



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DA AMAZÔNIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM AGRONOMIA

DECÍOLA FERNANDES DE SOUSA

ANÁLISE DO PROGRAMA R PARA CÁLCULOS EM FÍSICA DO SOLO

Belém
2020

DECÍOLA FERNANDES DE SOUSA

ANÁLISE DO PROGRAMA R PARA CÁLCULOS EM FÍSICA DO SOLO

Tese apresentado à Universidade Federal Rural da
Amazônia, como parte das exigências do
Programa de Pós-graduação em Agronomia, para
obtenção do título de Doutor.

Orientadora: Profa Dra. Herdjania Veras Lima

Belém
2020

DECÍOLA FERNANDES DE SOUSA

ANÁLISE DO PROGRAMA R PARA CÁLCULOS EM FÍSICA DO SOLO

Tese apresentada à Universidade Federal Rural da Amazônia, como parte das exigências do Curso de Doutorado em Agronomia: área de concentração Manejo e Conservação de Recursos Ambientais para obtenção do título de Doutora.

Orientadora: Profa. Dra. Herdjanía Veras Lima

BANCA EXAMINADORA

Dr^a Herdjanía Veras Lima
Universidade Federal Rural da Amazônia - UFRA

Dr Edson Marcos Leal Soares Ramos
Universidade Federal do Pará - UFPA

Dr^a Sueli Rodrigues
Universidade Federal do Piauí - UFPI

Dr^a Lorena Chagas Torres
Universidade de São Paulo - USP

Dr Gledson Luiz Salgado de Castro
Universidade Federal Rural da Amazônia - UFRA

AGRADECIMENTO

À Deus pela saúde do corpo, proteção e ampara em todos os momentos da minha vida;

Aos meus pais José Fernandes da Silva Júnior e Sebastiana Nunes Fernandes que estão sempre ao meu lado;

Ao meu esposo João Guilherme Mota de Sousa e a minha filha Ivana Fernandes de Sousa pela compreensão e companheirismo durante o doutorado;

Aos meus irmãos José Fernandes da Silva Neto, José Airton Nunes Fernandes, José Augusto Nunes Fernandes, José Luiz Nunes Fernandes, Edna Tereza Fernandes de Souza e José Wilson Nunes Fernandes pelo apoio e incentivo aos estudos;

À professora Herdjania Veras Lima pela mente aberta e futurista, por ter acreditado em mim e pela sala que disponibilizou em solos e toda contribuição para conseguir o título;

Em especial à Sueli Rodrigues que é além de professora é uma amiga, companhia de almoço e desabafos, sem a qual finalizar o trabalho seria mais difícil;

À Lorena Chagas Torres por toda ajuda principalmente na etapa final, almoço, café e esclarecimentos na área da agronomia;

Ao Grupo de física do solo que me recebeu com carinho e amizade durante o período de doutorado, assim como todos os colegas do Programa de Pós-graduação em Agronomia, principalmente os da sala de estudo;

À secretaria da Pós-graduação por todas as orientações e cafezinhos;

À direção do ICIBE, professor Pedro Silvestre da Silva Campos e Rosemiro dos Santos Galate pelo incentivo e apoio;

Todos os docentes da Universidade Federal Rural da Amazônia pelo companheirismo;

Aos técnicos e terceirizados da Universidade Federal Rural da Amazônia;

A todos que contribuíram de algum modo para a realização deste trabalho;

Obrigada

*Senhor, dai-me força para mudar o que pode ser
mudado...*

*Resignação para aceitar o que não pode ser
mudado...*

E sabedoria para distinguir uma coisa da outra.

São Francisco de Assis

RESUMO GERAL

Determinar a qualidade física do solo é importante para o estudo da degradação do solo e práticas de manejo. Essa propriedade requer análises profundas, principalmente as que envolvem o transporte de água no solo, com o uso de modelos, por vezes de difícil entendimento, e aplicação que exige solução de equações diferenciais e uso de variáveis complexas. Assim, utilizar ferramenta computacional para determinar a qualidade física do solo tornará o cálculo mais eficaz, além de subsidiar a análises dos dados. Com a finalidade de propor o uso de ferramenta de baixo custo, este estudo apresenta uma análise e exemplos, no programa R para cálculos em física do solo. Para tal objetivo se apresenta uma descrição de pacotes do programa R para a física do solo *sharpshootR*, *soilDB*, *SWATmodel*, *febr*, *soilprofile*, *HydroMe*, *soilphysics*, *soilwater*, *soiltexture* e *soilHyp*, analisando a facilidade de reprodução deles, exemplificando, quando possível, utilizando os dados fornecidos pelos próprios autores e disponível nos respectivos manuais, teste de funções que estão disponíveis no pacote *soilphysics* e nova funções que serão implementadas, com dados diferentes para calcular a Curva de Retenção de Água no Solo (CRAS) e a produção de uma cartilha explicando como reproduzir os cálculos para física do solo utilizando o programa R. Os pacotes *HydroMe* e *soilphysics* são os mais intuitivos e as determinações são facilmente reproduzíveis a partir dos exemplos fornecidos pelos autores dos respectivos pacotes, sendo que o *soilphysics* é o mais completo para física do solo, até o momento, permitindo que o usuário conduza diversos ajustes utilizando um único pacote, o *soiltexture* tem facilidade de entrada dos dados e a classe textural do solo em vários sistemas de classificação, a reprodução a partir dos exemplos fornecidos nos manuais não foi satisfatória para os pacotes *soilwater* e *SoilHyP*. O R é um programa de acesso livre e aberto e a disponibilidade desta ferramenta oferece a oportunidade de cálculos simples e complexos para a física do solo que são de fundamental importância para avaliação da qualidade física e estrutural dos solos. Todos os códigos do programa R e dados utilizados estão disponíveis para ser reproduzido no *GitHub* <https://github.com/sousaetal>.

Palavras-chave: física do solo, programa R, modelos, curva de retenção de água no solo.

LISTA DE FIGURAS

2. R SOFTWARE PACKAGES AS A TOOL FOR EVALUATING SOIL PHYSICAL AND HYDRAULIC PROPERTIES

- Figure 1. R packages for soil physics available in R PROJECT (<https://www.r-project.org/>).....25
- Figure 2. Soil textural classification using two texture classification systems from the *soiltexture* package available in <https://cran.r-project.org/>.....28
- Figure 3. Subset of the *isric* database for estimation of soil hydraulic parameters. Available in the *HydroMe* package (available at <https://cran.r-project.org/>).....32
- Figure 4. Subset of the *isric* database for estimation of soil water infiltration parameters. Available in the *HydroMe* package (available at <https://cran.r-project.org/>).....33
- Figure 5. Interactive fit available for some functions of the *soilphysics* package for the estimation of the initial fit parameters of the soil water retention curve. To the right images representing: data with no fit, with initial parameters (red line) and after fitting (blue line), and the fit parameters with the respective statistics.....35
- Figure 6. Example of databases available in the *SoilHyP* package for experimental data of evaporation (A), presented by the *dataSEM* function and hydraulic properties (B), obtained by the *dataSHP* function.....38

3. USO DO PACOTE *SOILPHYSICS* DO PROGRAMA R PARA EXPLORAR A CURVA DE RETENÇÃO DE ÁGUA NO SOLO

- Figura 1. Painel interativo (Interactive fit) para a definição dos parâmetros iniciais da função (a) e output gráfico da função *fitsoilwater()* a partir dos dados da Tabela 2, onde a linha vermelha representa a função descrita a partir dos parâmetros iniciais (b) e a linha azul representa a função ajustada (c).....56
- Figura 2. Output da função *psd()*: representação gráfica da distribuição do diâmetro de poros unimodal a partir do modelo de van Genuchten (1980) em função da sucção matricial com a representação do raio do poro equivalente (μm).58
- Figura 3. Curva da condutividade hidráulica do solo não saturado em função da tensão da água no modelo de van Genuchten (1980).....60

Figura 4. Parte da execução do programa RETC com o resultado do cálculo dos parâmetros da curva de retenção de água encontrados para o modelo de van Genuchten (1980).....61

4. CARTILHA DO PROGRAMA R PARA FÍSICA DO SOLO

Figura 1. Página do R PROJECT onde se encontra os pacotes, tutoriais e arquivos de instalação.....69

Figura 2. Opções na CRAN (*Comprehensive R Archive Network*) para o Brasil.....70

Figura 3. R pronto para ser usado.....70

Figura 4. Outra opção para usar o R.....71

Figura 5. Espelho, local para fazer o *download* do programa.....72

Figura 6. Triângulo textural no modelo exemplo utilizado pelo Sistema Brasileiro de Classificação de Solos. (Moeys, 2018).....74

Figura 7. Classificação textural do solo usando dois sistemas de classificação.....75

Figura 8. Valores de argila, silte e areia no arquivo de nome Textura do Excel no formato CSV, retirados do banco de dados HYBRAS 1.0 (versão 1) disponível em <http://www.cprm.gov.br/publique/Hidrologia/Pesquisa-e-Inovacao/HYBRAS-4930.html>.77

Figura 9. Classificação textural para 30 solos.....80

Figura 10. Dados salvo em arquivo planilha no formato CSV.....79

Figura 11. Classificação textural dos solos da figura 10. Na figura está somente a classificação e a figura b apresenta, além da classificação o percentual de carbono orgânico.....79

Figura 12. Planilha que será usada no exemplo para calcular a CRA nos modelos van Genuchten (*HydroMe*) e Dexter (*Soilphysics*). Banco de dados HYBRAS 1.0 (versão 1) disponível em <http://www.cprm.gov.br/publique/Hidrologia/Pesquisa-e-Inovacao/HYBRAS-4930.html>.....81

Figura 13. Resultado no *prompt* do R após executar a função *SSvgm* do pacote *HydroMe* para encontrar os parâmetros de ajuste da curva de retenção de água no solo no modelo de van Genuchten.....81

Figura 14. Resultado da execução do script para encontrar a CRA, no modelo Dexter (2008) pela função *fitsoilwater3*. Na Figura 14 (A) tem-se o Painel interativo (Interactive fit) disponível em algumas funções do pacote *soilphysics* para a definição dos parâmetros iniciais do ajuste da curva de retenção de água no solo. Na Figura 14(B) há os gráficos representando:

os dados sem ajuste, com parâmetros iniciais (só com os pontos) e após o ajuste (pontos com a linha azul), e os parâmetros de ajuste com as respectivas estatísticas estão na Figura 14 (C).....	83
Figura 15. Resultado da execução do <i>script Sindex</i> para encontrar o índice S no pacote <i>soilphysics</i> . O resultado está na Figura 15(A) e na 15(B) o gráfico com a inclinação da curva no seu ponto de inflexão.....	84
Figura 16. Banco de dados <i>retirados de Leao et al. (2005)</i> com o potencial, umidade, resistência a penetração e densidade da partícula para o cálculo do IHO.....	85
Figura 17. Resultado dos gráficos da variação do conteúdo de água com a densidade da partícula para o intervalo hídrico ótimo gerado pela função <i>llwr</i> do pacote <i>soilphysics</i>	86
Figura 18. Resultado para o Intervalo Hídrico Ótimo após executar o script <i>>IHO na função llwr</i> do pacote <i>soilphysics</i>	88
Figura 19. Subconjunto do Banco de Dados para estimativa de características de infiltração da água no solo, disponíveis no pacote <i>HydroMe</i> (disponível em https://cran.r-project.org/).....	88
Figura 20. Resultado após execução da função <i>SSgampt</i> para o Banco de Dados disponível no pacote <i>HydroMe</i> (disponível em https://cran.r-project.org/).....	89
Figura 21. Subconjunto do Banco de Dados para estimar os parâmetros de retenção de água e/ou a condutividade hidráulica não saturada (Ku), disponíveis no pacote <i>HydroMe</i> (disponível em https://cran.r-project.org/).....	90
Figura 22. Resultado para a execução da função <i>fitSH</i> para o Banco de Dados disponível no pacote <i>SoilHyP</i> (disponível em https://cran.r-project.org/).....	90
Figura 23. Resultado para a execução da função <i>fitSH</i> , após acrescentar na linha de comando (<i>>ans\$par</i>), para o Banco de Dados disponível no pacote <i>SoilHyP</i> (disponível em https://cran.r-project.org/).....	91
Figura 24. Subconjunto do Banco de Dados para estimar os parâmetros de ajuste da curva de resistência à penetração do solo disponíveis no pacote <i>soilphysics</i> (disponível em https://cran.r-project.org/).....	92

Figura 25. Parâmetros de ajuste da curva de resistência à penetração do solo obtidos pela função <i>fitbusscher</i> do pacote soilphysics.....	93
Figura 26. Resultado da execução do script função <i>criticalmoisture</i> do pacote soilphysics para obter a umidade ótima de compactação e densidade crítica pelo teste de Proctor.....	93
Figura 27. Curva de compactação do solo gerada pela função <i>criticalmoisture</i> do pacote soilphysics em função da umidade e a densidade.....	94

LISTA DE TABELAS

2. R SOFTWARE PACKAGES AS A TOOL FOR EVALUATING SOIL PHYSICAL AND HYDRAULIC PROPERTIES

Table 1. Overview of currently available packages from R program for evaluating soil physics data. For all other packages visit the CRAN website (<https://cran.r-project.org/>).....25

Table 2. Functions of the *HydroMe* package (available in <https://cran.r-project.org/>) to adjust soil water retention and infiltration parameters.29

3. USO DO PACOTE *SOILPHYSICS* DO PROGRAMA R PARA EXPLORAR A CURVA DE RETENÇÃO DE ÁGUA NO SOLO

Tabela 1. Funções do pacote *soilphysics* para o estudo do comportamento da água no solo e suas respectivas definições.51

Tabela 2. Dados de conteúdo de água no solo (w) e seu respectivo valor de sucção matricial (h).....56

Tabela 3. Resultado da execução do cálculo dos parâmetros da curva de retenção de água no solo obtidos pelos programas *soilphysics* e *RETC* no modelo de van Genuchten (1980).....61

4. CARTILHA DO PROGRAMA R PARA FÍSICA DO SOLO

Tabela 1 abreviatura e nome no *soiltexture*.....76

Tabela 2. Funções do pacote *HydroMe* (disponível em <https://cran.r-project.org/>) para a obtenção de parâmetros de retenção de água no solo.....80

Tabela 3. Funções do pacote *soilphysics* (disponível em <https://cran.r-project.org/>) para a obtenção de parâmetros de retenção de água no solo.....82

Tabela 4. Funções do pacote *HydroMe* (disponível em <https://cran.r-project.org/>) para a obtenção da infiltração de água no solo.....87

Lista de Abreviações

ABNT: Associação Brasileira de Normas Técnicas

CRA: Curvas de Retenção de Água

CRAN: Comprehensive R Archive Network

CSV: Valores Separados por Vírgula

IDE: Integrated Development Environment

IHO: Intervalo Hídrico Ótimo

IWC: Integral Water Capacity

Ks: condutividade hidráulica

Ks: hydraulic conductivity

LLWR: Least Limiting Water Range

Nls: Non Linear System

SAS: Statistical Analysis Software

SWRC: Water Retention Curve

SUMÁRIO

1. Contextualização	15
Referências	17
2. R SOFTWARE PACKAGES AS A TOOL FOR EVALUATING SOIL PHYSICAL AND HYDRAULIC PROPERTIES	19
RESUMO	19
ABSTRACT	20
2.1 Introduction	20
2.2 R software.....	23
2.3 R packages for soil physics	24
2.4 Examples of the use of R package for soil physics	25
2.4.1 soiltexture package	26
2.4.2 <i>soilwater</i> package	28
2.4.3 <i>HydroMe</i> package.....	29
2. 4.4 <i>soilphysics</i> packages.....	33
2.4.5 <i>SoilHyP</i> Package.....	36
2.5 Discussion.....	38
2.6 Final Considerations	41
References	42
3. USO DO PACOTE <i>SOILPHYSICS</i> DO PROGRAMA R PARA EXPLORAR A CURVA DE RETENÇÃO DE ÁGUA NO SOLO	48
3.1 Introdução.....	48
3.2. Pacote <i>soilphysics</i>	50
3.3. Equações.....	51
3.3.1. Equações para ajuste da curva de retenção de água no solo.....	51
3.3.1.1 Modelo van Genuchten (1980)	51
3.3.1.2 Modelo Dexter et al. (2008)	52
3.3.1.3 Modelo Groenevelt and Grant (2004)	52
3.3.2 Ponto de corte hidráulico.....	53

3.3.3. Distribuição do diâmetro dos poros.....	54
3.3.4 Índice S.....	54
3.3.5 Condutividade hidráulica.....	55
3.4. Exemplos	55
3.4.1 Ajuste da curva de retenção e água no solo.....	55
3.4.2 Distribuição do diâmetro dos poros.....	58
3.4.3 Índice S.....	59
3.4.4 Condutividade hidráulica.....	60
3.5. Resultados e comparações	61
3.6. Considerações finais	62
4. CARTILHA DO PROGRAMA R PARA FÍSICA DO SOLO	67
4.1. O R e suas características.	67
4.1.2 Começar a usar o R.....	68
4.1.3. Opções do R e o RStudio.....	69
4.1.4 Instalação e uso dos pacotes	70
4.1.5. Entrada de dados.....	71
4.2 Propriedades físico-hídrica do solo	72
4.2.1 Textura.....	72
4.2.2 Curva de Retenção de Água	79
4.3 Índice S.....	83
4.4. Intervalo Hídrico Ótimo	84
4.5. Infiltração.....	86
4.6. Condutividade Hidráulica.....	88
4.7 Parâmetros da Curva de Resistência a Penetração	91
4.8 Compactação	92
Referências	93
5. Considerações Finais e Perspectivas Futuras	95

1. Contextualização

O solo pode ser definido como a camada externa degradada e fragmentada da subsuperfície terrestre. Este é formado inicialmente pela desintegração, decomposição, e recomposição de material mineral contido em rochas expostas à processos físicos, químicos e biológicos (HILLEL, 2004). O solo pode ser considerado como um sistema natural, vivo e dinâmico, que regula a produção de alimentos e fibras, além de servir como meio para o crescimento vegetal, por meio do suporte físico, disponibilidade de água, nutrientes e oxigênio para as raízes das plantas (DORAN et al., 1996).

O uso e manejo do solo, sem a prévia avaliação dos seus potenciais e limitações, tem sido o motivo da degradação deste recurso natural fundamental para a sobrevivência do homem. Assim, o monitoramento da qualidade do solo, a partir de propriedades químicas, físicas e biológicas, é considerado um ponto chave para a sustentabilidade ambiental e tem sido objeto de estudo de diversas pesquisas no mundo (ARSHAD; MARTIN, 2002).

Neste projeto será dada atenção especial às propriedades físicas do solo, que assumem importância por estabelecerem relações fundamentais com processos hidrológicos, tais como, infiltração, escoamento superficial, drenagem e erosão. Além de influenciar o armazenamento de água, nutrientes e oxigênio no solo (BRADY; WEIL, 2013).

A física do solo é percebida por muitos como um assunto difícil. A maioria dos agrônomos e cientistas do solo, bem como alunos da graduação e pós-graduação, iguala a "física do solo" à "matemática avançada". Essa situação surge porque a matemática é uma ferramenta necessária para discutir relações entre as variáveis que descrevem um estado ou processo físico específico. Problemas envolvendo o transporte de água, por exemplo, podem requerer a solução de equação diferencial parcial, ou, no caso de drenagem, o uso de variáveis complexas.

Estes cálculos podem ser quantificados de modo seguro a partir do uso de programas. O desenvolvimento de programa para computador torna-se mais sofisticado com o passar dos anos. De maneira que permite resolver problemas matemáticos que vão desde simples operações algébricas até complexas envolvendo, por exemplo, integração, diferenciação e modelos não lineares para o ajuste da curva de retenção de água no solo, como o proposto por van Genuchten (1980), a qual representa a relação entre o conteúdo de água e o potencial matricial correspondente no solo e é uma ferramenta chave para o estudo de vários processos relacionados com a disponibilidade de água às plantas,

evapotranspiração e modelagem de fluxos de água e ar em solos parcialmente saturado (JENSEN et al., 2015).

Os programas disponíveis podem ser do tipo comercial ou de livre acesso. Existem também os programas de código aberto, ou seja, um programa que os usuários têm a capacidade de executar, copiar, distribuir, estudar, alterar, compartilhar e melhorar para qualquer finalidade (RANDHAWA, 2008). Atualmente se tem disponível vários programas para cálculos em física do Solo, do tipo comercial, como o *Statistical Analysis Software* (SAS) e o *Microsoft Excel*, os free Water Retention Curve-SWRC Fit (SEKI, 2007), SWRC (DOURADO-NETO, 2000), RETC (VAN GENUCHTEN et al, 1992) , e livre como o R (PENG, 2015), porém poucas pesquisas apresentam o funcionamento e a comparação entre esses programas.

O programa R está disponível com o código aberto, especializado em ambiente integrado de programação, onde é possível criar, testar, depurar e executar funções e pacotes, permitindo ao usuário resolver vários tipos de problemas matemáticos.

Diante do exposto, compreende-se que os programas são ferramentas importantes para auxiliar os cálculos matemáticos em Física do Solo, devido a segurança e agilidade nos resultados. Assim, objetiva-se com este trabalho: I) apresentar uma revisão dos pacotes e funções do programa R disponíveis para o estudo da Física do solo; II) investigar a confiabilidade das funções do pacote *soilphysics*, do programa R, para física do solo e III) disponibilizar uma cartilha com exemplo de códigos do programa R para física do solo.

O trabalho está organizado como segue: o primeiro capítulo é este que apresenta a contextualização; no segundo capítulo o artigo “*R software packages as a tool for evaluating soil physical and hydraulic properties*”, publicado em janeiro de 2020 no *Journal Internacional Computers and Electronics in Agriculture*, o terceiro capítulo a proposta do artigo “Uso do pacote *soilphysics* do programa R para explorar a curva de retenção de água no solo”; o quarto capítulo apresenta um produto resultado do estudo, uma cartilha do R para física do Solo, por fim as considerações finais e as perspectivas futuras estão no quinto capítulo.

Referências

- ARSHAD, M. A.; MARTIN, S. Identifying critical limits for soil quality indicators in agroecosystems. *Agriculture, Ecosystems and environment*. v.88, n.2, p.153–160, 2002.
- BRAY, N.C.; WEIL, R.R. *Elementos da Natureza e propriedades dos solos*. 3ª ed. Porto Alegre: Bookman, 704p, 2013.
- CASSEL, D.K., ELRICK, D.E. Using the programa package “MathCAD” as a tool to teach soil physics. *Journal of Natural Resources and Life Sciences Education*. Vol 21, nº1, 74-78, 1992.
- DORAN, J. W.; PARKIN, T. B. Quantitative indicators of soil quality: a minimum data set. In: DORAN, J.W.; JONES, A. J. (Org.) *Methods for assessing soil quality*. Madison: SSSA, p.25-37, 1996.
- DOURADO-NETO, D.; NIELSEN, D. R. ; HOPMANS, J. W.; REICHARDT, K.; BACCHI, O.O.S. Software to model soil water retention curve (SWRC, version 2.00). *Sci. agric.* vol.57 n.1 Piracicaba. //dx.doi.org/10.1590/S010390162000000100031., 2000.
- HILLEL, D. *Introduction to Environmental Soil Physics*. Elsevier Science (USA), 2004.
- JENSEN, L.B.; PROVAN, F.; LARSSSEN, E.; BRON, J.E.; OBACH, A. Reducing sea lice (*Lepeophtheirus salmonis*) infestation of farmed Atlantic salmon through functional feeds *Aquaculture Nutrition*, 21 (6) , 983-993, 2015.
- LIMA, R.P., SILVA, A.R., SILVA, A.P., LEÃO, T.P., MOSADDEGHI, M.R. soilphysics: An R package for calculating soil water availability to plants by different soil physical indices. *Comput. Electron. Agric.* 120, 63-71. <http://dx.doi.org/10.1016/j.compag.2015.11.003>, 2016.
- PENG, R.D. *R programming for Data Science*. Leanpulo books. ISBN/ASIN:n/a, 2015.
- RANDHAWA, S. *Open Source Software and Libraries*. Assistant Librarian, Centre for Research in Rural and Industrial Development (CRRID). 369-377, 2008.
- SEKI, K. SWRC fit - a nonlinear fitting program with a water retention curve for soils having unimodal and bimodal pore structure. *Hydrol. Earth Syst. Sci. Discuss.*, 4: 407-437. doi:10.5194/hessd-4-407, 2007.

