

UNIVERSIDADE FEDERAL DE PELOTAS
Faculdade de Agronomia Eliseu Maciel
Programa de Pós-Graduação em Manejo e Conservação do Solo e da Água



Tese de Doutorado

**Simulação geoestatística na avaliação da qualidade física e estrutural de
solos subtropicais**

Rômulo Félix Nunes

Pelotas, 2024

Rômulo Félix Nunes

Simulação geoestatística na avaliação da qualidade física e estrutural de solos subtropicais

Tese de doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Manejo e Conservação do Solo e da Água da Universidade Federal de Pelotas, como requisito parcial à obtenção de título de Doutor em Ciências.

Orientadora: Dr^a. Cláudia Liane Rodrigues de Lima

Coorientadora: Dr^a. Tírzah Moreira Siqueira

Pelotas, 2024

Universidade Federal de Pelotas / Sistema de Bibliotecas
Catalogação da Publicação

N972s Nunes, Rômulo Félix

Simulação geoestatística na avaliação da qualidade física e estrutural de solos subtropicais [recurso eletrônico] / Rômulo Félix Nunes ; Cláudia Liane Rodrigues de Lima, orientadora ; Tirzah Moreira Siqueira, coorientadora. — Pelotas, 2024.
214 f. : il.

Tese (Doutorado) — Programa de Pós-Graduação em Manejo e Conservação do Solo e da Água, Faculdade de Agronomia Eliseu Maciel, Universidade Federal de Pelotas, 2024.

1. Incertezas espaciais. 2. Variabilidade espacial. 3. Índice S. 4. Água no solo. 5. Vulnerabilidade física do solo. I. Lima, Cláudia Liane Rodrigues de, orient. II. Siqueira, Tirzah Moreira, coorient. III. Título.

CDD 631.432

Elaborada por Ubirajara Buddin Cruz CRB: 10/901

Rômulo Félix Nunes

Simulação geoestatística na avaliação da qualidade física e estrutural de solos subtropicais

Tese aprovada, como requisito parcial, para obtenção do grau de Doutor em Ciências, Programa de Pós-Graduação em Manejo e Conservação do Solo e da Água, Faculdade de Agronomia Eliseu Maciel, Universidade Federal de Pelotas.

Data da Defesa: 27/09/2024

Banca Examinadora:

Prof^a. Dr^a. Cláudia Liane Rodrigues de Lima (Presidente)
Doutora em Agronomia pela Universidade de São Paulo

Prof. Dr. Leandro Sanzi Aquino
Doutor em Agronomia pela Universidade Federal de Pelotas

Prof^a. Dr^a. Lizete Stumpf
Doutora em Agronomia pela Universidade Federal de Pelotas

Prof. Dr. Miguel David Fuentes Guevara
Doutor em Ciências pela Universidade Federal de Pelotas

Agradecimentos

À minha família, minha mãe Angélica, meu pai Carlos, e meus irmãos, por todo apoio e incentivo.

À minha esposa Vanessa, pela cumplicidade, apoio e incentivo nos momentos mais importantes dessa etapa.

Ao Programa de Pós-Graduação em Manejo e Conservação do Solo e da água, por ter proporcionado minha formação acadêmica.

À minha orientadora, Professora Cláudia, pela orientação, apoio, confiança e empenho dedicado à elaboração deste trabalho, e, à minha coorientadora Professora Tirzah, por todo auxílio prestado, durante o período de realização deste curso de pós-graduação.

Agradeço a todos os professores do programa e aos técnicos do laboratório de física do solo da FAEM, pela dedicação e ensinamentos.

Aos meus amigos e colegas do programa Manejo e Conservação do Solo e da água e programa Recursos Hídricos da Universidade Federal de Pelotas por todo apoio.

A todos, aqui citados ou não, que contribuíram de alguma forma, direta ou indiretamente, para a realização deste trabalho.

Resumo

NUNES, Rômulo Félix. **Simulação geoestatística na avaliação da qualidade física e estrutural de solos subtropicais**. 2024. 214f. Tese (Doutorado) – Programa de Pós-Graduação em Manejo e Conservação do Solo e da Água, Faculdade de Agronomia Esileu Maciel, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, 2024.

Existem diversos indicadores da qualidade física do solo (QFS) preconizados na literatura, a saber: macroporosidade, densidade do solo, condutividade hidráulica do solo saturado e índice S. O índice S advém do termo “Soil structure”, sendo um parâmetro obtido através da curva de retenção de água no solo e sensível aos diferentes usos e práticas de manejo do solo, identificando preferencialmente mudanças estruturais relacionadas ao estado original do solo. Utilizando simulação geoestatística, os objetivos deste estudo foram i) definir valores restritivos de índice S; ii) avaliar o impacto das incertezas espaciais no mapeamento dos atributos físico-hídricos do solo; iii) identificar zonas restritivas da qualidade física a partir dos atributos físico-hídricos, considerando as incertezas espaciais; iv) mapear as potenciais zonas restritivas dos atributos físico-hídricos; e v) desenvolver mapas de vulnerabilidade física a partir de cenários restritivos dos atributos físico-hídricos de solos. A simulação geoestatística foi eficiente na caracterização espacial dos atributos do solo e a escala de estudo significativamente o resultado final. A metodologia proposta identificou que o valor limitante de índice S = 0,02 não se adequa às condições da BHSR. A simulação geoestatística identificou os valores limitantes de densidade do solo e índice S para os solos da BHSR. Os índices de vulnerabilidade física do solo, desenvolvidos por meio da simulação sequencial gaussiana, identificaram zonas de vulnerabilidade física do solo e as áreas mais propensas à necessidade de intervenção no manejo, demonstrando-se ferramenta viável para dar suporte às tomadas de decisões quanto ao manejo e conservação da QFS.

Palavras-chave: incertezas espaciais; variabilidade espacial; índice S; água no solo; vulnerabilidade física do solo.

Abstract

NUNES, Rômulo Félix. **Geostatistical Simulation in the Assessment of the Physical and Structural Quality of Subtropical Soils.** 2024. 214p. Thesis (Doctoral Degree). Graduate Program in Management and Conservation of Soil and Water, Esileu Maciel Faculty of Agronomy, Federal University of Pelotas, Pelotas, 2024.

There are several indicators of soil physical quality (SPQ) advocated in the literature, such as macroporosity, bulk density, saturated hydraulic conductivity, and the S-index. The S-index derives from the term "Soil structure" and is a parameter obtained from the soil water retention curve, being sensitive to different land uses and soil management practices. It primarily identifies structural changes related to the soil's original state. Using geostatistical simulation, the objectives of this study were to: i) define restrictive values for the S-index; ii) assess the impact of spatial uncertainties on the mapping of soil physical-hydraulic attributes; iii) identify restrictive zones of physical quality based on physical-hydraulic attributes, considering spatial uncertainties; iv) map potential restrictive zones of physical-hydraulic attributes; and v) develop physical vulnerability maps from restrictive scenarios of soil physical-hydraulic attributes. The geostatistical simulation proved efficient in the spatial characterization of soil attributes, with the study scale significantly influencing the final result. The proposed methodology identified that the limiting value of S-index = 0.02 does not suit the conditions of the BHSR. The geostatistical simulation identified limiting values for bulk density and the S-index for BHSR soils. The soil physical vulnerability indices, developed through sequential Gaussian simulation, identified zones of soil physical vulnerability and areas most prone to intervention in management practices, proving to be a viable tool to support decision-making regarding the management and conservation of SPQ.

Keywords: spatial uncertainties; spatial variability; S-index; soil water; soil physical vulnerability.

Lista de Figuras

Figura 1	(A) Exemplo de uma curva de retenção de água no solo mostrando o ponto de inflexão e a inclinação ω , da reta tangente à curva de retenção de água no solo no ponto de inflexão. (B) Curvas de retenção de água do mesmo solo franco-argiloso com densidades diferentes, sendo um solo degradado e outro não degradado. Fonte: Dexter (2004a) 43	43
Figura 2	Diagrama ternário mostrando contornos de valores constantes de S para solos de textura diferente. A área A é onde $S > 0,04$, a área B é onde $0,03 < S < 0,04$ e a área C é onde $S < 0,03$. Fonte: Dexter (2004a) 44	44
Figura 3	Esquema de semivariograma experimental e teórico e os parâmetros que o descrevem. Fonte: adaptado de Soares (2018). 49	49
Figura 4	Mapa de localização e de elevação da área de estudo: sul do Brasil (A), estado do Rio Grande do Sul (B), município de Pelotas (C), sub-bacia hidrográfica Santa Rita (D). Pontos pretos indicam a malha de amostragem na sub-bacia hidrográfica Santa Rita. 59	59
Figura 5	Mapa de uso dos solos da área de estudo, compreendendo área nativa, campo nativo, cultivos anuais cultivos perenes e áreas industriais. 61	61
Figura 6	Mapa de amostragem incluindo as classes de solos: PBACal: Argissolo Bruno-Acinzentado alumínico; PVAd: Argissolo Vermelho-Amarelo distrófico; RLd: Neossolo Litólico distrófico; SXe: Planossolo Háptico eutrófico. 62	62
Figura 7	Metodologia empregada no artigo nº 2 da tese, intitulado de “Índice S como indicador da qualidade física de solos sob diferentes usos em escala de bacia hidrográfica”. 90	90
Figura 8	Metodologia empregada no artigo nº 2 da tese, intitulado de “Vulnerabilidade física dos solos em escala de bacia hidrográfica, a partir de simulação geoestatística”. 91	91

Lista de Figuras - Artigo 1

Figura 1	Location map of Santa Rita watershed, showing different soil classes (a); location of S-index samples (b); and satellite image (c), in the municipality of Pelotas, in southern Rio Grande do Sul, Brazil.	96
Figura 2	General procedure of statistical and geostatistical analyses for the assessment of the physical soil quality of the Santa Rita watershed, based on the S-index.	98
Figura 3	Standard deviation of the accumulated simulated random fields values of base-10 logarithm of the S-index in the Santa Rita watershed, Pelotas, in southern Rio Grande do Sul, Brazil.	116
Figura 4	Cumulative distribution curve of the means of simulated random fields of base-10 logarithm of the S-index in the Santa Rita watershed, Pelotas, in southern Rio Grande do Sul, Brazil.	117
Figura 5	Simulated random field 2 (a) and 23 (b) of base-10 logarithm of the S-index in the Santa Rita watershed, Pelotas, in southern Rio Grande do Sul, Brazil.	118
Figura 6	Coefficient of variation map using limits proposed by Warrick and Nielsen (1980) for values of simulated base-10 logarithm of the S-index in the Santa Rita watershed, Pelotas, in southern Rio Grande do Sul, Brazil.	119
Figura 7	Dispersion of residual errors of simulated field 2 (a) and simulated field 23 of the base-10 logarithm of the S-index in the Santa Rita watershed, located in Pelotas, in the southern region of Rio Grande do Sul, Brazil.	120
Figura 8	Comparison of the histograms of simulated random field 2 (a); simulated random field 23 (b); and the base-10 logarithm of the unclustered S-index (c) in the Santa Rita watershed, Pelotas, in southern Rio Grande do Sul, Brazil.	120
Figura 9	Comparison of the semivariograms of random fields 2 and 23 of the base-10 logarithm of the S-index, and the ungrouped theoretical semivariogram of the base-10 logarithm of the S-	

index in the Santa Rita watershed, Pelotas, in southern Rio Grande do Sul, Brazil..... 121

