliaram o desempenho de três modelos computacionais disponíveis na literatura no dimensionamento do volume molhado por gotejadores dispostos na superfície do solo. De acordo com estes autores, dentre os modelos avaliados, o Hydrus-2D foi o que apresentou os melhores resultados.

Sendo assim, com base nas informações descritas acima, pode-se afirmar que o modelo computacional Hydrus-2D apresenta-se como uma importante ferramenta para auxiliar no processo de simulação da dinâmica da água no solo.

3. MATERIAL E MÉTODOS

No que segue serão expostos os procedimentos adotados para a utilização do Hydrus-2D na simulação numérica da dinâmica da água em condições idênticas aquelas descritas nos dois experimentos descritos na Etapa 2 do Capítulo 3.

Para a simulação numérica da dinâmica da água no Hydrus-2D utilizou-se uma superfície retangular cujas dimensões, 35 cm de largura e 105 cm de comprimento, correspondem exatamente ao diâmetro e à profundidade da coluna de solo utilizada nos experimentos descritos na Etapa 2 do Capítulo 3 (Figura 1).

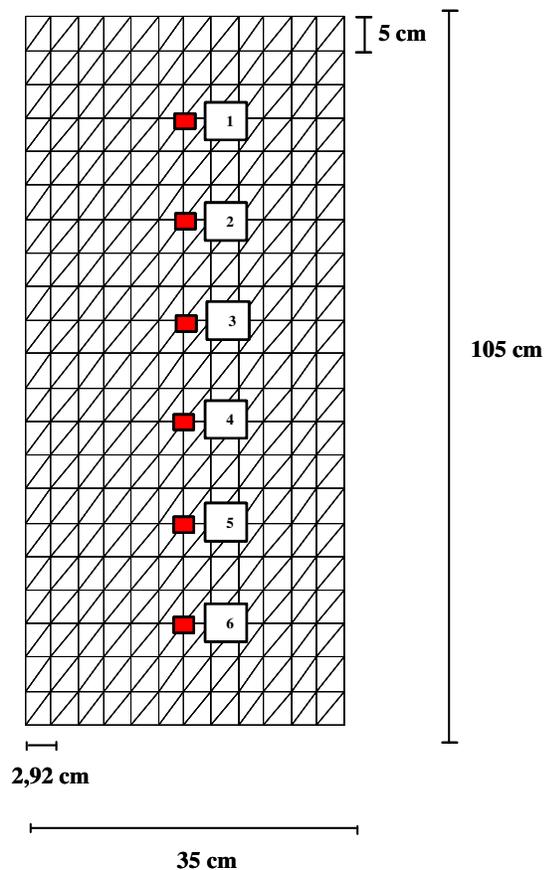


Figura 1: Discretização espacial utilizada na simulação numérica da dinâmica da água através do Hydrus-2D.

Como se pode verificar através da Figura 1, para a construção da malha espacial, a coluna foi dividida verticalmente, 12 sub-intervalos de aproximadamente 2,92 cm de amplitude, e horizontalmente, 21 sub-intervalos de 5 cm de amplitude. Os pontos numerados de 1 a 6, destacados nesta mesma Figura, correspondem as posições onde, ao longo da simulação, a umidade volumétrica do solo foi monitorada. Tais pontos de monitoramento estão respectivamente associados as profundidades de 15, 30, 45, 60, 75 e 90 cm.

O tempo de simulação foi definido em função do tempo de duração dos ensaios experimentais, 8,17 horas. De acordo com RASSAM et al. (2004), a discretização do tempo, é feita por uma rotina interna que em função da velocidade de convergência para a solução numérica. Segundo os mesmos autores, quando a convergência é lenta, a tal rotina, automaticamente reduz o passo no tempo, e quando a convergência é mais rápida, a mesma rotina aumenta o passo no tempo.

O Hydrus-2D permite que se escolha entre os modelos propostos por van GENUCHTEN (1980), BROOKS e COREY (1964) e o proposto por VOGEL e CISLEROVA (1988), para o cálculo da condutividade hidráulica. No caso das simulações numéricas realizadas neste trabalho utilizou-se o modelo de van GENUCHTEN (1980) desconsiderando-se a histerese (Figura 2)

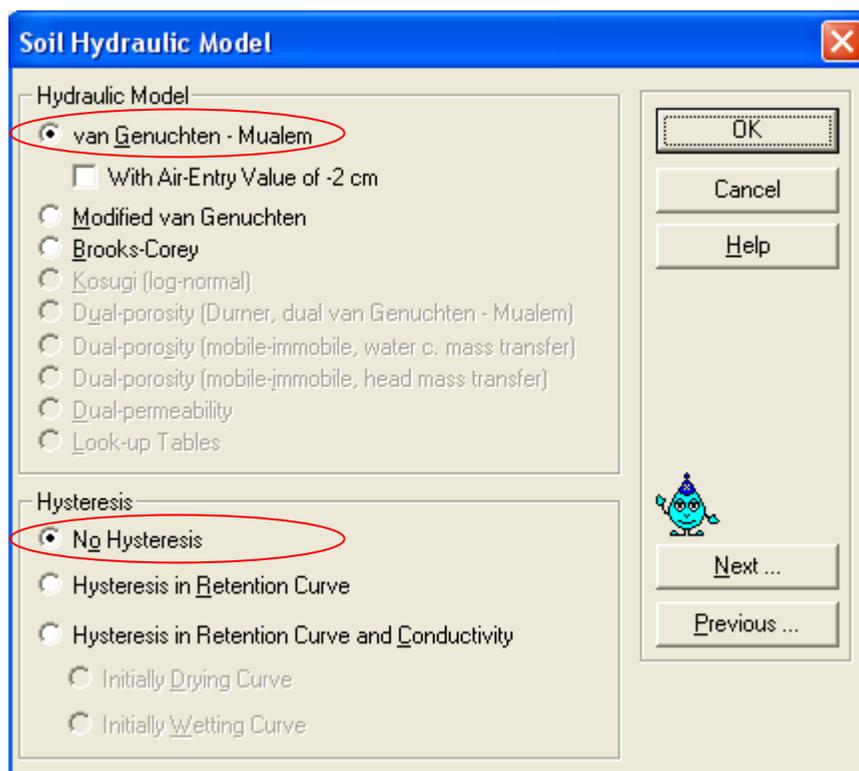


Figura 2: Modelo utilizado para a descrição da curva de retenção

Uma vez escolhido o modelo matemático, os parâmetros físico-hídricos utilizados, foram aqueles apresentados por MIRANDA e DUARTE (2002), (Tabela 1). Na Tabela 2 são apresentadas as características físico-hídricas do solo submetido à simulação.

Tabela 1: Parâmetros da curva de retenção

Parâmetros da Curva de Retenção				
θ_r (cm ³ cm ⁻³)	θ_s (cm ³ cm ⁻³)	α (m ⁻¹)	m	n
0	0,443	0.0449	0,1119	3,6732

Tabela 2: Características físico-hídricas do solo submetido à simulação.

Textura			Densidade		Porosidade	K_0
Areia	Silte	Argila	Solo	Partículas		
g kg ⁻¹			kg dm ⁻³		(%)	cm h ⁻¹
695	129	185	1,5	2,575	41,74	17,09

As simulações foram conduzidas considerando-se que ao longo de toda a coluna o solo apresentava uma umidade volumétrica inicial de 0,024. Considerou-se também, como condições de contorno, uma condição de fluxo constante, na parte superior da coluna, e de drenagem livre na base da mesma (Figura 3).

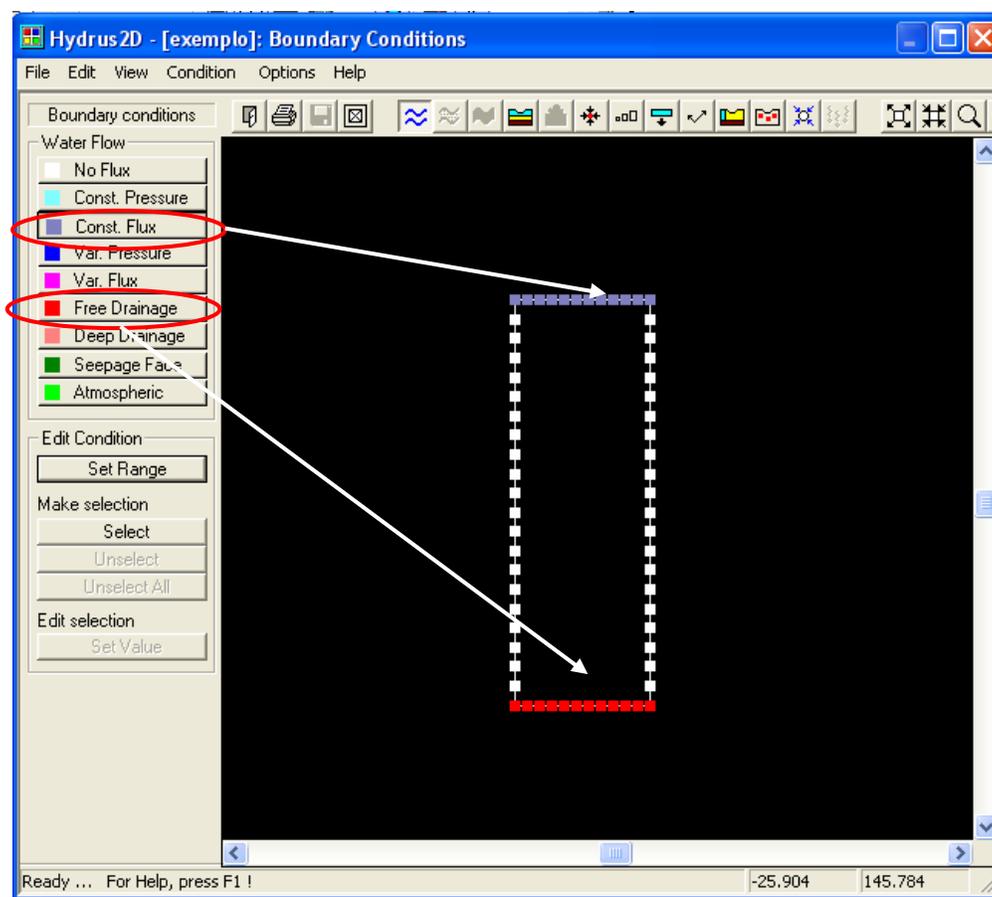


Figura 3: Escolha das condições de contorno utilizadas nas simulações

Foram realizadas duas simulações distintas sendo que em cada uma delas, em função dos ensaios experimentais, descritos nas seções 4.2.2 (Ensaio 1) e na seção 4.2.3 (Ensaio 2) do Capítulo 3, utilizou-se os respectivos fluxos de 2,7 e de 3 l h⁻¹.

Os resultados obtidos em cada uma dessas simulações foram comparados com os resultados dos respectivos ensaios experimentais. Uma vez que os dados experimentais foram obtidos indiretamente, a partir da técnica de TDR, a fim de se investigar o impacto da curva de calibração sobre os resultados obtidos, também se avaliou o comportamento dos dados simulados em função dos valores da constante dielétrica aparente (K_a) e da condutividade elétrica registrados pela técnica de TDR.

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Na Figura 4 são apresentados os resultados da dinâmica da água, simulados através do Hydrus-2D e os observados experimentalmente no Ensaio 2.

Nesta Figura, as curvas contínuas, Hydrus1, Hydrus2, Hydrus3, Hydrus4 e Hydrus5, descrevem os resultados simulados e as curvas pontilhadas, Exp1, Exp2, Exp3, Exp4, Exp5, descrevem os resultados experimentais nas respectivas profundidades de 15, 30, 45, 60 e 75 cm.

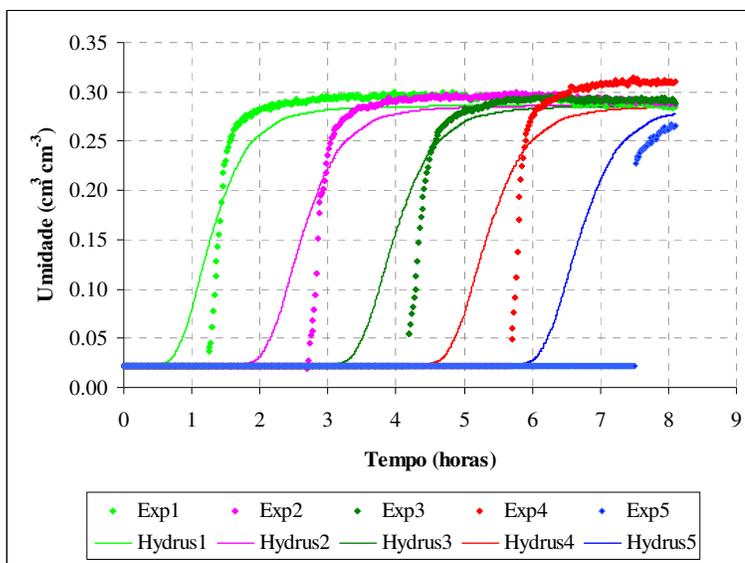


Figura 4: Resultados numéricos e experimentais da dinâmica da água no solo (Ensaio 1).

Analisando-se a Figura 4 pode-se verificar que em todas as profundidades avaliadas, nos resultados simulados através do Hydrus-2D a frente de molhamento desloca-se com uma

velocidade maior que aquela observada experimentalmente. Tal comportamento deve-se à condição de fluxo constante, escolhida como condição de contorno para a parte superior da coluna. Tal condição considera que, em todo tempo de simulação, a solução esta sendo aplicada de maneira uniforme à toda a superfície da coluna a uma vazão constante de $2,7 \text{ l h}^{-1}$, entretanto, como se pode verificar no Capítulo 3 deste trabalho, a solução foi aplicada à coluna através de 4 gotejadores. Sendo assim, muito embora, a vazão aplicada pelo conjunto de gotejadores fosse equivalente à considerada na simulação numérica, ao contrário do que pressupõe a condição de contorno considerada, a mesma não foi uniformemente aplicada à superfície da coluna e sim dividida nos quatro pontos onde se encontravam os gotejadores.