VAN GENUCHTEN, M. Th.; LEIJ, F. J.; YATES, S. R. The RETC Code for Quantifying the Hydraulic Functions of Unsaturated Soils, Version 1.0. EPA Report 600/2-91/065, U.S. Salinity Laboratory, USDA, ARS, Riverside, California, 1991.

VAN GENUCHTEN, M.T. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. Soil Science Society of America Journal. 44(5), 892-898, 1980.

2. R SOFTWARE PACKAGES AS A TOOL FOR EVALUATING SOIL PHYSICAL AND HYDRAULIC PROPERTIES¹

Decíola Fernandes de Sousa, Sueli Rodrigues, Herdjanía Veras de Lima, Lorena Chagas Torres.

(Normas do jornal internacional Computers and Electronics in Agriculture)

RESUMO

A determinação de propriedades físicas do solo requer análises complexas realizadas por programas, na maioria, de acesso pago. O programa R possui a vantagem de ser aberto e disponibilizar diversos pacotes para análise de dados de propriedades físico-hídricas do solo. O objetivo desta revisão é apresentar e disseminar as ferramentas disponíveis no R para estudos em Física do Solo. Descrevemos brevemente alguns pacotes do programa R para a Física do Solo e analisamos a facilidade de reprodução dos mesmos. As vantagens do uso destes pacotes incluem: (i) relativamente fáceis de usar, (ii) fornece funções para o ajuste de equações complexas e (iii) acesso gratuito.

Palavras-chave: Programa R, Física do Solo, modelos de retenção de água no solo, modelos de infiltração no solo.

¹ Artigo publicado no jornal internacional Computers and Electronics in Agriculture. Volume 168, janeiro de 2020. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168169919306386>

ABSTRACT

The determination of soil physical properties requires complex analyzes performed by software, which are mostly paid access programs. The advantage of using R software is that it is open access and offers several packages for the analysis of soil physical-water properties data. The objective of this review is to present and to disseminate the tools available in R for studies in soil physics. We briefly describe some packages of the R software for soil physics and analyze their ease of reproduction. From the examples given in the manuals of each package we observed that their reproducibility was not always self-explanatory, as verified for the packages *soilwater* and *SoilHyP*. The *HydroMe* and *soil physics* packages were the most comprehensible to be reproduced. The most common determination offered by these packages is related to soil water retention curve models. We hope this will guide the soil science researchers to employ, more often, R codes to analyze their data. The R scripts that were used to exemplify the packages reported in this paper are available at https://github.com/sousaetal/COMPAG_2019_600.

Keywords: R statistical computing language; soil physics; soil water retention models; soil infiltration models

2.1 Introduction

Soil physics is the area of soil science that studies the mass and volume relationships between the solid, liquid and gaseous phases of the soil in order to understand the mechanisms that govern the processes such as energy exchanges in the soil, water cycle and plant growth (Hillel, 2003).

Soil physics interacts with other areas of knowledge, such as hydrogeology, agronomy, meteorology, pedology, mathematics, physics, and others. These interactions promote the rise of advanced theories about natural processes, the construction of high

precision instruments and the development of new mathematical tools (modeling, computational simulations, fractal, geostatistics, so on) that contribute to a better understanding of the processes related to environmental pollution, soil degradation and water resources (Lahlou et al., 2004).

The determination of many soil physical properties requires complex analyses, with the aid of models, sometimes difficult to be understood and applied. This complexity results in the association between soil physics and advanced mathematics by undergraduate and graduate students and even researchers.

Such an association can be attributed to the fact that mathematics and physics are the knowledge needed to interpret a particular state or physical process of the soil. For example, evaluations involving water transport in the soil may require solving differential equations and the use of complex variables (Cassel & Elrick, 1992). Besides these “difficulties”, it also occurs that the analysis of soil physics data is often performed by complex and non-free access software.

Alternatives to overcome these perceptions regarding soil physics are the elaboration and dissemination of practical and low-cost tools for data analysis. Furthermore, the unavailability of proper open-source tools can limit the propagation of knowledge among researchers (Bishwal, 2017). One option is the use of “packages” for soil physics, available in program R, a free environment for statistical analysis and production of graphs (Hornik et al., 2018). These packages are usually created by experts in the calculation, programmers, and interested users, such as soil scientists. Bishwal (2017) described a list of packages available in R-programming for geoscience field such as geology, remote sensing, soil and rock mechanics, however, the content of the packages were not discussed.

In fact, several packages are available in the R for the most diverse areas. Most of them are demonstrated and described only in the manuals available in the CRAN (Comprehensive R Archive Network) repository while others are more detailed in scientific publications such as Oliveira et al. (2018) in the area of Meteorology, Toumazi et al. (2018) in Medical Clinic, Omuto & Gumbe (2009), Silva & Lima (2015), Lima et al., (2016), Silva & Lima (2017) and Moeys (2018) in the field of soil science.

The emergency in the use of free programs, such as R, is reliable and has increased in recent years because it promotes the development of new statistical tools and it also contributes to the tackle against piracy of non-free software. Software such as R, specialized in integrated programming, testing, depuration and execution environments, are available, allowing users to solve mathematical problems ranging from simple to complex algebraic operations involving, for example, integration, differentiation, and adjustment of nonlinear curves.

The availability of these tools may create an opportunity for users to perfect the way the soil physics is explored by expanding the use of mathematical modeling in the interpretation of phenomena of interest, and the development of critical analysis for the selection and careful use of models.

The range of available packages is one of the main advantages of R. Currently; R has more than 12,700 packages accessible from multiple repositories. However, this magnitude of options makes many users not aware of the specific packages available for their area of interest.

Although the developed and available packages come with manuals for consultation, they often provide very general explanations and examples, sometimes difficult to be interpreted. Few are the works in the literature that present and explore in more details the options of use of the packages. In the field of soil physics, only the

soilphysics (Silva & Lima, 2017; Lima et al, 2016; Silva & Lima, 2015), *soiltexture* (Moeys, 2018) and *HydroMe* (Omuto & Gumbe, 2009) packages are described in more detail, even so, only some functions.

Hence, in order to present and to disseminate the tools available in the R for the study of soil physics even more in the academic environment, the objectives of this review are (i) to briefly describe some of the resources of the R software packages for the soil physics, and (ii) to provide examples of how these packages can be used in soil physics data analysis, especially with respect to soil hydraulic characteristics.

The rest of the paper is organized as it follows: Section 2 presents a summary of R software; Section 3 defines the R-packages available for soil physics; Section 4 illustrates the use of some of these packages; Section 5 discusses the results, and Section 6 summarizes the final considerations of the review.

2.2 R software

R software is an open source language for statistical analysis developed by Ross Ihaka and Robert Gentleman of the Department of Statistics of the University of Auckland who made it public in 1993. It is based on the statistical and commercial S_Plus language (Peng, 2015).

R is available for free acquisition in a computing environment that receives contributions from researchers and experts in various fields of Science. Moreover, it can be redistributed and/or modified continuously. One of the goals of this software is to encourage users to develop their own programming.

The programmed functions are stored in “packages”. So, packages are libraries with functions. To each package, a name is assigned and it is available for download and installation on CRAN (Comprehensive R Archive Network) and other repositories. There

are thousands of packages available from various authors in several areas. The list of packages is always updated when new contributions are received and all packages are accompanied by a tutorial with a summary of information and examples of use.

2.3 R packages for soil physics

Although studies of soil physics are carried out for different purposes (engineering, environment, geology, farming), this review will focus on packages that assist in the evaluation of soil physics data for studies in agricultural sciences.

For the agricultural area, packages are available for evaluation of physical properties such as transport of gases and liquid in the soil, soil survey, and texture and water retention, among others. The packages available in CRAN for applications in soil physics are shown in Figure 1. The information for each package is available in the R PROJECT (<https://www.r-project.org/>) along with the description provided by those responsible for it. It should be noted that other packages may be available in different repositories.

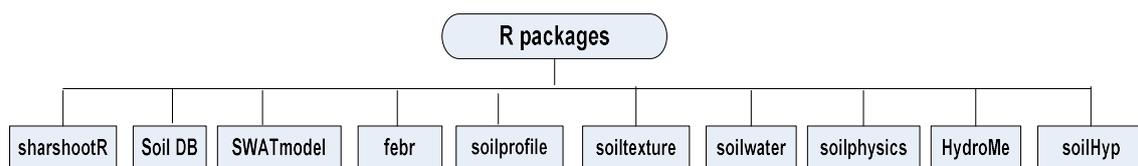


Figure 1. R packages for soil physics available in R PROJECT (<https://www.r-project.org/>).

Among the packages shown in Figure 1, not all of them can be widely used, for example, for the evaluation of soil studies in Brazil, since they were created for specific situations. *SharpshootR*, for example, allows for the manipulation, summarization and visualization of the United States Soil Database (USDA-NRCS SSURGO Database), as

well as *soilDB*, which provides methods for extracting soil data from several repositories (e.g., PedonPC, AK Site, NASIS, USDA-NASS). The *SWATmodel* (Soil and Water Assessment Tool) package is a river basin scale model, also for the USDA-ARS Soil Database. To access the Brazilian soil database, the *febr* package is available. It allows downloading one or more databases from the Free Brazilian Repository for Open Soil Data (Free Brazilian Repository for Open Soil Data – febr, <http://www.ufsm.br/febr>). The *soilprofile* package provides functions for plotting soil properties, but it is specific for soil morphological data such as horizon boundaries, structure, color, among others. Therefore, an example of its use will not be addressed in this review.

The other packages shown in Figure 1 (*HydroMe*, *soilphysics*, *soilwater*, *soiltexture* and *soilHyp*) can be widely used from empirical results obtained from studies of any region and, subsequently, they will be summarized and illustrated.

2.4 Examples of the use of R package for soil physics

Although the packages shown in the sequence can be used with any database, as long as they are saved as recommended by the authors, the demonstration of their use will be performed with the data provided by the authors themselves, as exemplified in the respective manuals, in order to evaluate the ease of reproduction, and point out its advantages and limitations. The list of packages to be demonstrated, as well as the summary and respective authors, is shown in Table 1.

Table 1. Overview of currently available packages from R program for evaluating soil physics data. For all other packages visit the CRAN website (<https://cran.r-project.org/>).

Year	Package	Function	Authors
2013	<i>HydroMe</i>	Soil water retention and infiltration	Omuto, C. T.
2017	<i>soilwater</i>	Soil water retention curve (SWRC)	Cordano, E.; Andreis, D.; Zottele, F.
2017	<i>soilphysics</i>	Soil bulk density, compaction, critical moisture, penetration resistance, load bearing capacity, water retention curve, soil aggregation, liquid limit, soil water capacity, least limiting water range, S index, and so on.	da Silva, A. R.; Lima, R. P.
2018	<i>soiltexture</i>	Soil texture	Moeys et al.
2018	<i>SoilHyp</i>	Soil water retention, unsaturated conductivity, fit parameters for SWRC.	Dettmann, U.; Andrews, F.

More complete package information can be found in the material available on CRAN where they are constantly updated.

Bishwal (2017) emphasized that the spirit of true research is to promote free access to data. Thus, in order to make the functions here discussed, reproducible, the readers can verify the R codes for each package at https://github.com/sousaetal/COMPAG_2019_600.

2.4.1 soiltexture package

By using *soiltexture* (Soil Texture Wizard R) package, from data of sand, silt and clay contents, it is possible to plot, to classify and to transform the data into different texture classes from multiple particle size classification systems. The package also offers some tools for exploring soil texture data (in relation to statistical visual analysis). The functions allow plotting triangles of soil textural classification in any triangular geometry (isosceles, rectangle triangles, etc.).

Over 15 textural triangles used all over the world are pre-defined in this package (Moeys, 2018). Among them, the one used by the Brazilian Soil Classification System

(Santos et al., 2018) and the Manual of Description and Collection of Soil in the Field (Santos et al., 2015). For example, to obtain the textural classification of a soil with 5% of clay, 5% of silt and 90% of sand, the following commands are used:

```
>old.par <- par(no.readonly=T)
>par("mfcol" = c(1,2), "mfrow"=c(1,2))
>dados <- data.frame("CLAY" = c(5), "SILT" = c(5), "SAND" = c(90))
># Plot the triangle - BRASIL: Lemos & Santos (1996)
>TT.plot(class.sys = "BRASIL.TT", tri.data = dados, main="Lemos & Santos (1996)", css.transf = TRUE, col = "black", pch = 19, class.line.col = "black", class.lab.col = "black", lwd.axis = 2, class.p.bg.col = c("gray"))
># Plot the triangle - BRASIL: SiBCS 2013 (EMBRAPA)
>TT.plot(class.sys = "SiBCS13.TT", tri.data = dados, main="SiBCS 2013 (EMBRAPA)", col = "gray0", pch = 19, class.line.col = "black", class.lab.col = "black", lwd.axis = 2, class.p.bg.col = c("gray"))
```

The first and second lines refer to a 2x2 matrix and consist of instructions to show the two triangles in the same figure. The results of the above functions can be seen in Figure 2 and the meaning of the abbreviations of each class can be obtained from the respective references.

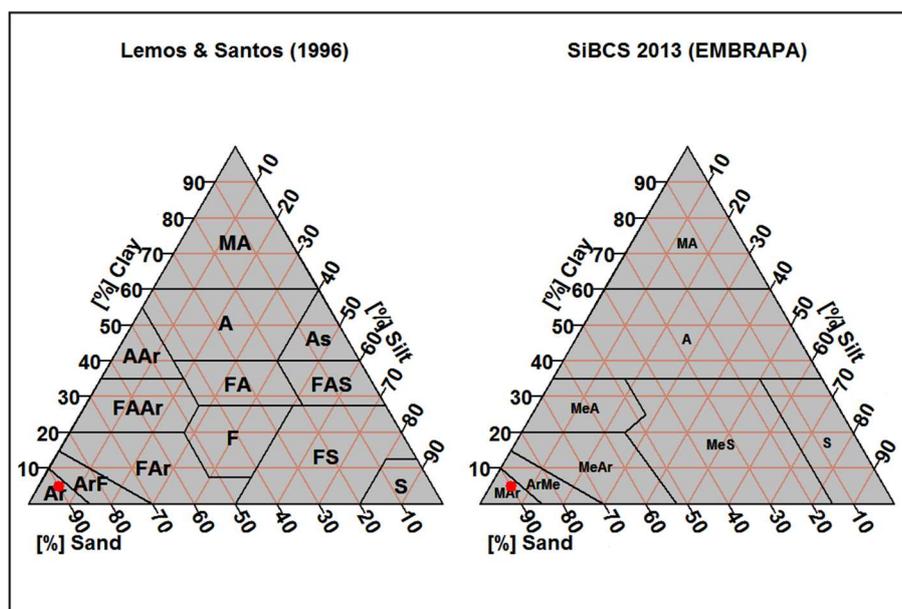


Figure 2. Soil textural classification using two texture classification systems from the *soiltexture* package available in <https://cran.r-project.org/>.

As it can be seen in the function *script*, it is possible to format several characteristics of the triangles as the title of the axes, colors, and symbols (Figure 2). The function also allows to plot several points in the same triangle, for that, just replace the data in the *script*:

```
> # Data
> data <- data.frame("CLAY" = c(05,60,15,05,25,05,25,45,65,75,13,47),
+ "SILT" = c(05,08,15,25,55,85,65,45,15,15,17,43),
+ "SAND" = c(90,32,70,70,20,10,10,10,20,10,70,10),
```

The areas corresponding to the different classes of each classification system can be illustrated with a color gradient defined by the *class.p.bg.col* (logical) option for TRUE. However, if no classification system is intended, it is possible to obtain an empty triangle without any specific classification. The *class.sys* option determines the classification system, so using the “none” specification, an empty triangle is plotted by the code:

```
> TT.plot(class.sys = "none")
```

Since there are many other classification systems, in addition to those implemented in the *soiltexture* package, the *TT.add()* function allows adding any triangle to the existing list. To create a triangle, you need to reproduce the structure of the settings (list of parameters) of the available triangles.

The R script for these functions are available in the repository cited above.

2.4.2 *soilwater* package

The package description states that it can be used to implement parametric formulas of soil water retention curve (SWRC) and hydraulic conductivity (Ks). However, only the models van Genuchten (1980) and Brooks & Corey (1966) for SWRC and Mualem (1976) and Brooks & Corey (1966) for Ks are implemented.

From the adjustment parameters of these two models, the example provided in the manual demonstrates the procedure for estimating soil diffusivity. However, the parameters are not obtained from the data adjustment by using functions available in the package, but the values of these parameters are provided directly in the *script* (see the repository R file). Thus, they must be previously estimated, from another function and/or program, because, from the arguments presented, functions were not verified for the estimation of the parameters of the models.

2.4.3 *HydroMe* package

The *Hydrome* package is in its second version and contains nine functions with adjustment models for water retention in the soil and three for infiltration models (Table 2), among other functions.

Some models of soil water retention curve, Brooks & Corey (1964), Russo (1988) and Tani (1982) require the estimation of initial parameters to perform its respective function. These parameters are obtained by the *Dstart* function that uses the Gauss-Newton algorithm for the estimation of parameters. The inputs to this algorithm include the mathematical model with parameters to be estimated, initial values for the parameters (based on the references of each model), partial derivatives of the first order of the model with respect to the parameters, and experimental data to facilitate the estimation process (Subramanian & Xiu, 1997). The initial parameters in the functions for the other models are obtained by auto-initialization using the inserted data set.

Table 2. Functions of the *HydroMe* package (available in <https://cran.r-project.org/>) to adjust soil water retention and infiltration parameters.

Function	Model	Function
<i>Brook</i>	$\theta = \theta_r + (\theta_s - \theta_r) / (\alpha h)^n$	SWRC fit by Brooks & Corey (1964) model
<i>Campbel</i>	$\theta = \theta_s (\alpha h)^n$	SWRC fit by Campbell (1974) model
<i>Ruso</i>	$\theta = \theta_r + (\theta_s - \theta_r) [(1 + 0.5\alpha h)e^{0.5\alpha h}]^{2/n+2}$	SWRC fit by Russo (1988) model
<i>SSfredlun</i>	$\theta = \theta_r + ((\theta_s - \theta_r) / \{\ln[2.7183 + (\alpha h)^n]\})^m$	SWRC fit by Fredlund & Xing (1994) model
<i>SSgard</i>	$\theta = \theta_r + (\theta_s - \theta_r) [1 + (\alpha h)^n]^{-1}$	SWRC fit by Gardner (1958) model, for grouped data.
<i>SSkosugi</i>	$\theta = \theta_r + 1/2(\theta_s - \theta_r) \operatorname{erfec}[(\ln(h/h_m)) / \alpha\sqrt{2}]$ (erfec: função erro complementar)	SWRC fit by Kosugi (1996) model.
<i>SSomuto</i>	$\theta = \theta_r + \theta_{s1}e^{-\alpha_1 h} + \theta_{s2}e^{-\alpha_2 h}$	Four-parameter function to determine water retention hydraulic parameters contained in a bimodal pore-size distribution developed by Omuto (2009).
<i>SSvgm</i>	$\theta = \theta_r + (\theta_s - \theta_r) [1 + (\alpha h)^n]^{-m}$	SWRC fit by van Genuchten (1980) model.
<i>Tani</i>	$\theta = \theta_r + (\theta_s - \theta_r) [1 + \alpha h]e^{-\alpha h}$	SWRC fit by Tani (1982) model.
<i>SSgampt</i>	$i = K_s + A/I(t)$	Soil water infiltration parameter by Green & Ampt (1911) model
<i>SShorton</i>	$i = f_c + (f_c - f_c) \exp(-kt)$	Soil water infiltration parameter by Horton (1940) model.
<i>SSphilip</i>	$i = f_c + 0.5St^{-0.5}$	Soil water infiltration parameter by Philip (1957) model.

SWRC: soil water retention curve

For a successful operation, the data set should be named according to the example provided by the authors (Figure 3), that is, y for the soil water content and x for the suction potential.

The procedures for estimating hydraulic parameters using the Philip infiltration model (1957) and the retention models of van Genuchten (1980) and Campbell (1974) are illustrated and discussed in Omuto & Gumbe (2009). The other models were tested using

the data provided in the examples, and the results will be discussed in the sequence. It is also possible to check the T script and output in the R file (https://github.com/sousaetal/COMPAG_2019_600)

Sample	Country	BD	x	lnx	y
Benin2	Benin	1.49	0.01000	0.100000	0.421
Benin2	Benin	1.49	10.00000	2.302585	0.401
Benin2	Benin	1.49	31.62278	3.453878	0.208
Benin2	Benin	1.49	100.00000	4.605170	0.120
Benin2	Benin	1.49	199.52623	5.295946	0.097
Benin2	Benin	1.49	501.18723	6.216980	0.087
Benin2	Benin	1.49	2511.88643	7.828789	0.079
Benin2	Benin	1.49	15848.93192	9.670857	0.075

Figure 3. Subset of the *isric* database for estimation of soil hydraulic parameters. Available in the *HydroMe* package (available at <https://cran.r-project.org/>).

The authors exemplify the use of the functions with data from the subgroup “Benin2” (Figure 3) of the *isric* file which consists of 320 observations from 6 countries.

For the Brook function, which estimates soil hydraulic parameters by the Brook & Corey (1966) model, despite generating the parameters, they were not significant for this data set. Thus, the function was also tested using the complete *isric* data as well as other datasets (data of the authors). However, in none of the trials, the parameters were significant. In general, the procedure used to try to improve the adjustment of these models is to change the initial parameters, however, the *Dstart* function mathematically estimates these parameters and the option to modify them is not permissible. For the other two functions that use the *Dsart* (Russian and Tani) the same data was properly adjusted and all parameters were significant.

For the functions that estimate the initial parameters by auto-initialization (*SSfreudland*, *SSgar*, *SSKosugi* and *SSOmuta*) the verifications performed with both the *isric* data and of others (unpublished data) showed that all of them generated coherent and significant results, except for the *SSKosugi* function, where precision varied according to

the database used, and it was noted that the function was less efficient when the data set contained low values of residual moisture.

An advantage of the *HydroMe* package is that it allows adjustments to be made with clustered and non-clustered data, that is, subsamples of the same database or the database as a whole. The use of the functions that make this segmentation possible is demonstrated in Omuto & Gumbe (2009). This option is useful as it avoids that the input processes of data and parameter estimation processes have to be repeated for each subset of the database.

Finally, the functions for estimating the parameters of water infiltration in the soil (*SSgampt*, *SShorton* and *SSphilip*) were also tested. The package includes an empirical model proposed by Horton (1940) and two models derived from physical considerations: Green & Ampt (1911) and Philip (1957). The database used to check the effectiveness of the functions of these models was provided by the package itself, *infiltr*. An example of a subset of this database is shown in Figure 4.

Sample	PlotNo	Erosion	Time	Rate	Cumrate	
1	1	1IP3	E1	1	1.000	1.000
2	2	1IP3	E1	2	3.000	4.000
3	3	1IP3	E1	3	2.200	6.200
4	4	1IP3	E1	4	2.200	8.400
5	5	1IP3	E1	5	2.100	10.500
6	6	1IP3	E1	6	2.100	12.600
7	7	1IP3	E1	7	1.100	13.700
8	8	1IP3	E1	8	1.100	14.800
9	9	1IP3	E1	9	1.100	15.900
10	10	1IP3	E1	10	1.000	16.900
11	11	1IP3	E1	11	1.000	17.900

Figure 4. Subset of the *isric* database for estimation of soil water infiltration parameters. Available in the *HydroMe* package (available at <https://cran.r-project.org/>).