Figura 10

Probability of occurrence of the S-index below 0.035 (a) and below 0.039 (b) in the Santa Rita watershed, located in Pelotas, southern Rio Grande do Sul, Brazil. 123

Lista de Figuras - Artigo 2

Figura 1	Location map of the Santa Rita watershed, displaying sampling points with a zoomed-in focus on the sampling density, within the soil classification map at the great group level, situated in the municipality of Pelotas, in the southern region of Rio Grande do Sul, Brazil.	143
Figura 2	General procedure of statistical and geostatistical analyses for assessing the spatial uncertainties of the physical vulnerability of the soil in the Santa Rita watershed, based on physical-hydric attributes.	145
Figura 3	General procedure for the selection of simulated scenarios for the uncertainty analysis of physical-hydric attributes in the Santa Rita watershed.	151
Figura 4	Standard deviation of the accumulated simulated random fields values of macroporosity (a); bulk density (b); and napierian logarithm of saturated hydraulic conductivity (c), in the Santa Rita watershed, Pelotas, in southern Rio Grande do Sul, Brazil.	158
Figura 5	Simulated random field 24 (a); simulated random field 15 (b); uncertainty of the simulated random fields (c); and coefficient of variation of the simulated random fields (d) of macroporosity, in the Santa Rita watershed, Pelotas, in southern Rio Grande do Sul, Brazil.	160
Figura 6	Simulated random field 2 (a); simulated random field 4 (b); uncertainty of the simulated random fields (c); and coefficient of variation of the simulated random fields (d) of bulk density, in the Santa Rita watershed, Pelotas, in southern Rio Grande do Sul, Brazil.	161
Figura 7	Simulated random field 70 (a); simulated random field 53 (b); uncertainty of the simulated random fields (c); and coefficient of variation of the simulated random fields (d) of napierian logarithm of saturated hydraulic conductivity, in the Santa Rita watershed, Pelotas, in southern Rio Grande do Sul, Brazil.	163

Figura 8	Dispersion of residual errors of simulated field 24 of the macroporosity (a); simulated field 15 of the macroporosity (b); simulated field 2 of the bulk density (c); simulated field 4 of the bulk density (d); simulated field 70 of the of napierian logarithm of saturated hydraulic conductivity (e); simulated field 53 of the of napierian logarithm of saturated hydraulic conductivity (f), in the Santa Rita watershed, located in Pelotas, in the southern region of Rio Grande do Sul, Brazil.	1640
Figura 9	Comparison of the histograms of simulated field 24 of the macroporosity (a); simulated field 15 of the macroporosity (b); declustered macroporosity (c); simulated field 2 of the bulk density (d); simulated field 4 of the bulk density (e); declustered bulk density (f); simulated field 70 of the of napierian logarithm of saturated hydraulic conductivity (g); simulated field 53 of the of napierian logarithm of saturated hydraulic conductivity (h), unclustered napierian logarithm of saturated hydraulic conductivity (i), in the Santa Rita watershed, located in Pelotas, in the southern region of Rio Grande do Sul, Brazil.	166
Figura 10	Comparison of the semivariograms of random fields and the declustered theoretical semivariogram of macroporosity (a); bulk density (b); and napierian logarithm of saturated hydraulic conductivity (c), in the Santa Rita watershed, Pelotas, in southern Rio Grande do Sul, Brazil.	168
Figura 11	Probability of occurrence of macroporosity below 6.26% (a); below 9.01% (b); below 13.09% (c); and below 10% (d), in the Santa Rita watershed, located in Pelotas, southern Rio Grande do Sul, Brazil.	170
Figura 12	Probability of occurrence of bulk density above 1.44 Mg m ⁻³ (a); above 1.54 Mg m ⁻³ (b); above 1.61 Mg m ⁻³ (c); and above 1.53 Mg m ⁻³ (d) in the Santa Rita watershed, located in Pelotas, southern Rio Grande do Sul, Brazil.	171
Figura 13	Probability of occurrence of saturated hydraulic conductivity below 8.83 mm h ⁻¹ (a); below 26.1 mm h ⁻¹ (b); below 67.79	

mm h⁻¹ (c); and below 25.86 mm h⁻¹ (d) in the Santa Rita watershed, located in Pelotas, southern Rio Grande do Sul, Brazil. 172

Figura 14	Percentage of soil physical vulnerability based on critical bulk density and saturated hydraulic conductivity, defined for the study area (a); percentage of soil physical vulnerability based on critical bulk density, saturated hydraulic conductivity defined for the study area, and a critical macroporosity of 10% (b); percentage of soil physical vulnerability based on critical bulk density and macroporosity, using threshold values from the literature (c); cell-by-cell map of uncertainties in the probability of soil physical vulnerability, using three physical vulnerability maps generated from different combinations of physical-hydric attributes described in figures a, b, and c (d), in the Santa Rita watershed, located in Pelotas, southern Rio Grande do Sul, Brazil.	174
------------------	---	-----

Figura 15	Map representing the pessimistic (a) and optimistic (b) scenarios of soil physical vulnerability, developed on the values corresponding to the 5th and 95th percentiles, cell by cell, of the physical vulnerability percentage, respectively, using three physical vulnerability maps generated from different combinations of physical-hydric attributes; land use map (c); elevation map (d), in the Santa Rita watershed, located in Pelotas, southern Rio Grande do Sul, Brazil.	176
------------------	--	-----

Lista de Tabelas – Artigo 1

Tabela 1	Cut-off values for the S index, according to limits proposed in the literature and developed for the data from the Santa Rita watershed, located in the municipality of Pelotas, in southern Rio Grande do Sul, Brazil.	104
Tabela 2	Descriptive statistics of the S-index subdivided by land uses, soil classes, and textural classes for data from the Santa Rita watershed, situated in the municipality of Pelotas, in the southern region of Rio Grande do Sul, Brazil.	105
Tabela 3	Macroporosity as a function of the S-index limits proposed by Dexter (2004) was analyzed using data from the Santa Rita watershed located in the municipality of Pelotas, in the southern region of Rio Grande do Sul, Brazil.	108
Tabela 4	S-index values corresponding to the critical macroporosity of 10%, were obtained from regression models using data from the Santa Rita watershed, located in the municipality of Pelotas, in the southern region of Rio Grande do Sul, Brazil. ..	110
Tabela 5	Comparison of the mean values and respective critical values of the S-index under the boundary conditions of the Santa Rita watershed, located in the municipality of Pelotas, in the southern region of Rio Grande do Sul, Brazil.	112
Tabela 6	Parameters of semivariogram models fitted to the base-10 logarithm of the S-index for data from the Santa Rita watershed, located in the municipality of Pelotas in the southern region of Rio Grande do Sul, Brazil.	113
Tabela 7	Parameters of the semi-variogram models fitted to the gaussian scores of the base-10 logarithm of the S-index for data from the Santa Rita watershed, located in the municipality of Pelotas in the southern region of Rio Grande do Sul, Brazil...	115
Tabela 8	Relationship between S-index ranges and the mean values of physical-hydraulic attributes of soils in the Santa Rita watershed, located in the municipality of Pelotas, in the southern region of Rio Grande do Sul, Brazil.	124

Lista de Tabelas – Artigo 2

Tabela 1	Thresholds proposed by the literature for the physical-hydric attributes.	152
Tabela 2	Descriptive statistics for exploratory analysis of physical-hydric attributes of soils in the Santa Rita watershed, located in the municipality of Pelotas, in the southern region of Rio Grande do Sul, Brazil.	155
Tabela 3	Parameters of the semivariogram models fitted to the physical-hydric attributes for data from the Santa Rita watershed, located in the municipality of Pelotas in the southern region of Rio Grande do Sul, Brazil.	156
Tabela 4	Evaluation of the preferential clustering effect resulting from the sample density of the physical-hydric attributes for data from the Santa Rita watershed, situated in the municipality of Pelotas in the southern region of Rio Grande do Sul, Brazil. ...	157
Tabela 5	Thresholds values for the physical-hydric attributes, according to limits proposed in the literature and developed for the data from the Santa Rita watershed, located in the municipality of Pelotas, in southern Rio Grande do Sul, Brazil.	168

SUMÁRIO

1. Introdução	19
1.1. Hipóteses	21
1.2. Objetivos	22
1.2.1. Gerais	22
1.2.2. Específicos	22
2. Revisão de literatura	24
2.1. Qualidade física do solo	24
2.2. Índice S	25
2.3. Geoestatística	28
2.3.1. Modelagem variográfica	31
2.3.2. Simulação geoestatística.....	32
2.3.2.1. Simulação sequencial gaussiana	33
3. Projeto de pesquisa: Simulação geoestatística na avaliação da qualidade física e estrutural de solos subtropicais.....	35
Resumo	35
3.1. Introdução	36
3.2. Revisão de literatura	39
3.2.1. Qualidade física do solo	39
3.2.2. Curva de retenção de água no solo	40
3.2.3. Modelo de Van Genuchten (1980)	40
3.2.4. Índice S	41
3.2.5. Geoestatística	45
3.2.5.1. Modelagem Variográfica	47
3.2.5.2. Simulação geoestatística	49
3.2.5.2.1. Simulação sequencial gaussiana	51
3.2.5.2.2. Simulação sequencial de indicadores	53
3.2.5.2.3. Validação das simulações.....	55
3.3. Hipóteses	56

