

UM MODELO MATEMÁTICO PARA SIMULAR A PROPAGAÇÃO DE DIFERENTES PESTICIDAS NO SOLO

JOAO GABRIEL PIRAINÉ BANDEIRA¹; DANIELA BUSKE²; RÉGIS SPEROTTO
DE QUADROS³

¹Universidade Federal de Pelotas – joaogabrielpbandeira@gmail.com

²Universidade Federal de Pelotas – danibuske@gmail.com

³Universidade Federal de Pelotas – quadros99@gmail.com

1. INTRODUÇÃO

Os pesticidas, uma categoria de substâncias que inclui inseticidas, fungicidas, herbicidas, rodenticidas, moluscicidas e nematocidas (TUDI *et al.*, 2021) desempenham um papel significativo no desenvolvimento agrícola, com destaque para os três primeiros, que são os mais vendidos globalmente (JACQUET *et al.*, 2022). Eles são amplamente reconhecidos por sua capacidade de reduzir perdas agrícolas, melhorando, assim, a produtividade e a qualidade dos alimentos na mesma área cultivada de maneira economicamente viável (CENTANNI *et al.*, 2023; CUNHA, 2008; JACQUET *et al.*, 2022; TUDI *et al.*, 2021).

Anualmente, três bilhões de quilos de pesticidas são utilizados globalmente, com apenas 1% atingindo efetivamente as pragas-alvo nas plantas desejadas (TUDI *et al.*, 2021). A grande quantidade de pesticidas não utilizada acaba se infiltrando em plantas não-alvo e em diversos meios ambientais, o que resulta em poluição ambiental e efeitos adversos à saúde humana (CENTANNI *et al.*, 2023; CUNHA, 2008; JACQUET *et al.*, 2022; TUDI *et al.*, 2021).

Modelos de simulação auxiliam na escolha de pesticidas adequados para condições específicas de solo, cultivo e clima, otimizando as taxas e o momento de aplicação para proteger as lavouras, além de identificar pesticidas com alto potencial de contaminação em compartimentos ambientais específicos (WAGENET; RAO, 1990).

O objetivo deste trabalho é desenvolver um modelo de simulação para prever a dinâmica e o destino dos pesticidas no ambiente. Serão analisados também os efeitos de diferentes pesticidas, levando em conta seus coeficientes de sorção ao carbono orgânico do solo, que influenciam sua mobilidade e retenção. A pesquisa visa compreender a interação entre esses fatores e como eles afetam a dispersão e a eficácia dos pesticidas, contribuindo para uma gestão mais eficiente e sustentável do uso desses químicos na agricultura.

2. METODOLOGIA

O modelo corresponde a um experimento em que uma mistura de solo e pesticida é preparada com uma concentração conhecida de pesticida. Uma camada dessa mistura é posicionada no topo de uma coluna de solo já saturada com água. Em seguida, água é introduzida a uma taxa constante no topo da coluna de solo, o que provoca o transporte do pesticida da camada superior. Será realizada uma investigação em um modelo de advecção-difusão com evolução de degradação, baseado em Pulino (2008), descrito por

$$R_f \frac{\partial C(x, t)}{\partial t} - D \frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2} + V \frac{\partial C(x, t)}{\partial x} + R_f k C(x, t) = 0. \quad (1)$$

O modelo será discretizado utilizando o esquema de Crank-Nicolson, definindo C_i^j como a aproximação de $C(x, t)$ em x_i, t_j . Assim, a equação (1) é discretizada da seguinte forma:

$$R_f \frac{C_i^{j+1} - C_i^j}{\Delta t} - \frac{D}{2} \left(\frac{C_{i+1}^{j+1} - 2C_i^{j+1} + C_{i-1}^{j+1}}{h^2} + \frac{C_{i+1}^j - 2C_i^j + C_{i-1}^j}{h^2} \right) + \frac{V}{2} \left(\frac{C_{i+1}^{j+1} - C_{i-1}^{j+1}}{2h} + \frac{C_{i+1}^j - C_{i-1}^j}{2h} \right) + \frac{R_f k}{2} (C_i^{j+1} + C_i^j) = 0. \quad (2)$$