All the three models are self-starting. The Horton model (*SShorton*), one of the most well-known methods for calculating soil infiltration rate is a three-parameter model that uses instantaneous infiltration rate data and climate, Rate and Time data from Figure 4. These variables are used in the Philip model (*SSphilip*) to estimate two parameters.

The function referring to Green & Ampt (*SSgampt*) model uses both instantaneous infiltration rates (*RATE*) and cumulative (*Cumrate*). The function estimates two parameters, *Ks* which is the saturated hydraulic conductivity and *A*, a constant that incorporates matric potential, the wetting front, and the previous moisture.

2. 4.4 *soilphysics* packages

The *soilphysics* package is a project in constant improvement that provides functions for the modeling of load-bearing capacity and resistance to penetration, adjustment of soil water retention curve by six different models, methods to obtain pre-consolidation pressure, among other calculations (cran.r-project.org//packages/soilphysics).

So far, the package has thirty-six functions. The theoretical explanations and illustration of the use of some of these functions are given in Silva & Lima (2017), which exemplify the achievement of the maximum point of curvature of a univariate nonlinear function. The implementation of the functions to determine the Least Limiting Water Range (LLWR) and Integral Water Capacity (IWC) are demonstrated in Lima et al. (2016) and, finally, the preconsolidation pressure, using several methods is explained in Silva & Lima (2015). The other functions refer to a database (*bulkDensity*, *compaction* and *skp1994*), soil water retention curve adjustment models (six models), as well as functions to use the parameters estimated by these models and other calculations related to soil physics.

The models available for adjusting the soil water retention curve (SWRC) are van Genuchten (1980) and its modified version according to Pierson & Mulla (1989); Groenevelt & Grant (2004); Dexter (2008); Ross et al. (1991) and Silva et al. (1994), the latter two included in a single function. Among these models, only the van Genuchten (1980) is available in the other packages presented in this paper (*Hydrome*, *soilwater* and *soilHyp*).

Regarding the definition of the initial parameters of the SWRC models, different from *Hydrome*, where the users do not have the possibility to fix the parameters because they are calculated automatically based on the database, the *soilphysics* package provides the option of an interactive panel (Figure 5) that allows changing the parameters according to the distribution of the data (its use can be checked from the R file available in https://github.com/sousaetal/COMPAG_2019_600). The estimates of non-linear least squares are obtained for four out of the five functions by taking the graphical initial values of the panel (*Interactive fit*). The initial estimation of the parameters of the models by Silva et al. (1994) and Ross et al. (1991), *fitsoilwater4* function, are provided by the linearization of the model and later used to generate least squares estimates through the *nls* (non linear system) function.

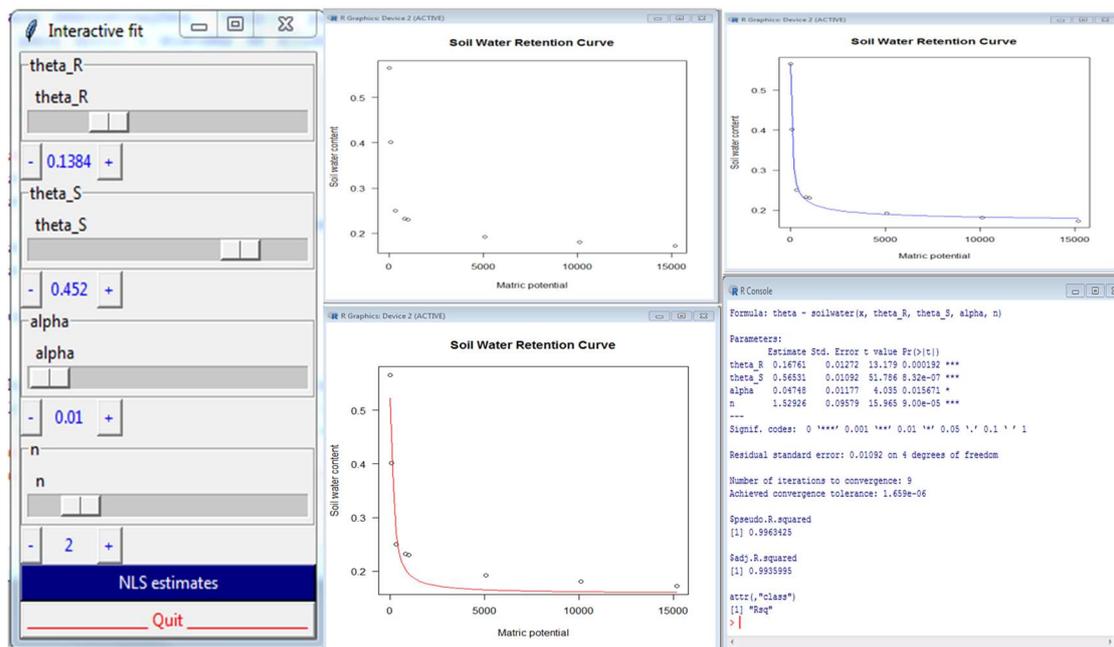


Figure 5. Interactive fit available for some functions of the *soilphysics* package for the estimation of the initial fit parameters of the soil water retention curve. To the right images representing: data with no fit, with initial parameters (red line) and after fitting (blue line), and the fit parameters with the respective statistics.

For each function used to obtain adjustment parameters of different SWRC models (*fitsoilwater*, *fitsoilwater2*, *fitsoilwater3*, *fitsoilwater4* and *fitsoilwater5*) another is obtained, *soilwater*, which provides the soil moisture adjusted for a given potential from the adjusted parameters. For example:

```
> #Water retention fit by the van Genuchten model
> h <- c(0.001, 50.65, 293.77, 790.14, 992.74, 5065, 10130, 15195)
> w <- c(0.5650, 0.4013, 0.2502, 0.2324, 0.2307, 0.1926, 0.1812, 0.1730)
> fitsoilwater(w, h)
      -      -
Parameters:
      Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
theta_R 0.16761   0.01272  13.179 0.000192 ***
theta_S 0.56531   0.01092  51.786 8.32e-07 ***
alpha   0.04748   0.01177   4.035 0.015671 *
n       1.52926   0.09579  15.965 9.00e-05 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

> #Soil moisture at the water potential of 0,1 kPa
> soilwater(x = 0.1, theta_R = 0.16761, theta_S = 0.56531, alpha = 0.04748, n = 1.52926)
[1] 0.5652715
```

The SWRC parameters are also used in other functions to obtain some physical soil properties. For example, by using the parameters of the van Genuchten model, it is possible to determine the S index (*Sindex* function) and the Integral Water Capacity (*iwc* function). The stability of aggregates can be evaluated by the HEMC (high-energy-moisture-characteristics) method using the *hemc* function that uses the van Genuchten adjustment parameters modified by Pierson & Mulla (1989). The potential of soil water at the point where the water flow is ceased even under a pressure gradient defined by Dexter et al. (2012) as the hydraulic cutoff point is obtained from the parameters of the Dexter et al. (2008) and Groenevelt & Grant (2004) models by the *hydraulicCutOff* function.

The parameters for the load-bearing capacity model ($\sigma_p = 10^{(b_0+b_1*\theta)}$) proposed by Dias Junior (1994) can be estimated from two functions, *getInitiallbc* which only provides the values of b_0 and b_1 and the *fitlbc* that besides generating the parameters, gives the statistical summary of the same ones. From these estimated parameters, the adjusted values of pre-consolidation pressure (σ_p) can be obtained by the function *SSlbc*.

Another function related to the determination of pre-consolidation pressure is *sigmaP*, which contains implementations of the major methods such as that of Casagrande (1936), Pacheco Silva (ABNT, 1990), and regression methods and the virgin compression intercept line. One example of pressure data adjustment (*pres*) as a function of the voids ratio (*VR*) using the Casagrande method is:

```
> pres <- c(1, 12.5, 25, 50, 100, 200, 400, 800, 1600)
> VR <- c(0.846, 0.829, 0.820, 0.802, 0.767, 0.717, 0.660, 0.595, 0.532)
> plot(VR ~ log10(pres), type = "b") #find the 'mcp'
> sigmaP(VR, pres, method = "casagrande", mcp = 1.6, n4VCL = 2)
```

Where *mcp* is the point of maximum curvature of the curve and is required only for the Casagrande method. To use another method, just set it to the *method* option. The voids ratio can be determined from soil deformation data using the *voidratio* function.

Other physical determinations that can be performed using the *soilphysics* package are the achievement of the optimum compaction moisture and critical density by the Proctor test using the *criticalmoisture* function; estimate of the parameters of the soil penetration resistance curve using the model of Busscher (1990) with the *fitbusscher* function and the soil moisture value corresponding to the liquidity limit (*liquidlimit* function) by the method of Sowers (1965).

2.4.5 SoilHyP Package

Similar to the *HydroMe* package, the *SoilHyP* package offers only the option of adjusting hydrologic models. In its current version, the package provides seventeen functions, out of which two are of database (Figure 6).

The hydraulic properties database (Figure 6B) can be created by the *SEM* function from the evaporation data (Figure 6A).

hour	weight	tens.up	tens.low
1	974.6850	1.5000000	4.500000e+00
2	974.3829	1.2458333	4.250000e+00
3	974.0808	0.9916667	4.000000e+00
4	973.7787	0.7375000	3.750000e+00
5	973.4767	0.4833333	3.500000e+00
6	973.1746	0.2291667	3.250000e+00
7	972.8725	-0.0250000	3.000000e+00
8	972.5704	-0.2791667	2.750000e+00
9	972.2683	-0.5333333	2.500000e+00
10	971.9662	-0.7875000	2.250000e+00

A

Ku	th	suc
NA	0.5161818	-53.9125
NA	0.5143602	-54.8500
NA	0.5125386	-55.7875
NA	0.5107170	-56.7750
0.62954622	0.5088954	-57.8125
0.56209484	0.5070738	-58.8500
0.51283259	0.5052931	-59.9250
0.49628961	0.5035124	-60.9875
0.49300521	0.5016294	-62.1125
0.50288541	0.4997669	-63.3500

B

Figure 6. Example of databases available in the *SoilHyP* package for experimental data of evaporation (A), presented by the *dataSEM* function and hydraulic properties (B), obtained by the *dataSHP* function.

The *fitSHP* function estimates water retention parameters and/or unsaturated hydraulic conductivity (Ku) by van Genuchten-Mualem or Peters-Durner-Iden (2015) models. For the van Genuchten model, the option of uni- or bi-modal adjustment can be used.

Almost all the other functions available in the package are in function of the parameters obtained by *fitSHP* adjustment. For example:

- *Kcap* function: estimation of relative (unsaturated) capillary conductivity;
- *Kfilm* function: estimation of the hydraulic conductivity by the Peters model (2013);
- *Ku* function: estimation of unsaturated hydraulic conductivity;
- *Sad* function: estimation of the relative saturation function for adsorption water storage described by a piecewise linear function (Iden and Durner, 2014).
- *Sat* function: estimation of van Genuchten capillary saturation function for unimodal or bimodal porous space distribution;
- *Scap* function: estimation of the capillary saturation function modified by Iden and Durner (2014);

- *SWC* function: estimation of water content in the soil.

All of these functions have the same script pattern, where the *par.shp* option is used to reference a list or a vector with parameters such as:

```
> Ku(suc = seq(1, 1000, by = 1), FUN.shp = 'vGM', par.shp = list(Ks = 10, ths = 0.5, thr = 0, +
alfa = 0.02, n = 1.5, tau = 0.5),modality = 'uni', suc.negativ = FALSE)
```

The package has functions for statistical evaluation such as *AIC_HY* which is an Akaike Information Criterion (AIC), that is, a relative measure of the amount of adjustment of an Akaike estimated statistical model (1974), with or without correction term using expression of Ye et al. (2008) and the Hurvich & Tsai correction term (1989). The package also has the functions *NSE* and *RMSE*, which are the efficiency coefficient of the Nash-Sutcliffe model and the root mean square error respectively.

The *SCEoptim* function of the *SoilHyP* package is copied from the *hydromad* package (<https://github.com/floybix/hydromad/>) and aims to optimize the *SCE* function by the Shuffled Complex Evolution (SCE) method developed by Duan et al. (1992).

Finally, the package provides the functions *plot.fitSHP* and *predict.fitSHP* which, respectively, creates a graph and predicts values from *fitSHP* function fit parameter.

2.5 Discussion

We know that there is a lot of open and free software that can be used to analyze the soil properties presented above. However, comparisons with them will not be presented here since the aim of this paper is to emphasize only those available in R program.

R is a free and open access program and, although conveniently accepted in many analytical follow-ups, it still does not appear to be widely recognized or accepted as a routine tool in the field of soil science. Commonly, paid programs, and sometimes unlicensed use, are preferred in studies in the area. Although R packages are used, or even

developed for the field of soil science, few students, researchers, and other stakeholders usually work with these options in their daily analyses.

Some papers have already presented and demonstrated packages for the data analysis of soil physics (Silva & Lima, 2017; Lima et al.; 2016, Silva & Lima, 2015; Omuto & Gumbe, 2009), however, there is no general vision of all available packages and their possibilities of use. The objective of this review was not to evaluate the R software but intended to provide an overview of free and reliable alternatives to work with soil physics data. Certainly, there is not enough space in this work to explain or to compare in detail all the packages and functions available in R. Thus, only some essential information for more usual adjustments, as well, its advantages and disadvantages, will be discussed sequentially.

The main functions of different packages available in the R program for adjustment and manipulation of soil physics data are listed in Section 4. With these illustrations, we try to get students and those interested in the area to overcome the apprehension for the handling and adjustment of their data. Although the use of these packages has the advantage of not wasting time for programming functions, it is possible, with these easily accessible packages, to learn programming notions following the scripts demonstrated in the manuals and reproduced in the R files made available in https://github.com/sousaetal/COMPAG_2019_600. In addition to using package functions for a particular interest, users are encouraged to explore various modifications using different functions that can add and/or remove information. This activity results in a greater understanding of the principles of different models and functions in addition to a deeper appreciation of physics and its sensitivity to the magnitudes of various parameters. It should be noted that the R community is very active, so packages are often created and improved, providing new functions for the users.

Besides the ease of data entry, the *soiltexture* package has the advantage of obtaining the textural class of the soil in several classification systems. The disadvantage, which extends to all packages tested here that provide graphical results is the difficulty of saving the graphics with a high-resolution quality.

It can be said that the reproduction of the analyses from the examples given in the manuals was not satisfactory for the *soilwater* and *SoilHyP* packages. The *scripts* of both packages are confusing and there seems to be a shortage of information needed for performing the analyses, what can be verified in the R files in the repository

The *HydroMe* and *soil physics* packages are the most intuitive and the determinations are easily reproduced from the examples provided by the authors of the respective packages (see repository files). The *HydroMe* package provides functions only for adjusting soil water properties (water retention and infiltration). Nine water retention models are available in this package whereas *soilphysics* offers six, and the only model iterated in both packages is the one of van Genuchten (1980). As a result, using the two packages there is a total of fourteen models of adjustment of the water retention curve in the soil.

The only one that presented the possibility of estimating the parameters by separating the database into groups was *HydroMe*. The others require that the data input entry and estimation process to be repeated for each group. This can be a tedious and error-prone process, especially with extensive databases.

So far, the *soilphysics* package is the most complete, allowing the user to conduct various adjustments using a single package. It also has the advantage of being very intuitive which facilitates the execution of the several functions even for users unfamiliar with the R language, in addition to presenting published works (Silva & Lima, 2017; Lima et al.,

2016; Silva & Lima 2015) that demonstrate the applicability of some functions inserted in the package, facilitating its use.

2.6 Final Considerations

The five R packages presented in this paper offer an overview of the most common soil physics analyzes such as soil texture and water retention curve. The checks performed in this review were made based on the examples given in the manuals of each package and, their reproducibility was not always self-explanatory, as verified for the packages *soilwater* and *SoilHyP*. The *HydroMe* and *soil physics* packages were the most comprehensible to be reproduced.

The most common determination offered by these packages is related to soil water retention curve models. Only the *HydroMe* and *soilphysics* packages together allow the adjustment of the water retention data using fourteen models. The van Genuchten model is the only one available in all packages that offer functions for estimating soil water retention.

We have tried to summarize the key features of each package in an attempt to help soil researchers choose the easiest one to reproduce, especially for those beginners in R language. To make full use of these packages, researchers are encouraged to read about the models employed and understand the functions options provided by these packages. We do not intend to promote the idea that R or any other statistical program is the best option to work with soil physics data. We only intend to disclose the availability of an efficient, reliable, relatively easy and free statistical tool for those interested.

The information that we have presented here can be updated over time, but we hope this will guide the soil science researchers to employ, more often, R codes to analyze their

data. The R scripts that were used to exemplify the packages reported in this paper are available at https://github.com/sousaetal/COMPAG_2019_600.

References

ABNT–Associação Brasileira de Normas Técnicas, 1990. Ensaio de adensamento unidimensional: NBR 12007. Rio de Janeiro. 13p.

Akaike, H., 1974. A new look at statistical model identification. *IEEE AUTOMAT CONTR.* 19(6), 716–723. <https://doi.org/10.1109/TAC.1974.1100705>.

Bishwal, R.M., 2017. Potential use of R-statistical programming in the field of geoscience. 2nd INTERNATIONAL CONFERENCE FOR CONVERGENCE IN TECHNOLOGY (I2CT). Doi: 10.1109/I2CT.2017.8226275

Brooks R.H., Corey A.T., 1964. Hydraulic properties of porous medium. Hydrology Paper Number 3. Colorado State University, USA.

Busscher, W.J. ,1990. Adjustment of flat-tipped penetrometer resistance data to common water content. *Transactions of the ASAE.* 33 (2), 0519-0524. <https://doi.org/10.13031/2013.31360>.

Campbell, G.S. 1974. A simple method for determining unsaturated conductivity from moisture retention data. *SOIL SCI.* 117(6), 311–314. <https://doi.org/10.1097/00010694-197406000-00001>.

Casagrande, A., 1936. The Determination of the Pre-Consolidation Load and Its Practical Significance. *Proc. of First ICMFE.* (3), 60-64.

Cassel, D.K., Elrick, D.E. 1992. Using the programa package “MathCAD” as a tool to teach soil physics. *J. Nat. Resour. Life Sci.Educ.* 21(1), 74-78.

Cordano,E., Andreis, D., Zottele, F., 2017. Package ‘soilwater’. <https://cran.r-project.org/web/packages/soilwater/soilwater.pdf> (acessado em 18 de fevereiro de 2019).

- Dettmann, U., 2018. Package 'SoilHyP'. <https://cran.r-project.org/web/packages/SoilHyP/SoilHyP.pdf> (acessado em 18 de fevereiro de 2019).
- Dexter, A.R., Czyz, E.A., Richard, G., 2012. Equilibrium, non-equilibrium and residual water: Consequences for soil water retention. *GEODERMA*. 177(178), 63-71. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2012.01.029>.
- Dexter, A.R., Czyz, E.A., Richard, G., Reszkowska, A., 2008. A user-friendly water retention function that takes account of the textural and structural pore spaces in soil. *GEODERMA*. 143(3), 243-253. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2007.11.010>
- Dias Junior, M. S., 1994. Compression of three soils under long term tillage and wheel traffic. 114p. Ph.D. Thesis - Michigan State University, East Lansing.
- Duan, Q.; Sorooshian, S., Gupta, V., 1992. Effective and efficient global optimization for conceptual rainfall-runoff models. *WATER RESOUR RES*. 28(4), 1015-1031. <https://doi.org/10.1029/91WR02985>.
- Fredlund, D.G., Xing, A., 1994. Equations for the soil-water characteristic curve. *CAN GEOTECH J*. 31(4), 521-532. <https://doi.org/10.1139/t94-061>.
- Gardner, W.R., 1958. Some steady state solutions of the unsaturated moisture flow equation with application to evaporation from a water table. *SOIL SCI*. 85(4), 228-232. <https://doi.org/10.1097/00010694-195804000-00006>.
- Green, W.H., Ampt G.A., 1911. Studies on soil physics: 1. The flow of air and water through soils. *J AGR SCI*. 4(1), 1-24. <https://doi.org/10.1017/S0021859600001441>.
- Groenevelt, P.H., Grant, C.D., 2004. A new model for the soil-water retention curve that solves the problem of residual water contents. *EUR J SOIL SCI*. 55,479-485. <https://doi.org/10.1111/j.1365-2389.2004.00617.x>.
- Hillel, D., 2003. *Introduction to Environmental Soil Physics*. Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-348655-4.X5000-X>

- Hornik, K. 2018. R FAQ: Frequenty Asked Question on R. Disponível: <https://cran.r-project.org/doc/FAQ/R-FAQ.html> (acessado em 18 de fevereiro de 2019).
- Horton R.E., 1940. An approach towards a physical interpretation of infiltration capacity. *SOIL SCI SOC AM J.* 5, 399-417.
- Iden ,S.C., Durner, W., 2014. Comment on “Simple consistent models for water retention and hydraulic conductivity in the complete moisture range” by A. Peters. *WATER RESOUR RES.* 50, 7530–7534. <https://doi.org/10.1002/2014WR015937>.
- Kosugi, K., 1996. Lognormal distribution model for unsaturated soil hydraulic properties. *WATER RESOUR RES.* 32(9), 2697-2703. <https://doi.org/10.1029/96WR01776>.
- Lahlou, S.; Mrabet, R.; Ouadia, M., 2004. Soil physics: a Moroccan perspective. *J AFR EARTH SCI.* 39(3), 441–445. <https://doi.org/10.1016/j.jafrearsci.2004.07.021>
- Lima, R.P., Silva, A.R., Silva, A.P., Leão, T.P., Mosaddeghi, M.R., 2016. soilphysics: An R package for calculating soil water availability to plants by different soil physical indices.. *COMPUT ELECTRON AGR.* 120, 63-71. <http://dx.doi.org/10.1016/j.compag.2015.11.003>.
- Moeys, J., 2018. The soil texture wizard:R functions for plotting, classifying, transforming and exploring soil texture data. http://cran.r-project.org/web/packages/soiltexture/vignettes/soiltexture_vignette.pdf (acessado em 24 de janeiro de 2019).
- Mualem, Y., 1976. A New Model for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Porous Media. *WATER RESOUR RES.* 12(3), 513-522. <https://doi.org/10.1029/WR012i003p00513>.
- Oliveira-Júnior, J.F, Gois, G., Terassic, P.M.B., Silva-Júnior, C.A., Blanco, C.J.C., Sobral, B.S., Gasparinih, K.A.C., 2018. Drought severity based on the SPI index and its relation to the ENSO and PDO climatic variability modes in the regions North and Northwest of the

State of Rio de Janeiro – Brazil. *Atmos Res.* 212, 91–105.
<https://doi.org/10.1016/j.atmosres.2018.04.022>.

Omuto C.T., 2009. Biexponential model for water retention characteristics. *GEODERMA*. 149(3), 235-242. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2008.12.001>.

Omuto, C.T., 2013. Package ‘HydroMe’. <https://cran.r-project.org/web/packages/HydroMe/HydroMe.pdf> (acessado em 18 de fevereiro de 2019).

Omuto, C.T.; Gumbe, L.O., 2009. Estimating water infiltration and retention characteristics using a Computer program in R. *COMPUT GEOSCI.* 35, 579-585.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.cageo.2008.08.011>.

Peng, R.D., 2015. R programming for Data Science. Leanpulo books. ISBN/ASIN:n/a.