3.4. Objetivos	57
3.4.1. Gerais.....	57
3.4.2. Específicos.....	57
3.5. Material e Métodos	59
3.5.1. Descrição da área de estudo	59
3.5.2. Amostragem de solo	62
3.5.3. Análises estatísticas.....	63
3.5.3.1. Análise exploratória.....	63
3.5.4. Análises geoestatísticas.....	64
3.6. Metas a serem alcançadas.....	66
3.7. Impactos esperados	67
3.7.1. Impactos econômicos.....	67
3.7.2. Impactos sociais.....	67
3.7.3. Impactos ambientais	67
3.8. Orçamento detalhado	69
3.8.1. Custeio	69
3.8.1.1. Material de consumo	69
3.8.1.2. Passagens e diárias	69
3.8.2. Capital (Material Permanente).....	70
3.8.3. Orçamento global	70
3.9. Divulgação dos resultados	71
3.10. Cronograma de atividades	72
3.11. Equipe	73
3.12. Referências bibliográficas	74
4. Relatório do trabalho de campo	88
4.1. Amostragem de solo.....	88
4.2. Metodologia empregada nos artigos científicos	89
5. Artigo 1: The S-index for evaluating soil physical quality under different land uses on a watershed scale	93

6. Artigo 2: Geostatistical simulation in assessing spatial uncertainties of soil physical vulnerability at the watershed scale.....	140
7. Considerações finais	192
REFERÊNCIAS.....	193

1. Introdução

O conhecimento da qualidade do solo é de grande importância para o desenvolvimento socioambiental, permitindo a otimização do planejamento e gestão dos recursos naturais (Souza *et al.*, 2021), auxiliando os agricultores na compreensão da agricultura de conservação (Telles *et al.*, 2022). Os processos físicos, químicos e biológicos que ocorrem no solo são inter-relacionados, e, assim, a qualidade física do solo (QFS) afeta os processos químicos e biológicos, desempenhando um papel fundamental na qualidade do solo (Dexter, 2004; Walia e Dick, 2018).

O crescente aumento populacional tem demandado um aumento na produção de alimentos e, conseqüentemente, a elevação do uso e ocupação de áreas agricultáveis. Práticas inadequadas de manejo têm causado, erosão, contaminação da água e do solo e assoreamento de rios (Tavares *et al.*, 2022), ocasionando alteração da QFS (Cherubin *et al.*, 2016). Dentre os processos que diminuem o funcionamento e a capacidade física do solo, destaca-se a compactação do solo, como um dos principais indicadores da degradação física estrutural e diminuição da QFS (Vizioli *et al.*, 2021).

A gestão inadequada da terra e práticas de uso do solo nessas áreas de rápido crescimento populacional levaram a fenômenos prejudiciais à qualidade e funcionamento do solo, como erosão, degradação de recursos hídricos e do solo, além da siltagem de rios (Cherubin *et al.*, 2016; Tavares *et al.*, 2022). A compactação do solo destaca-se como um dos principais indicadores de degradação física e redução da QFS entre os vários processos que contribuem para a deterioração da função do solo e a diminuição da capacidade ambiental (Vizioli *et al.*, 2021; Oliveira *et al.*, 2022).

Atributos físico-hídricos dos solos têm sido utilizados para avaliar as mudanças estruturais do solo (Valani *et al.*, 2020; Silva *et al.*, 2022), e possuem um papel importante na tomada de decisões em escala de bacias hidrográficas (Beskow *et al.*, 2016; Moratelli *et al.*, 2023).

A avaliação da QFS tem se baseado no uso de indicadores, que simplificam e fornecem informações para tornar um fenômeno perceptível e compreensível para serem utilizadas em tomadas de decisões (Van Der Werf e Petit, 2002; Moebius-Clune *et al.*, 2011; Toledo *et al.*, 2013; Julieta *et al.*, 2016).

Estudos têm sido desenvolvidos acerca de indicadores e valores de referência para analisar a qualidade física de solos agrícolas (Assis Júnior *et al.*, 2016; Bünemann *et al.*, 2018).

As bacias hidrográficas, importantes unidades de gestão, têm sido foco de estudos relacionados aos recursos hídricos e manejo do solo (Beskow *et al.*, 2016; Soares *et al.*, 2020; Dos Santos *et al.*, 2021) que visam o planejamento e manejo dos recursos naturais (Souza *et al.*, 2021). Em escala de bacia hidrográfica, pode ocorrer a presença de diversas classes, usos e ocupações dos solos. Essa grande variedade informações pode gerar variabilidade na qualidade física do solo. Conhecer a dinâmica das mudanças da qualidade física do solo por meio índices e interações entre os atributos é extremamente importante para a escolha adequada de práticas de intervenções de uso e manejo agrícola (Alencar *et al.*, 2015).

Estudos avaliam a qualidade física dos solos, a partir do índice S e de atributos do solo (Lima *et al.*, 2014; Hebb *et al.*, 2017; Kiani *et al.*, 2017; Timm *et al.*, 2020), bem como analisam incertezas espaciais de propriedades do solo em escala de propriedade rural e/ou bacia hidrográfica (Siqueira *et al.*, 2019; Soares *et al.*, 2023). Entretanto, considera-se, escassos ainda os estudos relacionados à análise das incertezas espaciais dos atributos do solo, do índice S e da avaliação visual do solo em escala de bacia hidrográfica no sul do Brasil.

A microbacia hidrográfica Santa Rita (BHSR) localiza-se no município de Pelotas no sul do Rio Grande do Sul, constitui uma unidade de planejamento fundamental socio e economicamente para a região. Colabora com a alimentação dos corpos hídricos para o abastecimento de água da população de Pelotas. Possui uma grande variedade de classes e usos de solos, destacando-se a agricultura familiar. Mapear a qualidade física do solo, identificando potenciais zonas de vulnerabilidade física do solo considerando a análise de incertezas dos atributos físicos do solo e do índice S, é um estudo estratégico e de grande relevância para o desenvolvimento socioeconômico da região, propiciando aos gestores e produtores ferramentas que subsidiem as tomadas de decisões quanto às práticas mais adequadas de uso e manejo do solo e da água, visando a sustentabilidade ambiental.

1.1. Hipóteses

Todas as hipóteses deste estudo foram testadas na microbacia hidrográfica Santa Rita, Pelotas, Rio Grande do Sul.

1. O índice S, a macroporosidade, a densidade do solo, e a condutividade hidráulica do solo saturado são capazes de representar a qualidade física, quando consideradas por meio da simulação geoestatística as incertezas espaciais.
2. Valores limitantes do índice S propostos por Dexter (2004a) que separaram solos degradados ($S = 0,02$) e, aqueles com condições físicas ruins e boas ($S = 0,035$), podem não ser representativos para as condições edafoclimáticas da área de estudo.
3. É possível a indicação de valores de índice S restritivos para solos subtropicais estudados a partir do valor restritivo de macroporosidade do solo (10%).
4. Mapas de probabilidade de ocorrência da área estar restritiva fisicamente baseados nos valores limitantes dos valores limitantes dos atributos físico-hídricos do solo, por meio de técnicas de simulação geoestatística, podem ser eficientes em identificar os valores restritivos destes atributos, mais próximos do real.
5. A vulnerabilidade física do solo pode ser mapeada a partir da integração dos cenários restritivos simulados de dois ou mais atributos físico-hídricos do solo, permitindo a identificação de zonas restritivas de qualidade física dos solos.

1.2. Objetivos

1.2.1. Gerais

Na microbacia hidrográfica Santa Rita, inserida na bacia do hidrográfica do arroio Moreira Fragata e localizada em região subtropical no sul do Rio Grande do Sul, Brasil, objetiva-se:

i) Definir valores restritivos de índice S; ii) avaliar o impacto das incertezas espaciais no mapeamento dos atributos físico-hídricos do solo; iii) identificar zonas restritivas da qualidade física a partir dos atributos físico-hídricos, considerando as incertezas espaciais; iv) mapear as potenciais zonas restritivas dos atributos físico-hídricos, utilizando simulação geoestatística; e v) desenvolver mapas de vulnerabilidade física a partir de cenários restritivos dos atributos físico-hídricos de solos.

1.2.2. Específicos

Os objetivos específicos foram:

- I. Caracterizar em uma malha amostral estabelecida, a distribuição e a variabilidade espacial, considerando as incertezas espaciais do(a): índice S, macroporosidade, densidade do solo, e da condutividade hidráulica do solo saturado, por meio de técnicas de simulação geoestatística.
- II. Definir valores restritivos de índice S, a partir da macroporosidade para solos subtropicais do sul do Brasil sob diferentes classes, usos e ocupação.
- III. Desenvolver mapas de distribuição de probabilidades para os valores propostos na literatura para o índice S, macroporosidade, densidade e condutividade hidráulica do solo saturado, determinando assim cenários equiprováveis de zonas restritivas de qualidade física do solo a partir das respectivas variáveis, por meio de simulação geoestatística.

- IV. Desenvolver mapas de zonas restritivas a partir da curva de distribuição de probabilidade acumulada para macroporosidade do solo, densidade do solo e condutividade hidráulica do solo saturado, determinando assim cenários equiprováveis de zonas restritivas de qualidade física do solo utilizando diversos cenários de limites críticos destes atributos, por meio de simulação geoestatística. Bem como, averiguar se os valores críticos propostos na literatura são representativos para a microbacia Santa Rita e, definir valores restritivos que sejam mais próximos da realidade, tomando como base a macroporosidade de 10%, considerada limitante.
- V. Desenvolver mapas de vulnerabilidade física, a partir da integração de mapas de distribuição de probabilidade referentes aos cenários críticos dos atributos físico-hídricos dos solos.

2. Revisão de literatura

2.1. Qualidade física do solo

De acordo com Doran e Parkin (1994), a qualidade do solo pode ser interpretada como a capacidade em manter as funcionalidades dentro dos limites naturais do ecossistema, sustentando a produtividade vegetal e animal, mantendo e/ou melhorando a qualidade da água e do ar, apoiando a habitação humana e a saúde dos seres vivos. Zornoza *et al.* (2015) afirmam que devido à complexidade, a qualidade de um solo deve ser interpretada a partir de propriedades indicadoras de qualidade. Uma agricultura mais sustentável pode ser atingida a partir do monitoramento das propriedades indicadoras de qualidade dos solos em seus diferentes usos e sistemas de manejo (Cherubin *et al.*, 2015).

De acordo com Shahane e Shivay (2021), há uma extensão de 1.036 a 1.470 milhões de hectares de área degradada no mundo, exigindo assim, a manutenção das propriedades do solo responsáveis por mantê-lo saudável. Para conhecer a qualidade do solo é necessário meios de avaliação, um grande desafio por parte dos cientistas. Metodologias têm sido desenvolvidas para dar suporte aos produtores e pesquisadores para o entendimento de processos e manejo do solo, promovendo sustentabilidade (Bünemann *et al.*, 2018).