Por outro lado, como já foi discutido no Capítulo 3, nos Ensaio 1 e 2 verificou-se que a frente de molhamento atingiu cada uma das profundidades monitoradas de maneira bastante uniforme, comportamento que está muito mais próximo da condição de contorno considerada. Sendo assim, a fim de se avaliar os resultados obtidos de uma maneira mais apropriada, tanto nos dados experimentais quanto nos numéricos que são apresentados a seguir, a dinâmica da água na coluna foi avaliada somente a partir do momento em que a frente de molhamento atingiu a profundidade de 15 cm.

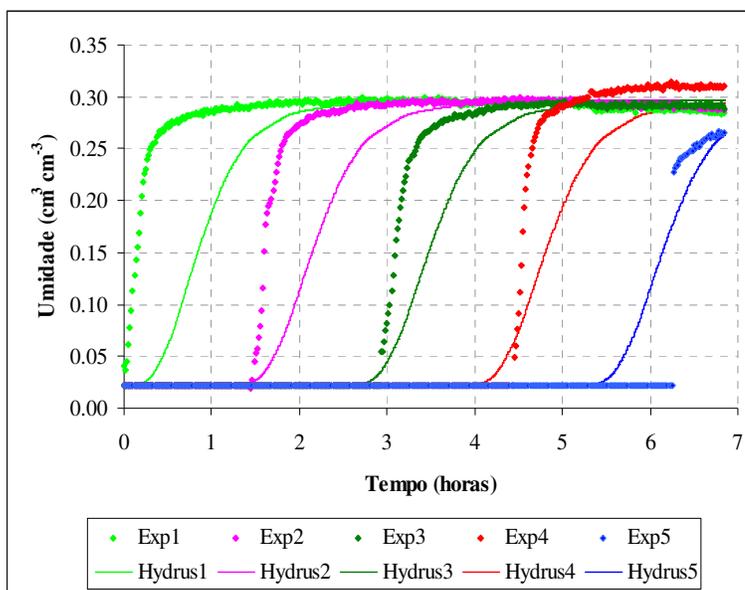


Figura 5: Resultados numéricos e experimentais da dinâmica da água no solo a partir do primeiro ponto de monitoramento (Ensaio 1).

Com base nos resultados apresentados na Figura 5, pode-se verificar que, uma vez corrigido o efeito da condição de contorno escolhida, a velocidade de deslocamento da frente de molhamento ao longo da coluna nos dados simulados e observados foram bastante semelhantes. Deve-se destacar ainda, que, uma vez que se desprezou o tempo que frente de molhamento levou para atingir a profundidade de 15 cm, 1,32 horas, nesta Figura, o tempo em que a dinâmica da água foi avaliada é inferior ao apresentado na Figura 4.

Através da Figura 5 percebe-se também que, mesmo com as correções propostas, ainda existe alguma diferença entre o avanço da frente de molhamento simulada e observada. Tal diferença, que tende a aumentar em função da profundidade da coluna, onde, nos resultados simulados, a frente de molhamento avança com maior velocidade. Tal comportamento deve-se ao fato de que o modelo computacional considera a água se desloca de maneira uniforme ao longo de toda a coluna, entretanto, como já discutido no Capítulo 3, um possível gradiente na densidade do solo, causada pela acomodação do mesmo ao longo da coluna, fez com que, experimentalmente, o a velocidade de deslocamento da frente de molhamento diminuísse com a profundidade.

Muito embora, nas diferentes profundidades avaliadas, as curvas experimentais e numéricas da dinâmica da água descrevam o avanço da frente de molhamento satisfatoriamente esse estabilizam com valores de umidade relativamente próximos, as curvas experimentais atingem estes patamares com maior velocidade. Tais resultados podem estar associados tanto a não determinação experimental dos parâmetros da curva de retenção quanto ao fato de que as curvas experimentais de umidade foram obtida, de maneira indireta, a partir de leituras da constante dielétrica aparente (K_a) feitas através da técnica da reflectometria no domínio do tempo (TDR).

Na Figuras 6 são apresentados os resultados da dinâmica da água, simulados através do Hydrus-2D e os observados no experimentalmente no Ensaio 2.

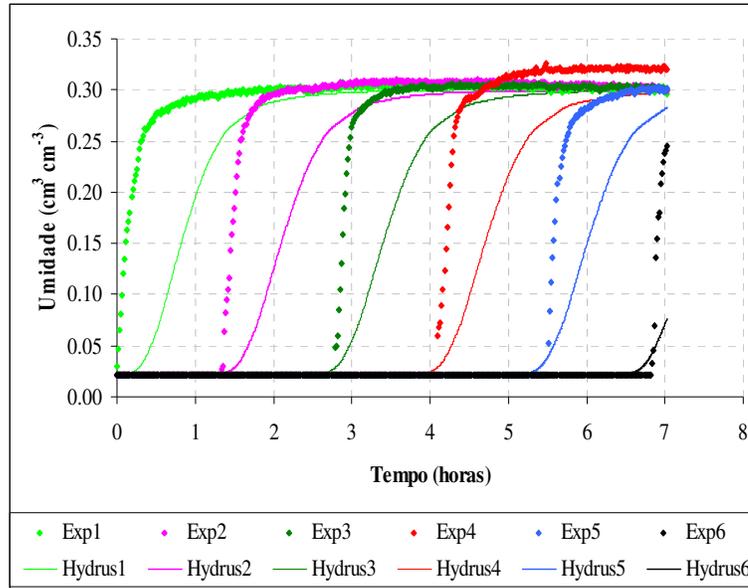


Figura 6: Resultados numéricos e experimentais da dinâmica da água no solo a partir do primeiro ponto de monitoramento(Ensaio 2).

De uma maneira geral, os resultados apresentados na Figura 6 são bastante semelhantes aos apresentados na Figura 5, indicando uma consistência da metodologia proposta neste capítulo. Deve-se destacar, que no Ensaio 2 os dados experimentais estão associados a uma vazão de gotejamento de 3 l h^{-1} . Tal acréscimo na vazão da solução aplicada à coluna de solo fez com que, tanto nos resultados simulados (Hydrus6) quanto nos experimentais (Exp6), a frente de molhamento atingisse a profundidade de 90 cm.

Buscando-se avaliar o efeito do uso de uma curva de calibração na diferença entre os resultados experimentais e numéricos observados neste Capítulo, nas figuras 7 e 8 são apresentados os valores da dinâmica da água simulados através do Hydrus-2D e os valores de K_a obtidos pelo uso da técnica de TDR nos respectivos Ensaio 1 e 2

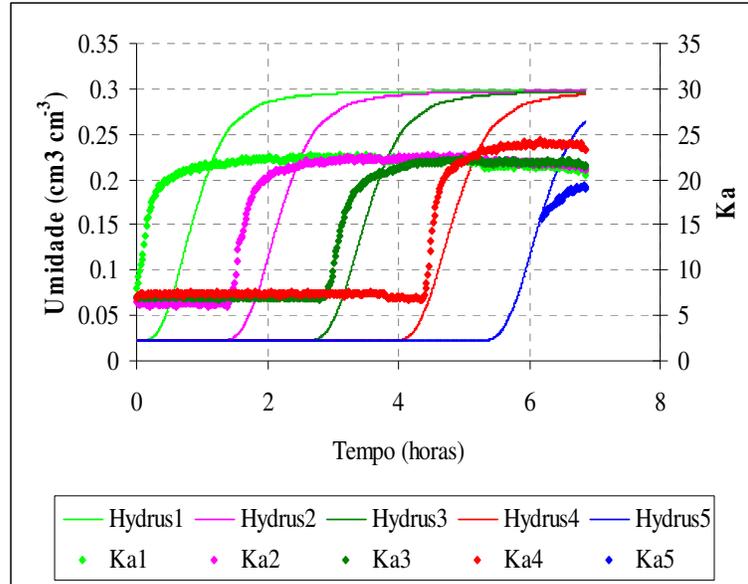


Figura 7: Resultados numéricos da dinâmica da água no solo e valores de K_a obtidos através da técnica de TDR, nas diferentes profundidade de monitoramento (Ensaio 1).

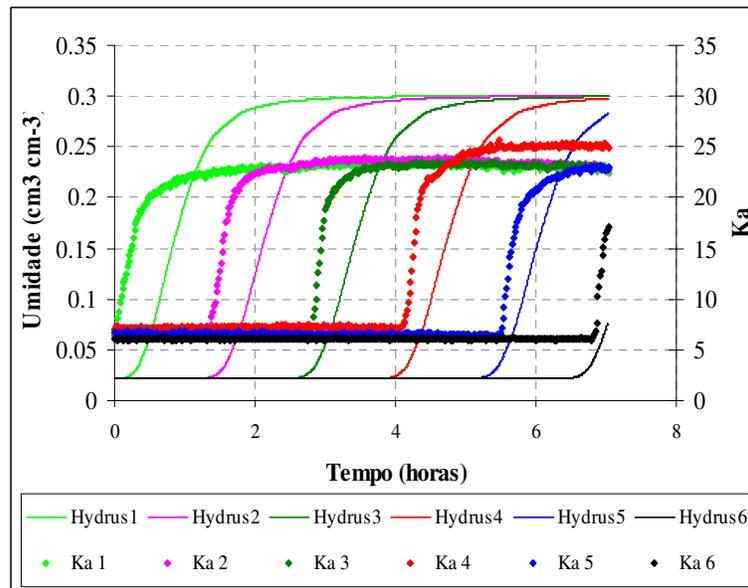


Figura 8: Resultados numéricos da dinâmica da água no solo e valores de K_a obtidos através da técnica de TDR, nas diferentes profundidade de monitoramento (Ensaio 2).

Através das Figuras 7 e 8 percebe-se que, quando utilizadas pra identificar o avanço da frente de molhamento, as curvas obtidas pela da medição de K_a através da técnica de TDR, apresentam resultados semelhantes aos obtidos através do Hydrus-2D. Verifica-se também

que, independente das profundidades avaliadas, em ambos os ensaios avaliados, as curvas obtidas através da técnica de TDR se estabilizaram em uma mesma faixa de valor de K_a e, uma vez que ambos os ensaios experimentais tenham sido conduzidos em condições bastante semelhantes, tais resultados reforçam a consistência das medidas realizadas através da técnica de TDR e do procedimento experimental utilizado neste trabalho. Deve-se ressaltar que, a exemplo do que aconteceu com as curvas de umidade, Figuras 5 e 6, as curvas obtidas para K_a , também atingem os respectivos patamares de uma maneira bastante acelerada.

5. CONCLUSÃO

O confronto de resultados advindos do uso da técnica de TDR com resultados numéricos, dado a grande quantidade de informações geradas, apresenta um grande potencial para contribuir com o estudo e com o entendimento da dinâmica da água no solo. Baseado nos resultados disponíveis na literatura, nos quais o Hydrus-2D vem descrevendo com sucesso a dinâmica de água no solo, conclui-se que a diferença entre os dados simulados e os obtidos experimentalmente deve-se ao fato de que a umidade tenha sido feita de forma indireta, reforçando a necessidade da condução de mais estudos que tenho como objetivo investigar a sensibilidade da técnica de TDR em detectar pequenas variações de umidade, e o efeito das curvas de calibração, exigidas no uso desta técnica, sobre os resultados da dinâmica da água no solo.

6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ARBAT, G.; BARRAGÁN, J. P.; POCH, R.; RAMIREZ DE CARTAGENA, F. Evaluación de los modelos numéricos de flujo de agua e el suelo HYDRUS_2D y SIMIDAS em riego localizado. **Estúdios de la zona no saturada del suelo**. v. VI, p. 279-288, 2003.

BROOKS, R.H. & COREY, A.T. Hydraulic properties of porous media. Hydrol. Fort Collins, Colo. State University, 1964. 27p

CLOTE, C. M.; Bristow, K. L.; CHARLESWORTH, P. B.; COOK, F. J.; THORBURN, P. J. Analysis of soil wetting and solute transport in subsurface trickle irrigation. **Irrigation Science**. v. 22, n. 3-4, p. 143-156, 2003

MIRANDA, J. H.; DUARTE, S. N. Modelo para simulação da dinâmica de nitrato em colunas verticais de solo não saturado. **Revista Brasileira de Eng. Agrícola e Ambiental**. v. 6, n. 2, p.235-241, 2002.

RASSAM, D.; SIMUNEK, J.; GENUCHTEN, M. Th. Modelling Variably Saturated Flow with HYDRUS-2D. 'ND Consult', Brisbane, Australia. 2004.

SKAGGS, T. H.; TROUT, T. J.; SIMUNEK, J.; SHOUSE, P. J. Comparison of Hydrus-2D simulations of drip irrigation with experimental observations. *J. Irrig. and Drain. Eng.* v. 130, n. 4, p. 304-310, 2004.

SIMUNEK, J.; SEJNA, M.; VAN GENUCHTEN T. The HYDRUS_2D software for Simulating the Two-Dimensional Movement of Water, Heat and Multiple Solutes in Variably-Saturated Media. 1999. 227 p.

SOUZA, C. S. A utilização da reflectometria no domínio do tempo (TDR) na modelagem do bulbo molhado do solo irrigado por gotejamento. 2002. 115p. (Tese de Doutorado) Faculdade de Engenharia Agrícola – FEAGRI/ UNICAMP.

VAN GENUCHTEN, M. T. A Closed-form Equation for predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils. **Soil Sci. Soc. Am. J.** v.44, p. 892-898.1980.