Peters, A., 2013. Simple consistent models for water retention and hydraulic conductivity in the complete moisture range. *WATER RESOUR RES.* 49, 6765–6780.
<https://doi.org/10.1002/wrcr.20548>.

Peters, A., Iden, S.C., Durner, W., 2015. Revisiting the simplified evaporation method: Identification of hydraulic functions considering vapor, film and corner flow. *J HYDROL.* 527,531-542. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jhydrol.2015.05.020>.

Philip, J.R., 1957. The theory of infiltration: 4. Sorptivity and algebraic infiltration equations. *SOIL SCI.* 84(3), 257-264. <https://doi.org/10.1097/00010694-195709000-00010>.

Pierson, F.B.; Mulla, D.J., 1989. An Improved Method for Measuring Aggregate Stability of a Weakly Aggregated Loessial Soil. *SOIL SCI SOC AM J.* 53(6), 1825-1831.
<https://doi.org/10.2136/sssaj1989.03615995005300060035x>.

Ross, P.J. Williams, J., Bristow, K.L., 1991. Equation for Extending Water-Retention Curves to Dryness. *SOIL SCI SOC AM J.* 55(4), 923-927.
<https://doi.org/10.2136/sssaj1991.03615995005500040004x>.

Russo, D., 1988. Determining soil hydraulic properties by parameter estimation: On the selection of a model for the hydraulic properties. *WATER RESOUR RES.* 24(3), 453-459. <https://doi.org/10.1029/WR024i003p00453>.

Santos, H.G., Jacomine, P.K.T., Anjos, L.H.C., Oliveira, V.A., Lumbrreras, J.F., Coelho, M.R., Almeida, J.A., Filho, J.C.A., Oliveira, J.B., Cunha, T.J.F., 2018. Sistema brasileiro de classificação de solos. 5ª Edição, Embrapa. E-book

Santos, R.D., Santos, H.G., Ker, J.C., Anjos, L.H.C. Shimizu, S.H., 2015. Manual de descrição e coleta de solo no campo. 6ª edição revisada e ampliada. Viçosa, Sociedade Brasileira de Ciência do solo.

Silva, A.P., Kay, B.D., Perfect, E., 1994. Characterization of the least limiting water range of soils. *SOIL SCI SOC AM J.* 58(60), 1775-1781. <https://doi.org/10.2136/sssaj1994.03615995005800060028x>.

Silva, A.R., Lima, R.P., 2017. Package ‘soilphysics’. <https://cran.r-project.org/web/packages/soilphysics/soilphysics.pdf> (acessado em 18 de fevereiro de 2019).

Silva, A.R., Lima, R.P.; 2015. soilphysics: An R Package to determine soil preconsolidation pressure. *COMPUT GEOSCI.* 84, 54-60. <https://doi.org/10.1016/j.cageo.2015.08.008>.

Silva, A.R.; Lima, R.P., 2017. Determination of Maximum Curvature Point with the R package Soilphysics. *Int J Curr Res.* 9(1), 45241-45245.

Sowers, G.F., 1965. Consistency. In: BLACK, C.A. (Ed.) *Methods of soil analysis*. Madison: American Society of Agronomy. 391-399.

Subramanian, P.K., Xiu, H., 1997. Convergence Analysis of Gauss–Newton Methods for the Complementarity Problem. *J OPTIMIZ THEORY APP.* 94(3), 727-738. <https://doi.org/10.1023/A:1022661202977>.

Tani, M., 1982. The properties of a water-table rise produced by one dimensional, vertical, unsaturated flow. *J. Jap. Forest Soc.* 64, 409-418.

Toumazi, A., Contes, E., Alberti, C., Friede, T., Lentz, F., Stallard, N., Zohar, S., Ursino, M., 2018. dfpk: An R-package for Bayesian dose-finding designs using pharmacokinetics (PK) for phase I clinical trials. *Comput Meth Prog Bio.* 157, 163-177. <https://doi.org/10.1016/j.cmpb.2018.01.023>.

van Genuchten, M.T., 1980. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *SOIL SCI SOC AM J.* 44(5), 892-898. <https://doi.org/10.2136/sssaj1980.03615995004400050002x>.

Ye, M., Philip, M., Neuman, S.P., 2008. On model selection criteria in multimodel analysis. *WATER RESOUR RES.* 44, W03428. <https://doi.org/10.1029/2008WR006803>.

3. USO DO PACOTE *SOILPHYSICS* DO PROGRAMA R PARA EXPLORAR A CURVA DE RETENÇÃO DE ÁGUA NO SOLO

Resumo

O teor de água no solo e a energia correspondente absorvida nas partículas representam a curva de retenção de água no solo. Tratando-se de uma importante prática relaciona a solo-água na agricultura utilizada como base para determinar indicadores de qualidade física do solo. Neste trabalho são ilustradas as funções hidráulicas do pacote R, *soilphysics*, apresentando a funcionalidade e validando os resultados para o cálculo dos parâmetros da curva de retenção de água no solo no modelo de van Genuchten (1980) com programa RETC. O pacote *soilphysics* está em constante atualização, possui disponível para download, até o momento, trinta e seis funções, porém novas funções estão sendo testadas como a $K.h()$ e $psd()$, apresentadas neste trabalho

Palavras-chaves: qualidade física do solo, água no solo, pacote *soilphysics*.

3.1 Introdução

A relação entre o conteúdo de água no solo e o correspondente potencial matricial, podendo ser expressa em unidades de massa ou volume, é denominada curva de retenção da água no solo CRA. A CRA é considerada a curva de maior importância na ciência do solo, a qual fornece informações críticas sobre o comportamento insaturado do solo com uma ampla aplicação em estudos agro-físicos (HAGHVERDI et al., 2018). O estudo da CRA é importante para o conhecimento da disponibilidade de água para as plantas, evapotranspiração, modelagem de fluxos de água e vapor em solos insaturados, determinação de volumes de irrigação, fertilização e remediação de solos poluídos (JENSEN et al., 2015).

A CRA é estudada, na maioria das vezes, a partir modelos matemáticos ajustados aos dados experimentais. Diversas funções analíticas para descrever a CRA podem ser encontradas na literatura (BROOKS; COREY, 1964; VAN GENUCHTEN, 1980; FREDLUN; XING, 1994; KOSUGI, 1996; GROENEVELT; GRANT, 2004; DEXTER et al., 2008, OMUTO; GUMBE, 2009). A partir da CRA é possível derivar uma série de indicadores adicionais, tais como, a distribuição do diâmetro dos poros, volume de

macroporos, mesoporos e microporos, água disponível, índice S, entre outros (RABOT et al., 2018).

O uso de modelagem numérica avançada e análise estatística para o melhor entendimento da CRA envolvem códigos computacionais complexos, os quais demandam significativa experiência e, conseqüentemente, dificultam sua aplicação. Assim, o desenvolvimento e disseminação de ferramentas para a análise de dados de livre acesso e fácil entendimento têm sido considerados de fundamental importância para uma eficiente exploração de resultados e propagação de conhecimento entre a comunidade científica, uma vez que simulações, códigos e algoritmos podem ser disponibilizados tornando as análises reprodutíveis (BISHWAL, 2017).

Recentemente, alguns estudos têm reconhecido a importância da pesquisa reprodutível, a qual objetiva representar as análises de tal forma que seu conteúdo possa ser recriado, melhor entendido e verificado (PENG, 2011; SANDVE et al., 2013; BISWAL, 2017). Isto requer que estudos em ciência experimental descrevam os resultados e forneça um protocolo claro o suficiente para permitir a repetição dos resultados. Neste sentido, tem sido encorajado que pesquisadores individuais, instituições, empresas de fomento e revistas científicas estabeleçam bons hábitos de reprodutibilidade e, assim, melhorem a transparência da pesquisa. Esta prática ajudará a garantir a credibilidade da pesquisa, beneficiando toda a comunidade científica (SANDVE, 2013).

Alguns programas computacionais e pacotes estatísticos de aquisição livre podem ser usados para realizar a modelagem da CRA, estes incluem: *Soil Water Retention Curve-CRA Fit*² (SEKI, 2007), *SWRC*³ (DOURADO NETO, 2000), *RETC*⁴ (VAN GENUCHTEN et al, 1992) e o *R*⁵ (PENG, 2015). A linguagem R tem sido predominantemente usada por pesquisadores para tornar a análise de dados científicos reprodutíveis (BISHWAL, 2017).

O R é um programa que recebe contribuição de pesquisadores em vários campos da ciência ao redor do mundo. Dentre as diversas ferramentas disponíveis no programa R, destacamos os *pacotes*, os quais contêm funções programadas para as mais diversas áreas do conhecimento. Por exemplo, os pacotes *HydroMe*, *soilwater*, *soilHyp* e *soilphysics* apresentam funções específicas para o estudo das funções hidráulicas do solo (SOUSA et al, 2020). Neste estudo será dada ênfase ao pacote *soilphysics*, o qual fornece, entre outras, comandos programados para o estudo de funções hidráulicas do solo.

² <http://seki.webmasters.gr.jp/swrc/>

³ <https://qafinds.com/?q=software+swrc+download+esalq&spid=2emepi9br40piac>

⁴ <https://www.pc-progress.com/en/Default.aspx?retc-downloads>

⁵ <https://www.r-project.org/>

Apesar dos avanços no desenvolvimento de modelos que melhor representem as o comportamento da água no solo, a descrição detalhada da metodologia computacional para a determinação dos parâmetros hidráulicos da CRA e indicadores derivados, a partir de dados experimentais ainda é escassa. Embora, seja possível consultar os manuais dos pacotes desenvolvidos no R, estes muitas vezes apresentam informações superficiais e de difícil interpretação (SOUSA et al., 2020). Assim, a fim de contribuir para o aperfeiçoamento dar reprodutibilidade da pesquisa, objetivou-se com este estudo apresentar códigos reprodutíveis, assim como, a aplicabilidade das funções do pacote *soilphysics* do programa R para a modelagem da curva de retenção da água no solo e determinação de indicadores derivados, de modo a permitir a aplicação em novos dados. Os códigos e os dados do artigo para consulta estão disponíveis em <https://github.com/sousaetal>.

3.2. Pacote *soilphysics*

O pacote *soilphysics* é um projeto em constante aperfeiçoamento que fornece funções para a modelagem da capacidade de suporte de carga e resistência à penetração, ajuste da curva de retenção de água no solo por seis diferentes modelos, métodos para obter a pressão de pré-consolidação, dentre outros cálculos (cran.r-project.org/packages/soilphysics).

O pacote possui funções para física do solo, algumas foram apresentadas em Silva e Lima (2017), que exemplificam a obtenção do ponto de curvatura máxima de uma função não linear univariada. A implementação das funções para determinar o Intervalo Hídrico Ótimo (Least Limiting Water Range, LLWR) e a Capacidade de Água Integral (Integral Water Capacity, IWC) são demonstradas em Lima et al. (2016) a pressão de preconsolidação, usando diversos métodos é explanada em Silva e Lima (2015) e, por fim, Sousa et al. (2020) analisam superficialmente o pacote, assim como funções para usar os parâmetros estimados por modelos e outros cálculos relacionados a física do solo.

Tabela 1. Funções do pacote *soilphysics* para o estudo do comportamento da água no solo e suas respectivas definições.

Função	Definição
<i>fitsoilwater</i>	Ajuste da CRA pelo modelo de van Genuchten (1980)
<i>fitsoilwater2</i>	Ajuste da CRA pelo modelo de Groenevelt & Grant (2004)
<i>fitsoilwater3</i>	Ajuste da CRA pelo modelo de Dexter (2008)
<i>fitsoilwater4</i>	Ajuste da CRA pelo modelo de Ross et al. (1991) e Silva et al. (1994)
<i>Sindex</i>	Índice de qualidade física e estrutural do solo S
<i>hydraulicCutOff</i>	Ponto de corte hidráulico
<i>K.h</i>	Condutividade hidráulica insaturada
<i>psd</i>	Distribuição do diâmetro de poros (uni-modal)

Dentre as funções apresentados na tabela 1, somente as funções *fitsoilwater2*, *fitsoilwater3* e *fitsoilwater4* não serão exemplificadas.

3.3. Equações

3.3.1. Equações para ajuste da curva de retenção de água no solo

A retenção de água no solo é descrita matematicamente através de equações onde o conteúdo de água no solo é dado em função da sucção matricial (h) ou potencial matricial da água no poro ($\Psi=-h$). Embora diversos modelos tenham sido propostos na literatura, nós discutiremos apenas os modelos inseridos no pacote *soilphysics* (Tabela1), com exceção dos modelos Ross et al. (1991) e Silva et al. (1994), os quais estão detalhados em Lima et al. (2016).

3.3.1.1 Modelo van Genuchten (1980)

Uma das funções mais comumente usadas para descrever a CRA é o modelo uni-modal proposto por van Genhuchten (1980), no qual o conteúdo de água no solo (θ) é relacionado ao potencial matricial (ψ) através de duas variáveis empíricas (n e α), que representam o parâmetro de distribuição de diâmetro dos poros e um fator de escala, respectivamente (MORET-FERNÁNDE; LATORRE, 2017). Este modelo é representado pela equação 1:

$$w = (\theta_{sat} - \theta_{res})[1 + (\alpha h)^n]^{-m} + \theta_{res} \quad (1)$$

Onde, θ_{sat} e θ_{res} são o conteúdo de água na saturação e conteúdo de água residual, respectivamente, h (hPa) representa a sucção matricial da água no solo, α (hPa)⁻¹ é a pressão de ar recíproca, a qual é característica para cada solo e n e m são parâmetros que descrevem a forma da curva.

3.3.1.2 Modelo Dexter et al. (2008)

O modelo duplo-exponencial proposto por Dexter et al. (2008) é adequado para solos que apresentam distribuição de poros bimodal e é representado pela equação 2:

$$w = C + A_1 \exp \exp \left(\frac{-Pa}{P_1} \right) + A_2 \exp \exp \left(\frac{-Pa}{P_2} \right) \quad (2)$$

Onde, C representa o conteúdo de água residual no solo; A_1 e A_2 descrevem o conteúdo de água na porosidade textural (espaço poroso entre as partículas individuais minerais) e na porosidade estrutural (espaço poroso entre microagregados), respectivamente. Pa é a pressão de ar aplicada e P_1 e P_2 são as pressões de ar características aplicadas para esvaziar o espaço poroso textural e estrutural, respectivamente.

3.3.1.3 Modelo Groenevelt and Grant (2004)

A equação desenvolvida por Groenevelt e Grant (2004) foi proposta para o ajuste a curva de retenção de água completa, ou seja, desde o conteúdo de água na saturação à condição de solo seco em estufa. O modelo é representado pela equação 3:

$$w = \left[\exp \left(\frac{-k_0}{(pF_0)^n} \right) - \exp \left(\frac{-k_0}{(pF)^n} \right) \right] \quad (3)$$

Neste caso, a curva de retenção de água é dada por $w=f(pF)$. Onde, $pF = \log h$ e h está em hPa. O valor de pF_0 corresponde ao valor no qual o conteúdo de água no solo torna-se zero. k_1 , k_0 e n são os parâmetros de ajuste da equação.

Apesar de ser considerada indisponível às plantas, estudos visando quantificar a água na porção mais seca da curva de retenção (abaixo do conteúdo de água residual) tornam-se importantes, uma vez que, a água nestas condições pode ser determinante na regulação de processos bioquímicos microbianos no solo e mineralização do N (De Neve e Hofman (2002), na oxidação de CH₄ (De Visscher e Van Cleemput (2003), na reindução da tolerância à dessecação de sementes germinadas e plântulas quando submetidas a elevado

potencial matricial ($\Psi_m > 1.500$ kPa) (RODRIGUES, 2010), além de apresentar diversas aplicações em estudos coloidais (BLUNT, 2001).

3.3.2 Ponto de corte hidráulico

Em estudo recente, Dexter et al. (2012) discutiram a ocorrência de um ponto de corte hidráulico que pode ocorrer em valores de $h < 15,000$ hPa. Definindo o ponto de corte hidráulico como ponto onde cessa o fluxo de água mesmo sob gradiente de pressão. Neste ponto, a condutividade hidráulica do solo torna-se suficientemente pequena de tal forma que o fluxo de água possa ser considerado desprezível (GROENEVELT et al., 2001; DEXTER et al., 2012). Czyż e Dexter (2012) concluíram que a ausência de fluxo no meio poroso poderia ser a explicação para as descobertas de Briggs e Shantz (1912) e Veihmeyer e Hendrickson (1928) sobre o ponto de murcha permanente, os quais sugeriram que plantas de diferentes espécies tendem ao murchamento em valores similares de conteúdo de água sob um mesmo solo. Isso ocorreria devido à forte redução do fluxo de água devido ao ponto de corte hidráulico, que é uma propriedade específica do solo (Czyż e Dexter, 2012), dependente da textura.

Dexter et al. (2012) sugeriram dois métodos para o cálculo do valor de sucção no ponto de corte hidráulico. Ambos relacionados à presença do conteúdo de água residual no solo, que representa a água isolada em “micro pacotes” não drenáveis devido a não continuidade de poros preenchidos por água. O primeiro método baseia-se na determinação do ponto de máxima curvatura da CRA ajustada ao modelo duplo-exponencial (DE).

O segundo método está baseado na determinação do valor de sucção matricial correspondente ao início do regime de água residual, calculado a partir da substituição do valor C (conteúdo de água residual) da equação duplo exponencial proposta por Dexter et al. (2008) na forma invertida da equação proposta por Groenevelt e Grant (2004), conforme descrito na equação 4:

$$pF_{ch} = \left[\left(\frac{1}{n} \right) \left\{ \frac{-k_0}{\left[\left(\frac{-k_0}{(pF)^n} \right) - \frac{C}{k_1} \right]} \right\} \right] \quad (4)$$

Onde, pF_{ch} é o valor de sucção matricial no ponto de corte hidráulico, C é o conteúdo de água residual (a partir do modelo de Dexter et al. (2008)), k_1 , k_0 e n são os parâmetros de ajuste da equação proposta no modelo de Groenevelt e Grant (2004).

3.3.3. Distribuição do diâmetro dos poros

A água no solo governada por forças capilares pode ser descrita pela equação de Young-Laplace, a qual indica que a retenção da água no solo é uma função da distribuição do diâmetro dos poros, e pode ser representada pela relação aproximada:

$$d = \left(-\frac{3000}{h} \right) \quad (5)$$

Onde, d é o diâmetro do poro equivalente (μm) e h é altura de ascensão capilar equivalente ao potencial matricial (cm). A equação 5 deriva da equação de ascensão capilar baseada na equação de Young-Laplace.

A distribuição do diâmetro dos poros pode ser derivada da curva de retenção de água no solo. Para tal, a curva de retenção de água medida $\theta=f(\Psi)$ deve ser convertida a uma curva equivalente $\theta=f(d)$, onde d é o diâmetro do poro preenchido por água de acordo com a equação de Young-Laplace e assumindo uma configuração paralela de poros cilíndricos. A derivada desta curva promove uma estimativa da distribuição do diâmetro dos poros.

Antes de converter os pontos experimentais da CRA em uma distribuição do diâmetro dos poros, um modelo matemático é ajustado, o que permite uma interpolação entre os pontos experimentais.

3.3.4 Índice S

Em uma série de artigos Dexter (2004a, 2004b, 2004c) propõe um parâmetro para avaliação da qualidade física do solo, denominado índice S (S de “slope” = declividade). Este índice é definido como o coeficiente angular da reta tangente à curva de retenção de água em seu ponto de inflexão. O índice S é fácil de calcular, representa a distribuição a distribuição do tamanho de poros de maior frequência no solo e possibilita a comparação direta de diferentes solos e dos efeitos de diferentes práticas de manejo na qualidade física do solo.

O cálculo do índice S é feito a partir da equação 6, tendo sido previamente realizado ajuste dos dados experimentais ao modelo de van Genuchten (1980):

$$S = -n(\theta_s - \theta_r) \left(1 + \frac{1}{m}\right)^{-(1+m)} \quad (6)$$

Onde, θ_s , θ_r , m e n são parâmetros da equação de van Genuchten (1980).

Tem sido indicado que o limite entre solos com boa e pobre qualidade estrutural ocorre no valor aproximado de $S = 0,035$, valores de $S < 0,020$ estão claramente associados às más condições físicas do solo (DEXTER, 2004a).

3.3.5 Condutividade hidráulica

A condutividade hidráulica do solo é uma propriedade que expressa a facilidade com que a água nele se movimenta, a velocidade de transporte da água do solo em direção às raízes (BODNER et al 2015). Sendo de extrema importância ao uso agrícola e, conseqüentemente, à produção das culturas e à preservação do solo e do ambiente. (GONÇALVES e LIBARDI, 2013).

Uma alternativa comum para medida direta é usar modelos teóricos que prever $K(h)$ a partir do teor de água, medido com mais facilidade relação $q(h)$. Dois modelos desse tipo são os de Burdine (1953) e Mualem (1976) foram usados por vários autores para obter expressões analíticas de $K(h)$.

3.4. Exemplos

Considerando as equações apresentadas, algumas funções do pacote *soilphysics* serão exemplificadas com dados dos autores.

3.4.1 Ajuste da curva de retenção e água no solo

O conjunto de dados de retenção de água no solo (conteúdo de água e sucção matricial) apresentado na Tabela 2 será usado como exemplo.

Tabela 2. Dados de conteúdo de água no solo (w) e seu respectivo valor de sucção matricial (h).

h	10	20	40	60	80	100	250	500	1000	5000	15000
-----	----	----	----	----	----	-----	-----	-----	------	------	-------

w	0.316	0.288	0.276	0.228	0.194	0.186	0.154	0.140	0.124	0.104	0.079
---	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------

h e w estão em unidades de hPa e kg kg^{-1} , respectivamente.

Os dados podem ser inseridos via console do R ou a partir de um arquivo .csv (comma separated value). No console do R, os dados devem ser inseridos como dois vetores: um contendo os dados de conteúdo de água no solo (w) e outro contendo os dados de potencial matricial (h):

```
>w=c(0.316,0.288,0.276,0.228,0.194,0.186,0.154,0.14,0.124,0.104,0.079)
```

```
>h=c(10,20,40,60,80,100,250,500,1000,5000,15000)
```

Os dados originalmente preparados em uma planilha e exportados como texto “comma separated value”(csv) podem ser inseridos via `read.csv()`:

```
>data=read.csv("Dados.csv",header = T,sep = ";",fill = T)
```

Onde, `Dados.csv` é o nome da planilha, `header = T` indica que a identificação das colunas estão na primeira linha da planilha, `sep = ";"` significa que os campos estão separados por “;” e `fill = T` indica o valor lógico *TRUE* para o caso de linhas com número de dados desigual, onde campos em branco serão adicionados.

Em seguida, podemos usar as funções de ajuste da curva de retenção de água no solo disponíveis no pacote (Tabela 1). Por exemplo, usando a função `fitsoilwater()` para calcular os parâmetros de ajuste da curva de retenção de água no solo segundo o modelo de van Genuchten (1980), tal como:

```
> fitsoilwater(w,h)
```

O output gráfico da função `fitsoilwater()` está representado na figura 1. O usuário tem a possibilidade de definir os parâmetros iniciais do modelo, de acordo com a distribuição dos dados a partir de um painel interativo (*interactive fit*) (Figura 1A). A função descrita a partir dos parâmetros iniciais definidos no painel interativo é representada por uma linha vermelha no gráfico de distribuição dos dados (Figura 1 B).