De acordo com Dexter (2004a), as propriedades do solo desempenham um importante papel na qualidade, visto que exercem influência sobre os processos químicos e biológicos. Shahab *et al.* (2013) afirmam que as propriedades indicadoras de qualidade física são as relacionadas com a agregação, estrutura e movimento da água no solo. Dentre as propriedades mais utilizadas como indicadoras da qualidade, destacam-se: densidade, porosidade, retenção de água no solo e índice S. (Dexter, 2003A; Stefanoski *et al.*, 2013; Valani *et al.*, 2022).

A utilização da curva de retenção de água no solo (CRAS) representa uma ferramenta crucial na avaliação da qualidade física, sendo caracterizada como uma função hidráulica intrínseca ao solo (Rickson *et al.*, 2012). Um aspecto de destaque entre as informações valiosas obtidas por meio da CRAS é o índice S (Dexter, 2004), uma vez que demonstra sensibilidade a alterações estruturais no

solo associadas às práticas de manejo (Rossetti e Centurion, 2022). Os valores de determinados atributos físico-hídricos do solo, tais como macroporosidade, densidade do solo e condutividade hidráulica do solo saturado, também auxiliam na avaliação da qualidade física, visto que guardam relações diretas com diferentes usos, ocupações e processos de degradação do solo.

A degradação da qualidade física do solo por compactação reflete em valores mais baixos de macroporosidade, mais elevados de densidade do solo e, menores valores de condutividade hidráulica do solo saturado (Zimmermann *et al.*, 2006; Mainuri e Owino, 2013). Observa-se também a contribuição do pisoteio animal para a redução de Ma em algumas regiões da área de estudo, conforme documentado por Balbinot *et al.* (2009), Moreira *et al.* (2014) e Ortigara *et al.* (2014). A pressão exercida pelo pisoteio animal resulta na transformação de macroporos em microporos, alterando a estrutura do solo (Bertol *et al.*, 2004; Bonell *et al.*, 2010; Salemi *et al.*, 2013).

Para a avaliação da qualidade física, se faz necessário que o indicador seja sensível aos diferentes usos e práticas de manejo do solo, permitindo, a identificação de mudanças estruturais em relação ao seu estado original do solo (Dexter, 2004a). Isto torna-se necessário devido aos efeitos de diferentes usos e manejos sobre as condições edafoclimáticas de cada região (Teferi *et al.*, 2016).

2.2. Índice S

A curva de retenção de água no solo (CRAS) expressa a relação entre o conteúdo de água volumétrica e o logaritmo da energia potencial matricial com que a água está retida nos poros do solo e/ou adsorvida nas partículas minerais (Silva *et al.*, 2010; Jong Van Lier, 2020). A CRAS é uma função específica de cada solo, reflexo das relações de diversos atributos, como por exemplo, teor de argila, macroporosidade, densidade do solo, entre outros (Reichardt e Timm, 2020), e está diretamente relacionada com a capacidade de armazenamento de água no solo para o desenvolvimento das plantas (Dalmago *et al.*, 2009).

A CRAS é um indicador da qualidade física estrutural, visto que, a partir dela podem ser obtidas informações, como: porosidade total, macroporosidade

do solo, microporosidade do solo, capacidade de campo (CC), ponto de murcha permanente (PMP), capacidade de água disponível (CAD) e índice S (Dexter, 2004a; Filgueiras *et al.*, 2016; Reichardt e Timm, 2020).

Modelos matemáticos foram desenvolvidos para caracterizar a forma com que a água está retida. Dentre os modelos desenvolvidos, destaca-se o de van Genuchten (1980) (Equação 1), que, segundo Jong van Lier (2020), é um dos mais utilizados para descrever as propriedades hidráulicas.

$$\theta(\Psi_m) = \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{[1 + (\alpha|\Psi_m|)^n]^m} \quad \text{Equação 1}$$

Onde: $\theta(\Psi_m)$ é a umidade volumétrica em função do potencial mátrico Ψ_m ; θ_s e θ_r representam a umidade volumétrica na saturação (porosidade total) e residual, respectivamente;

Ψ_m é o potencial mátrico total de água no solo (kPa);

α , n e m : são parâmetros empíricos da equação e são obtidos por ajuste matemático.

Utiliza-se a restrição de Mualem (1976), onde $m = 1 - (1/n)$ e $n > 1$.

O índice S proposto por Dexter (2004a; 2004b; 2004c) representa o valor da inclinação da reta no ponto de inflexão da CRAS ajustada pelo modelo de van Genuchten (1980). De acordo com Dexter (2004a), o S representa a porosidade microestrutural do solo, ou seja, os poros estruturais que compreendem microfendas, fendas, bioporos e macroestruturas do solo.

Dexter e Bird (2001) demonstraram que o módulo do potencial de água no ponto de inflexão quando é plotado como logaritmo natural do potencial mátrico ($\ln(\Psi_i)$) em relação ao conteúdo de água no solo (θ) é expresso pela Equação 2. Substituindo o potencial mátrico da equação de van Genuchten (1980) (Equação 1) pela Equação 2, resulta no conteúdo de água no solo no ponto de inflexão (Equação 3). A inclinação da curva de retenção de água no ponto de inflexão está evidenciada na Equação 4.

$$\Psi_{mi} = \frac{1}{\alpha} \left(\frac{1}{m} \right)^{1/n} \quad \text{Equação 2}$$

$$\theta_{gi} = (\theta_{gs} - \theta_{gr}) \left(1 + \frac{1}{m} \right)^{-m} + \theta_{gr} \quad \text{Equação 3}$$

$$S = -n(\theta_{gs} - \theta_{gr}) \left(1 + \frac{1}{m}\right)^{-(1+m)} \quad \text{Equação 4}$$

Onde: Ψ_{mi} é o potencial mátrico no ponto de inflexão da CRAS;

θ_{gi} é o conteúdo gravimétrico de água no ponto de inflexão;

S é o índice S;

θ_{gs} é o conteúdo gravimétrico de água na saturação;

θ_{gr} é o conteúdo gravimétrico de água residual;

α , m e n são parâmetros empíricos da equação e são obtidos por ajuste matemático.

Dexter (2004a) e Dexter e Czyz (2007) definiram faixas de limites de qualidade física (estrutural) do solo a partir do índice S. $S \geq 0,050$ indica que a qualidade física é considerada muito boa, enquanto $0,035 \leq S < 0,050$ é considerada boa qualidade física, $0,020 \leq S < 0,035$ é considerada de qualidade física pobre e $S < 0,020$ é considerada a qualidade física muito pobre ou degradada.

A porosidade total e os tamanhos de poros influenciam a curva de retenção de água no solo, modificando graficamente o seu formato. A inclinação no ponto de inflexão da curva pode refletir em alguns aspectos referentes à qualidade física do solo, como, compactação, infiltração de água no solo e estabilidade de agregados (Narjary e Aggarwal, 2014). O valor de índice S diminui com o aumento da densidade do solo (Dexter, 2004a), possuindo menor inclinação, para o solo degradado por compactação e maior inclinação, para o solo não degradado.

Matematicamente, o índice S representa o valor da inclinação da reta tangente no ponto de inflexão da CRAS, traçada a partir da umidade gravimétrica e do logaritmo natural do potencial mátrico de água no solo. De acordo com Dexter (2004a), na maioria dos solos, os valores mais elevados de S indicam uma melhor microestrutura. Estudos demonstram correlações matemáticas com a densidade do solo (Tormena *et al.*, 2008; Cavalieri *et al.*, 2009; Caviglione, 2018) e com a macroporosidade (Andrade e Stone, 2009; Caviglione, 2018).

Embora, o índice S tenha sido adequado para avaliar a qualidade física do solo a partir de condições estruturais diversas (Lima *et al.*, 2014, Rossetti e

Centurion, 2018; Timm *et al.*, 2020), alguns autores defendem que o valor limitante definido por Dexter (2004a) e Dexter e Czyz (2007), não se adequa a diversas condições de contorno descritas na literatura (Jong Van Lier, 2014, Assis Júnior *et al.*, 2016, Armindo e Wendroth, 2016), sendo necessária uma reavaliação dos limites ideais do índice S para regiões tropicais e subtropicais (Andrade e Stone, 2009; Oliveira *et al.*, 2014b). Moncada *et al.* (2015) afirmam que se a CRAS é conhecida, pode não ser interessante avaliar a qualidade física e estrutural dos solos com base em um único ponto da curva.

O índice S é um indicador de qualidade física e estrutural sensível ao uso do solo e diferentes manejos (Hebb *et al.*, 2017; Kiani *et al.*, 2017). Heeb *et al.* (2017) afirmam que o índice S demonstrou-se um indicador robusto e capaz de avaliar a qualidade de solos de textura fina, encontrando diferenças significativas em solos sob cultivo anual e pastagens nativas e introduzidas. Reynolds *et al.* (2009) afirmam que para solos arenosos, o índice S pode não ser eficaz. Beutler *et al.* (2008), encontraram valores de índice S superior ao limite crítico proposto por Dexter (2004a), quando avaliada a produtividade da soja e milho (0,056 e 0,062, respectivamente). Andrade e Stone (2009) afirmam que para solos tropicais do Brasil, o limite de $S=0,045$ foi mais adequado como o valor mínimo de S para caracterizar solos com qualidade estrutural. Sendo este limite, relacionado aos limites críticos de densidade, macroporosidade, porosidade total e relação entre microporosidade e macroporosidade do solo para adequado crescimento das plantas (Andrade e Stone, 2009).

2.3. Geoestatística

A geoestatística é o ramo da estatística que estuda variáveis aleatórias que possuem estrutura de dependência espacial. A partir da geoestatística se faz a caracterização dos fenômenos naturais a partir de variáveis regionalizadas (VR's), considerando assim, a posição espacial de cada variável do estudo (Matheron, 1962). Os fenômenos naturais podem assumir dois aspectos contraditórios: (1) aleatório ou estocástico: as variáveis podem assumir quaisquer valores no espaço, segundo uma determinada distribuição de probabilidade baseada em dados amostrais; e (2) estruturado ou determinístico:

as variáveis assumem valores de forma estruturada espacialmente, não envolvendo quaisquer interpretações probabilísticas (Andriotti, 2003). De acordo com Landim (2003) e Soares (2006), a partir das técnicas geoestatísticas é possível entender as leis que condicionam o comportamento das VR's, por meio do estudo de estrutura ou dependência espacial.