VOGEL, T.; CISLEROVA, M. On the reliability of unsaturated hydraulic conductivity calculated from the moisture retention curve. **Transport in Porous Media**. v. 3, n.1.p1-15, 1988.

CAPITULO 5: USO DA TEORIA DE CONJUNTOS *FUZZY* NO ESTUDO DA DINÂMICA DE ÁGUA E DE SOLUTO NO SOLO

1. RESUMO

O sucesso dos modelos numéricos em descrever a dinâmica da água e de soluto no solo está intimamente ligado à precisão com que os parâmetros físico-hídricos que regem estes processos são determinados. Este tem sido o grande desafio no uso desta metodologia, uma vez que, em geral, tais parâmetros são difíceis de serem determinados e apresentam uma grande variabilidade espacial no solo. Desta forma, mostra-se necessário a proposição e a utilização de metodologias que se incorporem, de maneira apropriada, as incertezas intrínsecas ao deslocamento de água e de solutos no solo. Sendo assim, este trabalho tem como objetivo utilizar a lógica *fuzzy*, especificamente da modelagem baseada em regras *fuzzy*, para descrever a dinâmica da água e de solutos no solo na direção vertical. A utilização da teoria dos conjuntos *fuzzy* é vantajosa a medida em que permite que as incertezas envolvidas na dinâmica de água e de solutos no solo sejam absorvidas pela utilização de conjuntos de regras que descrevem lingüisticamente as relações entre as variáveis de entrada e de saída. Neste trabalho, construiu-se uma base de regras para descrever a dinâmica da água no solo a partir de um conjunto de um treinamento, obtido das simulações numéricas deste processo, sob diferentes condições iniciais. Tais simulações numéricas foram realizadas utilizando-se o modelo computacional Hydrus_2D (SIMUNEK et al., 1999). A construção do modelo baseado em regras *fuzzy* (MBRF) foi feita utilizando-se o software MATLAB 6.5. Muito embora, quando comparado a dados experimentais o MBRF tenha apresentado resultados regulares, o mesmo mostrou-se como uma ferramenta com um grande potencial para o estudo da dinâmica de água e de solutos no solo.

2. INTRODUÇÃO

Conhecer a dinâmica de água e de solutos no solo é condição imprescindível para a proposição de metodologias que busquem a produção agrícola sustentável. Devido as dificuldades de se avaliar experimentalmente estes parâmetros a utilização de modelos matemáticos mostra-se vantajosa pela rapidez e, em geral, pela precisão dos resultados obtidos.

No geral, segundo WRAITH e OR (1998), os modelos matemáticos que buscam descrever o transporte dos solutos no solo são descritos pela Equação 1.

$$R \frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v \frac{\partial C}{\partial z} \quad (1)$$

onde:

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

t = tempo (T);

z = profundidade do solo (L);

R = fator de retardamento (-);

D = coeficiente de dispersão hidrodinâmica longitudinal ($L^2 T^{-1}$);

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

Segundo BARROS e BASSANEZI (2001), estes tipos de modelos numéricos, baseados em equações diferenciais, tem como característica essencial a precisão obtida nas previsões dos fenômenos que descrevem. Por outro lado, tais previsões ou inferências estão sempre dependentes de informações que são inseridas nos valores médios dos parâmetros utilizados.

Com base nesta afirmação ficam evidentes pelo menos dois grandes desafios na utilização deste tipo de modelo no estudo da dinâmica da água e de soluto no solo. O primeiro é que mediante a grande variabilidade dos atributos físico-hídricos do solo, não é possível considerar-se os seus valores médios. Isto restringe a utilização destes modelos apenas para áreas em que a distribuição espacial destes parâmetros seja conhecida. O segundo desafio vem da dificuldade associada à avaliação experimental e/ou quantificação de tais parâmetros.

Neste sentido, devido a sua capacidade de produção de cálculos e inferências a partir de informações imprecisas, a utilização da teoria de conjuntos *fuzzy* vem se difundindo dentro das ciências do solo (MCBRETNEY e ODEH, 1997).

BARDOSSY e DISSE (1993), avaliaram o desempenho de dois modelos baseados em regras *fuzzy* para descrever o processo de infiltração de água no solo. No primeiro, a base de regras foi obtida através de um conjunto de treinamento construído a partir da equação de Green e Ampt para descrever a taxa de infiltração ao longo do tempo. A estrutura das regras neste modelo baseia-se na diferença de umidade em camadas adjacentes e na profundidade da frente de molhamento. No segundo modelo a base de regras foi construída com base em um conjunto de treinamento obtido a partir da simulação numérica da Equação de Richards para fluxo vertical. Segundo os mesmos autores a simulação numérica foi feita utilizando-se o método de diferenças finitas. Neste modelo a estrutura das regras é baseada apenas na diferença de umidade em camadas adjacentes. Em ambos os modelos a associação das relações de entrada à conjuntos *fuzzy*, ou seja, a transformação da base de regras em regras *fuzzy* foi feito utilizando-se o método da contagem. Este método será melhor discutido no capítulo de material e métodos.

Segundo os mesmos autores, quando comparados a dados experimentais, o modelo cuja base de regras foi construída a partir da simulação numérica da equação de Richards foi o que apresentou os melhores resultados. Isto porque, de maneira geral, o modelo de Richards descreve com maior fidelidade o processo de infiltração que o modelo de Green e Ampt.

BARDOSSY (1996), construiu um modelo baseado em regras *fuzzy* para descrever a dinâmica da água no solo. A base de regras foi construída utilizando-se o método da contagem em um conjunto de treinamento obtido a partir da simulação numérica da Equação de Richards. O autor avaliou o desempenho do modelo baseado em regras *fuzzy* com o modelo de Green e Ampt, na predição de dados experimentais do deslocamento vertical de água no solo. O modelo baseado em regras *fuzzy* apresentou melhores resultados.

MOHAMED e HAWAS (2004), propuseram a utilização de um modelo neuro-*fuzzy* para descrever o conteúdo de água no solo. De acordo com os mesmos, os resultados obtidos indicaram que o modelo construído foi capaz de prever o conteúdo de água nos diferentes tipos de solo em que foi testado.

Entretanto, segundo os mesmos autores, as redes neurais requerem um grande esforço computacional e tanto a escolha de um modelo de rede neurais quanto o ajuste dos parâmetros associados ao algoritmo de aprendizagem é bastante difícil e requer uma grande experiência.

DOU et al. (1999) desenvolveram um modelo baseado em regras *fuzzy*, para descrever a dinâmica de água e de solutos no solo. O modelo proposto por estes autores possui duas bases de regras, uma para descrever a dinâmica da água no solo e outra para descrever a dinâmica de solutos. Ambas as bases de regras foram construídas utilizando-se o método da contagem em conjuntos de treinamento os quais foram construídos respectivamente, a partir da simulação numérica da Equação de Richards e da Simulação numérica da EDP que rege o transporte de solutos no solo. A simulação numérica foi feita utilizando-se o modelo computacional SWMS_2D proposto por SIMUNEK et al. (1993). O modelo proposto por estes autores foi utilizado para descrever a curva de eluição do brometo em uma coluna de solo os resultados obtidos foram similares aos observados experimentalmente e aos dados simulados utilizando-se o SWMS_2D.

Analisando-se os trabalhos descritos acima fica evidente ao potencial do uso da lógica *fuzzy* como uma forma de simplificação e de flexibilização dos modelos clássicos utilizados para descrever a dinâmica de água e de solutos no solo. Verifica-se também que o método da contagem vem sendo amplamente utilizados na construção de modelos baseados em regras *fuzzy* aplicados a este tipo de estudo. Outra constatação bastante importante é que a validação dos modelos baseados em regras *fuzzy* pode ser feita através da comparação com dados experimentais e/ou através da comparação com resultados obtidos da simulação numérica da dinâmica de água e de soluto no solo via algum modelo numérico computacional.

3. MATERIAL E MÉTODOS

3.1 Construção do Modelo Baseado Regras *Fuzzy*

Segundo DOU et al. (1999), para descrever a dinâmica da água e de solutos no solo, um modelo baseado em regras *fuzzy* no solo deve possuir duas bases de regras, uma para descrever a dinâmica da água e outra para descrever a dinâmica de solutos. Segundo os mesmos autores, cada uma destas bases de regras deve ser obtida a partir de informações oriundas das simulações numéricas de cada um destes processos. Entretanto, este trabalho,

propõe uma simplificação de ordem teórica na qual considerou-se apenas fluxo de massa para descrever a dinâmica de solutos no solo. Neste caso, a Equação 1 pode ser reescrita como:

$$R \frac{\partial C}{\partial t} = -v \frac{\partial C}{\partial z} \quad (2)$$

Tal simplificação permitiu, que a dinâmica da água e de solutos no solo fosse descrita através de um MBRF que utiliza apenas a base de regras construída para descrever a dinâmica da água no solo.

3.1.1 Conjunto de Treinamento

Neste trabalho o conjunto de treinamento foi obtido a partir da simulação numérica da a dinâmica da água em um meio poroso. De acordo com DOU et al. (1999), para se obter um conjunto de treinamento completo, um grande número de simulações numéricas, com diferentes condições iniciais, devem ser realizadas.

Sendo assim, para gerar o conjunto de treinamento, neste trabalho, utilizou-se o modelo computacional Hydrus_2D, onde foram feitas 25 simulações numéricas da dinâmica água no solo. Em cada uma das simulações mantiveram-se fixos os parâmetros físico-hídricos, já apresentados Nas Tabelas 1 e 2, variando-se uniformemente a umidade inicial do solo de $0,02 \text{ cm}^3 \text{ cm}^{-3}$ até $0,443 \text{ cm}^3 \text{ cm}^{-3}$ (umidade na saturação).

Tabela 1: Características físico- hídricas do solo utilizado na Etapa 2.

Textura			Densidade		Porosidade	K_0
Areia	Silte	Argila	Solo	Partículas		
g kg^{-1}			kg dm^{-3}		(%)	cm h^{-1}
695	129	185	1,5	2,575	41,74	17,09

Tabela 2: Parâmetros da curva de Retenção utilizados

Parâmetros da Curva de Retenção				
$\theta_r (\text{cm}^3 \text{ cm}^{-3})$	$\theta_r (\text{cm}^3 \text{ cm}^{-3})$	$\alpha(\text{m}^{-1})$	m	n
0	0,443	0.0449	0,1119	3,6732

Cada uma das simulações forneceu como resposta, ao longo de um período de 1 hora, minuto a minuto, a umidade do solo, centímetro à centímetro, até a profundidade de 30 cm. Utilizando-se o programa Excel juntamente com uma rotina computacional construída no

MATLAB 6.5., estabeleceu-se, a partir dos resultados obtidos a cada simulação, a umidade entre dois pontos consecutivos e a respectiva vazão entre os mesmos. O conjunto de treinamento obtido no final desta etapa consistiu em um amplo conjunto de dados, a partir do qual foi possível avaliar os diferentes fluxos de água entre camadas de solo adjacentes sob diferentes umidades.

3.1.2 Construção da Base de Regras *Fuzzy*

Uma vez construído o conjunto de treinamento, são apresentados os procedimentos utilizados para a construção da base de regras *fuzzy*. Neste trabalho, assim como em BARDOSSY e DISSE (1993), BARDOSSY et al. (1995), BARDOSSY (1996) e DOU et al. (1999), a principal pressuposição feita para na criação das regras que descrevem a dinâmica de água no solo é que o movimento vertical de água no solo em um determinado instante e em um determinado ponto ao longo do seu perfil depende, fortemente, do teor de umidade da região imediatamente próxima a este ponto. Sendo assim, de forma geral, as regras *fuzzy* que constituirão a base de regras deste trabalho apresentam a seguinte configuração:

“**Se** a *umidade relativa* em um ponto (P_1) é $A_{1,i}$ e a *umidade relativa* do ponto adjacente abaixo de (P_1), (P_2), é $A_{2,i}$, **então** o *fluxo* entre os dois pontos é B_i ”.

onde:

a *umidade* relativa nos distintos pontos são as variáveis lingüísticas de entrada;

o *fluxo* entre estes dois pontos é a variável lingüística de saída;

$A_{1,i}$ é o argumento associado à umidade relativa no ponto P_1 ;

$A_{2,i}$ é o argumento associado à umidade relativa no ponto P_2 ;

B_i é a resposta associado aos argumentos $A_{1,i}$ e $A_{2,i}$;

$$i \in (1, N)$$

onde:

i é o termo que descreve qual regra esta sendo utilizada;

N é o número de regras que formam a base de regras.

3.1.3 Fuzzificação

Uma vez definida estrutura das regras, deve-se associar números *fuzzy* à cada um dos argumentos $A_{1,i}$ e $A_{2,i}$ e as respectivas respostas B_i .

Primeiramente deve-se definir qual o formato dos números *fuzzy* que serão utilizados. De acordo com SUGENO e YASUKAWA (1993), os modelos baseados em regras *fuzzy* são pouco sensíveis ao formato das funções de pertinências utilizadas para a construção dos números *fuzzy*. Sendo assim, por facilidade, neste trabalho, assim com em BARDOSSY e DISSE (1993), BARDOSSY et al. (1995), BARDOSSY (1996) e DOU et al. (1999), foram utilizados números *fuzzy* triangulares.

Desta forma, com base no conjunto de treinamento gerado, utilizando-se o método da contagem, descrito por BARDOSSY e DUCKSTEIN (1995), foram determinados os números *fuzzy* que serão utilizados.