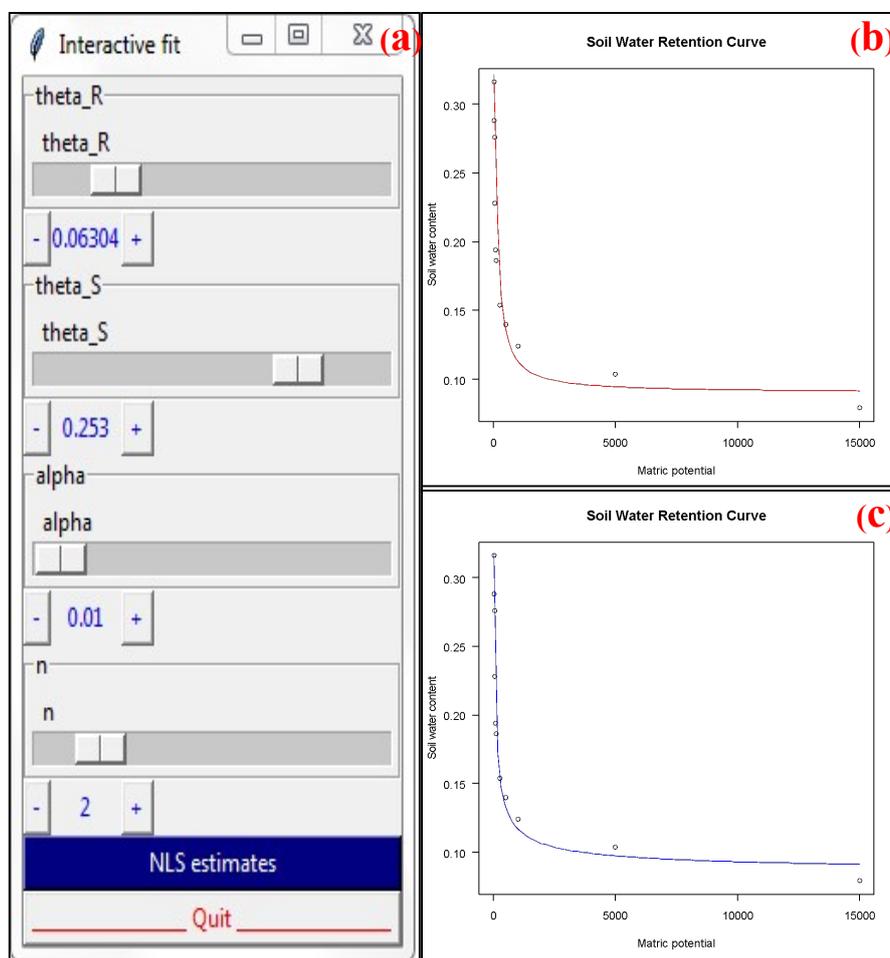


Figura 1. Painel interativo (Interactive fit) para a definição dos parâmetros iniciais da função (a) e output gráfico da função *fitsoilwater()* a partir dos dados da Tabela 2, onde a linha vermelha representa a função descrita a partir dos parâmetros iniciais (b) e a linha azul representa a função ajustada (c).

A análise dos mínimos quadrados não lineares usada para ajustar a função pode ser obtida com um click no botão *NLS estimates* no painel interativo. Uma vez que o conjunto de dados foi ajustado ao modelo, este é representado por uma linha azul no gráfico de distribuição dos dados (Figura 1C). A estimativa dos parâmetros de ajuste da função e o respectivo resumo estatístico são mostrados no console do R:

```
Formula: theta ~ soilwater(x, theta_R, theta_S, alpha, n)
Parameters:
      Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
theta_R  0.08356   0.01615   5.174  0.00129 **
theta_S  0.33627   0.02331  14.428 1.83e-06 ***
alpha    0.03988   0.01966   2.029  0.08208 .
n        1.55126   0.17149   9.046  4.13e-05 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
Residual standard error: 0.0132 on 7 degrees of freedom
Number of iterations to convergence: 11
Achieved convergence tolerance: 6.866e-06
$pseudo.R.squared
[1] 0.980459
$adj.R.squared
[1] 0.9720843
```

```
attr("class")
[1] "Rsq"
```

Para cada função de ajuste da CRA (*fitsoilwater*, *fitsoilwater2*, *fitsoilwater3*, *fitsoilwater4*) existe um comando respectivo (*soilwater*, *soilwater2*, *soilwater3*, *soilwater4*) para determinar o conteúdo de água, a partir dos parâmetros do modelo obtido, associado à diferentes valores de sucção matricial. Para isto, deve ser inserido um vetor contendo as informações de sucção matricial, assim como, os valores dos parâmetros de ajuste da função, tal como:

```
>soilwater(x = c(10, 20, 40, 60, 80, 100, 250,500, 1000, 5000,15000),
theta_R = 0.08356, theta_S = 0.33627, alpha = 0.03988, n = 1.55126)
```

O resultado da execução do comando *soilwater()* é:

```
[1] 0.31765517 0.29266114 0.25331995 0.22753268 0.20981733 0.19689865 [7]
0.15399439 0.13193893 0.11664900 0.09720062 0.09100476
```

3.4.2 Distribuição do diâmetro dos poros

A distribuição do diâmetro dos poros do solo com base no modelo de van Genuchten (distribuição unimodal) pode ser calculada pela função *psd()*:

```
>y <- psd(thetaR = 0.154,thetaS = 0.600, alpha = 0.103, n = 2.365,h=h)
>plot(x=h,y=y, log="x", xlab="h (hPa)",
>y lab=expression(delta*theta/delta*h), ylim=c(0,0.03))
>ax <- c(1,10,100,1000,10000)
>radius <- r(h=ax)
>axis(3,at=ax, labels=round(radius,2))
>mtext("Equivalent pore radius"~(mu*m),3,line=2.5, cex=0.9)
```

Após executar o comando acima, a representação gráfica da distribuição do tamanho dos poros do solo representada por $d\theta/dh$ em função da sucção matricial (h) será plotada conforme a figura 2.

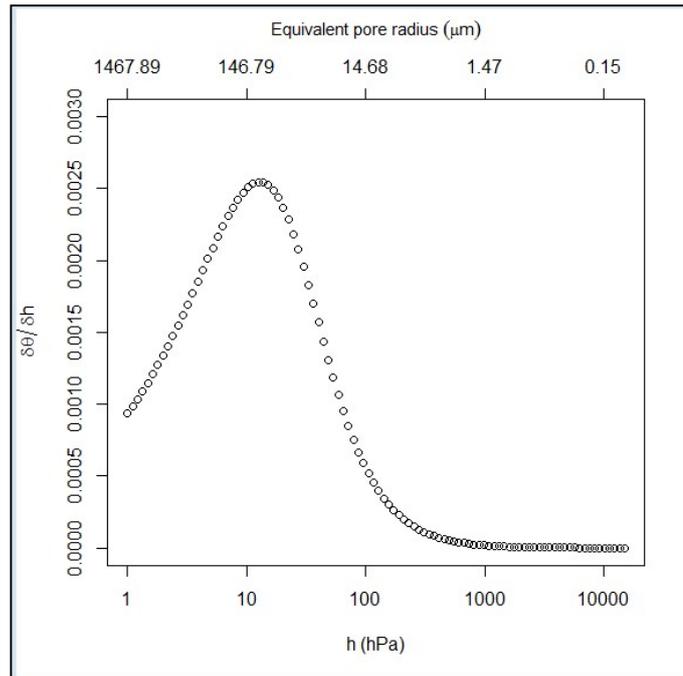


Figura 2. Output da função *psd()*: representação gráfica da distribuição do diâmetro de poros unimodal a partir do modelo de van Genuchten (1980) em função da sucção matricial com a representação do raio do poro equivalente (μm).

3.4.3 Índice S

O cálculo do índice de qualidade física e estrutural S proposto por Dexter (2004, a,b,c) pode ser realizado a partir da função *Sindex()*, de acordo com o seguinte comando :

```
>Sindex(0.082943, 0.337467, 0.039558, 1.544481, xlim = c(0, 15000))
```

Após executar o comando acima, o valor do conteúdo de água (*theta_i*) e sucção matricial (*h_i*) no ponto de inflexão da CRA, assim como, o valor do índice S (em módulo) e a classificação de qualidade do solo serão apresentados no console do R, assim como, um gráfico com o indicativo dos limites:

```
The S Index

h_i : 49.6522
theta_i : 0.2414
|S| : 0.0638
Soil physical quality : Very good
```

3.4.4 Condutividade hidráulica

Cálculo da condutividade hidráulica não saturada em função da tensão da água no solo com base na curva de retenção de água no modelo de van Genuchten (1980) é conforme o script:

```
#Solo Sandy Clay
>K.h(Ks = 4.80*10^-1, alpha = 0.040, n = 1.55,h=100)
```

O resultado é um valor numérico da condutividade hidráulica não saturada:

```
[1] 0.0004737584
```

É possível alterar o script para mostrar um gráfico em função do potencial alterando

o script:

```
>x <- seq(log10(1), log10(15000),len=100)
>h <- 10^x
>y <- K.h(Ks = 4.80*10^-1, alpha = 0.040, n = 1.5,h=h)
>plot(x=h,y=y, log="yx", xlab="h (hPa)", yaxt='n', ylab="",
ylim=c(0.001,1))
>mtext(expression(K[s] ~ (cm~d^-1)), 2, line=2)
>ax <- c(0.001, 0.01, 0.1, 1, 10, 100)
>axis(2,at=ax, labels=ax)
```

E gerar um gráfico da figura 3

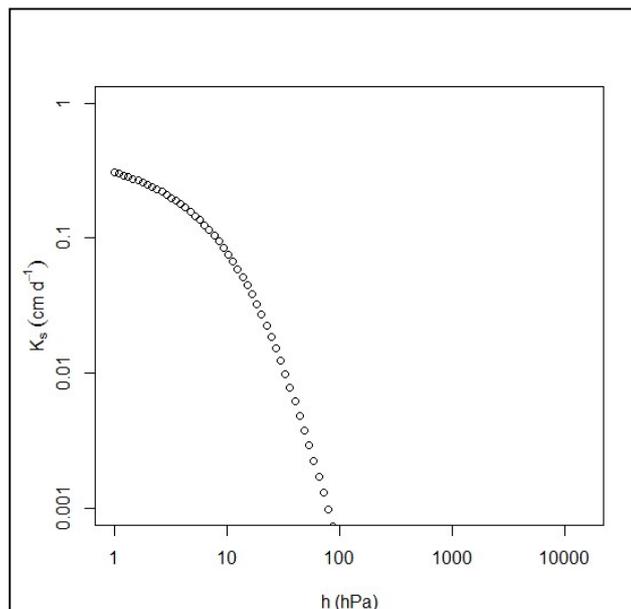
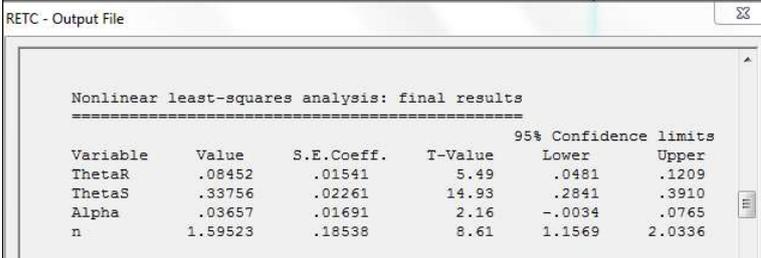


Figura 3. Curva da condutividade hidráulica do solo não saturado em função da tensão da água no modelo de van Genuchten (1980).

No valor de 100 hPa (figura 3) da sucção matricial a condutividade hidráulica do solo não saturado, tornou-se suficientemente baixa para restringir os fluxos de água no solo.

3.5. Resultados e comparações

Comparamos os resultados do cálculo dos parâmetros de ajuste da curva de retenção de água no solo segundo o modelo de van Genuchten (1980) função *fitsoilwater()* do pacote do R *soilphysics* (figura 1) com os obtidos com o *RETC* (figura 4).



Variable	Value	S.E.Coeff.	T-Value	95% Confidence limits	
				Lower	Upper
ThetaR	.08452	.01541	5.49	.0481	.1209
ThetaS	.33756	.02261	14.93	.2841	.3910
Alpha	.03657	.01691	2.16	-.0034	.0765
n	1.59523	.18538	8.61	1.1569	2.0336

Figura 4. Parte da execução do programa RETC com o resultado do cálculo dos parâmetros da curva de retenção de água encontrados para o modelo de van Genuchten (1980).

O resultado da comparação dos programas está na tabela 3.

Tabela 3. Resultado da execução do cálculo dos parâmetros da curva de retenção de água no solo obtidos pelos programas *soilphysics* e *RETC* no modelo de van Genuchten (1980).

Programas	Parâmetros no modelo de van Genuchten			
	Theta_R	Theta_S	Alpha	n
soilphysics	0.08356	0.33627	0.03988	1.55126
RETC	0.08452	0.33756	0.03657	1.59523

Os dados usados para encontrar os parâmetros da tabela 3 são os da tabela 2 para os dois programas. Constatou-se que ambos os programas promoveram os mesmos valores, com diferenças insignificantes.

3.6. Considerações finais

Com o pacote *soiphysics* do programa R é possível executar vários cálculos para encontrar a qualidade física do solo, como os que foram exemplificados no artigo, *fitsoilwater()*, *soilwater()*, *K.h()*, *psd()*, *Sindex()* e *hydraulicCutOff()*. Destaca-se que para a área de física do solo o *soiphysics* é o pacote mais completo.

Verificou-se que o resultado da execução da função que calcula os parâmetros de van Genuchten (1980) no *soiphysics* forneceu o mesmo resultado para os mesmos dados encontrado no programa RETC, a grande diferença entre os dois é que no R o código é aberto, dando liberdade para se alterar e distribuir. Proporcionando a disseminação e a reprodutibilidade.

A funcionalidade apresentada vai ajudar a popularizar as funções que tratam de índices de água disponíveis na planta na agricultura e na ciência do solo.

REFERÊNCIAS

- BISHWAL, R. M. Potential use of R-statistical programming in the field of geoscience. 2nd International Conference for Convergence in Technology (I2CT), 2017.
- BLUNT, M.J. Flow in porous media — pore-network models and multiphase flow. *Curr. Opin. Colloid Interface Sci.*, 6 (3), pp. 197-207, 2001.
- BODNER, G.; NAKHFOROOSH, A.; KAUL, H. Management of crop water under drought: a review. *Agronomy for Sustainable Development*, 2015.
- BROOKS, R.H., Corey A.T. Hydraulic properties of porous medium. Hydrology Paper Number 3. Colorado State University, USA, 1964.
- BRIGGS, L.J.; SHANTZ, H.L. The Wilting Coefficient for Different Plants and Its Indirect Determination. USDA. Bureau of Plant Industry Bull. N° 230. Government Printing Office, Washing DC, 83, 1912.
- BURDINE, N.T.. Relative permeability calculation from size distribution data. *Trans. AIME*, 198:71-78. <http://dx.doi.org/10.2118/225-g>, 1953.
- CZYŻ, E.A; DEXTER, A.R. Plant wilting can be caused either by the plant or by the soil. *Soil Research*, Wellington v. 50, p.708-713, 2012.

DE NEVE, S.; HOFMAN, G. Quantifying soil water effects on nitrogen mineralization from soil organic matter and from fresh crop residues. *Biol Fertil Soils* 35, 379–386, doi:10.1007/s00374-002-0483-3, 2002.

DE VISSCHER, A.; VAN CLEEMPUT, O. Simulation model for gas diffusion and methane oxidation in landfill cover soils. *Waste Management*, 23(7), 581–591, 2003.

DEXTER, A. R. Soil physical quality: Part I. Theory, effects of soil texture, density, and organic matter, and effects on root growth. *Geoderma*, v.120, p.201-214, <http://dx.doi.org/10.1016/j.geoderma.2003.09.004>; 2004a.

DEXTER, A. R. Soil physical quality: Part II. Friability, tillage, tith and hard-setting. *Geoderma*, v.120, p.215-225, <http://dx.doi.org/10.1016/j.geoderma.2003.09.005>; 2004b.

DEXTER, A. R. Soil physical quality: Part III. Unsaturated hydraulic conductivity and general conclusions about S-theory. *Geoderma*, v.120, p.227-239, <http://dx.doi.org/10.1016/j.geoderma.2003.09.004>, [10.1016/j.geoderma.2003.09.005](http://dx.doi.org/10.1016/j.geoderma.2003.09.005); 2004c.

DEXTER, A.R.; CZYŻ, E.A.; RICHARD, G.; RESZKOWSKA, A. A user-friendly water retention function that takes account of the textural and structural pore spaces in soil. *Geoderma*. 143(3), 243-253. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2007.11.010>, 2008.

DEXTER, A.R.; CZYŻ, E.A.; RICHARD. Equilibrium, non-equilibrium and residual water: Consequences for soil water retention. *Geoderma*, 63–71 doi:10.1016/j.geoderma.2012.01.029, 2012.

DOURADO NETO, D.; NIELSEN, D.R.; HOPMANS, J. W.; REICHARDT, K.; BACCHI, O.O.S. Software to model soil water retention curves (SWRC, version 2.00). *Sci. agric.* vol.57 n.1 Piracicaba. [//dx.doi.org/10.1590/S010390162000000100031](http://dx.doi.org/10.1590/S010390162000000100031), , 2000.

Fredlund, D.G., Xing, A., 1994. Equations for the soil-water characteristic curve. *Can.*

Geotech. J. 31(4), 521-532. <https://doi.org/10.1139/t94-061>.

GONÇALVES, A. D. M. A; LIBARDI, P. L. Análise da determinação da condutividade hidráulica do solo pelo método do perfil instantâneo. *Revista Brasileira de Ciência do Solo*, 2013.

GROENEVELT, P.H.; GRANT, C.D. A new model for the soil-water retention curve that solves the problem of residual water contents. *Eur J. Soil Sci.* 55,479-485. <https://doi.org/10.1111/j.1365-2389.2004.00617.x>, 2004.

GROENEVELT, P.H.; GRANT, C.D.; SEMETSA, S. A new procedure to determine soil water availability. *Australian Journal Soil Research*, 39:577—598, 2001.

Haghverdia, A.; Öztürkb, H. S.; Durnerc, W., 2018. Measurement and estimation of the soil water retention curve using the evaporation method and the pseudo continuous pedotransfer function. *Journal of Hydrology V.563*, P.251–259.

Jensen, D. K.; Tuller, M.; Jonge, L. W., Arthur, E.; Moldrup, P., 2015. A New Two-Stage Approach to predicting the soil water characteristic from saturation to oven-dryness. *Journal of Hydrology, Amsterdam, V. 521*, P.498–507.

Kosugi, K., 1996. Lognormal distribution model for unsaturated soil hydraulic properties. *Water Resour. Res.* 32(9), 2697-2703. <https://doi.org/10.1029/96WR01776>.

LIMA, R.P., SILVA, A.R., SILVA, A.P., LEÃO, T.P., MOSADDEGHI, M.R. soilphysics: An R package for calculating soil water availability to plants by different soil physical indices. *Comput. Electron. Agric.* 120, 63-71. <http://dx.doi.org/10.1016/j.compag.2015.11.003>, 2016.

MORET-FERNÁNDEZ, D., LATORRE, B. Estimate of the soil water retention curve from the sorptivity and β parameter calculated from an upward infiltration experiment. *J. Hydrol.* <http://dx.doi.org/10.1016/j.jhydrol.2016.11.035>, 2017.

MUALEM, Y. A New Model for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Porous Media. *Water Resour. Res.* 12(3), 513-522. <https://doi.org/10.1029/WR012i003p00513>, 1976.

OMUTO, C.T.; GUMBE, L.O. Estimating water infiltration and retention characteristics using a Computer program in R. *Comput. Geosci.* 35, 579-585. <http://dx.doi.org/10.1016/j.cageo.2008.08.011>, 2009.

PENG, R.D. R programming for Data Science. Leanpulo books. ISBN/ASIN:n/a, 2015.

PENG, R.D. Reproducible Research in Computational Science. 334, 1226-1227. doi: 10.1126/science.1213847, , 2011.

RABOT, E. M.; WIESMEIERB, M.; SCHLÜTERA, S.; VOGELA H.-J. Soil structure as an indicator of soil functions: A review. *Geoderma*. 314, 122-137. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2017.11.009>, 2018.

RODRIGUES, A.C. Germinação e reindução da tolerância à dessecação em sementes de *Bauhinia forficata* LINK (FABACEAE). Lavras, Universidade Federal de Lavras, 2010. 64p. (Dissertação de Mestrado)

ROSS, P.J. WILLIAMS, J., BRISTOW, K.L. Equation for Extending Water-Retention Curves to Dryness. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 55(4), 923-927. <https://doi.org/10.2136/sssaj1991.03615995005500040004x>, 1991.

SANDVE, G. K.; NEKRUTENKO, A.; TAYLOR, J.; HOVIG, E. Ten Simple Rules for Reproducible Computational Research. *PLoS Comput Biol* 9(10), e1003285. doi:10.1371/journal.pcbi.1003285, 2013.

SEKI, K. SWRC fit - a nonlinear fitting program with a water retention curve for soils having unimodal and bimodal pore structure. *Hydrol. Earth Syst. Sci. Discuss.*, 4: 407-437. doi:10.5194/hessd-4-407-2007, , 2007.

SILVA, A.P., KAY, B.D., PERFECT, E. Characterization of the least limiting water range of soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 58(60), 1775-1781. <https://doi.org/10.2136/sssaj1994.03615995005800060028x>, 1994.

SILVA, A.R., LIMA, R.P. Package soilphysics: Soil Physical Analysis R package version 3.1 available from: <https://cran.r-project.org/web/packages/soilphysics/soilphysics.pdf> (acessado em 04 de dezembro de 2019), , 2017.

SILVA, A.R., LIMA, R.P. soilphysics: An R Package to determine soil preconsolidation pressure. *Comput. Geosci.* 84, 54-60. <https://doi.org/10.1016/j.cageo.2015.08.008>, ; 2015.

SILVA, A.R.; LIMA, R.P. Determination of maximum curvature point with the R package Soilphysics. *Int. J. Curr. Res.* 9(1), 45241-45245, , 2017.

SOUSA, D.F.; RODRIGUES, S; LIMA, H.V.; TORRES, L.C. R software packages as a tool for evaluating soil physical and hydraulic properties. *Comput. Electron. Agric.* 168. <https://doi.org/10.1016/j.compag.2019.105077>, 2020.

VIEIHMEYER, F.J.; HENDRICKSON, A.H. Soil moisture at permanent wilting of plants. *Plant Physiology*, Minneapolis, v.3, p.355-357, 1928.

VAN GENUCHTEN, M.Th. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 44(5), 892-898. <https://doi.org/10.2136/sssaj1980.03615995004400050002x>, 1980.

VAN GENUCHTEN, M.Th.; LEIJ, F.J.; YATES, S.R. The RETC Code for Quantifying the Hydraulic Functions of Unsaturated Soils, Version 1.0. EPA Report 600/2-91/065, U.S. Salinity Laboratory, USDA, ARS, Riverside, California, 1991.

4. CARTILHA DO PROGRAMA R PARA FÍSICA DO SOLO

4.1. O R e suas características.

O R é uma linguagem para análise estatística de código aberto e foi desenvolvido por Ross Ihaka e Robert Gentleman, do Departamento de Estatística da Universidade de Auckland que, em 1993, o tornaram público. É baseado na linguagem estatística e comercial S_Plus (Peng, 2015).

O R está disponível para aquisição gratuita em um ambiente computacional que recebe contribuições de pesquisadores e especialistas em vários campos da ciência, podendo ser redistribuído e/ou modificado continuamente. Um dos objetivos desse programa é encorajar que usuários desenvolvam suas próprias programações.

As funções programadas são armazenadas em “pacotes”, portanto, pacotes são bibliotecas com funções. Inúmeros pacotes estão disponíveis no R para as mais diversas áreas, a cada pacote é atribuído um nome e o mesmo fica disponível para *download* e instalação na CRAN (Comprehensive R Archive Network) e outros repositórios. Existem milhares de pacotes disponibilizados por vários autores nas mais diversas áreas. A lista de pacotes sempre é atualizada quando recebe novas contribuições e todos os pacotes são acompanhados de tutorial com resumo das informações e exemplos de uso.