Conforme Matheron (1963), a geoestatística é fundamentada na teoria das VR's. A variação de uma variável regionalizada (VR) é descrita por uma função aleatória (FA), que é composta por um conjunto de variáveis aleatórias que podem assumir componentes aleatórios ou estruturados (Huijbrets, 1975). De acordo com Burrough *et al.* (2015), a variação espacial de uma VR é expressa pela soma de três componentes: componente estrutural, associada a um valor médio; componente aleatória espacialmente estruturado, associada a variação da VR; ruído ou erro residual espacialmente não correlacionado, associado a erros de medições e inferências. Sendo assim, a VR pode ser considerada uma realização particular da VA em um determinado local do espaço, ou seja, $VR(z(x))$ é uma VA que assume diferentes valores da variável $z(x)$, em função da localização georreferenciada x no espaço (Journel e Huijbregts, 1978)

Para variáveis serem submetidas às técnicas geoestatísticas, duas hipóteses devem ser atendidas: (1) estacionariedade de 1ª ordem, que é caracterizada como uma variável aleatória que possui esperança matemática constante, independentemente de sua origem no espaço e, conseqüentemente, possua a mesma média para toda região em estudo (Reichardt e Timm, 2020); (2) estacionariedade de 2ª ordem, que é relacionada a condição, se o segundo momento em relação à origem é constante, tem-se então que, além da média, a variância é constante, independente da origem no espaço ou no tempo (Matheron, 1963).

De acordo com Oliver e Webster (2014), processo aleatório é representado conforme a equação 5.

$$Z(u) = \mu + \varepsilon(u) \quad \text{Equação 5}$$

$Z(u)$ é um processo (função) randômico, μ é a média do processo, considerado estacionário, e $\varepsilon(u)$ é um processo intrinsecamente estacionário com

média zero. A covariância $C(h)$ entre duas variáveis aleatórias $[Z(u), Z(u + h)]$, separadas por uma distância h , é dada por meio da equação 6.

$$C(h) = E[Z(u), Z(u + h)] \quad \text{Equação 6}$$

Que é equivalente a equação 7.

$$C(h) = E[\{Z(u) - \mu\}\{Z(u + h) - \mu\}] = E[Z(u)Z(u + h) - \mu^2] \quad \text{Equação 7}$$

Nas equações 5, 6 e 7, h (denominado de *lag* em inglês) é a distância de separação entre os pares de observações de $Z(u)$ e $Z(u + h)$ medidos nos locais u e $u + h$ e denota a esperança matemática.

A geoestatística vem sendo utilizada na ciência para caracterizar a variabilidade espacial de propriedades do solo e para mapear a distribuição espacial de determinadas propriedades por meio da técnica de krigagem ordinária (Goovaerts, 1999; Chiba *et al.*, 2010; Zonta *et al.*, 2014; Aquino *et al.*, 2015; Montanari *et al.*, 2015; Wang e Shi, 2018). A krigagem tem demonstrado bom desempenho para estimativa em grandes escalas, como é utilizada na hidrologia e na meteorologia (alsamamra *et al.* 2009; Cornelissen *et al.*, 2014). Porém, possui algumas limitações: subestimativa da amplitude dos dados reais (Delbari *et al.*, 2009); a variância do erro de estimativa é associada ao arranjo espacial das amostras e ao modelo do semivariograma e independente dos valores reais (Yamamoto e Landim, 2013); possui boa precisão local, porém, desconsidera os momentos estatísticos globais dos valores estimados (Heuvelink, 2014). A medida indicativa da magnitude do erro de estimação dos atributos é denominada incerteza. Para toda estimativa há uma incerteza associada, uma vez que, este não pode ser determinado com exatidão, pois, seria necessário o conhecimento do valor real do atributo em cada posição estimada (Isaaks e Srisvastava, 1989). A krigagem ordinária não é capaz de prever as incertezas associadas às estimativas (Isaaks e Srivastava, 1989). A incerteza deve ser considerada para que as métricas estatísticas globais sejam bem caracterizadas (QU *et al.*, 2013). Nesse sentido, a simulação geoestatística tem demonstrado ser uma excelente ferramenta para a avaliação das incertezas espaciais de uma determinada variável (Cornelissen *et al.*, 2014; Qu *et al.*, 2014).

2.3.1. Modelagem variográfica

O semivariograma é uma função intrínseca que mede as semivariâncias entre pares de amostras separados por uma distância h (Oliver e Webster, 2014), reflete a estrutura dos fenômenos espacializados, e é definida como a variância do erro de estimação da variável desconhecida em $(u + h)$ com auxílio da amostra em (u) (Andriotti, 2003). O semivariograma experimental pode ser obtido utilizando o estimador clássico de Matheron, por meio da equação 8 (Matheron, 1963).

$$y(h) = \frac{1}{2n(h)} \sum_{\alpha=1}^{n(h)} [z(u + h) - z(u)]^2 \quad \text{Equação 8}$$

Onde, $y(h)$ é o valor da semivariância experimental em função de h ;
 $n(h)$ é o número de pares de observações da variável Z separados por uma distância h ; e h é a distância de separação entre os pares de observações $n(h)$, medidos em u e $u + h$.

Os modelos teóricos esférico, exponencial e gaussiano são os mais comuns, podendo ser ajustados aos semivariogramas experimentais (Webster e Oliver, 2007) e, a partir dos ajustes, os parâmetros da modelagem variográfica são obtidos, tais como: alcance (a), patamar ($C+c_0$), contribuição (C) e efeito pepita (c_0). A dependência espacial é observada no semivariograma, pois os pontos de semivariância experimental demonstram um comportamento crescente à medida que a distância aumenta até estabilizarem e se tornarem independentes entre si, com os pontos de semivariância apresentando um comportamento variando em torno da variância a priori dos dados. O alcance (a) representa a distância na qual as observações da variável passam a não se correlacionarem entre si, tornando-se independentes (Yamamoto e Landim, 2013). O valor de semivariância correspondente ao alcance (a) é o patamar ($C+c_0$). Representa a soma da variância explicada pela estrutura de correlação espacial (C) com a variância não explicada, que é representada pelo efeito pepita

(c_0) (Reichardt e Timm, 2020). O efeito pepita (c_0), por sua vez, é a descontinuidade no gráfico de semivariância quando a distância h tende a zero, e reflete a incerteza associada ao espaçamento das amostras no espaço, representando a variabilidade não explicada da variável de estudo (Yamamoto e Landim, 2013). A contribuição (C) é a variância explicada pela estrutura de continuidade espacial e, de acordo com Reichardt e Timm (2020), numericamente a contribuição é a diferença entre o patamar ($C+c_0$) e o efeito pepita (c_0).

De acordo com Oliver e Webster (2014), a modelagem variográfica é realizada por meio do ajuste de uma função entre os pontos de semivariância experimental, de modo que a curva ajustada represente continuamente o comportamento dos pontos experimentais de semivariância e, consequentemente, o padrão da estrutura de continuidade espacial da variável de estudo. Sendo este, um processo supervisionado que depende da experiência do pesquisador e do auxílio de programas computacionais confiáveis.

2.3.2. Simulação geoestatística

A simulação geoestatística consiste em métodos estocásticos baseados no desenvolvimento de diversos cenários equiprováveis da distribuição espacial da variável de interesse, também denominados de campos aleatórios (Goovaerts, 1997). Os campos aleatórios são capazes de reproduzir momentos estatísticos dos valores reais, obtendo assim, uma boa precisão global da variável (reprodução do histograma e do semivariograma) (Nunes e Almeida, 2010; Beretta *et al.*, 2011). A simulação geoestatística tem sido uma das técnicas mais utilizadas na análise das incertezas associadas à estimativa da variável de interesse (Goovaerts, 2001). Os campos aleatórios equiprováveis da variável de interesse devem cumprir três condições: reprodução da função de densidade de probabilidade acumulada; capacidade de reprodução do histograma e da variância dos dados e reprodução exata dos dados amostrados.

A simulação geoestatística é utilizada nas geociências, principalmente em estimativas de depósitos minerais (Marques e Costa, 2014; Takafuji *et al.*, 2017;

Narciso *et al.*, 2019; Oliveira *et al.*, 2019; Drumond *et al.*, 2020). Na ciência do solo, Goovaerts (2001) foi um dos percussores em aplicar métodos geoestatísticos em propriedades do solo. Goovaerts (2001) apresentou em seu estudo a aplicação de técnicas geoestatísticas, incluindo a simulação sequencial gaussiana e a simulação sequencial de indicadores na avaliação de incertezas espaciais, bem como a comparação da krigagem com a simulação como métodos de previsão da distribuição espacial de propriedades do solo. A modelagem da incerteza é importante quando um atributo não possui uma média linear no espaço, causando assim, incertezas na sua estimativa (Goovaerts, 2001). Além desse, existem diversas publicações relacionadas à simulação geoestatística para atributos físico-hídricos e químicos do solo (He *et al.*, 2010; Poggio *et al.*, 2010; Silva Júnior *et al.*, 2012; Oliveira *et al.*, 2014a; Silva *et al.*, 2015; Siqueira *et al.*, 2019). Delbari *et al.* (2009), utilizaram a simulação sequencial gaussiana para avaliar as incertezas espaciais do conteúdo de água no solo, na Áustria. Castriganano e Buttafuoco (2004) no sul da Itália avaliaram por meio da simulação estocástica condicional, a probabilidade de ocorrência do conteúdo de água no solo atingir o limite crítico que causa o estresse hídrico para os solos. Hu *et al.* (2007), geraram campos aleatórios da condutividade hidráulica do solo saturado e da drenagem de água no solo, por meio de simulação condicional, na China. Poggio *et al.* (2010), avaliaram as incertezas espaciais da capacidade de água disponível no solo, na Escócia, por meio da simulação sequencial gaussiana. Emadi *et al.* (2015), também fizeram uso da simulação condicional para avaliar regimes de temperatura e o conteúdo de água de solos da província de Mazandaran, região norte do Irã.

Os estudos relacionados à quantificação das incertezas sobre os valores desconhecidos de indicadores de qualidade física do solo ainda são escassos. Dentre os métodos de simulação geoestatística, destacam-se a simulação sequencial gaussiana e a simulação sequencial de indicadores.