Em seguida, ao definir os coeficientes como

$$\alpha = -D - \frac{Vh}{2}; \lambda = \frac{2R_f h^2}{\Delta t} + 2D + R_f k h^2; \beta = -D + \frac{Vh}{2}; \mu = -\frac{2R_f h^2}{\Delta t} + 2D + R_f k h^2,$$

a expressão, para $i = 1, 2, 3, \dots, n$ e $j = 0, 1, 2, \dots$, torna-se

$$\alpha C_{i-1}^{j+1} + \lambda C_i^{j+1} + \beta C_{i+1}^{j+1} = -\alpha C_{i-1}^j - \mu C_i^j - \beta C_{i+1}^j,$$

a equação (2), para $i = 1$, é

$$\left(\lambda + \frac{4D\alpha}{2Vh + 3D} \right) C_1^{j+1} + \left(\beta - \frac{D\alpha}{2Vh + 3D} \right) C_2^{j+1} = -\alpha C_0^j - \mu C_1^j - \beta C_2^j \quad (3)$$

e, por fim, a equação (2), para $i = n$, torna-se:

$$\left(\alpha - \frac{\beta}{3} \right) C_{n-1}^{j+1} + \left(\lambda + \frac{4\beta}{3} \right) C_n^{j+1} = -\alpha C_{n-1}^j - \mu C_n^j - \beta C_{n+1}^j. \quad (4)$$

As soluções numéricas serão obtidas ao resolver o sistema de equações (2), (3) e (4). Um algoritmo foi desenvolvido em Python para realizar a simulação. Os parâmetros utilizados na simulação estão apresentados na tabela 1 com base nos valores descritos por Pulino (2008). Analisou-se o comportamento de diferentes pesticidas no solo, variando seus coeficientes de sorção ao carbono orgânico, K_{oc} , conforme os valores apresentados na tabela 2 (WAUCHOPE *et al.*, 2002; LEWIS *et al.*, 2016).

Tabela 1: Parâmetros da simulação numérica.

$L(m)$	$T_f(d)$	$C_0(kg\ m^{-3})$	f_{oc}	θ	R_f	h
0,3	16	0,8	0,01	0,4	3,1	0,3/512
$D(m^2 d^{-1})$	$V(m\ d^{-1})$	$k(d^{-1})$	$K_{oc}(m^3 kg^{-1})$	$\rho(kg\ m^{-3})$	$\varepsilon(m)$	Δt
10^{-4}	0,04	0,01	0,06	1400	0,05	16/128

Tabela 2: Valores de K_{oc} de diferentes pesticidas.

	$K_{oc}(m^3 kg^{-1})$
Atrazina	0,172
2,4-D	0,032
Diuron	0,351
Glifosato	1,424

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Na figura 1a, é apresentado o gráfico de $C(x, t)$ para uma variação temporal utilizando $t = 0, 3, 6, 9, 12$ e 15 dias. Adicionalmente, a figura 1b mostra o gráfico de $C(x, t)$ para $x = 0,1$ m. Com o tempo, a concentração do pesticida diminui devido à degradação, enquanto a difusão amplia sua dispersão no solo. Esse alargamento da curva reflete a distribuição do composto, influenciada também pelo fluxo de água e características do solo, afetando a propagação e a redução da concentração máxima em diferentes profundidades.

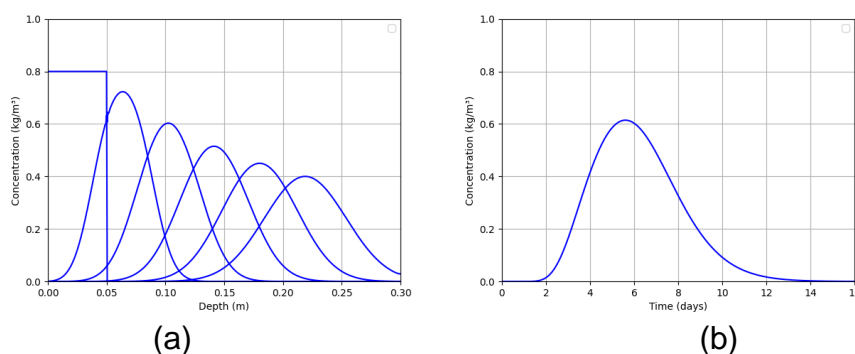


Figura 1: Solução numérica de $C(x, t)$ para (a) $t = 0, 3, 6, 9, 12$ e 15 dias e para (b) $x = 0,1$ m.

A comparação entre os diferentes pesticidas com valores distintos de K_{oc} revela variações significativas no comportamento de mobilidade no solo. Pesticidas com menores valores de K_{oc} , como o 2,4-D, apresentam maior mobilidade, sendo transportados mais profundamente devido à menor afinidade com o carbono orgânico. Para $t = 5$ dias (figura 2a), observa-se que o 2,4-D já se deslocou consideravelmente em profundidade, enquanto o glifosato, com o maior K_{oc} , permanece mais retido nas camadas superficiais. Esse padrão se mantém e se acentua ao longo do tempo, como visto em $t = 15$ dias (figura 2b).