A emergência no uso de programas livres, como o R, é fidedigna e tem aumentado nos últimos anos, pois, além de incentivar o desenvolvimento de novas ferramentas estatísticas, também contribui para o combate à pirataria de programas não livres. Programas como o R, especializados em ambiente integrado de programação, teste, depuração e execução, estão disponíveis, permitindo aos usuários resolver problemas matemáticos que vão desde operações algébricas simples a complexas envolvendo, por exemplo, integração, diferenciação e ajuste de curvas não lineares.

A disponibilidade destas ferramentas pode criar uma oportunidade para os usuários aperfeiçoarem a maneira como a área da Física do Solo é explorada, ampliando o uso da modelagem matemática na interpretação dos fenômenos de interesse e o desenvolvimento da análise crítica para escolha e uso criterioso dos modelos.

A amplitude de pacotes disponíveis é uma das principais vantagens do R. Atualmente o R dispõe de mais de 12.700 pacotes acessíveis a partir de múltiplos

repositórios. Porém, essa magnitude de opções faz com que muitos usuários não conheçam os pacotes específicos disponíveis para sua área de interesse.

Apesar dos pacotes desenvolvidos e disponibilizados virem acompanhados de manuais para consulta, estes, muitas vezes, fornecem explicações e exemplos muito gerais, por vezes, de difícil interpretação. Poucos são os trabalhos na literatura que apresentam e exploram mais minuciosamente as opções de uso dos pacotes.

4.1.2 Começar a usar o R

O R trabalha com linha de comandos em praticamente todas as plataformas disponíveis, incluindo os sistemas *Windows*, *Mac OS X* e *Linux*.

Em particular, iremos nos referir ocasionalmente ao uso de R em um sistema *Windows*, embora a maior parte do que é dito se aplique geralmente a qualquer sistema operacional.

Para instalar é necessário acessar página, R PROJECT (<https://www.r-project.org/>), onde encontra-se os pacotes, tutoriais e arquivos de instalação. Em seguida Clique em CRAN (Comprehensive R Archive Network).

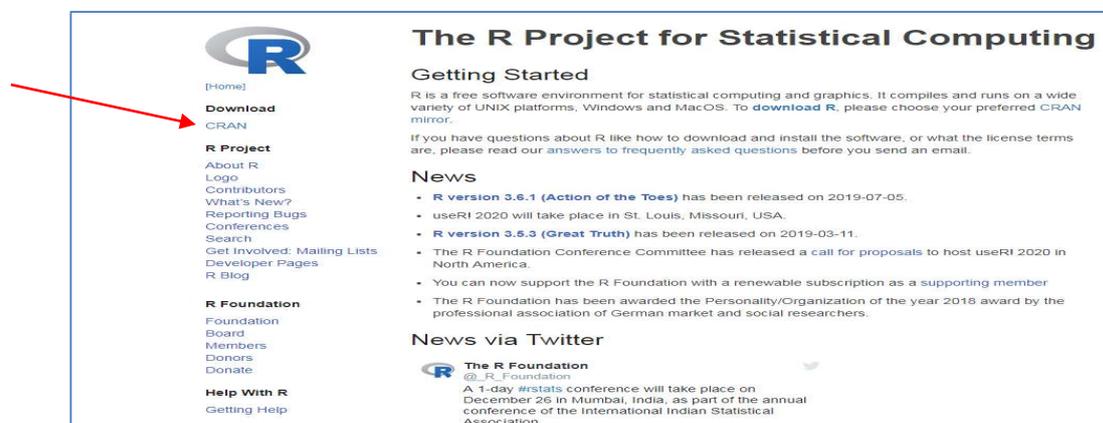


Figura 1. Página do R PROJECT onde se encontra os pacotes, tutoriais e arquivos de instalação.

Após o Clique em CRAN (Comprehensive R Archive Network).

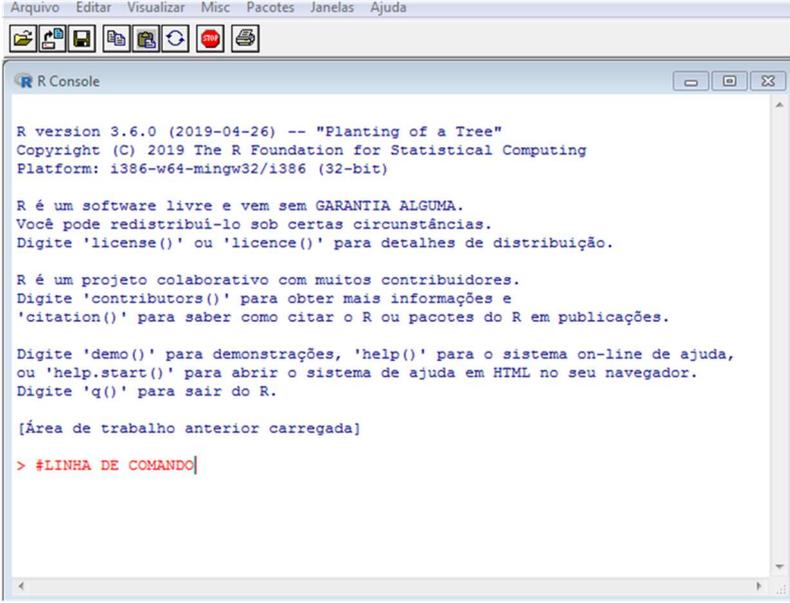
Brazil	
http://nbcgib.uesc.br/mirrors/cran/	Computational Biology Center at Universidade Estadual de Santa Cruz
https://cran-r.c3sl.ufpr.br/	Universidade Federal do Parana
http://cran-r.c3sl.ufpr.br/	Universidade Federal do Parana
https://cran.fiocruz.br/	Oswaldo Cruz Foundation, Rio de Janeiro
http://cran.fiocruz.br/	Oswaldo Cruz Foundation, Rio de Janeiro
https://vps.fmvz.usp.br/CRAN/	University of Sao Paulo, Sao Paulo
http://vps.fmvz.usp.br/CRAN/	University of Sao Paulo, Sao Paulo
https://brieger.esalq.usp.br/CRAN/	University of Sao Paulo, Piracicaba
http://brieger.esalq.usp.br/CRAN/	University of Sao Paulo, Piracicaba

Figura 2. Opções na CRAN (*Comprehensive R Archive Network*) para o Brasil.

A escolha do espelho onde se encontra o R é pessoal, após a escolha instale o R para o Sistema Operacional que vai utilizar: *Windows*, *Mac OS X* ou *Linux*.

4.1.3. Opções do R e o RStudio

Ao instalar o R, conforme o item 2, é necessário iniciar. Há duas opções de uso, uma usando a estação de trabalho para executar um sistema de janelas (Figura 3) e a outra em um ambiente de desenvolvimento integrado disponível para o R que é construído pelo R Studio (Figura 4).



```

Arquivo  Editar  Visualizar  Misc  Pacotes  Janelas  Ajuda
R Console
R version 3.6.0 (2019-04-26) -- "Planting of a Tree"
Copyright (C) 2019 The R Foundation for Statistical Computing
Platform: i386-w64-mingw32/i386 (32-bit)

R é um software livre e vem sem GARANTIA ALGUMA.
Você pode redistribuí-lo sob certas circunstâncias.
Digite 'license()' ou 'licence()' para detalhes de distribuição.

R é um projeto colaborativo com muitos contribuidores.
Digite 'contributors()' para obter mais informações e
'citation()' para saber como citar o R ou pacotes do R em publicações.

Digite 'demo()' para demonstrações, 'help()' para o sistema on-line de ajuda,
ou 'help.start()' para abrir o sistema de ajuda em HTML no seu navegador.
Digite 'q()' para sair do R.

[Área de trabalho anterior carregada]

> #LINHA DE COMANDO|

```

Figura 3. R pronto para ser usado

O símbolo > indica a linha de comando, é o *prompt* do R indicando que está pronto para receber comandos e o # é comentários e ignorado pelo R. Para utilizar o ambiente integrado do R Studio (Figura 4) é necessário instalar em <https://www.rstudio.com/>.

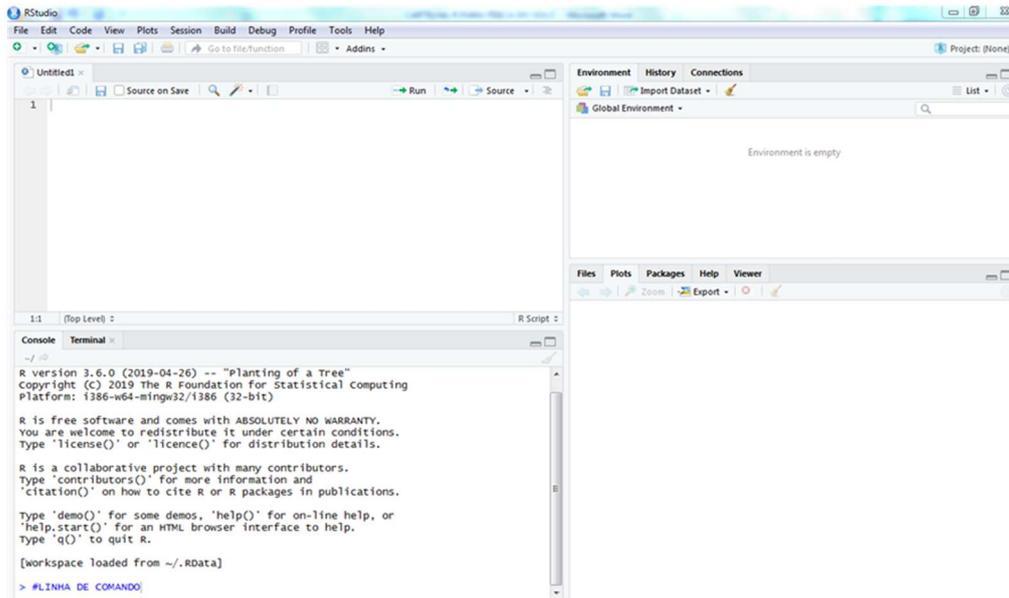


Figura 4. Outra opção para usar o R

Na *Integrated Development Environment* (IDE) da Figura 4 existe uma série de recursos que estão integrados.

4.1.4 Instalação e uso dos pacotes

Após instalar o R é necessário instalar os pacotes que serão usados. Na janela de comandos há o símbolo “>”, o *prompt* do R indicando que o programa está pronto para receber comandos. O sinal “+” indica que está faltando comando.

O R é *case-sensitive*, isto é, ele diferencia letras maiúsculas de minúsculas.

É possível instalar o R pela linha de comando ou na opção do menu Pacotes + Instalar pacotes.

```
> install.packages("soilphysics")
```

É necessário escolher o espelho na Figura 5, sendo pessoal.



Figura 5. Espelho, local para fazer o *download* do programa.

Após instalar é necessário “carregar” o pacote sempre que “abrir” e for usar o pacote digitando o comando ou na opção do menu Pacotes + Carregar pacotes ou digitando o script:

```
> library("soilphysics")
```

Após isso as funcionalidades do pacote *soilphysics* estarão prontas para serem usadas. Lembre-se que sempre que abrir o R será necessário carregar o pacote novamente.

4.1.5. Entrada de dados

A atribuição para uma variável pode ser direta com sinal “<-” ou “=”, conforme o exemplo:

```
> dados <- 3
> dados
[1] 3
> dado = 3
> dados
[1] 3
```

Na primeira linha do *script* a variável *dados* recebe o valor 33, na segunda é pedido para mostrar o conteúdo de *dados* e a terceira mostra o conteúdo. É possível criar um conjunto de valores usando o vetor:

```
> dados=c(33,24,88,70,98,60)
> dados
```

[1] 33 24 88 70 98 60

O símbolo “#” é utilizado para colocar comentários, exemplo:

```
># Dados
```

Ao criarmos uma variável, esta será seguida do símbolo “<-” ou “=”, que indica que as informações passadas no lado direito do símbolo serão gravadas para esta variável, pode ter espaço ou não antes dos símbolos. Como o exemplo: `dados<-c(33,24,88,70,98,60)` ou `dados=c(33,24,88,70,98,60)`, onde é criado um vetor no qual utilizando a função **c()** para indicar que será realizado um agrupamento de dados em forma de vetor.

Pode-se criar o banco de dados em uma planilha, que será explicado na próxima seção.

4.2 Propriedades físico-hídrica do solo

Em estudos e planejamento de irrigação, o solo pode também ser classificado de acordo com sua aptidão para irrigação. Para o manejo da irrigação, é necessário que se conheçam algumas das propriedades físicas e físico-hídricas do solo (Couto e Sans, 2002).

Funções para as principais propriedades físicas e físico-hídricas do solo estão disponíveis no programa R e serão apresentadas.

4.2.1 Textura

Com o pacote `soiltexture` (Soil Texture Wizard R), a partir dos dados dos conteúdos de areia, silte e argila, sendo possível plotar, classificar e transformar os dados em diferentes classes de textura a partir de diversos sistemas de classificação do tamanho das partículas. O pacote também oferece algumas ferramentas para explorar os dados de textura do solo (no sentido de análise visual estatística). As funções permitem plotar triângulos de classificação textural do solo em qualquer geometria triangular (isósceles, triângulos retângulos, etc.).

Mais de 15 triângulos texturais utilizados em todo o mundo estão pré-definidos neste pacote (Moeys, 2018), dentre eles, aquele utilizado pelo Sistema Brasileiro de Classificação de Solos (Santos et al., 2018) e do Manual de descrição e coleta de solo no

campo (Santos et al., 2015). Por exemplo, para obter a classificação textural de um solo com 5% de argila, 5% de silte e 90% de areia utiliza-se os comandos abaixo:

```
#DADOS
> dados = data.frame("CLAY" = c(5), "SILT" = c(5), "SAND" = c(90))
> # Plotar o triângulo - BRASIL: Lemos & Santos (1996)
> TT.plot(class.sys = "BRASIL.TT", tri.data = dados, main="Lemos & Santos
(1996)")
```

Conforme comentado no item 2.2 o R é *case-sensitive*, isto é, ele diferencia letras maiúsculas de minúsculas, se colocar *C(5)* maiúsculo, vai dar erro

O script produz o resultado da Figura 6.

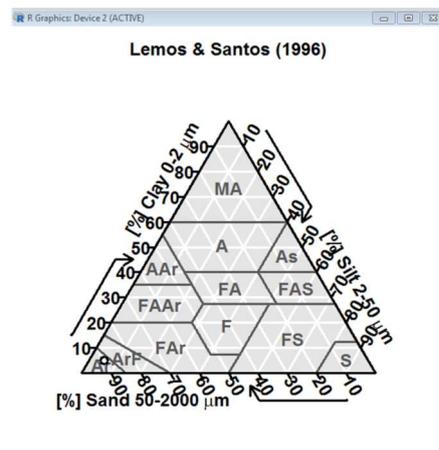


Figura 6. Triângulo textural no modelo exemplo utilizado pelo Sistema Brasileiro de Classificação de Solos. (Moeys, 2018)

A visualização da Figura 6 pode ser melhorada com pequenas alterações no *script*, numerada para facilitar a explicação.

```
>old.par =- par(no.readonly=T)
>par("mfcol" = c(1,2), "mfrow"=c(1,2))
> dados =- data.frame("CLAY" = c(5), "SILT" = c(5), "SAND" = c(90))
># Plotar o triângulo - BRASIL: Lemos & Santos (1996)
>TT.plot(class.sys = "BRASIL.TT", tri.data = dados, main="Lemos & Santos
(1996)", css.transf = TRUE,col = "black",pch = 19,class.line.col =
"black",class.lab.col = "black",lwd.axis = 2,class.p.bg.col = c("gray"))
># Plotar o triângulo - BRASIL: SiBCS 2013 (EMBRAPA)
```

```
>TT.plot(class.sys = "SiBCS13.TT", tri.data = dados, main="SiBCS 2013
(EMBRAPA)", col = "gray0",pch = 19, class.line.col =
"black",class.lab.col = "black",lwd.axis = 2,class.p.bg.col = c("gray"))
```

A primeira e a segunda linha se referem a uma matriz de 2x2, e consistem de instruções para apresentar os dois triângulos na mesma figura. Na terceira linha estão os objetos capazes de guardar informações tabulares presentes em bancos de dados. A quarta e a sexta linhas são comentários. A quinta e a sexta linhas mostram os triângulos, com alterações de cor, símbolo e linhas.

Os resultados das funções acima podem ser visualizados na Figura 7.

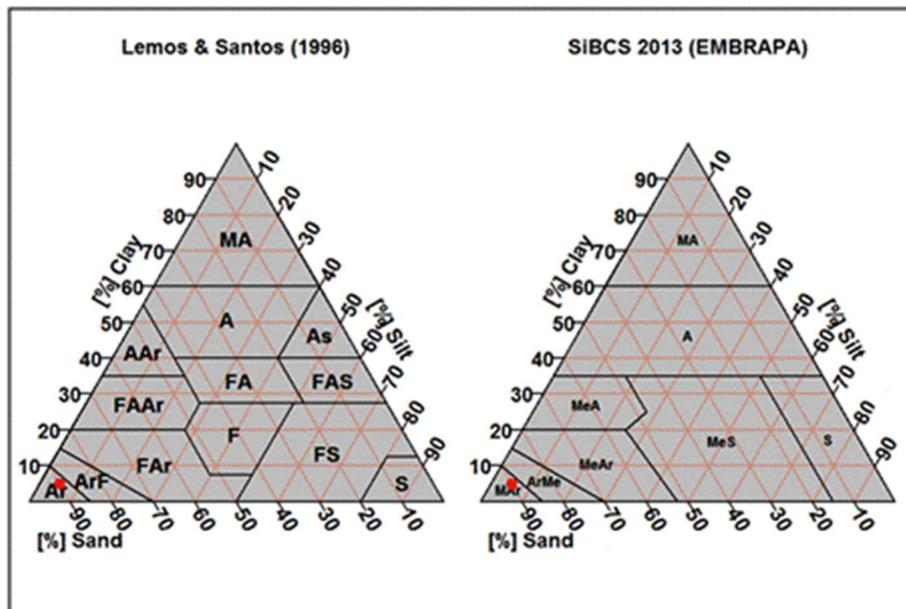


Figura 7. Classificação textural do solo usando dois sistemas de classificação.

O significado das abreviações de cada classe, obtido a partir das respectivas referências, estão na tabela 1.

Tabela 1. Abreviatura e nome no *soiltexture*

abreviatura	nome
MA	Muito argiloso
A	Argiloso
AAr	Argila arenoso
AS	Argila siltosa
FAAr	Franco argilo arenoso
FA	Franco argiloso
FAS	Franco argiloso siltoso
FAS	Franco argiloso siltoso
MeS	Média siltosa
MeA	Média Argilosa
MeAr	Média Arenosa
ArMe	Arenosa média
Mar	Muito renosa
Ar	Areia
Arf	Areia franca
FAr	Franco arenoso
F	Franco
Fs	Franco siltoso
S	Siltosa

Fonte: MOEYS, 2016

Alguns detalhes da Figura 7 foram retirados utilizando um programa de edição de imagem. Como pode ser observado no *script* da função, é possível formatar várias características dos triângulos como título dos eixos, cores e símbolos.

A função também permite *plotar* vários pontos em um mesmo triângulo (Figura 9), para tanto, basta substituir os dados no *script* para um conjunto de solos e mostrar:

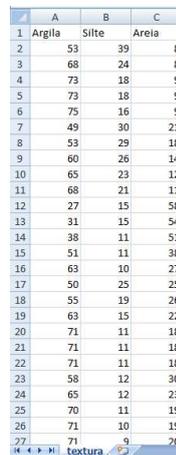
```
>old.par =- par(no.readonly=T)
>par("mfcol" = c(1,2), "mfrow"=c(1,2))
> # Dados
>dados=- data.frame("CLAY" = c(05,60,15,05,25,05,25,45,65,75,13,47),
                    "SILT" = c(05,08,15,25,55,85,65,45,15,15,17,43),
                    "SAND" = c(90,32,70,70,20,10,10,10,20,10,70,10))
># Plotar o triângulo - BRASIL: Lemos & Santos (1996)
>TT.plot(class.sys = "BRASIL.TT", tri.data = dados, main="Lemos & Santos
(1996)", css.transf = TRUE,col = "black",pch = 19,class.line.col =
"black",class.lab.col = "black",lwd.axis = 2,class.p.bg.col = c("gray"))
># Plotar o triângulo - BRASIL: SiBCS 2013 (EMBRAPA)
>TT.plot(class.sys = "SiBCS13.TT", tri.data = dados, main="SiBCS 2013
(EMBRAPA)", col = "gray0",pch = 19, class.line.col =
"black",class.lab.col = "black",lwd.axis = 2,class.p.bg.col = c("gray"))
```

Os dados podem ser digitados na mesma linha, para exemplificar, devido o espaço, foi necessário apresentar em mais de uma linha, os "...", no exemplo, significam que o comando continua na próxima linha e não é para digitar.

Pode ser criado um arquivo “.csv” , valores separados por vírgula, com os dados, conforme *script*:

```
> ##### DADOS
> dados=read.csv("C:\\Users\\EXCEL\\TEXTURA.csv",header = T,sep =
";",fill = T)
> dados=data.frame("CLAY" = c(as.numeric(Dados$Argila)), "SILT"=
c(as.numeric(Dados$Silte)), "SAND" = (as.numeric(Dados$Areia)))
> # Plotar o triângulo - BRASIL: Lemos & Santos (1996)
> TT.plot(class.sys = "BRASIL.TT", tri.data = dados,main="Lemos & Santos
(1996)", css.transf = TRUE,col = "red",pch = 19,class.line.col =
"black",class.lab.col = "black",lwd.axis = 2,class.p.bg.col = c("gray"))
> #
```

Onde, EXCEL na segunda linha do *script* é o diretório onde está o arquivo de nome TEXTURA (Figura 8) com os dados no formato CSV.



	A	B	C
1	Argila	Silte	Areia
2	53	39	8
3	68	24	8
4	73	18	9
5	73	18	9
6	75	16	9
7	49	30	21
8	53	29	18
9	60	26	14
10	65	23	12
11	68	21	11
12	27	15	58
13	31	15	54
14	38	11	51
15	51	11	38
16	63	10	27
17	50	25	25
18	55	19	26
19	63	15	22
20	71	11	18
21	71	11	18
22	71	11	18
23	58	12	30
24	65	12	23
25	70	11	19
26	71	10	19
27	71	9	20

Figura 8. Valores de argila, silte e areia no arquivo de nome Textura do Excel no formato CSV, retirados do banco de dados HYBRAS 1.0 (versão 1) disponível em <http://www.cprm.gov.br/publique/Hidrologia/Pesquisa-e-Inovacao/HYBRAS-4930.html>

A classificação textural dos solos para o vetor (Figura 8) de 30 elementos é o da figura 9.

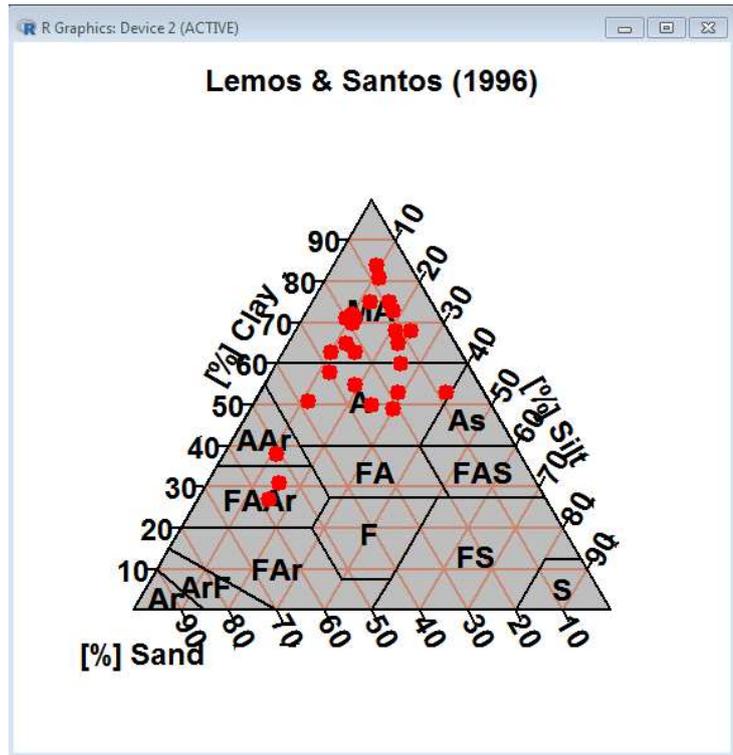


Figura 9. Classificação textural para 30 solos.