2.3.2.1. Simulação sequencial gaussiana

A simulação sequencial gaussiana (SSG) é um método estocástico condicional que reproduz campos aleatórios capazes de reproduzir o mesmo

grau de variabilidade existente na variável regionalizada, propiciando assim, a análise das incertezas da distribuição espacial da variável. Goovaerts (1997) denomina como SSG, o procedimento de simulação sequencial para funções aleatórias multigaussianas. Na SSG, a forma da distribuição das incertezas espaciais de uma variável é gerada a partir da média e do desvio padrão da krigagem (Srivastava, 2013). A SSG aplicada neste estudo foi realizada de acordo com os procedimentos descritos em Deustsch e Journel (1998) que permite quantificar a incerteza associada a variabilidade dos atributos a partir de diversos campos aleatórios simulados, obtendo um cenário pessimista e um cenário otimista.

3. Projeto de pesquisa: Simulação geoestatística na avaliação da qualidade física e estrutural de solos subtropicais

Resumo

A qualidade física do solo (QFS) está relacionada com o seu estado de conservação e degradação. Dentre os indicadores da QFS, destacam-se principalmente os atributos do solo, como a macroporosidade, densidade do solo e o índice S. O índice S é sensível aos diferentes usos do solo e práticas de manejo adotadas, identificando mudanças estruturais em relação ao estado original do solo, sendo um bom indicador da QFS, quando são consideradas as incertezas espaciais por meio da simulação geoestatística. Apresenta faixas de valores de referência relacionados com a QFS. Essas faixas não se adequam a diversas condições edafoclimáticas, inclusive na área da microbacia hidrográfica Santa Rita, Pelotas, RS (BHSR). Diante do exposto, o objetivo geral deste estudo será avaliar a Influência da escala de amostragem na estrutura de dependência espacial e análises de incertezas dos atributos de macroporosidade e densidade do solo; identificar as zonas de vulnerabilidade da qualidade física do solo considerando as incertezas espaciais dos atributos do solo; bem como definir valores limitantes de índice S e densidade do solo para os solos da BHSR, utilizando técnicas de simulação geoestatística. A simulação geoestatística foi eficiente na caracterização espacial dos atributos do solo e a escala de estudo significativamente o resultado final. A metodologia proposta identificou que o valor limitante de índice S = 0,02 não se adequa às condições da BHSR. A simulação geoestatística foi capaz de auxiliar na identificação dos valores limitantes de densidade do solo e índice S para os solos da BHSR. Os índices de vulnerabilidade física do solo desenvolvidos por meio das técnicas geoestatísticas e estatísticas aplicadas identificaram as zonas mais críticas do solo, considerando os cenários críticos dos atributos utilizados no desenvolvimento, demonstrando-se uma excelente ferramenta para dar suporte às tomadas de decisões quanto ao manejo e conservação da qualidade física do solo.

Palavras-chave: Incertezas espaciais; variabilidade espacial; índice S; vulnerabilidade física do solo; bacia hidrográfica.

3.1. Introdução

O conhecimento da qualidade dos solos é de grande importância para o desenvolvimento socioambiental e conservação de ecossistemas (Demarchi e Zimback, 2014). Os processos físicos, químicos e biológicos que ocorrem no solo estão relacionados e, sendo assim, a qualidade física do solo (QFS) afeta os processos químicos e biológicos, desempenhando um papel fundamental na qualidade do solo (Dexter, 2004a; Walia e Dick, 2018). A QFS é designada como a capacidade do solo em atender às demandas de plantas e ecossistemas, bem como a capacidade do mesmo de resistir e se recuperar quando exposto a processos pelos quais tal capacidade seja reduzida (Mckenzie *et al.*, 2014).

O crescente aumento populacional tem demandado um aumento na produção de alimentos e, conseqüentemente, a elevação do uso e ocupação de áreas agricultáveis que nem sempre possuem práticas adequadas de manejo do solo, causando assim, fenômenos como erosão, degradação da água e do solo e assoreamento de rios (Tavares *et al.*, 2022), acarretando muitas vezes na diminuição da QFS (Cherubin *et al.*, 2016). Dentre os processos que diminuem o funcionamento e a capacidade ambiental do solo, destaca-se a compactação do solo, a qual é um dos principais indicadores da degradação física e diminuição da QFS (Vizioli *et al.*, 2021).

Solos com baixa QFS podem apresentar baixa infiltração de água, alto escoamento superficial, endurecimento, baixa aeração e baixa capacidade de enraizamento (Dexter, 2004a). Em contrapartida, um solo com boa qualidade física possui boa estrutura, propiciando o bom desenvolvimento e crescimento das culturas, crescimento das raízes, resistindo à erosão e compactação, possuindo proporções ideais de água no solo, maximizando assim, o desempenho da capacidade produtiva e reduzindo a degradação ambiental (Reynolds *et al.*, 2007).

Atributos físico-hídricos dos solos têm sido utilizados para avaliar as mudanças estruturais do solo (Honda *et al.* 2011; Aschonitis *et al.* 2012; Laudone *et al.* 2013; Dippenaar, 2014) e qualidade física estrutural do solo (Freitas *et al.*, 2004; Valani *et al.*, 2020), e possuem um papel importante na tomada de decisões em escala de bacias hidrográficas (Beskow *et al.*, 2016).

A avaliação da QFS tem se baseado no uso de indicadores, que simplificam e fornecem informações para tornar um fenômeno perceptível e compreensível para serem utilizadas em tomadas de decisões (Van der werf e Petit, 2002; Moebius-Clune *et al.*, 2011; Toledo *et al.*, 2013; Julieta *et al.*, 2016). Tem sido intenso o esforço da pesquisa na busca de indicadores ou valores de referência para analisar a qualidade física do solo para fins agrícolas (Assis Júnior *et al.*, 2016; Bünemann *et al.*, 2018).

A curva de retenção de água no solo (CRAS) tem sido uma ferramenta importante para avaliar a qualidade física do solo, auxiliando o produtor no manejo de irrigação (De Mello e Pedrollo, 2015). Dentre as importantes informações que podem ser obtidas a partir da CRAS, destaca-se o índice S (Dexter, 2004a), o qual se destaca por ser sensível às mudanças estruturais do solo referentes às práticas de manejo (Rossetti e Centurion, 2018).

As bacias hidrográficas, importantes unidades de gestão, têm sido foco de importantes estudos relacionados aos recursos hídricos e manejo do solo (Beskow *et al.*, 2016; Soares *et al.*, 2020; Dos Santos *et al.*, 2021) que visam o planejamento e gestão dos recursos naturais (Souza *et al.*, 2021). Em escala de bacia hidrográfica, pode ocorrer a presença de diversas classes, usos e ocupações dos solos. Essa grande variedade de classes, usos e ocupações dos solos podem gerar variabilidade na qualidade física do solo. Conhecer a dinâmica das mudanças da qualidade física do solo por meio índices e interações entre os atributos é extremamente importante para a escolha adequada de práticas de manejo em áreas agrícolas (Alencar *et al.*, 2015).

Estudos têm sido desenvolvidos avaliando a qualidade física dos solos a partir do índice S e atributos do solo (Lima *et al.*, 2014; Hebb *et al.*, 2017; Kiani *et al.*, 2017; Timm *et al.*, 2020) e analisando as incertezas espaciais de propriedades do solo em escala de propriedade rural e/ou bacia hidrográfica (He *et al.*, 2010; Poggio *et al.*, 2010; Silva Júnior *et al.*, 2012; Oliveira *et al.*, 2014a; Silva *et al.*, 2015; Siqueira *et al.*, 2019). Entretanto, ainda são escassos os estudos relacionados à análise das incertezas espaciais dos atributos do solo e do índice S em escala de bacia hidrográfica no Brasil. Além disso, as faixas de limites de qualidade física a partir do índice S, proposto por Dexter (2004a) não têm tido resultados adequados em condições edafoclimáticas diversas. Sendo assim, é importante a utilização de índices que consigam ser representativos

para as condições edafoclimáticas do sul do Brasil, com o intuito de dar suporte ao monitoramento da qualidade estrutural do solo, propiciando identificar o uso inadequado do solo de técnicas de manejo e monitorar a degradação física do solo (Guimarães *et al.*, 2017). Adicionalmente, pode ajudar na compreensão dos agricultores acerca de uma agricultura conservacionista (Telles *et al.*, 2022).

A microbacia hidrográfica Santa Rita (BHSR) localiza-se no sul do Rio Grande do Sul, no município de Pelotas, sendo uma unidade de planejamento fundamental socioeconomicamente para a região, pois colabora com a alimentação dos corpos hídricos para o abastecimento de água para a população de Pelotas. Além disso, a SBHSR possui uma grande variedade de classes de solos e variados usos do solo, dentre eles destaca-se a atividade leiteira e a agricultura familiar. Desse modo, identificar as zonas de vulnerabilidade física do solo considerando a análise de incertezas dos atributos físicos do solo e do índice S, bem como desenvolver um índice de vulnerabilidade física que integre as variáveis do solo, por meio de técnicas geoestatísticas será um estudo estratégico e de grande relevância para o desenvolvimento socioeconômico da região, propiciando aos gestores e produtores ferramentas que subsidiem as tomadas de decisões quanto às práticas mais adequadas de uso e manejo do solo e da água, visando a sustentabilidade ambiental.

3.2. Revisão de literatura

3.2.1. Qualidade física do solo

O aumento de produtividade tem resultado no aumento da degradação física do solo, sendo necessárias estratégias de gestão que mantenham a qualidade deste recurso (Shahab *et al.*, 2013). De acordo com Doran e Parkin (1994), a qualidade do solo pode ser interpretada como a capacidade do mesmo em manter as funcionalidades dentro dos limites naturais do ecossistema, sustentando a produtividade vegetal e animal, mantendo e/ou melhorando a qualidade da água e do ar, apoiando a habitação humana e a saúde dos seres vivos. Zornoza *et al.* (2015) afirmam que devido à complexidade, a qualidade de um solo deve ser interpretada a partir de propriedades indicadoras de sua qualidade. Uma agricultura mais sustentável pode ser atingida a partir do monitoramento das propriedades indicadoras de qualidade dos solos em seus diferentes usos e sistemas de manejo empregados (Cherubin *et al.*, 2015).

Avaliar a qualidade do solo tem sido um grande desafio para cientistas. Metodologias têm sido desenvolvidas para dar suporte aos produtores e pesquisadores no entendimento de processos do solo e manejo do mesmo, promovendo sustentabilidade (Bünemann *et al.*, 2018). De acordo com Dexter (2004a), as propriedades do solo desempenham um importante papel na qualidade, visto que exercem influência sobre os seus processos químicos e biológicos.