3.1.3.1 Método da Contagem

Inicialmente devem-se estabelecer quantos argumentos serão utilizados para descrever a variável lingüística umidade relativa. Neste trabalho, para a escolha do numero de argumentos utilizados, dividiu-se a faixa de umidade do solo em intervalos regulares e, para cada um desses intervalos construiu-se, a partir dos dados disponíveis no conjunto de treinamento, um par de gráficos de dispersão. No primeiro gráfico associou-se a umidade do solo em um ponto (θ_{sup}) à umidade do solo no ponto imediatamente abaixo do mesmo (θ_{inf}). Tal gráfico permitiu que se avaliasse, dentro da faixa de umidade considerada, o gradiente de umidade entre dois pontos adjacentes do solo. No segundo gráfico associou-se a vazão da solução do solo entre estes dois pontos adjacentes com a umidade no ponto imediatamente superior (θ_{sup}). Com base nas informações contidas nestes dois gráficos foi possível de se avaliar visualmente o efeito do gradiente de umidade entre dois pontos adjacentes sobre vazão da solução do solo entre os mesmos.

Com base nestas informações, agrupando-se as faixas de umidade nas quais os efeitos do gradiente de umidade sobre a vazão entre dois pontos consecutivos foram considerados

semelhantes, determinou-se o número de argumentos. Esta é uma etapa bastante importante e ao mesmo tempo bastante subjetiva, uma vez que, analisando os mesmos gráficos, um outro pesquisador, com base em suas experiências pode agrupar os dados de maneiras distintas.

Definido, para cada argumento, o suporte correspondente ao número *fuzzy* que o representa e lembrando-se que serão utilizados números *fuzzy* triangulares, determinou-se o ponto que está associado ao grau de pertinência máximo. Este ponto é obtido para cada argumento a partir da média das umidades relativas contidas no conjunto de treinamento, cujos valores encontrem-se dentro dos respectivos suportes.

O suporte do número *fuzzy* associado a cada resposta B_i , foi determinado pelo menor e pelo maior fluxo observado no conjunto de treinamento quando a umidade relativa em dois pontos adjacentes pode ser associada aos argumentos $A_{1,i}$, $A_{2,i}$. Definido o suporte, lembrando que, neste trabalho, a variável repostada também será associada a um número *fuzzy* triangular, deve-se determinar qual o ponto dentro do intervalo suporte está associado à pertinência máxima. Este ponto é determinado a partir da média dos fluxos entre dois pontos adjacentes quaisquer cujas respectivas umidade relativas estão associadas aos argumentos $A_{1,i}$, $A_{2,i}$.

3.1.4 Inferência

No geral, em um sistema de regras *fuzzy*, uma mesma premissa aciona diferentes regras *fuzzy* com diferentes conseqüências ou respostas. Em cada uma das regras *fuzzy* acionadas, os valores de entrada são associados com diferentes graus de pertinência aos argumentos que compõem a sua premissa. No caso deste estudo, os valores da umidade relativa em dois pontos adjacentes sobrepostos no solo, acionam as regras nas quais estes valores de entrada são associados, com grau de pertinência maior que 0, aos argumentos $A_{1,i}$, $A_{2,i}$.

Sendo assim, o processo de inferência permite combinar as conseqüências associadas as diferentes regras *fuzzy* que foram acionadas fornecendo uma resposta única. Existem diferentes métodos de inferência, com diferentes propriedades. DOU (1999) afirma que o método de Mandani tem se destacado por sua eficiência e simplicidade, por esta razão este método será utilizado neste trabalho.

Inicialmente, o método de inferência de Mandani combina os graus de pertinência associados aos valores de entrada através do operador Mínimo (min). Por exemplo, considerando-se que em um determinado ponto do solo a umidade relativa é x e no ponto adjacente abaixo a umidade relativa é y , o par (x, y) acionará um determinado número de regras as quais estarão associados com diferentes graus de pertinência. Sendo assim, para cada regra i , acionada, o método de Mandani realizará a seguinte operação:

$$\mu_i(x, y) = \min\{\mu_{A_{1,i}}(x), \mu_{A_{2,i}}(y)\} \quad (3)$$

onde:

- $\mu_i(x, y)$ é a função de pertinência que determina com que grau a regra i foi acionada;
- $\mu_{A_{1,i}}(x)$ é a função de pertinência que determina com que grau $x \in A_{1,i}$;
- $\mu_{A_{2,i}}(y)$ é a função de pertinência que determina com que grau $y \in A_{2,i}$;

O valor de pertinência $\mu_i(x, y)$, encontrado em cada regra é projetado às respectivas variáveis de resposta, de modo que, sua função de pertinência passa a assumir apenas valores entre zero e $\mu_i(x, y)$.

Após esta alteração na função de pertinência de cada uma das variáveis resposta, obtém-se, através da união dos conjuntos *fuzzy* que representam as mesmas, um único conjunto *fuzzy* como resposta, denominado topologia *fuzzy*. A união dos conjuntos *fuzzy* associados as respostas é feito através do máximo entre as funções de pertinência dos conjuntos *fuzzy*.

3.1.5 Defuzzificação

Como já foi dito, a *defuzzificação* consiste em transformar o conjunto *fuzzy* obtido com resposta ao final do processo de inferência. Em BARDOSSY e DUCKSTEIN (1995), são descritos diferentes métodos de *defuzzificação*, neste trabalho, assim com em Bardossy & DISSE (1993), BARDOSSY et al. (1995), BARDOSSY (1996) e DOU et al. (1999), será utilizado o método do centro de gravidade (MCG) também conhecido como método de centro de área (MCA). Neste método toma-se como resposta o ponto no eixo x no qual a área da topologia *fuzzy* é dividida em duas partes iguais. No caso deste estudo foi obtido como

resposta o fluxo de água entre dois pontos adjacentes, (P_j , P_{j+1}), cujo os valores foram determinados a partir da Equação 4 abaixo descrita.

$$Q_{j,j+1} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} q \mu(q) dq}{\int_{-\infty}^{\infty} \mu(q) dq} \quad (4)$$

onde:

$Q_{j,j+1}$ = densidade de fluxo vertical da água no solo entre os pontos P_j , P_{j+1} (LT^{-1});

q = densidade de fluxo vertical da água no solo (LT^{-1});

$\mu(q)$ é o grau de pertinência do fluxo q na topologia *fuzzy* (adimensional).

3.2 Estudo da dinâmica da água através do modelo Baseado em Regras *Fuzzy*

Cumprido os passos descritos acima, o modelo baseado em regras *fuzzy* foi construído, de acordo com (AMENDOLA et al., 2007), utilizando-se o “*Fuzzy Logic Toolbox*” do o pacote de computação científica MATLAB 6.5.

De maneira geral a modelagem da dinâmica da água e de soluto no solo baseada em regras *fuzzy* seguirá os passo descritos a seguir:

$$\Theta = \frac{\theta}{\theta_s}$$

1. A umidade θ ao longo do perfil do solo é transformada em umidade relativa;

onde: Θ é a umidade relativa (-); θ = umidade volumétrica (cm^3H_2O/ cm^3); θ_s = umidade volumétrica saturada (cm^3H_2O/ cm^3);

2. A cada par de pontos adjacentes (P_j , P_{j+1}), os respectivos valores das umidade relativas (Θ_j , Θ_{j+1}), acionam um conjunto de regras;

3. Através do método de inferência de Mandani obtêm-se a topologia *fuzzy*;

4. A vazão da água ($B_{j,j+1}$) entre os pontos (P_j , P_{j+1}) é obtido pelo centro de gravidade da topologia *fuzzy* ;

5. A vazão $B_{j, j+1}$ obtido em 4 é utilizado para determinar a umidade nos pontos P_j, P_{j+1} no próximo passo de tempo;
6. Os passos 1-5 são repetidos para cada passo no tempo até totalizar o tempo total da simulação Buscando-se um maior entendimento do funcionamento do MBRF na simulação da dinâmica da água no solo, os procedimentos descritos acima são apresentados graficamente no Anexo 1.

Nas Figuras 1 e 2 são apresentado de forma mais dtalhadas os porcedimentos envolvidos no uso do MBRF no processo de simulação da dinâmica da água e de potássio no solo.

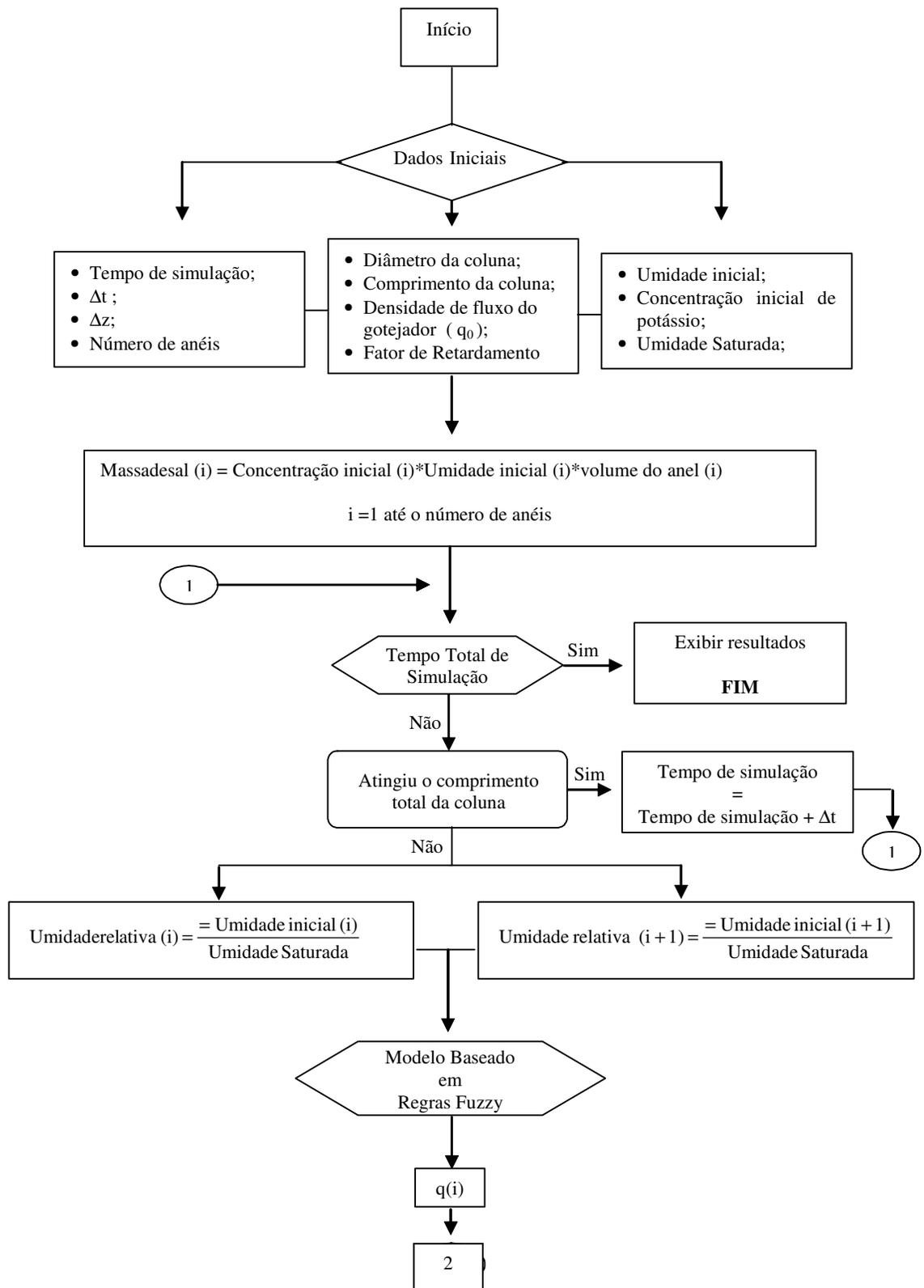


Figura 1: Fluxograma do modelo baseado em regras *fuzzy* proposto.

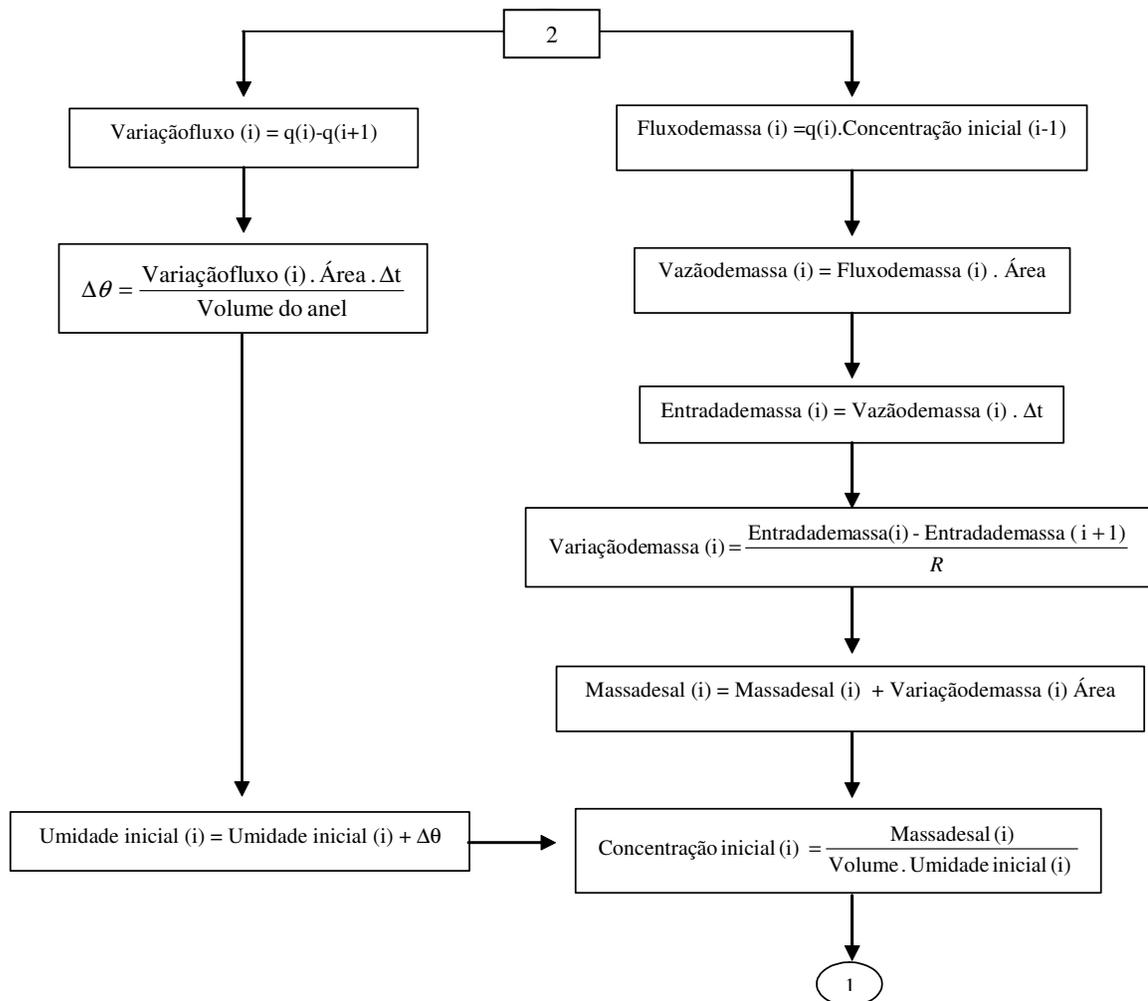


Figura 2: Fluxograma da sub-rotina do modelo baseado em regras *fuzzy* proposto.