Pode-se acrescentar no triângulo a informação do Carbono Orgânico (Figura 11), alterando o *script*:

```
> dados =- data.frame( "CLAY" = c(as.numeric(Dados$argila)),
  "SILT" = c(as.numeric(Dados$silt)), "SAND" = c(as.numeric(Dados$areia)),
  "OC" = c(as.numeric(Dados$MO)) )
> # Plotar o triângulo - BRASIL: Lemos & Santos (1996) com Co e legenda
> TT.plot(class.sys = "BRASIL.TT", tri.data = dados, z.name = "OC",
main="", css.transf = TRUE,col = "red",pch = 19,class.line.col =
"black",class.lab.col = "black",lwd.axis = 2,class.p.bg.col = c("gray"))
> # Recompute some internal values:
> z.cex.range = TT.get("z.cex.range")
> def.pch = par("pch")
> def.col = par("col")
> def.cex = TT.get("cex")
> oc.str = TT.str( my.text[, "OC"], z.cex.range[1], z.cex.range[2])
> # The legend:
> legend( x = 80, y = 110, title = expression( bold('OC [g.kg-1~']') ),
legend = + formatC( c( min( my.text[, "OC"]),quantile(my.text[, "OC"]
+,probs=c(25,50,75)/100), max( my.text[, "OC"] ) ),
format = "f", digits = 1, width = 4, flag = "0"), # pt.lwd = 4,
```

```

col = "red", # col = def.col, pt.cex = c( min( oc.str ),
quantile(oc.str ,probs=c(25,50,75)/100), max( oc.str ) ), #, pch =
def.pch, bty = "o", bg = NA,
#box.col = NA, # Uncomment this to remove the legend box
text.col = "black", cex = def.cex )
> #FIM

```

Na Figura 10 tem-se o banco de dados salvo em um arquivo no formato CSV

	A	B	C	D
1	argila	silt	areia	MO
2	50	25	25	2.86
3	58	12	30	2.48
4	21	14	65	0.88
5	40	47	13	1.41
6	92	6	2	1.85
7	13	6	81	3.44
8	12	6	82	1.03

Figura 10. Dados salvo em arquivo planilha no formato CSV.

O resultado da execução do *script* com os dados da Figura 10 está nas figuras 11(A e B).

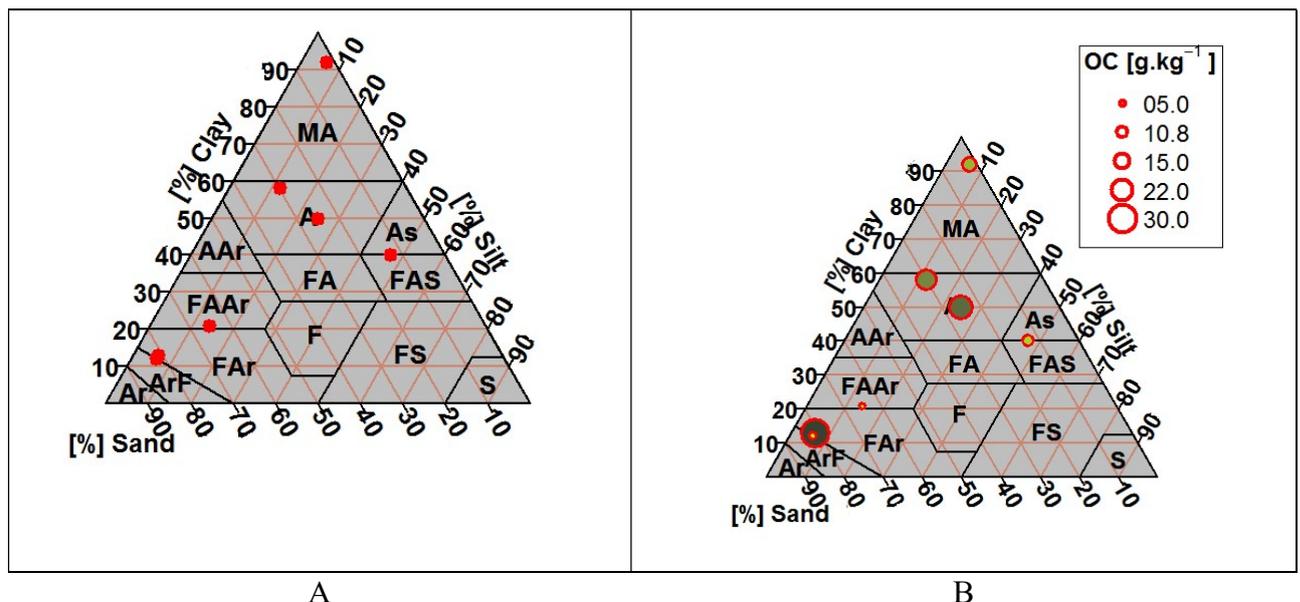


Figura 11. Classificação textural dos solos da figura 10. Na figura está somente a classificação e a figura b apresenta, além da classificação o percentual de carbono orgânico.

É importante observar que a soma de argila, silte e areia precisa se obrigatoriamente 100, caso contrário dará erro.

4.2.2 Curva de Retenção de Água

Os dados utilizados nos exemplos dos dois pacotes do R que serão apresentados foram retirados do Banco de Dados Hidrofísico para Solos Brasileiros (HYBRAS), uma iniciativa do Departamento de Hidrologia da Geologia Pesquisa do Brasil da Companhia de Pesquisa de Recursos Minerais (CPRM) com o apoio da Universidade Federal do Rio de Janeiro. É um Banco de Dados que busca consolidar dados de retenção de água e condutividade hidráulica saturada, associados aos atributos básicos de solo e métodos de determinação dessas propriedades hidráulicas.

Os pacotes para realizar o ajuste da Curva de retenção de água no solo são o *HydroMe* (tabela 2) e *Soilphys*.

Tabela 2. Funções do pacote HydroMe (disponível em <https://cran.r-project.org/>) para a obtenção de parâmetros de retenção de água no solo.

Função	Modelo	Funcionalidade
<i>Brook</i>	$\theta = \theta_r + (\theta_s - \theta_r) / (\alpha h)^n$	Ajuste da CRAS pelo modelo de Brooks & Corey (1964)
<i>Campbel</i>	$\theta = \theta_s (\alpha h)^n$	Ajuste da CRAS pelo modelo de Campbell (1974)
<i>Ruso</i>	$\theta = \theta_r + (\theta_s - \theta_r) [(1 + 0.5\alpha h)e^{0.5\alpha h}]^{2/n+2}$	Ajuste da CRAS pelo modelo de Russo (1988)
<i>SSfredlund</i>	$\theta = \theta_r + ((\theta_s - \theta_r) / \{\ln[2.7183 + (\alpha h)^n]\})^m$	Ajuste da CRAS pelo modelo de Fredlund & Xing (1994)
<i>SSgard</i>	$\theta = \theta_r + (\theta_s - \theta_r) [1 + (\alpha h)^n]^{-1}$	Ajuste da CRAS pelo modelo de Gardner (1958), para dados agrupados.
<i>SSkosugi</i>	$\theta = \theta_r + 1/2(\theta_s - \theta_r) \operatorname{erfec}[(\ln(h/h_m)) / \alpha \sqrt{2}]$ (erfec: função erro complementar)	Ajuste da CRAS pelo modelo de Kosugi (1996).
<i>SSvgm</i>	$\theta = \theta_r + (\theta_s - \theta_r) [1 + (\alpha h)^n]^{-m}$	Ajuste da CRAS pelo modelo de van Genuchten (1980).
<i>Tani</i>	$\theta = \theta_r + (\theta_s - \theta_r) [1 + \alpha h] e^{-\alpha h}$	Ajuste da CRAS pelo modelo de Tani (1982)

CRAS: curva de retenção de água no solo

Conforme o item 2.2 é necessário instalar e carregar o pacote *HydroMe* antes de usar.

Primeiro criar o arquivo no Excel (Figura 12) com o potencial e a umidade observada e salvar no formato CSV (separado por vírgula), o nome usado foi *hybras*.

	A	B
1	POT	Uobs
2	61.2	0.451
3	102	0.431
4	337	0.406
5	1020	0.380
6	5100	0.342
7	15300	0.332

Figura 12. Planilha que será usada no exemplo para calcular a CRA nos modelos van Genuchten (*HydroMe*) e Dexter (*Soilphycs*). Banco de dados HYBRAS 1.0 (versão 1) disponível em <http://www.cprm.gov.br/publique/Hidrologia/Pesquisa-e-Inovacao/HYBRAS-4930.html>

O pacote *HydroMe* não aceita o potencial zero, caso coloque dará erro. Para executar a função *SSvgm* do pacote que encontra o ajuste da CRAS pelo modelo de van Genuchten (1980) é necessário escrever o *script*:

```
>dados=read.table("C:\\Users\\EXCEL\\hybras.csv",header=T,sep=";",fill=T)
>vn.ns=nlsLM(y~SSvgm(x,thr,ths,alp,nscal,mscal),data=dados,control=nls.lm
.control(maxiter=200,options(warn=-1)))
>summary(vn.ns)
```

O resultado dos parâmetros ajustados pelo modelo de van Genuchten (1980) no pacote *HydroMe* para os dados da Figura 12 está na Figura 13.

```
Formula: y ~ SSvgm(x, thr, ths, alp, nscal, mscal)

Parameters:
      Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
thr  2.057e-01  8.085e-01  0.254  0.841
ths  8.900e-01  2.750e+04  0.000  1.000
alp  7.194e+01  2.350e+07  0.000  1.000
nscal 1.064e+00  4.236e+04  0.000  1.000
mscal 1.156e-01  4.601e+03  0.000  1.000

Residual standard error: 0.007757 on 1 degrees of freedom

Number of iterations till stop: 96
Achieved convergence tolerance: 1.49e-08
Reason stopped: Number of calls to `fcn' has reached or exceeded `maxfev' == 600.
```

Figura 13. Resultado no *prompt* do R após executar a função *SSvgm* do pacote *HydroMe* para encontrar os parâmetros de ajuste da curva de retenção de água no solo no modelo de van Genuchten.

Os parâmetros para calcular a Curva de Retenção de Água no Solo (Figura 13) serão usados no cálculo do índice S, apresentado na seção 3.3. A tabela 3 apresenta as funções do pacote *soilphysics* para calcular a Curva de Retenção de Água no Solo

Tabela 3. Funções do pacote *soilphysics* (disponível em <https://cran.r-project.org/>) para a obtenção de parâmetros de retenção de água no solo.

Função	Modelo	Funcionalidade
fitsoilwater	$\theta = \theta_r + (\theta_s - \theta_r) [1 + (\alpha h)^n]^{-m}$	Ajuste da CRAS pelo modelo de van Genuchten (1980)
Fitsoilwater2	$= k_1 (\exp^{-k_0/(pF_0)^n}) - \exp^{-k_0/(pF)^n}$	Ajuste da CRAS pelo modelo de Groenevelt & Grant (2004)
Fitsoilwater3	$= C + A_1 \exp^{-h/h_1} + A_2 \exp^{-h/h_2}$	Ajuste da CRAS pelo modelo de Dexter (2008)
Fitsoilwater4	$= (\alpha h)^c$ $= \exp(a + b * B_d) h^c$	Ajuste da CRAS pelo modelo de Ross et al (1991) e Silva et al. (1994)
Fitsoilwater5	$= \theta_r + (\theta_s - \theta_r) [1 + (\alpha h)^n]^{-m} + A h^2 - B h +$	Ajuste da CRAS pelo modelo de van Genuchten (1980) modificado por Pierson & Mulla (1989)

O pacote do R *soilphysics* tem disponíveis para o ajuste da curva de retenção de água no solo (CRAS) os modelos da tabela 2, sendo que Ross et al. (1991) e Silva et al. (1994) estão em uma única função.

Para encontrar a CRA no modelo Dexter (2008) com os mesmos dados utiliza-se a função *fitsoilwater3*, conforme o *script*:

```
>Dados=read.csv("C:\\Users\\EXCEL\\hybras.csv",header = T,sep = ";",fill
= T)
>w=as.numeric(Dados$y)
>h=as.numeric(Dados$x )
>fitsoilwater3 (w,h)
```

Os dados estão salvos em um arquivo do Excel chamado hybras no formato CSV (separado por vírgulas), após executar o *script* (Figura 14).

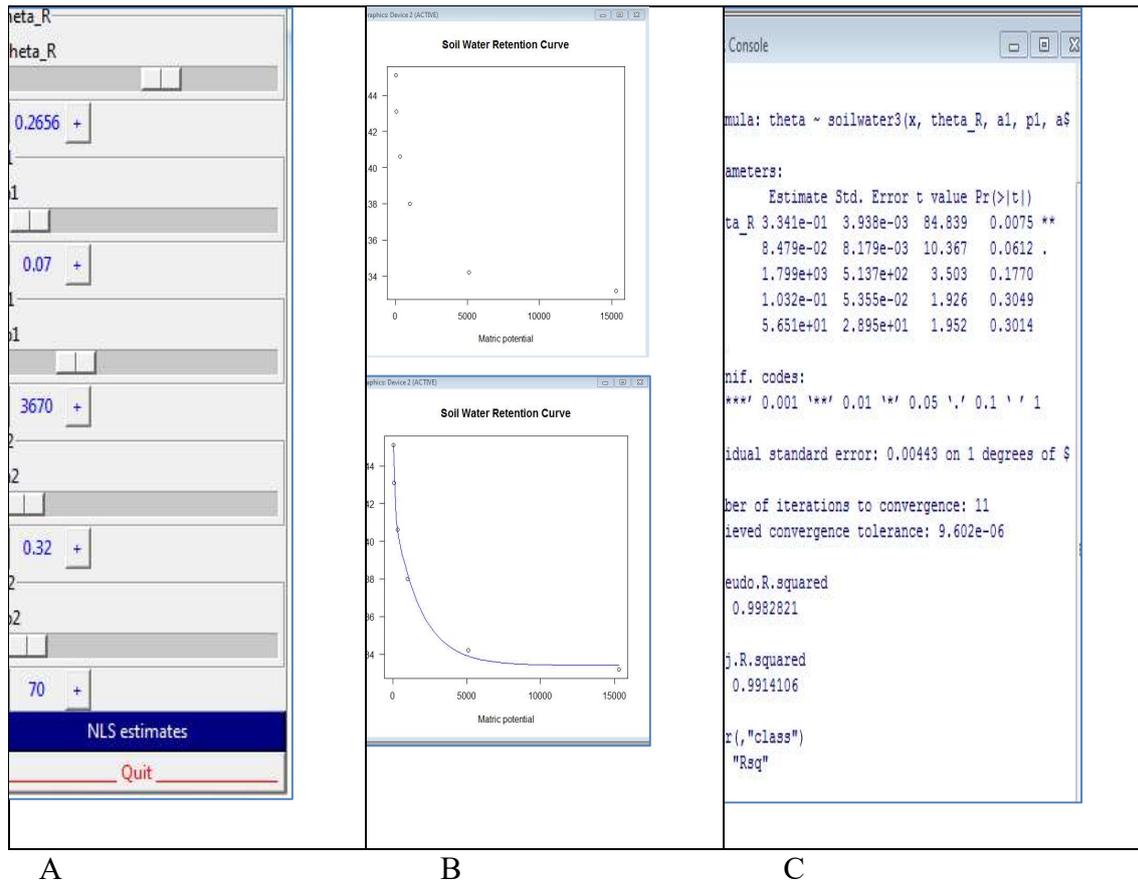


Figura 14. Resultado da execução do script para encontrar a CRA, no modelo Dexter (2008) pela função *fitsoilwater3*. Na Figura 14 (A) tem-se o Painel interativo (Interactive fit) disponível em algumas funções do pacote *soilphysics* para a definição dos parâmetros iniciais do ajuste da curva de retenção de água no solo. Na Figura 14(B) há os gráficos representando: os dados sem ajuste, com parâmetros iniciais (só com os pontos) e após o ajuste (pontos com a linha azul), e os parâmetros de ajuste com as respectivas estatísticas estão na Figura 14 (C).

O processo pode ser repetido para encontrar os parâmetros da curva de retenção de água no modelo de van Genuchten na função *fitsoilwater* do pacote *soilphysics*.

As umidades para cada potencial são fornecidas pela função *soilwater*, podendo ser para um potencial específico, conforme Sousa et al (2020) ou para os potenciais da figura 12:

```
# soil water content for array hPa water potential
R>soilwater(x = c(61.2, 102, 337, 1020, 5100, 15300), theta_R = 0.20570,
theta_S = 0.8900, alpha = 71.9400, n = 1.06400)
```

Resultado da execução da função:

```
[1] 0.6056861 0.5928221 0.5643176 0.5397795 0.5070810 0.4866184
```

4.3 Índice S

O índice S é a inclinação da curva no seu ponto de inflexão. O pacote *soilphysics* tem uma função (*sindex*) para encontrar o índice S, calculado pela equação (1)

$$S = [-n * (\theta_s - \theta_r) * (1 + 1/m)^{-(1+m)}] \quad (1)$$

Onde θ_s , θ_r , m e n são parâmetros da equação de van Genuchten (1980).

Para encontrar o índice S pela função *sindex* do pacote *soilphysics* com os dados da figura 13 da seção 3.2, é só executar o *script*:

```
> Sindex(0.20570, 0.89000, 71.9400, 1.06400, xlim = c(0, 1500))
```

O resultado da execução do *script* está na figura 15.

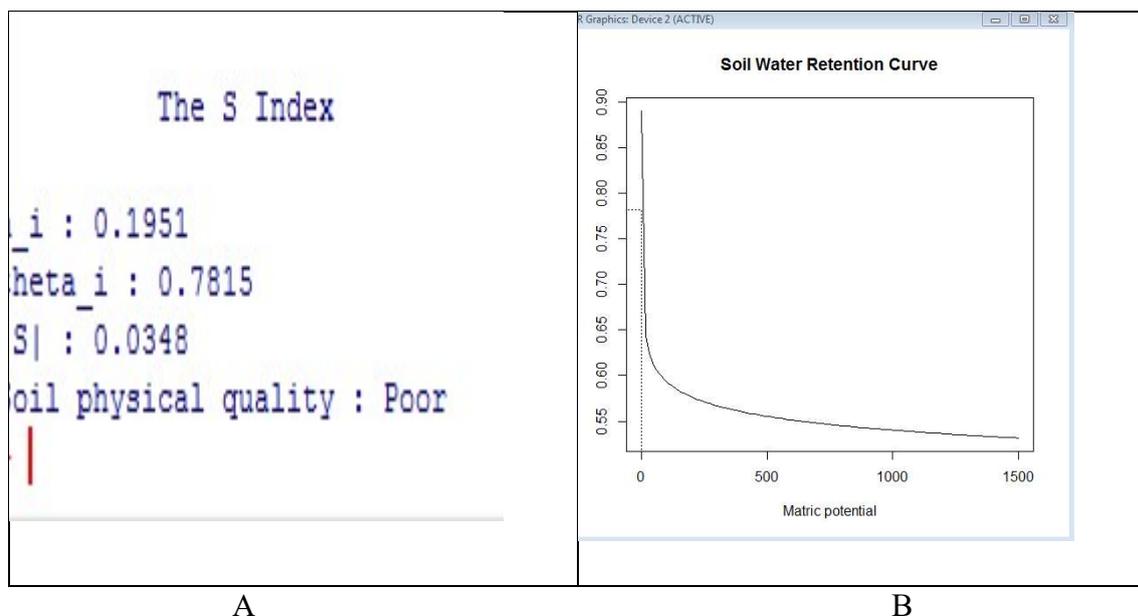


Figura 15. Resultado da execução do *script Sindex* para encontrar o índice S no pacote *soilphysics*. O resultado está na Figura 15(A) e na 15(B) o gráfico com a inclinação da curva no seu ponto de inflexão.

Na figura 15 (A) h_i é o módulo do potencial da água no ponto de inflexão, θ_i o conteúdo de água no ponto de inflexão, $|S|$ é o módulo do índice S e por último o indicador da qualidade física do solo proposto por Dexter (2004).

Dexter (2004) e Dexter & Czyz (2007) propuseram que um crescimento adequado da raiz requer valores do índice $S > 0,030$, valores entre 0,020 e 0,030 promovem baixo

crescimento radicular e, para $S < 0,020$, não há desenvolvimento de raiz, independentemente do tipo de solo e espécies de plantas.

4.4. Intervalo Hídrico Ótimo

O Intervalo Hídrico Ótimo (Least Limiting Water Range, LLWR) para os dados da figura 16 aplicando o script para a função *llwr* do pacote *soilphysics*

	A	B	C	D
1	pot	um	rp	dp
2	20	0.43	0.23	1.35
3	20	0.41	1.16	1.53
4	20	0.45	0.2	1.36
5	20	0.43	0.38	1.46
6	20	0.4	0.42	1.53
7	20	0.43	0.37	1.44
8	20	0.41	1.03	1.47
9	20	0.4	1.16	1.56
10	50	0.42	0.85	1.43
11	50	0.45	0.59	1.37
12	50	0.45	0.6	1.35
13	50	0.4	0.43	1.42
14	50	0.42	1.76	1.45
15	50	0.42	0.64	1.45
16	50	0.39	0.85	1.35
17	50	0.4	1.38	1.58
18	80	0.36	0.5	1.51
19	80	0.4	0.88	1.53
20	80	0.42	1.61	1.49
21	80	0.36	1.29	1.53
22	80	0.38	0.55	1.48
23	80	0.39	1.5	1.46
24	80	0.36	0.72	1.36
25	80	0.4	1.36	1.5
26	100	0.37	1.34	1.6
27	100	0.38	1.09	1.47

Figura 16. Banco de dados retirados de Leao et al. (2005) com o potencial, umidade, resistência a penetração e densidade da partícula para o cálculo do IHO.

```
>#IHO-llitura dos dados

>Dados=read.csv("C:\\Users\\EXCEL\\IHO.csv",header = T,sep = ";",fill =
T)

>#### DADOS

>w=as.numeric(Dados$um)

>h=as.numeric(Dados$pot)

>BD=as.numeric(Dados$dp)

>PR=as.numeric(Dados$rp)

>IHO=(llwr(theta = w, h = h, Bd = BD, Pr = PR, particle.density = 2.65,
air = 0.1, critical.PR = 2, h.FC = 100, h.WP = 15000))
```

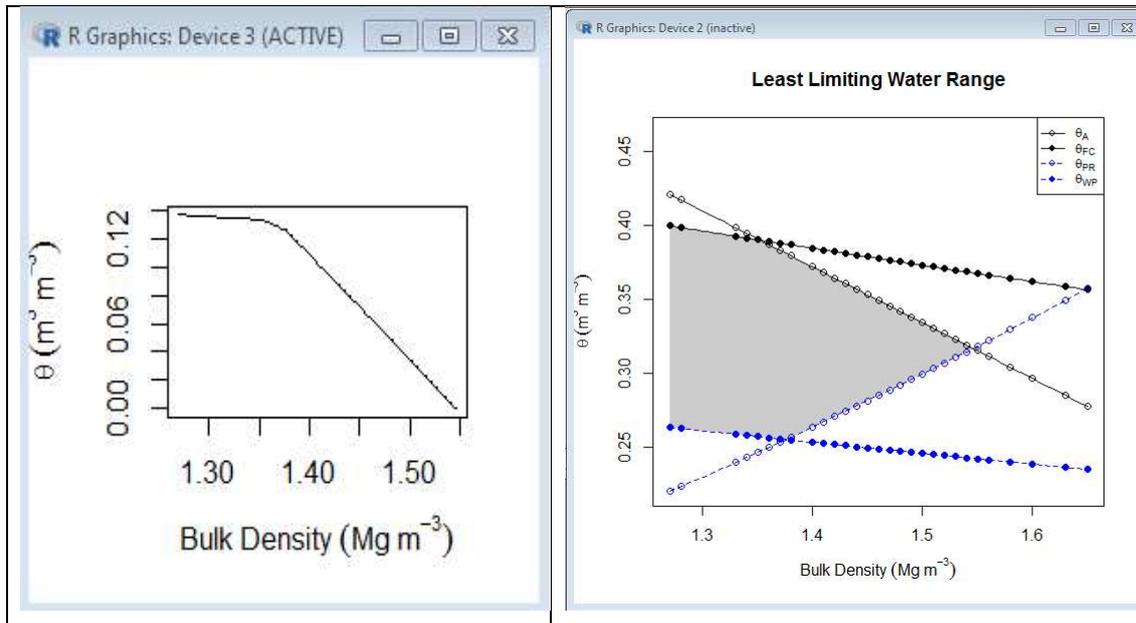


Figura 17. Resultado dos gráficos da variação do conteúdo de água com a densidade da partícula para o intervalo hídrico ótimo gerado pela função *llwr* do pacote *soilphysics*.