De acordo com Silva *et al.* (2010), a qualidade física do solo está relacionada com o seu estado de conservação e degradação. A baixa qualidade física está associada com solos que apresentam baixa infiltração de água, alto escoamento superficial, baixa aeração, pouca capacidade de enraizamento e trabalhabilidade pobre (Dexter, 2004a). De acordo com Reynolds *et al.* (2007), um solo que desempenha funções agrícolas, permitindo um bom desenvolvimento das culturas e mínima degradação ambiental, possui boa estrutura. Shahab *et al.* (2013) afirmam que as propriedades indicadoras de qualidade física são as relacionadas com a agregação do solo, estrutura do solo e movimento da água no solo. Stefanoski *et al.* (2013) citam algumas das

propriedades mais utilizadas como indicadoras da qualidade física, tais como: densidade do solo, porosidade, retenção de água no solo e índice S.

Para uma melhor avaliação da qualidade física do solo, se faz necessário que o indicador seja sensível aos diferentes usos do solo e práticas de manejo adotadas, permitindo assim, a identificação das mudanças estruturais do solo em relação ao seu estado original (Dexter, 2004a). Isto porque os efeitos dos diferentes usos e manejos são particulares das condições edafoclimáticas do local (Teferi *et al.*, 2016). Além disso, é necessário que haja uma comparação entre o valor medido com intervalos de referência (reynolds *et al.*, 2009).

3.2.2. Curva de retenção de água no solo

A curva de retenção de água no solo (CRAS) expressa a relação entre o teor de água volumétrica no solo e o logaritmo da energia potencial matricial com que a água está retida nos poros do solo e/ou adsorvida nas partículas minerais (Silva *et al.*, 2010; Jong Van Lier, 2020). A CRAS é uma função do solo, ou seja, ela é específica de cada solo, pois é reflexo das relações de diversos atributos, como por exemplo, teor de argila, teor de matéria orgânica, densidade do solo, entre outros (Freitas *et al.*, 2004), e está diretamente relacionada com a capacidade de armazenamento de água no solo para o desenvolvimento das plantas (Dalmago *et al.*, 2009).

A CRAS é considerada um importante indicador da qualidade física estrutural do solo, visto que a partir dela podem ser obtidas importantes informações, tais como: porosidade total, macroporosidade, microporosidade, capacidade de campo (CC), ponto de murcha permanente (PMP), capacidade de água disponível (CAD) e índice S (Dexter, 2004a; Filgueiras *et al.*, 2016; Reichardt e Timm, 2020).

3.2.3. Modelo de Van Genuchten (1980)

Modelos matemáticos foram desenvolvidos para caracterizar a forma com que a água está retida em um determinado solo e assim estabelecer a CRAS.

Dentre os modelos desenvolvidos, destaca-se o modelo de Van Genuchten (1980) (Equação 1), que, segundo Van Lier (2020), é um dos modelos mais utilizados para descrever as propriedades hidráulicas.

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

Onde: $\theta(\Psi_m)$ é a umidade volumétrica do solo determinada no potencial Ψ_m ; θ_s e θ_r representam a umidade volumétrica na saturação (porosidade total) e residual (ponto de murcha permanente); Ψ_m é o potencial total de água no solo (kPa); α , n e m : são parâmetros empíricos da equação e são obtidos por ajuste matemático. É conveniente utilizar a restrição de Mualem (1976), onde $m = 1 - (1/n)$ e $n > 1$.

3.2.4. Índice S

O índice S foi proposto por Dexter (2004a) e seu valor representa o valor da inclinação da reta no ponto de inflexão da CRAS ajustada pelo modelo de Van Genuchten (1980). De acordo com Dexter (2004a), o S representa a porosidade microestrutural do solo, ou seja, os poros estruturais que compreendem as microfendas, fendas, bioporos e macroestruturas. Sendo assim, um indicador de qualidade física do solo.

Dexter e Bird (2001) demonstraram que o módulo do potencial de água no ponto de inflexão quando é plotado como logaritmo natural do potencial mátrico ($\ln(\Psi_i)$) em relação ao conteúdo de água no solo (θ) é expressado pela Equação 2. Substituindo o potencial mátrico da equação de Van Genuchten (1980) (Equação 1) pela Equação 2, resulta no conteúdo de água no solo no ponto de inflexão, expresso pela Equação 3. A inclinação da curva de retenção de água no ponto de inflexão é expressada pela Equação 4.

$$\Psi_{mi} = \frac{1}{\alpha} \left(\frac{1}{m} \right)^{1/n} \quad (2)$$

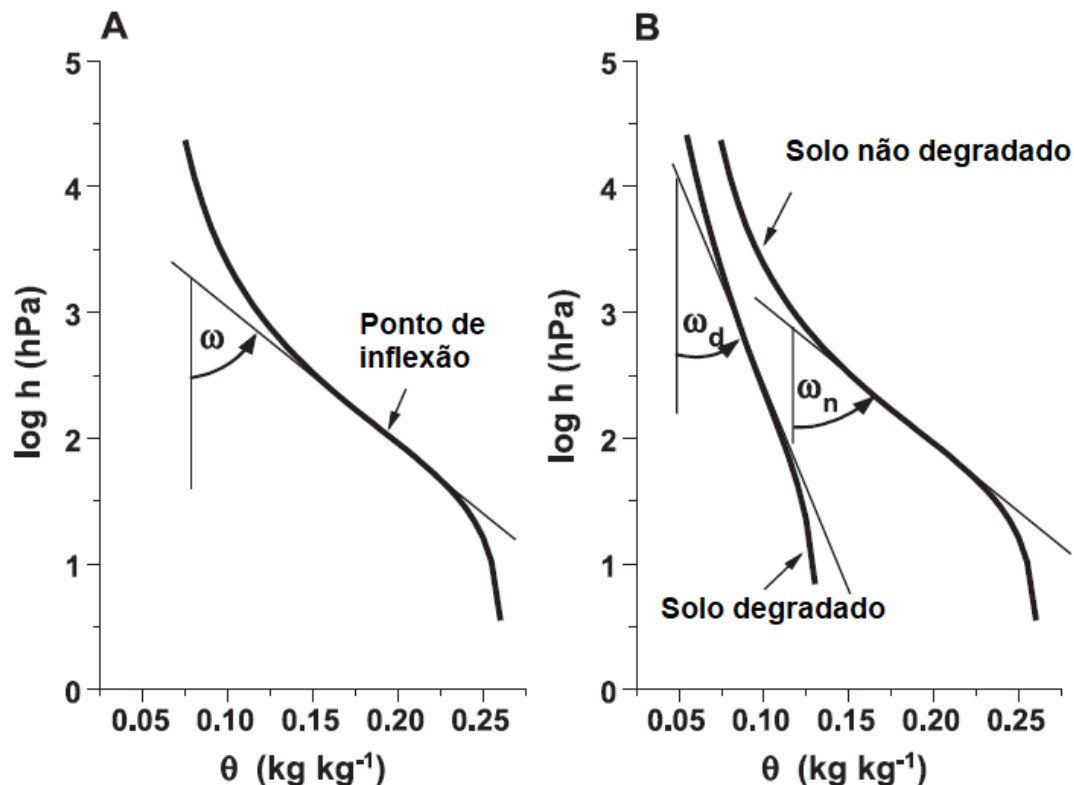
$$\theta_{gi} = (\theta_{gs} - \theta_{gr}) \left(1 + \frac{1}{m} \right)^{-m} + \theta_{gr} \quad (3)$$

$$S = -n(\theta_{gs} - \theta_{gr}) \left(1 + \frac{1}{m}\right)^{-(1+m)} \quad (4)$$

Onde: Ψ_{mi} é o potencial mátrico no ponto de inflexão da CRAS; θ_{gi} é o conteúdo gravimétrico de água no ponto de inflexão; S é o índice S ; θ_{gs} é o conteúdo gravimétrico de água na saturação; θ_{gr} é o conteúdo gravimétrico de água residual; α , m e n são parâmetros empíricos da equação e são obtidos por ajuste matemático. Dexter (2004a) e Dexter e Czyz (2007) definiram faixas de limites e qualidade física (estrutural) do solo a partir do índice S . $S \geq 0,050$ indica que a qualidade física é considerada muito boa, enquanto $0,035 \leq S \leq 0,050$ é considerada boa qualidade física, $0,020 \leq S \leq 0,035$ é considerada de qualidade física pobre e $S \leq 0,020$ é considerada a qualidade física muito pobre ou degradada.

A porosidade e os tamanhos de poros influenciam a curva de retenção de água no solo, modificando graficamente o seu formato. Dessa forma, a inclinação no ponto de inflexão da curva pode refletir alguns aspectos referentes à qualidade física do solo, tais como, compactação, infiltração de água no solo e estabilidade de agregados (Narjary e Aggarwal, 2014). Conforme Dexter (2004a), a Figura 1A demonstra o exemplo de uma CRAS e o ponto de inflexão na reta tangente. O valor de S diminui conseqüentemente com o aumento da densidade do solo (Dexter, 2004a), conforme demonstra a Figura 1B referente à duas CRAS de um solo franco-arenoso com diferentes densidades, com ângulos de inclinação da reta tangente, sendo ω_d a menor inclinação, para o solo degradado e ω_n a maior inclinação, para o solo não degradado. A degradação física do solo ocorre quando o solo é compactado, o que reduz a inclinação da curva de retenção no ponto de inflexão (Dexter, 2004a).

Figura 1. (A) Exemplo de uma curva de retenção de água no solo mostrando o ponto de inflexão e a inclinação ω , da reta tangente à curva de retenção de água no solo no ponto de inflexão. (B) Curvas de retenção de água do mesmo solo franco-argiloso com densidades diferentes, sendo um solo degradado e outro não degradado. Fonte: Dexter (2004a).