3.3 Avaliação do modelo baseado em regras *fuzzy*.

Para se avaliar a eficiência do modelo baseado em regras *fuzzy* na simulação da dinâmica da água no solo, o mesmo foi utilizado para descrever este fenômeno em uma coluna de solo, submetida a diferentes vazões de entrada. Estas mesmas simulações foram feitas utilizando-se o modelo computacional Hydrus_2D e os resultados obtidos através de cada um destes modelos, para cada uma das vazões de entrada foram comparados.

Numa segunda etapa o MBRF foi utilizado para simular a dinâmica de água e de potássio e os resultados obtidos foram comparados com os resultados experimentais obtidos no experimento apresentado no Capítulo 3. Nesta etapa os dados experimentais e simulados

serão comparados mediante a análise do valor absoluto do erro relativo ER calculado através da Equação 4.

$$ER = \left| \frac{\text{Valor Observado} - \text{Valor Simulado}}{\text{Valor Observado}} \right| \quad (4)$$

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 Construção do MBRF

Com base nas simulações numéricas da dinâmica da água no solo, através do Modelo computacional *Hydrus_2D*, obteve-se o conjunto de treinamento apresentado na Figura 3.

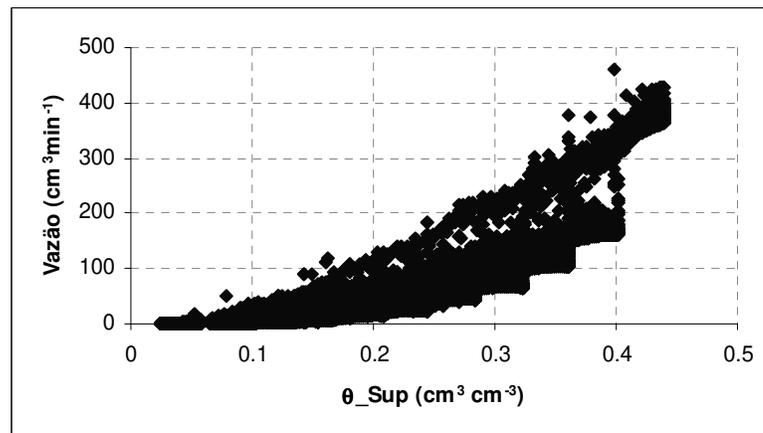


Figura 3: Conjunto de treinamento utilizado na construção do MBRF.

A Figura 3 descreve a vazão entre dois pontos sobrepostos ao longo do perfil do solo em função da umidade volumétrica do solo no ponto superior.

Na Figura 4 são apresentados os gradientes de umidade entre dois pontos sobrepostos ao longo do perfil do solo obtidos das simulações numéricas que compõem o conjunto de treinamento.

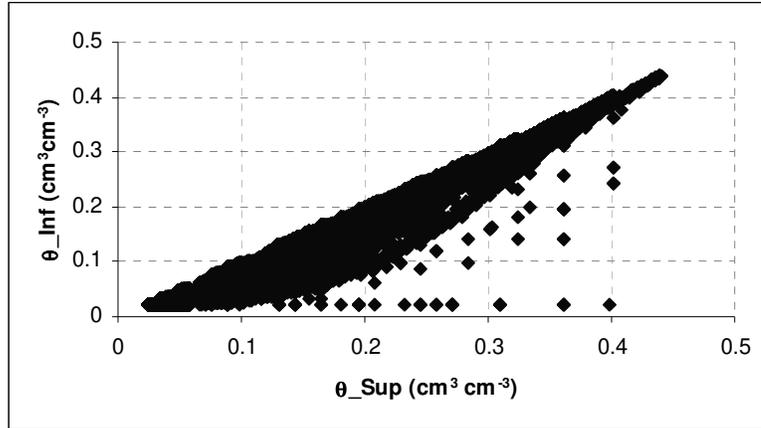


Figura 4: Gradientes de umidade entre os pares de pontos sobrepostos.

Analisando-se as Figuras 4 e 5, fixando-se uma faixa de umidade, pode-se verificar que a variação da vazão da água entre os diferentes pares de pontos está altamente relacionada com o gradiente de umidade que existe entre os mesmos. Tal constatação esta de acordo com a pressuposição existente na estrutura de regras que integram o MBRF.

Através da Figura 4, pode-se constatar também que o conjunto de treinamento utilizado, é apropriado para descrever a dinâmica de água no solo. Isto porque, de uma maneira geral, θ_{Sup} é sempre maior ou igual a θ_{Inf} .

A fim de se avaliar de maneira mais apropriada o comportamento da vazão da água em função do gradiente de umidade, os dados apresentados nas Figuras 3 e 4, foram particionados em faixas de umidade de menor amplitude. Tais particionamentos são apresentados na forma de gráficos, apresentados no Anexo 2.

Baseado, nas informações apresentadas no Anexo 2, definiu-se, o suporte e, conseqüentemente, o numero de argumentos da variável de entrada do MBRF utilizado neste trabalho.

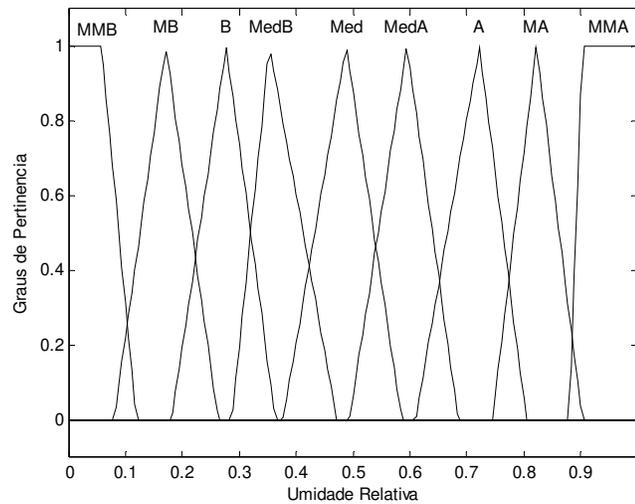


Figura 5: *Fuzzição* da variável de entrada.

A Figura 5 apresenta os conjuntos *fuzzy* associados ao domínio da variável de entrada do MBRF proposto. Deve-se ressaltar que, neste trabalho a variável de entrada Umidade Relativa descreve a razão entre a umidade volumétrica do solo medida em um determinado ponto ao longo do seu perfil e a umidade saturada do mesmo.

Através da Figura 5, pode-se verificar que, no modelo proposto, a variável de entrada teve 9 conjuntos *fuzzy* associados ao seu domínio. Tais conjuntos estão associados as variáveis lingüísticas: umidade baixíssima (MMB), umidade muito baixa (MB), umidade baixa (B), umidade média-baixa (MedB), umidade média (Méd), umidade média–alta (MedA), umidade alta (A), umidade muito alta (MA), umidade altíssima (MMA). Os conjuntos *fuzzy* MMB e MMA têm formatos distintos dos demais conjuntos pois tais conjuntos se encontram nas extremidades do domínio da variável de entrada e, para estes casos, o formato trapezoidal foi considerado o mais apropriado.

Uma vez definidos os conjuntos *fuzzy* associados as variáveis de entrada, através do método da contagem estabeleceu-se os conjuntos *fuzzy* associados as respectivas saídas. Deve-se ressaltar que em função de se utilizar duas variáveis de entrada, cada qual associada a 9 conjuntos *fuzzy*, inicialmente poderia se esperar que a combinação dos mesmos resultaria em uma base de 81 regras. Entretanto, o MBRF proposto descreve a dinâmica descendente de água no solo e, neste caso, mostra-se necessário que θ_{Sup} seja maior ou igual a θ_{Inf} . Sendo assim combinações em que esta condição não eram observadas foram descartadas, resultando

no Quadro 1 onde são apresentadas a base de 37 regras utilizada no MBRF proposto neste trabalho. A variável saída, vazão entre os pares de pontos, foi associada a conjuntos *fuzzy* triangulares, cujos parâmetros também são apresentados no Quadro 1, segundo notação apresentada no Capítulo 1.

Quadro 1: Base de regras utilizadas no MBRF proposto neste trabalho

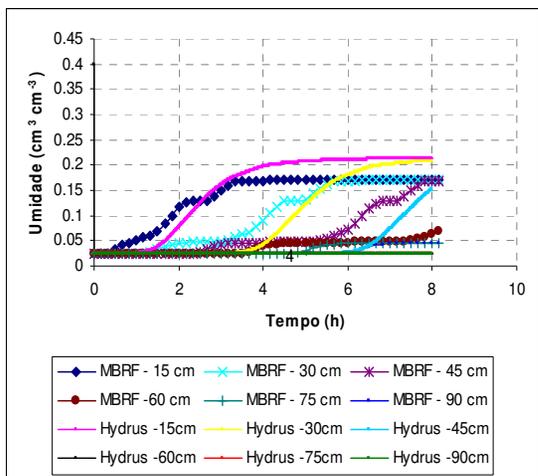
Número da Regra	Base de Regras	Saída Fuzzy Vazão (cm ³ min ⁻¹)
1	Se θ_{Sup} é MB e θ_{Inf} é MB então Fluxo é	(0; 0,049; 0,722) _T
2	Se θ_{Sup} é B e θ_{Inf} é MB então Fluxo é	(0; 3,1; 13,74) _T
3	Se θ_{Sup} é B e θ_{Inf} é B então Fluxo é	(0,48; 1,81; 5,8) _T
4	Se θ_{Sup} é MedB e θ_{Inf} é MB então Fluxo é	(5,1; 12,01; 33,16) _T
5	Se θ_{Sup} é MedB e θ_{Inf} é B então Fluxo é	(0,96; 5,23; 20,84) _T
6	Se θ_{Sup} é MedB e θ_{Inf} é MedB então Fluxo é	(0,96; 5,23; 20,84) _T
7	Se θ_{Sup} é Med e θ_{Inf} é MB então Fluxo é	(36,65; 48,74; 88,39) _T
8	Se θ_{Sup} é Med e θ_{Inf} é B então Fluxo é	(14,82; 32,7; 72,16) _T
9	Se θ_{Sup} é Med e θ_{Inf} é MedB então Fluxo é	(5,1; 12,01; 33,16) _T
10	Se θ_{Sup} é Med e θ_{Inf} é Med então Fluxo é	(5,1; 12,01; 33,16) _T
11	Se θ_{Sup} é MedA e θ_{Inf} é MB então Fluxo é	(73,03; 92,52; 130,4) _T
12	Se θ_{Sup} é MedA e θ_{Inf} é B então Fluxo é	(47,53; 84,23; 128,3) _T
13	Se θ_{Sup} é MedA e θ_{Inf} é MedB então Fluxo é	(20,99; 51,04; 128,3) _T
14	Se θ_{Sup} é MedA e θ_{Inf} é Med então Fluxo é	(14,82; 32,7; 72,16) _T
15	Se θ_{Sup} é MedA e θ_{Inf} é MedA então Fluxo é	(14,82; 32,7; 72,16) _T
16	Se θ_{Sup} é A e θ_{Inf} é MB então Fluxo é	(117,7; 143,4; 159,4) _T
17	Se θ_{Sup} é A e θ_{Inf} é B então Fluxo é	(98,31; 106,3; 141,4) _T
18	Se θ_{Sup} é A e θ_{Inf} é MedB então Fluxo é	(84,76; 131,5; 174,7) _T
19	Se θ_{Sup} é A e θ_{Inf} é Med então Fluxo é	(68,83; 120; 206,2) _T
20	Se θ_{Sup} é A e θ_{Inf} é MedA então Fluxo é	(24,9; 50,7; 102,1) _T
21	Se θ_{Sup} é A e θ_{Inf} é A então Fluxo é	(24,9; 50,7; 102,1) _T
22	Se θ_{Sup} é AA e θ_{Inf} é MB então Fluxo é	(134,3; 181; 218,3) _T
23	Se θ_{Sup} é AA e θ_{Inf} é B então Fluxo é	(134,3; 181; 218,3) _T
24	Se θ_{Sup} é AA e θ_{Inf} é MedB então Fluxo é	(134,3; 181; 218,3) _T
25	Se θ_{Sup} é AA e θ_{Inf} é Med então Fluxo é	(134,3; 181; 218,3) _T
26	Se θ_{Sup} é AA e θ_{Inf} é MedA então Fluxo é	(134,3; 181; 218,3) _T
27	Se θ_{Sup} é AA e θ_{Inf} é A então Fluxo é	(46,1; 87,1; 148,6) _T
28	Se θ_{Sup} é AA e θ_{Inf} é AA então Fluxo é	(46,1; 87,1; 148,6) _T
29	Se θ_{Sup} é MA e θ_{Inf} é MB então Fluxo é	(332,5; 333,8; 336,6) _T
30	Se θ_{Sup} é MA e θ_{Inf} é B então Fluxo é	(332,5; 333,8; 336,6) _T
31	Se θ_{Sup} é MA e θ_{Inf} é MedB então Fluxo é	(332,5; 333,8; 336,6) _T
32	Se θ_{Sup} é MA e q_{Inf} é Med então Fluxo é	(226,8; 258,2; 279,6) _T
33	Se θ_{Sup} é MA e q_{Inf} é MedA então Fluxo é	(226,8; 258,2; 279,6) _T
34	Se θ_{Sup} é MA e q_{Inf} é A então Fluxo é	(226,8; 258,2; 279,6) _T
35	Se θ_{Sup} é MA e q_{Inf} é AA então Fluxo é	(105,4; 126,8; 186,3) _T
36	Se θ_{Sup} é MA e q_{Inf} é MA então Fluxo é	(105,4; 126,8; 186,3) _T
37	Se θ_{Sup} é MMA então Fluxo é	(161,3; 213,9; 362,6) _T