Além disso, a dispersão lateral também é influenciada pelo K_{oc} . Pesticidas com maior coeficiente de sorção, como o glifosato e o diuron, mostram menor dispersão lateral e profundidade, contrastando com o 2,4-D e a atrazina, que se espalham mais rapidamente pelo solo. Esse comportamento é essencial para decisões agrícolas, pois compostos com menor K_{oc} têm maior potencial de contaminação em camadas profundas e lençóis freáticos.

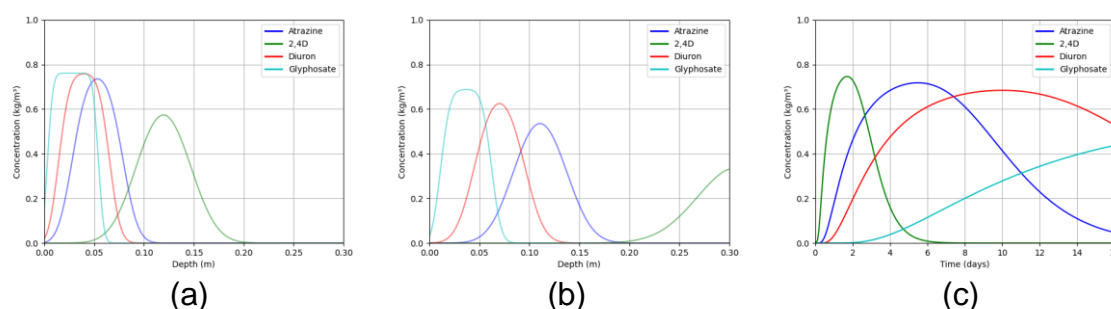


Figura 2: Comportamento dos diferentes pesticidas para (a) $t = 5$ dias, para (b) $t = 15$ dias e para (c) $x = 0,06$ m.

4. CONCLUSÕES

O modelo de simulação apresentado neste estudo oferece uma ferramenta valiosa para compreender a dinâmica do movimento de pesticidas no solo e seu potencial impacto no meio ambiente. O modelo consegue prever a propagação de pesticidas ao longo do tempo e do espaço, fornecendo informações importantes para a tomada de decisões na agricultura e na gestão ambiental. Ao otimizar as taxas de aplicação, o momento e a seleção dos pesticidas com base nas condições do solo e do clima, é possível mitigar a poluição ambiental e garantir a segurança alimentar.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- CENTANNI, M.; RICCI, G. F.; DE GIROLAMO, A. M.; ROMANO, G.; GENTILE, F. A review of modeling pesticides in freshwaters: Current status, progress achieved and desirable improvements. **Environmental Pollution**, v. 316, p. 120553, 2023.
- CUNHA, J. P. Simulação da deriva de agrotóxicos em diferentes condições de pulverização. **Ciência e Agrotecnologia - CIENC AGROTEC**, v. 32, 2008.
- JACQUET, F.; JEUFFROY, M.; JOUAN, J.; LE CADRE, E.; LITRICO, I.; MALAUSA, T.; REBOUD, X.; HUYGHE, C. Pesticide-free agriculture as a new paradigm for research. **Agronomy for Sustainable Development**, v. 42, n. 1, p. 8, 2022.
- PULINO, P. **Métodos de Diferenças Finitas: Aspectos Teóricos, Computacionais e Aplicações**. 2008, p. 299–317.
- TUDI, M.; RUAN, H. D.; WANG, L.; LYU, J.; SADLER, R.; CONNELL, D.; CHU, C.; PHUNG, D. T. Agriculture Development, Pesticide Application and Its Impact on the Environment. **International Journal of Environmental Research and Public Health**, v. 18, n. 3, 2021.
- WAGENET, R. J.; RAO, P. S. C. Modeling Pesticide Fate in Soils. In: **Pesticides in the Soil Environment: Processes, Impacts and Modeling**. John Wiley & Sons, Ltd, 1990. Cap. 10, p. 351–399.
- WAUCHOPE, R. D.; YEH, S.; LINDERS, J. B.; KLOSKOWSKI, R.; TANAKA, K.; RUBIN, B.; KATAYAMA, A.; KÖRDEL, W.; GERSTL, Z.; LANE, M.; UNSWORTH, J. B. Pesticide soil sorption parameters: theory, measurement, uses, limitations and reliability. **Pest Management Science**, v. 58, n. 5, p. 419–445, 2002.