Acrescentando no *prompt* a linha no *script* tem-se o resultado da figura 18.

> IHO

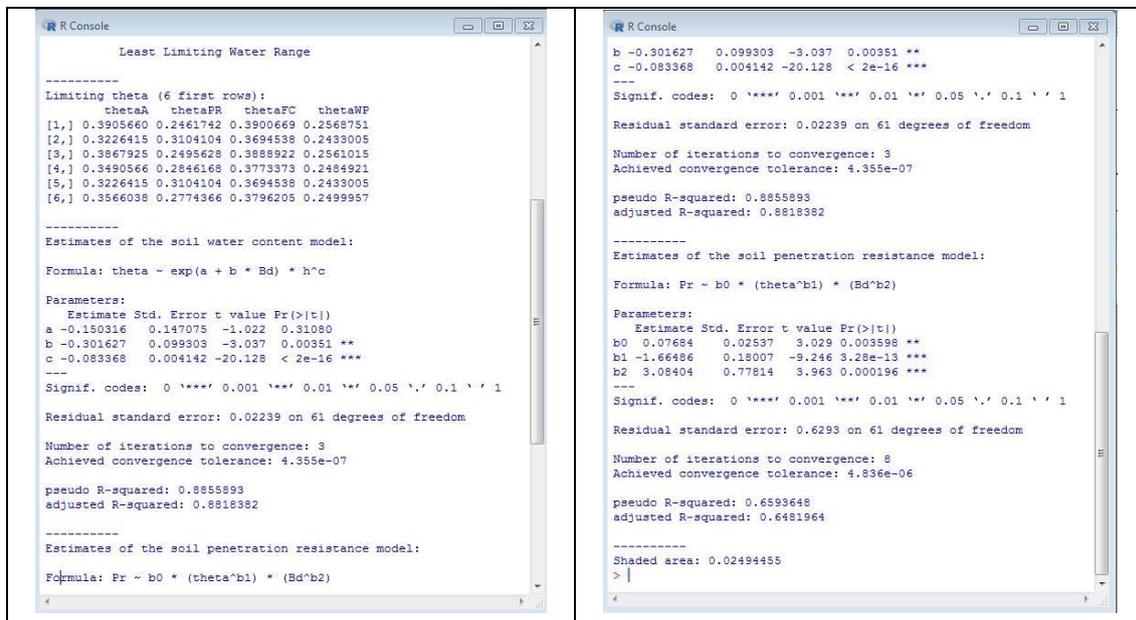


Figura 18. Resultado para o Intervalo Hídrico Ótimo após executar o script >IHO na função *llwr* do pacote *soilphysics*.

Na figura 18 se tem uma matriz nx4 contendo os valores limites do conteúdo de água para cada valor de entrada de densidade (θ_A), resistência à penetração (θ_{PR}), capacidade de campo (θ_{FC}) e ponto de murchamento (θ_{WP}). Um vetor numérico contendo estimativas dos três parâmetros do modelo empregado por Silva et al. (1994) para a relação funcional entre teta, B_d e h . O erro residual padrão, número de interações para convergir, r^2 e ajuste do r^2 , um vetor numérico contendo estimativas dos três parâmetros do modelo de resistência à penetração,

4.5. Infiltração

As características de infiltração e de retenção de água são características hidráulicas que governam a entrada de água na superfície do solo e o subsequente movimento ou armazenamento no solo. Omuto & Gumbe (2009). Vários modelos para obter a infiltração de água no solo foram propostos, a tabela 4 apresenta os modelos disponíveis no pacote *HydroMe* para encontrar a infiltração.

Tabela 4. Funções do pacote *HydroMe* (disponível em <https://cran.r-project.org/>) para a obtenção da infiltração de água no solo.

Função	Modelo	Funcionalidade
<i>SSgampt</i>	$i=K_s+A/I(t)$	Infiltração de água pelo modelo de Green & Ampt (1911)
<i>SShorton</i>	$i=f_c+(f_c-f_c)\exp(-kt)$	Infiltração de água pelo modelo de Horton (1940).
<i>SSphilip</i>	$i=f_c+0.5St^{0.5}$	Infiltração de água pelo modelo de Philip (1957).

O pacote inclui um modelo empírico, proposto por Horton (1940) e dois modelos derivados de considerações físicas: Green & Ampt (1911) e Philip (1957). O banco de dados utilizado para a averiguação da eficácia das funções destes modelos foi o fornecido pelo próprio pacote. Exemplo de um subconjunto deste banco é apresentado na figura 19.

	A	B	C	D	E	F
1	Sample	PlotNo	Erosion	Time	Rate	Cumrate
2	1	1P3	E1		1	1
3	2	1P3	E1		2	3
4	3	1P3	E1		3	2.2
5	4	1P3	E1		4	2.2
6	5	1P3	E1		5	2.1
7	6	1P3	E1		6	2.1
8	7	1P3	E1		7	1.1
9	8	1P3	E1		8	1.1
10	9	1P3	E1		9	1.1
11	10	1P3	E1		10	1
12	11	1P3	E1		11	1
13	12	1P3	E1		12	0.9
14	13	1P3	E1		13	0.8
15	14	1P3	E1		14	0.7
16	15	1P3	E1		15	0.7
17	16	1P3	E1		16	0.7
18	17	1P3	E1		17	0.8
19	18	1P3	E1		18	0.7
20	19	1P3	E1		19	0.6
21	20	1P3	E1		20	0.6
22	21	1P3	E1		22	0.9
23	22	1P3	E1		24	0.95
24	23	1P3	E1		26	0.65
25	24	1P3	E1		28	0.7
26	25	1P3	E1		30	0.8
27	26	1P3	E1		32	0.55

Figura 19. Subconjunto do Banco de Dados para estimativa de características de infiltração da água no solo, disponíveis no pacote HydroMe (disponível em <https://cran.r-project.org/>).

Todos os três modelos são de auto-inicialização. O modelo de Horton (SShorton), um dos métodos mais conhecidos para o cálculo da taxa de infiltração do solo, é um modelo de três parâmetros que usa dados de taxas de infiltração instantâneas e dados de tempo, Rate e Time da Figura 18. Estas mesmas variáveis são usadas no modelo de Philip (SSphilip) para estimativa de dois parâmetros.

A função referente ao modelo de Green & Ampt é descrita no *script*:

```
> dados=read.table("C:\\Users\\EXCEL\\infiltracao.csv",header = T,sep =
";",fill = T)
> gamp.ns=nlsLM(Cumrate~SSgampt(Rate,ks,A), dados)
> summary(gamp.ns)
```

A função (SSgampt) usa taxas de infiltração instantânea (Rate) e cumulativa (Cumrate). A execução do *script* fornece o resultado da figura 20.

```

Formula: Cumrate ~ SSgampt(Rate, ks, A)

Parameters:
  Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
ks 15.33111    0.40690   37.68  <2e-16 ***
A  -0.70344    0.06312  -11.14  <2e-16 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 10.11 on 1103 degrees of freedom

Number of iterations to convergence: 3
Achieved convergence tolerance: 1.49e-08

>

```

Figura 20. Resultado após execução da função *SSgampt* para o Banco de Dados disponível no pacote *HydroMe* (disponível em <https://cran.r-project.org/>).

O resultado da função *SSgampt* (figura 20) estima dois parâmetros, K_s que é a condutividade hidráulica saturada e A uma constante que incorpora potencial mátrico, a frente de molhamento e a umidade prévia.

4.6. Condutividade Hidráulica

A função *SSgampt* do pacote *HydroMe* (figura 19) estima K_s que é a condutividade hidráulica saturada.

No pacote *SoilHyP* os parâmetros de retenção de água e/ou a condutividade hidráulica não saturada (K_u) pelos modelos de van Genuchten-Mualem ou Peters-Durner-Iden (2015) são estimados pela função *fitSH*, conforme *script*. Para o modelo de van Genuchten tem-se a opção do ajuste uni ou bimodal.

```

>dados=read.csv("C:\\Users\\EXCEL\\cond_hidra.csv",header = T,sep =
";",fill = T)
>#
>ans = fitSHP(obs = list(th = dados$th , K = dados$ku), suc = list(th =
dados$suc , K = dados$suc), FUN.shp = 'vg', modality = 'uni', par.shp
= NULL, fit = 'both', weighting = 'var', log = c('alfa', 'n', 'ks'),
control = list(ncomplex = 15, reltol = 1e-07,tolsteps = 7), suc.negative
= TRUE, integral = FALSE,L = 0, print.info = TRUE )

```

O *script* foi executado para os dados da figura 21.

	A	B	C
1	ku	th	suc
2		0.698763	2.873958
3		0.697527	2.621875
4		0.696290	2.369792
5		0.695054	2.117708
6		0.693817	1.865625
7		0.692581	1.613542
8		0.691344	1.361458
9		0.690107	1.109375
10		0.688871	0.857292
11		0.687634	0.605208
12		0.686398	0.353125
13		0.685161	0.101042
14		0.683925	-0.151042
15		0.682688	-0.403125
16		0.681451	-0.655208
17		0.680215	-0.907292
18		0.678978	-1.159375
19		0.677742	-1.411458
20		0.676505	-1.663542
21		0.675269	-1.915625
22		0.674032	-2.167708
23		0.672795	-2.419792
24		0.671559	-2.671875
25		0.670322	-2.923958
26		0.669086	-3.050000
27		0.667849	-3.262500

Figura 21. Subconjunto do Banco de Dados para estimar os parâmetros de retenção de água e/ou a condutividade hidráulica não saturada (Ku), disponíveis no pacote HydroMe (disponível em <https://cran.r-project.org/>).

Resultado da execução do *script* para os dados da figura 20.

```
[1] "Initial parameter input (par) is missing and set to default:"
    ths   thr  alfa    n   ks   tau
    0.50  0.00  0.01  1.20 100.00 0.50
[1] "Lower parameter boundary input (lower) is missing and set to:"
    ths   thr  alfa    n   ks   tau
    0.4000 0.0000 0.0010 1.0100 0.0001 -2.0000
[1] "Upper parameter boundary input (upper) is missing and set to:"
    ths   thr  alfa    n   ks   tau
    1e+00 4e-01 5e+00 1e+01 5e+03 5e+00
[1] "For optimization logarithmized parameter:"
[1] "alfa" "n"    "ks"
[1] "RMSE_Th: 0.01910000165040817"
[1] "RMSE_K: 0.0432886035587479"
> |
```

Figura 22. Resultado para a execução da função *fitSH* para o Banco de Dados disponível no pacote SoilHyP (disponível em <https://cran.r-project.org/>).

Ao se acrescentar mais uma linha de comando no script (`> ans$par`), tem-se as informações da figura 23.

```

$ths
[1] 0.6595795

$thr
[1] 8.310104e-13

$alfa
[1] 0.01930168

$sn
[1] 1.409409

$ks
[1] 31.52202

$tau
[1] 0.08998705

```

Figura 23. Resultado para a execução da função *fitSH*, após acrescentar na linha de comando (*>ans\$par*), para o Banco de Dados disponível no pacote SoilHyP (disponível em <https://cran.r-project.org/>).

Praticamente todas as demais funções disponíveis no pacote são em função dos parâmetros obtidos pelo ajuste de fitSHP. Por exemplo:

- Função Kcap: estimativa da condutividade capilar (não saturada) relativa
- Função Kfilm: estimativa da condutividade hidráulica pelo modelo de Peters (2013)
- Função Ku: estimativa da condutividade hidráulica não saturada
- Função Sad: estimativa da função de saturação relativa para armazenamento de água de adsorção descrita por uma função linear por partes (Iden e Durner, 2014).
- Função Sat: estimativa da função de saturação capilar de van Genuchten para distribuição do espaço poroso unimodal ou bimodal.
- Função Scap: estimativa da função de saturação capilar modificada por Iden e Durner (2014)
- Função SWC: estimativa do conteúdo de água no solo

Todas estas funções apresentam o mesmo padrão de script, onde a opção *par.shp* é usada para referenciar uma lista ou um vetor com os parâmetros como, por exemplo,

```
>Ku(suc = seq(1, 1000, by = 1), FUN.shp = 'vGM', par.shp = list(Ks = 10,
ths = 0.5, thr = 0, alfa = 0.02, n = 1.5, tau = 0.5),modality = 'uni',
suc.negativ = FALSE)
```

O *script* executa a função Ku que estimativa da condutividade hidráulica não saturada

4.7 Parâmetros da Curva de Resistência a Penetração

No pacote *soilphysics* a função `fitbusscher` com auto-inicialização fornece os parâmetros de ajuste da curva de resistência à penetração do solo pelo modelo de Busscher (1990), pode ser executada para o banco de dados fornecido pelo pacote em um arquivo do Excel (figura 24)

	A	B	C	D
1	PR	BD	Mois	PS
2	6.8	1.5	0.14	311
3	6.8	1.6	0.14	301
4	6.7	1.5	0.14	307
5	6.8	1.5	0.13	306
6	6.7	1.5	0.14	305
7	6.6	1.5	0.14	301
8	6.8	1.5	0.14	307
9	6.7	1.6	0.13	306
10	6.7	1.6	0.14	305
11	6.6	1.5	0.14	304
12	6.1	1.4	0.18	221
13	5.8	1.4	0.18	222
14	5.9	1.4	0.18	223
15	6.1	1.4	0.16	227
16	6.0	1.4	0.18	225
17	6.0	1.3	0.18	222
18	5.9	1.4	0.17	223
19	5.8	1.3	0.18	223
20	5.8	1.4	0.17	220
21	4.7	1.4	0.17	221
22	4.8	1.3	0.24	175
23	4.8	1.3	0.24	176
24	4.7	1.2	0.24	176
25	4.6	1.2	0.25	180
26	4.8	1.2	0.24	176
27	4.7	1.3	0.24	180

Figura 24. Subconjunto do Banco de Dados para estimar os parâmetros de ajuste da curva de resistência à penetração do solo disponíveis no pacote *soilphysics* (disponível em <https://cran.r-project.org/>).

O *script* da função é:

```
>Dados=read.csv("C:\\Users\\EXCEL\\compact.csv",header = T,sep = ";",fill
= T)
>crp=fitbusscher(Pr = Dados$PR, theta = Dados$Mois, Bd = Dados$BD)
>summary(crp)
```

A função *fitbusscher* cria estimativas iniciais (por log-linearização) dos parâmetros b_0 , b_1 e b_2 (figura 25).

```

Formula: Pr ~ b0 * (theta^b1) * (Bd^b2)

Parameters:
      Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
b0    1.5259     0.3849   3.965 0.000249 ***
b1   -0.5935     0.2506  -2.368 0.022051 *
b2    0.8078     0.5878   1.374 0.175866
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.5813 on 47 degrees of freedom

Number of iterations to convergence: 5
Achieved convergence tolerance: 1.876e-06

> |

```

Figura 25. Parâmetros de ajuste da curva de resistência à penetração do solo obtidos pela função *fitbusscher* do pacote *soilphysics*.

4.8 Compactação

O pacote *soilphysics* usa a função *criticalmoisture* para a obtenção da umidade ótima de compactação e densidade crítica pelo teste de Proctor.

Executando o script da função para os dados da figura 24 apresentada na seção 3.7, o resultado da execução do script é apresentado na figura 26.

```

>Dados=read.csv("C:\\Users\\EXCEL\\compact.csv",header = T,sep = ";",fill
= T)
>criticalmoisture(theta = Dados$Mois, Bd = Dados$BD)

```

```

                Critical Moisture and Maximum Bulk Density
                Sample 1
Intercept          2.0987385
Dados$Mois        -4.9321755
Dados$Mois^2       5.3381945
R.squared           0.9670012
n                   50.0000000
critical.mois      0.4619704
max.bulk           0.9594790

```

Figura 26. Resultado da execução do script função *criticalmoisture* do pacote *soilphysics* para obter a umidade ótima de compactação e densidade crítica pelo teste de Proctor.

A função calcula os parâmetros (figura 26) da curva de compactação (figura 27).

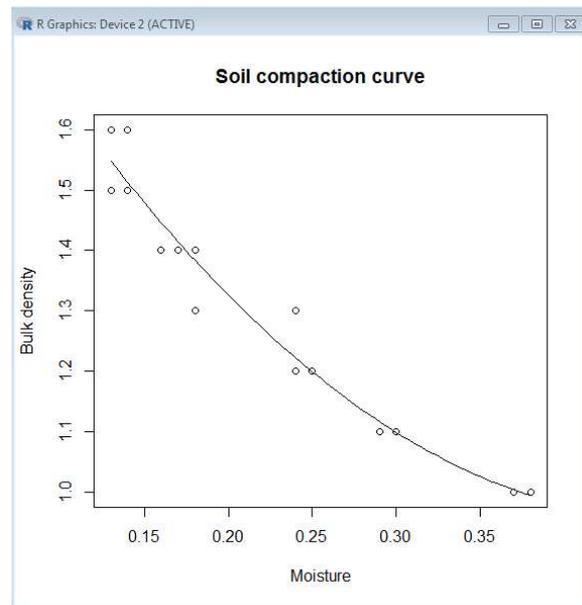


Figura 27. Curva de compactação do solo gerada pela função criticalmoisture do pacote soilphysics em função da umidade e a densidade.

Referências

Couto, L.; Sans, L.M.A. Características Físico-Hídricas e Disponibilidade de Água no Solo. Ministério da Agricultura, Pecuária e Abatecimento. Sete Lagoas, MG, 2002.

Dexter, A.R., Czyz, E.A., Richard, G., Reszkowska, A. A user-friendly water retention function that takes account of the textural and structural pore spaces in soil. *Geoderma*. 143(3), 243-253. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2007.11.010>, 2008.

Leao et al. An Algorithm for Calculating the Least Limiting Water Range of Soils. *Agronomy Journal*, 97:1210-1215, 2005.

Moeys, J., The soil texture wizard: R functions for plotting, classifying, transforming and exploring soil texture data, 2018. http://cran.r-project.org/web/packages/soiltexture/vignettes/soiltexture_vignette.pdf (acessado em 24 de janeiro de 2019).

Peng, R.D. R programming for Data Science. Leanpulo books. ISBN/ASIN:n/a, 2015.

R Core Team. R: A language and environment for statistical computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. URL <https://www.R-project.org/>. 2019.

Santos, H.G., Jacomine, P.K.T., Anjos, L.H.C., Oliveira, V.A., Lumbreras, J.F., Coelho, M.R., Almeida, J.A., Filho, J.C.A., Oliveira, J.B., Cunha, T.J.F., 2018. Sistema brasileiro de classificação de solos. 5ª Edição, Embrapa. E-book

Santos, R.D., Santos, H.G., Ker, J.C., Anjos, L.H.C. Shimizu, S.H., 2015. Manual de descrição e coleta de solo no campo. 6ª edição revisada e ampliada. Viçosa, Sociedade Brasileira de Ciência do solo.

Silva, A.P., Kay, B.D., Perfect, E., 1994. Characterization of the least limiting water range of soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 58(60), 1775-1781. <https://doi.org/10.2136/sssaj1994.03615995005800060028x>.

Sousa, D.F.; Rodrigues, S; Lima, H.V.; 2020. R software packages as a tool for evaluating soil physical and hydraulic properties. *Comput. Electron. Agric.* 168. <https://doi.org/10.1016/j.compag.2019.105077>.

van Genuchten, M.T., 1980. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 44(5), 892-898. <https://doi.org/10.2136/sssaj1980.03615995004400050002x>.

5. Considerações Finais e Perspectivas Futuras

A física do solo interage com outras áreas de conhecimento, tais como: hidrogeologia, agronomia, meteorologia, pedologia, matemática, física e outras. Estas interações promovem a emergência de teorias avançadas sobre processos naturais, criação de instrumentos de elevada precisão e o desenvolvimento de novas ferramentas matemáticas. Onde a matemática e a física são conhecimentos necessários para interpretar um determinado estado ou processo físico do solo.

Os cálculos para física do solo podem ser quantificados de maneira segura partir do uso de programas. Os programas disponíveis podem ser do tipo comercial ou de livre acesso e código aberto, como o R onde é possível alterar e distribuir pacote ou função.

O trabalho apresentou os pacotes do programa R para a física do solo *sharpshootR*, *soilDB*, *SWATmodel*, *febr*, *soilprofile*, *HydroMe*, *soilphysics*, *soilwater*, *soiltexture* e *soilHyp*, analisando a facilidade de reprodução, exemplificando, quando possível, utilizando os dados fornecidos pelos próprios autores e disponível nos respectivos manuais e outros dados, testando funções que estão disponíveis no pacote *soilphysics* e nova funções que serão implementadas, com dados diferentes para calcular a Curva de Retenção de Água no Solo (CRAS) e a produção de uma cartilha explicando como reproduzir os cálculos para física do solo utilizando o programa R.

Os pacotes *HydroMe* e *soilphysics* são os mais intuitivos e as determinações são facilmente reprodutíveis a partir dos exemplos fornecidos pelos autores dos respectivos pacotes. O *soiltexture* tem facilidade de entrada dos dados e a classe textural do solo em vários sistemas de classificação, a reprodução a partir dos exemplos fornecidos nos manuais não foi satisfatória para os pacotes *soilwater* e *SoilHyP*. O *HydroMe* apresenta a possibilidade de estimar os parâmetros separando o banco de dados em grupos.

O *soilphysics* é, até o momento, o pacote do R mais completo para física do solo, permite que o usuário conduza diversos ajustes utilizando um único pacote, por isso foi ilustrado no trabalho a aplicabilidade e a reprodutibilidade do pacote. O *soilphysics* está em constante atualização, possui disponível para download, até o momento, trinta e seis funções, porém novas funções estão sendo testadas como a *K.h()* e *psd()*, apresentadas neste trabalho.

Um produto foi gerado pelo trabalho como o objetivo de ensinar como realizar os cálculos para física do solo utilizando o programa R. Com o objetivo de facilitar a

produtividade, todos os códigos e dados utilizados no trabalho estão disponíveis no *GitHub* <https://github.com/sousaetal>.

Como perspectivas futuras pretende-se publicar o segundo artigo, capítulo 3 do trabalho e a cartilha, além de um terceiro artigo comparando o resultado da execução nos programas, por exemplo, R e RETC ou outro disponível.