4.2 Validação do MBRF

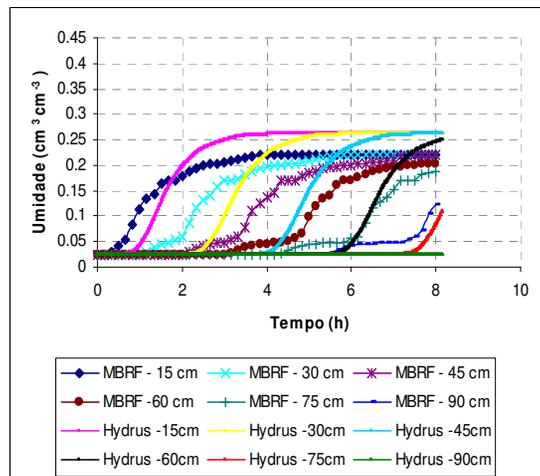
A fim de se avaliar o desempenho do MBRF o mesmo foi utilizado para descrever a dinâmica da água sob diferentes condições de contorno. Foram feitas 5 simulações em condições semelhantes aquelas já descritas para os ensaios experimentais descritos na Seção 3.2 do Capítulo 3 deste trabalho. Em cada uma destas simulações utilizaram-se as seguintes vazões de gotejamento: 1,0; 2,0; 3,0; 4,9 e 9,7 l h⁻¹. Nas simulações avaliou-se a cada minuto a umidade volumétrica em 6 pontos de monitoramento ao longo do perfil do solo, posicionados nas profundidades de 15, 30, 45, 60, 75 e 90 cm.

Com base nos parâmetros apresentados nas Tabelas 1 e 2, foram feitas, para as mesmas condições descritas acima, simulações da dinâmica da água utilizando-se o modelo computacional Hydrus-2D.

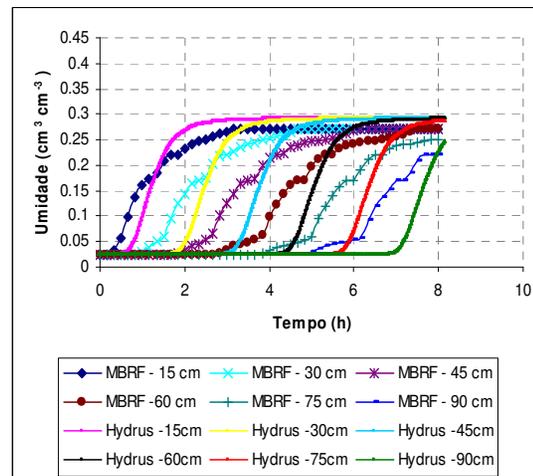
A Figura 6 apresenta para cada uma das vazões de gotejamento as simulações numéricas da dinâmica da água obtidas através do MBRF e do modelo computacional Hydrus-2D. Tomando-se os resultados do modelo Hydrus-2D como referência, pode-se verificar que o desempenho do MBRF na simulação da dinâmica da água no solo foi claramente influenciado pela vazão de gotejamento. E ainda que o desempenho do MBRF melhora com o aumento da vazão do gotejador. Tal resultado pode ser explicado a medida em que nas simulações realizadas para a construção do conjunto de treinamento, utilizaram-se vazões de gotejamento relativamente altas.



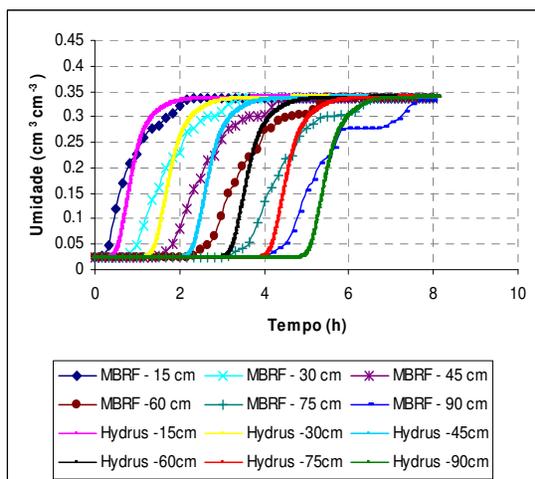
Vazão do gotejador = 1,0 l h⁻¹



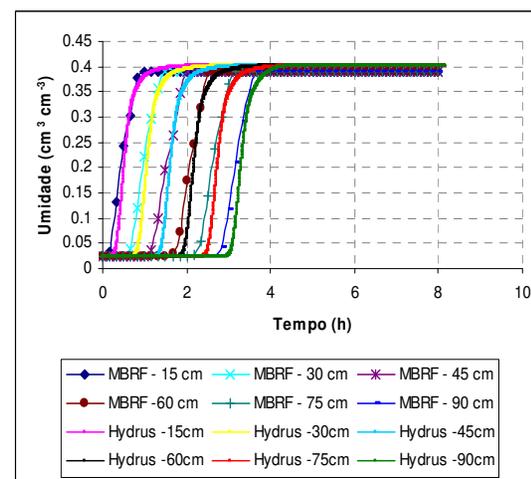
Vazão do gotejador = 2,0 l h⁻¹



Vazão do gotejador = 3,0 l h⁻¹



Vazão do gotejador = 4,9 l h⁻¹



Vazão do gotejador = 9,7 l h⁻¹

Figura 6: Comparação do MBRF e do HYDRUS_2D na simulação da dinâmica da água no solo, sob diferentes vazões de gotejamento

Na Tabela 3 são apresentados, em diferentes instantes de tempo, para as diferentes profundidades avaliadas, os valores de umidade volumétrica simulados pelo MBRF, os obtidos experimentalmente no Ensaio 1 e os respectivos erros relativos (ER). Pelos valores do ER destacados em negrito nesta mesma Tabela, verifica-se que o ER desloca-se para as camadas mais profundas com o passar do tempo, tal comportamento esta associado ao fato de que a velocidade do deslocamento frente de molhamento simulada pelo MBF foi mais rápida que a observada experimentalmente.

Com base nas considerações descritas acima e em função dos altos valores de ER apresentados na Tabela 3, verifica-se que, para as condições associadas ao Ensaio 1, o MBRF mostrou-se pouco eficiente em descrever a dinâmica da água no solo.

Observa-se também, uma tendência do ER se estabilizar com o passar do tempo, isto porque, tanto na simulação numérica quanto nos dados experimentais, as umidades volumétricas obtidas também tendem a se estabilizar nos respectivos valores de 0,24 e 0,29.

Na Tabela 4 são apresentados, em diferentes instantes de tempo, para as diferentes profundidades avaliadas, as concentrações de potássio (C) simuladas pelo MBRF, os obtidos experimentalmente no Ensaio 1 e os respectivos erros relativos (ER). Uma vez que neste trabalho a dinâmica de potássio foi modelada considerando-se apenas o fluxo de massa, o desempenho do MBRF em descrever este processo esta intimamente ligado à precisão do mesmo em descrever a dinâmica da água no solo. Sendo assim, a eficiência do MBRF em descrever a dinâmica do potássio no solo, alem das limitações associadas as simplificações adotadas, também foi comprometida pela baixa eficiência deste modelo em descrever a dinâmica da água, tal constatação é refletida pelos altos valores do ER obtidos.

Tabela 3: Valores de umidade volumétrica simulados pelo MBRF, obtidos experimentalmente no Ensaio 1 e respectivos erros (ER).

Profundidade (cm)	Tempo (horas)														
	2,41			3,53			5,10			6,63			8,13		
	θ (cm ³ cm ⁻³)		ER	θ (cm ³ cm ⁻³)		ER	θ (cm ³ cm ⁻³)		ER	θ (cm ³ cm ⁻³)		ER	θ (cm ³ cm ⁻³)		ER
	MBRF	Exp		MBRF	Exp		MBRF	Exp		MBRF	Exp		MBRF	Exp	
15	0,24	0,29	0,17	0,25	0,29	0,16	0,25	0,29	0,15	0,25	0,29	0,14	0,25	0,28	0,12
30	0,17	0,02	6,09	0,23	0,28	0,17	0,25	0,29	0,16	0,25	0,29	0,15	0,25	0,29	0,13
45	0,05	0,02	0,88	0,17	0,02	5,90	0,24	0,28	0,15	0,25	0,29	0,16	0,25	0,29	0,14
60	0,02	0,02	0,00	0,05	0,02	0,92	0,17	0,02	6,26	0,24	0,30	0,20	0,25	0,31	0,19
75	0,02	0,02	0,00	0,02	0,02	0,00	0,06	0,02	1,33	0,21	0,02	7,95	0,24	0,27	0,09
90	0,02	0,02	0,00	0,02	0,02	0,00	0,03	0,02	0,15	0,11	0,02	3,50	0,22	0,02	8,20

Tabela 4: Concentrações de Potássio simuladas pelo MBRF, obtidas experimentalmente no Ensaio 1 e respectivos erros relativos (ER).

Profundidade (cm)	Tempo (horas)														
	2,41			3,53			5,10			6,63			8,13		
	C (mg l ⁻¹)		ER	C (mg l ⁻¹)		ER	C (mg l ⁻¹)		ER	C (mg l ⁻¹)		ER	C (mg l ⁻¹)		ER
	MBRF	Exp		MBRF	Exp		MBRF	Exp		MBRF	Exp		MBRF	Exp	
15	1378,3	15,0	90,89	1460,1	660,0	1,21	1491,9	1200,0	0,24	1498,3	1282,5	0,17	1499,6	1320,0	0,14
30	730,0	19,5	36,44	1075,0	75,0	13,33	1346,7	30,0	43,89	1450,1	390,0	2,72	1484,7	1065,0	0,39
45	83,5	19,5	3,28	262,6	19,5	12,47	663,3	30,0	21,11	1028,4	30,0	33,28	1267,2	30,0	41,24
60	13,6	19,5	0,30	23,1	19,5	0,18	134,2	19,5	5,88	385,8	15,0	24,72	703,5	15,0	45,90
75	19,5	19,5	0,00	12,8	19,5	0,34	14,1	19,5	0,28	70,6	19,5	2,62	217,5	15,0	13,50
90	19,5	19,5	0,00	19,5	19,5	0,00	10,5	19,5	0,46	8,7	19,5	0,55	37,9	19,5	0,94

A fim de uma melhor visualização, na Figura 7 apresentam-se graficamente os dados disponíveis nas Tabelas 3 e 4.

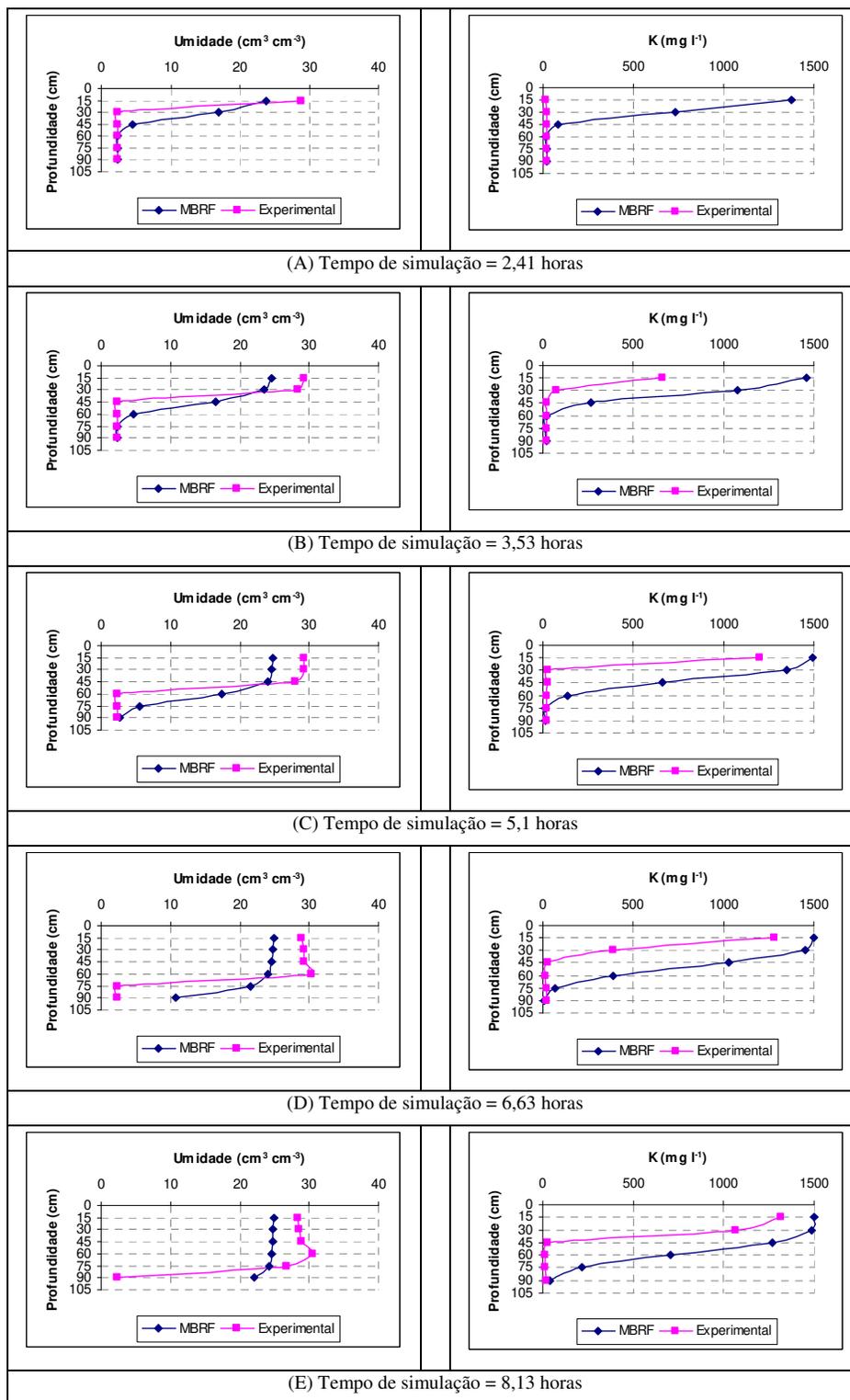


Figura 7: Umidade volumétrica e concentração de potássio experimentais (Ensaio 1) e simulados através do MBRF.

Pela Figura 7 verifica-se que embora no MBRF a frente de molhamento se desloque com uma velocidade superior à observada experimentalmente, os valores de umidade simulados levam mais tempo para atingir a faixa de umidade em que se estabilizam. Tal comportamento do MBRF faz com que, ao considerar-se apenas o fluxo de massa, este modelo super-estime a concentração de potássio nas diferentes profundidades avaliadas.

Na Tabela 5 são apresentados, em diferentes instantes de tempo, para as diferentes profundidades avaliadas, os valores de umidade volumétrica simulados pelo MBRF, os obtidos experimentalmente no Ensaio 2 e os respectivos erros relativos (ER). Nesta Tabela, os valores destacados em negrito demonstram que, mais uma vez, o ER tende a deslocar-se para as camadas mais profundas com o passar do tempo. Indicando que nesse caso, a exemplo do que já foi verificado na simulação feita para o Ensaio 1, a velocidade do deslocamento frente de molhamento simulada pelo MBF foi mais rápida que a observada experimentalmente.

Embora o MBRF tenha apresentado um comportamento semelhante ao descrito anteriormente, neste caso, pelos valores de ER apresentados, o modelo, embora ainda tenha apresentado um desempenho regular, o mesmo mostrou-se mais eficiente na simulação da dinâmica da água e do potássio no solo.

Na Tabela 6 são apresentados, em diferentes instantes de tempo, para as diferentes profundidades avaliadas, as concentrações de potássio (C) simuladas pelo MBRF, os obtidos experimentalmente no Ensaio 2 e os respectivos erros relativos (ER). Verifica-se, através desta Tabela que o MBRF ainda mostra-se pouco eficiente em descrever a dinâmica da água e do potássio no solo. Por outro lado, pelos valores de ER apresentados, constata-se que a melhora deste modelo em descrever a dinâmica da água, acarretou em um ganho de precisão do mesmo na simulação da dinâmica de potássio.

Na Figura 8 pode-se visualizar graficamente os resultados simulados experimentais simulados da dinâmica de água e de potássio apresentados nas Tabelas 5 e 6.

Tabela 5: Valores de umidade volumétrica simulados pelo MBRF, obtidos experimentalmente no Ensaio 2 e respectivos erros relativos (ER).

Profundidade (cm)	Tempo (horas)														
	2,41			3,53			5,10			6,63			8,13		
	θ (cm ³ cm ⁻³)		ER	θ (cm ³ cm ⁻³)		ER	θ (cm ³ cm ⁻³)		ER	θ (cm ³ cm ⁻³)		ER	θ (cm ³ cm ⁻³)		ER
	MBRF	Exp		MBRF	Exp		MBRF	Exp		MBRF	Exp		MBRF	Exp	
15	0,25	0,29	0,15	0,27	0,30	0,09	0,27	0,30	0,10	0,27	0,30	0,10	0,27	0,30	0,09
30	0,17	0,02	6,11	0,24	0,30	0,19	0,27	0,31	0,11	0,27	0,31	0,11	0,27	0,30	0,09
45	0,05	0,02	1,10	0,17	0,02	6,11	0,25	0,30	0,18	0,27	0,30	0,10	0,27	0,30	0,10
60	0,02	0,02	0,00	0,05	0,02	1,00	0,21	0,02	7,70	0,25	0,32	0,22	0,27	0,32	0,15
75	0,02	0,02	0,00	0,02	0,02	0,00	0,08	0,02	2,43	0,22	0,02	8,16	0,25	0,30	0,16
90	0,02	0,02	0,00	0,02	0,02	0,00	0,03	0,02	0,36	0,14	0,02	4,63	0,24	0,22	0,07

Tabela 6: Concentrações de Potássio simuladas pelo MBRF, obtidas experimentalmente no Ensaio 2 e respectivos erros relativos (ER).

Profundidade (cm)	Tempo (horas)														
	2,41			3,53			5,10			6,63			8,13		
	C (mg l ⁻¹)		ER	C (mg l ⁻¹)		ER	C (mg l ⁻¹)		ER	C (mg l ⁻¹)		ER	C (mg l ⁻¹)		ER
	MBRF	Exp		MBRF	Exp		MBRF	Exp		MBRF	Exp		MBRF	Exp	
15	150,0	756,8	0,80	990,0	1072,4	0,08	1305,0	1350,5	0,03	1425,0	1452,7	0,02	1425,0	1485,8	0,04
30	19,5	100,0	0,81	45,0	290,1	0,84	15,0	669,2	0,98	720,0	1038,2	0,31	1155,0	1275,9	0,09
45	19,5	13,0	0,50	19,5	28,5	0,32	45,0	150,3	0,70	30,0	395,3	0,92	30,0	717,7	0,96
60	19,5	19,5	0,00	19,5	12,2	0,60	19,5	16,5	0,18	22,5	79,3	0,72	15,0	226,3	0,93
75	19,5	19,5	0,00	19,5	19,5	0,00	19,5	7,8	1,50	19,5	10,4	0,88	60,0	42,4	0,42
90	19,5	19,5	0,00	19,5	19,5	0,00	19,5	16,0	0,22	19,5	5,4	2,61	19,5	6,9	1,83

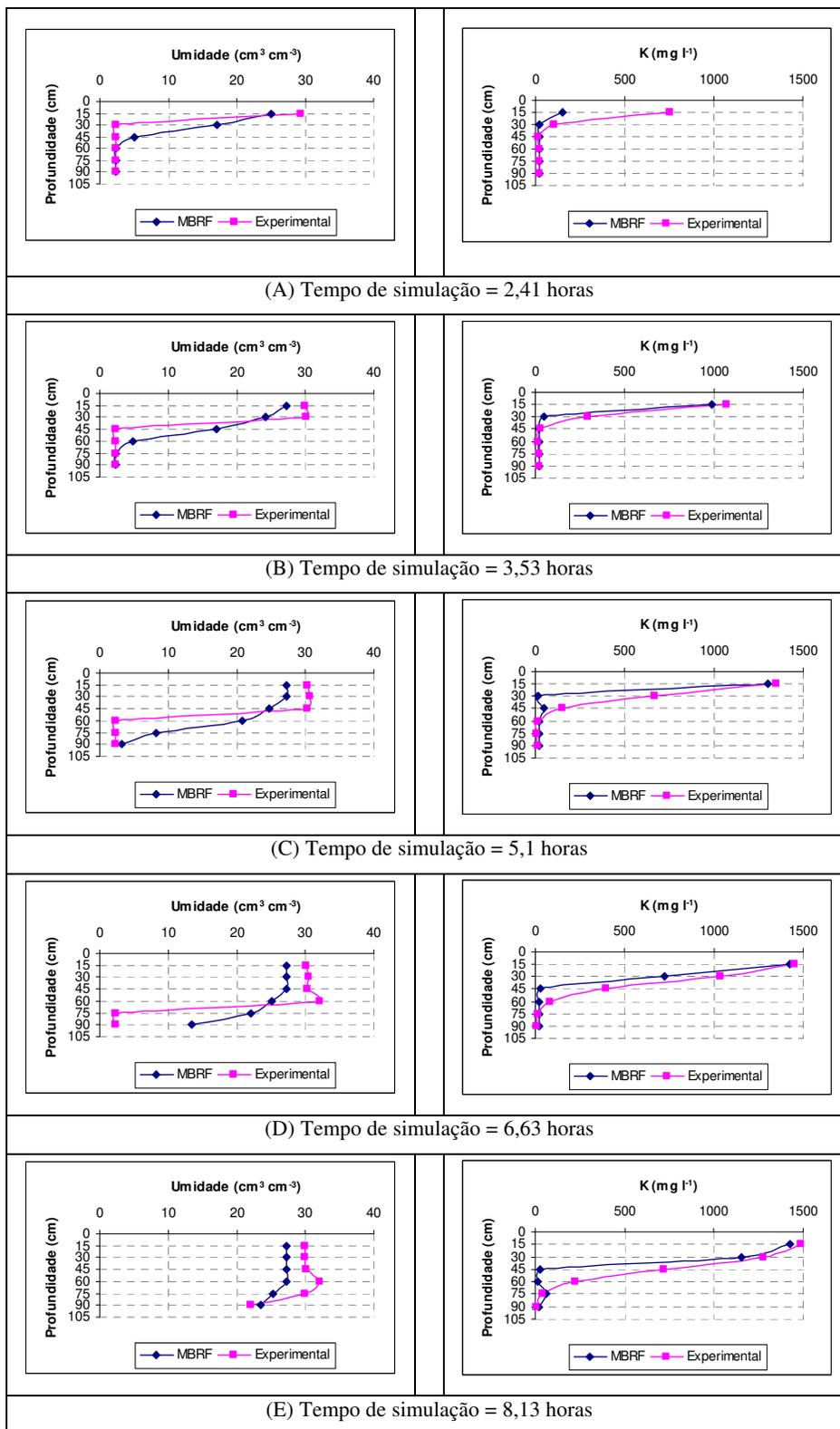


Figura 8: Umidade volumétrica e concentração de potássio experimentais (Ensaio 2) e simulados através do MBRF.

Analisando-se a Figura 8, verifica-se que o MBRF descreveu de maneira mais satisfatória a dinâmica da água no solo. Isto se deve ao fato de que, como já foi visto na Figura 6, a eficiência do MBRF tende a melhorar com o aumento da vazão de gotejamento, e neste caso, tanto os resultados experimentais do Ensaio 2, quanto os simulados, foram obtidos a partir de uma vazão de gotejamento de $3,0 \text{ l h}^{-1}$, ligeiramente maior que a vazão de gotejamento utilizada na obtenção dos dados apresentados na Figura 7.

Uma vez que neste caso a dinâmica do potássio também foi feita através do fluxo de massa, o melhor desempenho do MBRF em descrever a dinâmica da água no solo refletiu em uma sensível melhora no desempenho deste mesmo modelo em descrever o transporte deste íon ao longo do solo. Deve-se ressaltar ainda que a maior eficiência do MBRF em descrever a dinâmica do potássio também esta associada ao fato de que quanto maior a vazão com que a solução é aplicada ao solo, menor é o efeito do processo de difusão no deslocamento do potássio no solo e, desta forma, mais razoável é a utilização apenas do fluxo de massa.

5. CONCLUSÕES

O uso do programa MATLAB 6.5. mostrou-se como uma importante ferramenta tanto para a organização do conjunto de treinamento, quanto para a construção do modelo baseado em regras *fuzzy*.

O modelo proposto neste trabalho para descrever a dinâmica da água no solo, mostrou-se sensível à vazão do gotejador. Tal comportamento pode estar associado às características do conjunto de treinamento e/ou à construção da base de regras utilizada, indicando que, possivelmente, deve-se associar à variável de entrada um maior número de argumentos.

Quando comparado aos dados experimentais, o modelo baseado em regras *fuzzy*, mostrou-se pouco eficiente em descrever a dinâmica da água e do potássio no solo, por outro lado, quando comparado aos dados simulados pelo Hydrus-2D, o MBRF mostrou-se como uma ferramenta capaz de descrever estes processos, indicando que mais estudos devem ser conduzidos afim de se investigar a sensibilidade do mesmo à base de regras e ao conjunto de treinamento e utilizados.

Muito embora seja possível de se obter uma estimativa razoável da dinâmica de potássio no solo considerando-se apenas o fluxo de massa, a incorporação de uma base de

regras específica para descrever a dinâmica de íons no solo pode acarretar em um ganho de precisão bastante significativo na simulação numérica deste processo.

6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AMENDOLA, Mariangela; SOUZA, Anderson Luiz e BARROS, Laécio Carvalho. Manual do uso da teoria dos conjuntos *fuzzy* no MATLAB 6.5. Versão 2005 do manual apresentado no Ciclo de Palestras/2004, realizado na FEAGRI/UNICAMP. Disponível em: http://www.ime.unicamp.br/~laeciocb/manual_fuzzy_matlab.pdf. Acesso em 28/06/2007

BARDOSSY, A. The use of *fuzzy* rules for the description of elements of the hydrological cycle. **Ecological Modelling**. v.85, p. 59-65, 1996.

BARDOSSY, A.; DUCKSTEIN, L. **Fuzzy Rule-Based Modeling with Applications to Geophysical, Biological and Engineering Systems**. Flórida: CRC, 1995. 232p.

BARDOSSY, A.; BRONSTERT, A.; MERZ, B. 1-, 2- and 3-dimensional modeling of water movement in the unsaturated soil matrix using a *fuzzy* approach. v.18 (4), p.237-251. 1995.

BARDOSSY, A.; DISSE, M. *Fuzzy* rule-based models for infiltration. **Water-Resour-Res.** v.29 (2) p. 373-382. 1993.

BARROS, L.C.; BASSANEZI, R. C. Introdução à Teoria *Fuzzy*: aplicações em biomatemática: minicurso apresentado no **XV Congresso Latino Americano de Biomatemática**, 29 de out. - 02 de nov. de 2001.

DOU, C.; WOLDT, W.; BOGARDI, I. *Fuzzy* rule-based approach to describe solute transport in the unsaturated zone. **Journal of Hydrology**. v. 220 , p. 74-85, 1999.

McBRETNEY, A. B.; ODEH, I. O. A. Application of *fuzzy* sets in soil science: *fuzzy* logic, *fuzzy* measurements and *fuzzy* decisions. **Geoderma**. v.77, p. 85 -113, 1997.

MOHAMED, A. M. O.; HAWAS, Y. Neuro-*fuzzy* logic model for evaluating water content of sandy soils. **Computer-Aided Civil and Infrastructure Engineering**. v. 19, p. 274-287, 2004.

SIMUNEK, J.; VOGEL, T.; VAN GENUTCHEN T. SWMS_2D: simulating water flow and solute transport in two-dimensional variably saturated media. US Salinity Lab, Riverside-CA, 1993.

SIMUNEK, J.; SEJNA, M.; VAN GENUTCHEN T. The HYDRUS_2D software for Simulating the Two-Dimensional Movement of Water, Heat and Multiple Solutes in Variably-Saturated Media. 1999. 227 p.

SUGENO, M.; YASUKAWA, T. A *Fuzzy-Logic-Based* Approach to Qualitative Modeling. **Fuzzy Systems** v. 1, pp. 7-31, 1993.

WRAITH, J.M.; OR, D. Nonlinear parameter estimation using spreadsheet software. **Journal of Natural Resources** 27: 13-19, 1998.

CONCLUSÃO GERAL

O uso de colunas de solo equipadas com sondas de TDR e com extratores de solução, devido ao grande volume de informações geradas e em função da consistência das mesmas, mostra-se como uma importante ferramenta no estudo da dinâmica de água no solo, sobretudo nos trabalhos que tenham como objetivo propor e/ou avaliar a utilização de modelos matemáticos na descrição destes processos. Por outro lado, mais estudos devem ser conduzidos a fim de se avaliar a sensibilidade da técnica da TDR a pequenas variações da umidade volumétrica.

O modelo baseado em regras *fuzzy* proposto neste trabalho, apresentou um desempenho regular na simulação da dinâmica da água no solo. Tal resultado pode estar associado ao número de conjuntos *fuzzy* associados as variáveis de entrada e/ou ao processo de construção do conjunto de treinamento utilizado. A utilização desse mesmo modelo para descrever a dinâmica de potássio no solo, considerando-se apenas o fluxo de massa, teve os resultados associados à dinâmica desse íon comprometidos, sobretudo pelos resultados da dinâmica da água.

Mediante as imprecisões intrínsecas ao ajuste dos parâmetros associados ao transporte de íons no solo, o uso da teoria de conjunto *fuzzy* no estudo da dinâmica da água e de solutos no solo mostra-se vantajosa, reforçando a importância da continuidade de estudos neste sentido.

ANEXO 1

No que segue são apresentados graficamente os procedimentos envolvidos em uma iteração realizada pelo MBRF construído neste trabalho para que se determine, num determinado intervalo de tempo, o volume de água que passa de um ponto qualquer localizado ao longo do perfil do solo para um ponto adjacente posicionado abaixo do mesmo.

Considerando-se uma situação hipotética onde $\theta_{sup} = 0,57$ e $\theta_{inf} = 0,49$, inicialmente, deve-se verificar a quais conjuntos *fuzzy* estes valores de entrada estão associados. Sendo assim, tomando como base os resultados apresentados no Capítulo 5, obtém-se a Figura 1.

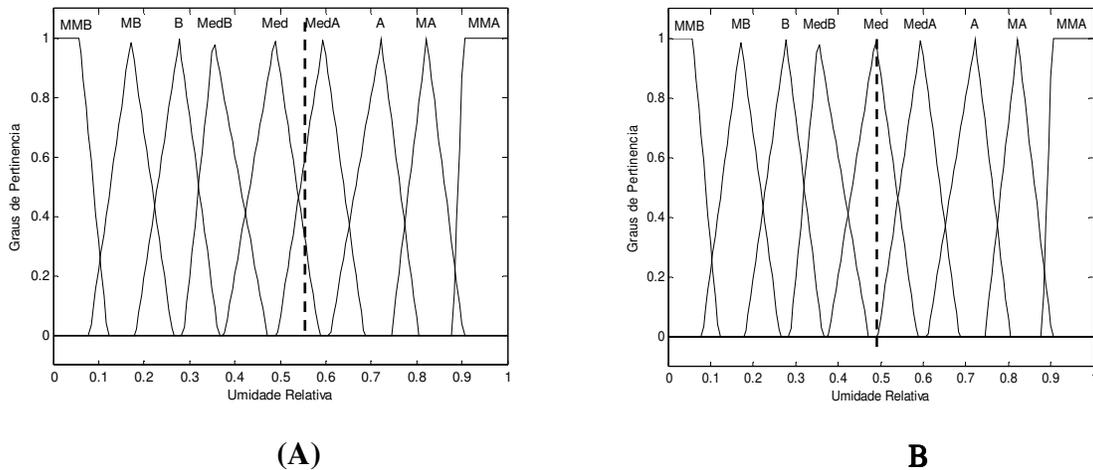


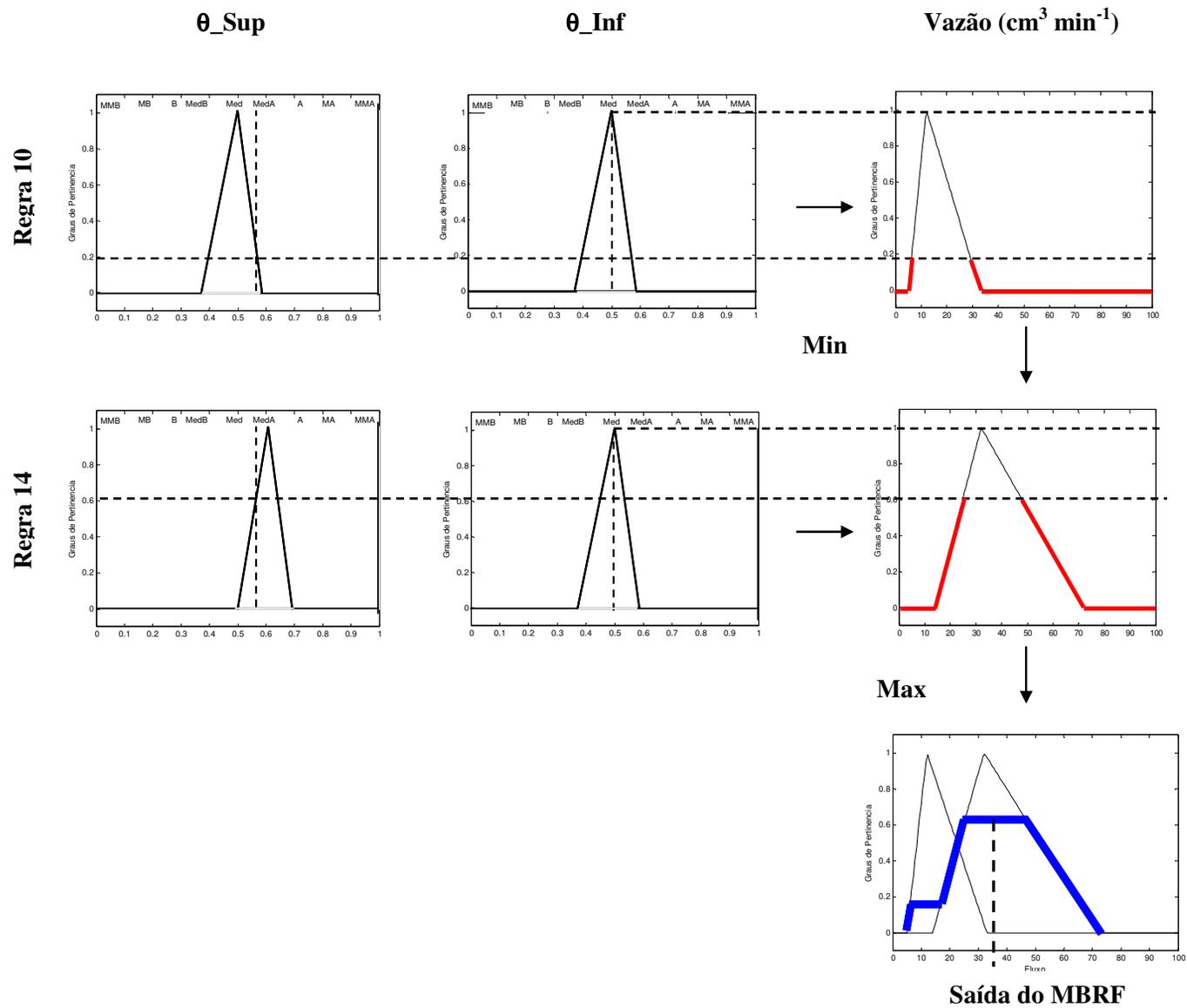
Figura 1: *Fuzzificação* das variáveis de entrada

Analisando-se a Figura 1A, verifica-se que o valor da variável de entrada $\theta_{sup} = 0,57$, esta associado, com diferentes graus de pertinência à 2 conjuntos *fuzzy* (Med e MedA). Por sua vez, a variável de entrada $\theta_{inf} = 0,49$ esta associada a um único conjunto *fuzzy* (Med). Sendo assim os valores das variáveis de entrada θ_{sup} e θ_{inf} hipoteticamente escolhidos nesse exemplo acionam as regras 10 e 14, destacadas no Quadro 1.

Quadro 1: Base de regras utilizadas no MBRF

Número da Regra	Base de Regras	Saída <i>Fuzzy</i> Vazão (cm ³ min ⁻¹)
1	Se θ_{Sup} é MB e θ_{Inf} é MB então Fluxo é	(0; 0,049; 0,722) _T
2	Se θ_{Sup} é B e θ_{Inf} é MB então Fluxo é	(0; 3,1; 13,74) _T
3	Se θ_{Sup} é B e θ_{Inf} é B então Fluxo é	(0,48; 1,81; 5,8) _T
4	Se θ_{Sup} é MedB e θ_{Inf} é MB então Fluxo é	(5,1; 12,01; 33,16) _T
5	Se θ_{Sup} é MedB e θ_{Inf} é B então Fluxo é	(0,96; 5,23; 20,84) _T
6	Se θ_{Sup} é MedB e θ_{Inf} é MedB então Fluxo é	(0,96; 5,23; 20,84) _T
7	Se θ_{Sup} é Med e θ_{Inf} é MB então Fluxo é	(36,65; 48,74; 88,39) _T
8	Se θ_{Sup} é Med e θ_{Inf} é B então Fluxo é	(14,82; 32,7; 72,16) _T
9	Se θ_{Sup} é Med e θ_{Inf} é MedB então Fluxo é	(5,1; 12,01; 33,16) _T
10	Se θ_{Sup} é Med e θ_{Inf} é Med então Fluxo é	(5,1; 12,01; 33,16) _T
11	Se θ_{Sup} é MedA e θ_{Inf} é MB então Fluxo é	(73,03; 92,52; 130,4) _T
12	Se θ_{Sup} é MedA e θ_{Inf} é B então Fluxo é	(47,53; 84,23; 128,3) _T
13	Se θ_{Sup} é MedA e θ_{Inf} é MedB então Fluxo é	(20,99; 51,04; 128,3) _T
14	Se θ_{Sup} é MedA e θ_{Inf} é Med então Fluxo é	(14,82; 32,7; 72,16) _T
15	Se θ_{Sup} é MedA e θ_{Inf} é MedA então Fluxo é	(14,82; 32,7; 72,16) _T

Na Figura 2 são apresentadas as representações gráficas das Regras 10 e 14, nesta figura se pode observar também a utilização do método Mandani que, inicialmente, para cada uma das regras acionadas, combina os graus de pertinência associados aos valores de entrada por meio do operador Mínimo (Min). O valor de pertinência $\mu_i(x,y)$, encontrado em cada regra é projetado às respectivas variáveis de resposta. Após esta alteração na função de pertinência de cada uma das variáveis resposta (figuras destacadas em vermelho), obtém-se, através da união dos conjuntos *fuzzy* que representam as mesmas, um único conjunto *fuzzy* como resposta, denominado topologia *fuzzy* (figura destacada em azul). Uma vez criado a topologia *fuzzy* toma-se o valor que corresponde ao centro de gravidade da mesma como a vazão da água entre os dois pontos adjacentes. A vazão da água entre os dois pontos é utilizada para se determinar a umidade dos mesmos no próximo intervalo de tempo. Por sua vez, estas novas umidades calculadas, acionam um novo conjunto de regras e este processo é repetido até que se atinja o tempo total de simulação



ANEXO 2

Anexo 2: Gráficos utilizados para definir o numero e o suporte dos argumentos utilizados como variáveis de entrada do MBRF proposto.