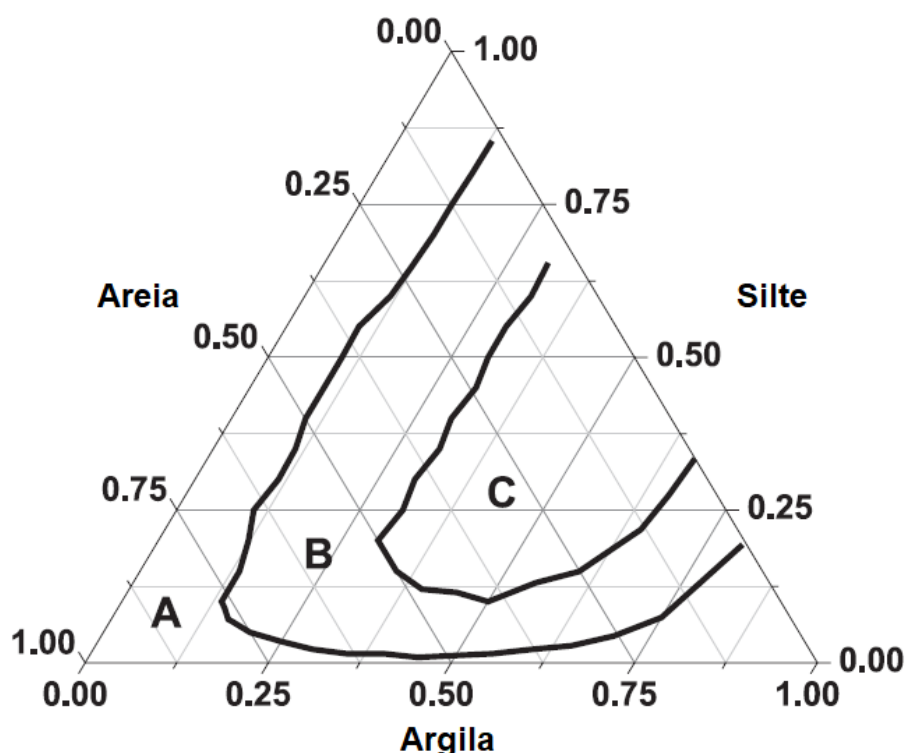
Matematicamente, o índice S representa o valor da inclinação da reta tangente no ponto de inflexão da CRAS, traçada a partir da umidade gravimétrica e do logaritmo natural do potencial matricial de água no solo. Fisicamente, o índice S está associado à estrutura do solo, pois reflete efeitos da estrutura e textura do solo na CRAS (Assis Júnior *et al.*, 2016). De acordo com Dexter (2004a), na maioria dos solos, os valores mais elevados de S indicam uma microestrutura melhor definida. Portanto, o índice S está relacionado diretamente com a porosidade microestrutural, que por sua vez governa importantes propriedades físicas do solo que são necessárias para um bom funcionamento agrícola e ambiental do solo. O índice S possui correlações matemáticas diretas com a densidade do solo (Tormena *et al.*, 2008; Cavalieri *et al.*, 2009; Caviglione, 2018) e com a macroporosidade (Andrade e Stone, 2009; Caviglione, 2018).

Embora o índice S tenha sido adequado para avaliar a qualidade física do solo a partir de condições estruturais em diversos estudos (Lima *et al.*, 2014,

Timm *et al.*, 2020), alguns autores defendem que o valor limitante definido por Dexter e Czyz (2007) ($S=0,035$) não se adequa a diversas condições de contorno descritas na literatura (Jong Van Lier, 2014, Assis Júnior *et al.*, 2016, Armindo e Wendroth, 2016). Moncada *et al.* (2015) afirmam que se a curva de retenção de água no solo é conhecida, pode não ser interessante avaliar a qualidade física e estrutural dos solos com base em um único ponto da curva. Sendo necessária uma reavaliação dos limites ideais do índice S para regiões tropicais (Andrade e Stone, 2009; Oliveira *et al.*, 2014b).

O índice S pode sofrer efeito da textura do solo. A Figura 2 proposta por Dexter (2004a), demonstra um diagrama ternário de contorno de valores constantes de S para solos de diferentes texturas.

Figura 2. Diagrama ternário mostrando contornos de valores constantes de S para solos de textura diferente. A área A é onde $S > 0,04$, a área B é onde $0,03 < S < 0,04$ e a área C é onde $S < 0,03$. Fonte: Dexter (2004a).



O índice S é um indicador de qualidade física e estrutural sensível ao uso do solo e diferentes manejos do solo (Hebb *et al.*, 2017; Kiani *et al.*, 2017). Heeb *et al.* (2017) afirmam que o índice S demonstrou-se um indicador robusto e capaz de avaliar a qualidade de solos de textura fina, encontrando diferenças

significativas em solos sob cultivo anual e pastagens nativas e introduzidas. No entanto, Reynolds *et al.* (2009) afirmam que para solos arenosos, o índice S pode não ser eficaz. Beutler *et al.* (2008), encontraram valores de índice S superior ao limite crítico proposto por Dexter (2004), quando estudada a produtividade da soja e milho (0,056 e 0,062, respectivamente). Andrade e Stone (2009) afirmam que para solos tropicais do Brasil o limite de $S=0,045$ foi mais adequado como o valor mínimo de S para caracterizar solos com qualidade estrutural. Sendo este limite, relacionado aos limites críticos de densidade do solo, macroporosidade, porosidade total e relação entre microporosidade e macroporosidade para adequado crescimento das plantas (Andrade e Stone, 2009).

3.2.5. Geoestatística

A geoestatística é o ramo da estatística que estuda as variáveis aleatórias que possuem estrutura de dependência espacial. Portanto, a partir da geoestatística se faz a caracterização dos fenômenos naturais a partir de variáveis regionalizadas, considerando assim, a posição espacial de cada variável do estudo (Matheron, 1962). Os fenômenos naturais podem assumir dois aspectos contraditórios: (1) aleatório ou estocástico, quando as variáveis podem assumir quaisquer valores no espaço, segundo uma determinada distribuição de probabilidade baseada em dados amostrais; e (2) estruturado ou determinístico, quando, as variáveis assumem valores de forma estruturada espacialmente, não envolvendo quaisquer interpretações probabilísticas (Andriotti, 2003). De acordo com Landim (2003) e Soares (2006), a partir das técnicas geoestatísticas é possível entender as leis que condicionam o comportamento das variáveis regionalizadas, por meio do estudo de estrutura ou dependência espacial.

Conforme Matheron (1963), a geoestatística é fundamentada na teoria das variáveis regionalizadas (VR's). A variação de uma VR é descrita por uma função aleatória (FA), que é composta por um conjunto de variáveis aleatórias que podem assumir componentes aleatórios ou estruturados (HUIJBRETS, 1975). De acordo com Burrough *et al.* (2015), a variação espacial de uma VR é expressa pela soma de três componentes: (1) componente estrutural, associada

a um valor médio; (2) componente aleatória espacialmente estruturado, associada a variação da VR; (3) ruído ou erro residual espacialmente não correlacionado, associado a erros de medições e inferências. Sendo assim, a VR pode ser considerada uma realização particular da VA em um determinado local do espaço, ou seja, $VR(z(x))$ é uma VA que assume diferentes valores da variável $z(x)$, em função da localização georreferenciada x no espaço (Journel e Huijbregts, 1978)

Para variáveis serem submetida às técnicas geoestatísticas, duas hipóteses devem ser atendidas: (1) estacionariedade de 1ª ordem, que é caracterizada como uma variável aleatória que possui esperança matemática constante, independentemente de sua origem no espaço e, conseqüentemente, possua a mesma média para toda região em estudo (Reichardt e Timm, 2020); (2) estacionariedade de 2ª ordem, que é relacionada a condição, se o segundo momento em relação à origem é constante, tem-se então que, além da média, a variância é constante, independente da origem no espaço ou no tempo (Matheron, 1963).

De acordo com Oliver e Webster (2014), processo aleatório é representado conforme a Equação 5.

$$Z(u) = \mu + \varepsilon(u) \quad (5)$$

$Z(u)$ é um processo (função) randômico, μ é a média do processo, considerado estacionário, e $\varepsilon(u)$ é um processo intrinsecamente estacionário com média zero. A covariância $C(h)$ entre duas variáveis aleatórias $[Z(u), Z(u + h)]$, separadas por uma distância h , é dada por meio da Equação 6.

$$C(h) = E[Z(u), Z(u + h)] \quad (6)$$

Que é equivalente a Equação 7.

$$C(h) = E[\{Z(u) - \mu\}\{Z(u + h) - \mu\}] = E[Z(u)Z(u + h) - \mu^2] \quad (7)$$

Nas Equações 5, 6 e 7, h (denominado de *lag* em inglês) é a distância de separação entre os pares de observações de $Z(u)$ e $Z(u + h)$ medidos nos locais u e $u + h$. E denota a esperança matemática.

A geoestatística vem sendo cada vez mais utilizada na ciência do solo para caracterizar a variabilidade espacial de propriedades do solo e para mapear a distribuição espacial de determinadas propriedades por meio da técnica de krigagem ordinária (Goovaerts, 1999; Chiba *et al.*, 2010; Zonta *et al.*, 2014; Aquino *et al.*, 2015; Montanari *et al.*, 2015; Wang e Shi, 2017). A krigagem tem demonstrado bom desempenho para estimativa em grandes escalas, como é utilizada na hidrologia e na meteorologia (Alsamamra *et al.* 2009; Cornelissen *et al.*, 2014). Porém, a krigagem possui algumas limitações: (1) subestimativa da amplitude dos dados reais (Delbari *et al.*, 2009); (2) a variância do erro de estimativa é associada ao arranjo espacial das amostras e ao modelo do semivariograma e independente dos valores reais (Yamamoto E Landim, 2013); (3) possui boa precisão local, porém, desconsidera os momentos estatísticos globais dos valores estimados (Heuvelink, 2014). Na geoestatística, a medida indicativa da magnitude do erro de estimação dos atributos é denominada incerteza. Para toda estimativa há uma incerteza associada, uma vez que este não pode ser determinado com exatidão, pois, para isso, seria necessário o conhecimento do valor real do atributo em cada posição estimada (Isaaks e Srisvastava, 1989). A krigagem ordinária não é capaz de prever as incertezas associadas às estimativas (Isaaks e Srivastava, 1989). A incerteza deve ser considerada para que as métricas estatísticas globais sejam bem caracterizadas (QU *et al.*, 2013). Nesse sentido, a simulação geoestatística tem demonstrado ser uma excelente ferramenta para a avaliação das incertezas espaciais de uma determinada variável (Cornelissen *et al.*, 2014; Qu *et al.*, 2014).

3.2.5.1. Modelagem Variográfica

O semivariograma é uma função intrínseca que mede as semivariâncias entre pares de amostras separados por uma distância h (Oliver e Webster, 2014), reflete a estrutura dos fenômenos espacializados, e é definida como a variância do erro de estimação da variável desconhecida em $(u + h)$ com auxílio do da

amostra em (u) (Andriotti, 2003). O semivariograma experimental pode ser obtido utilizando o estimador clássico de Matheron, por meio da Equação 8 (Matheron, 1963).

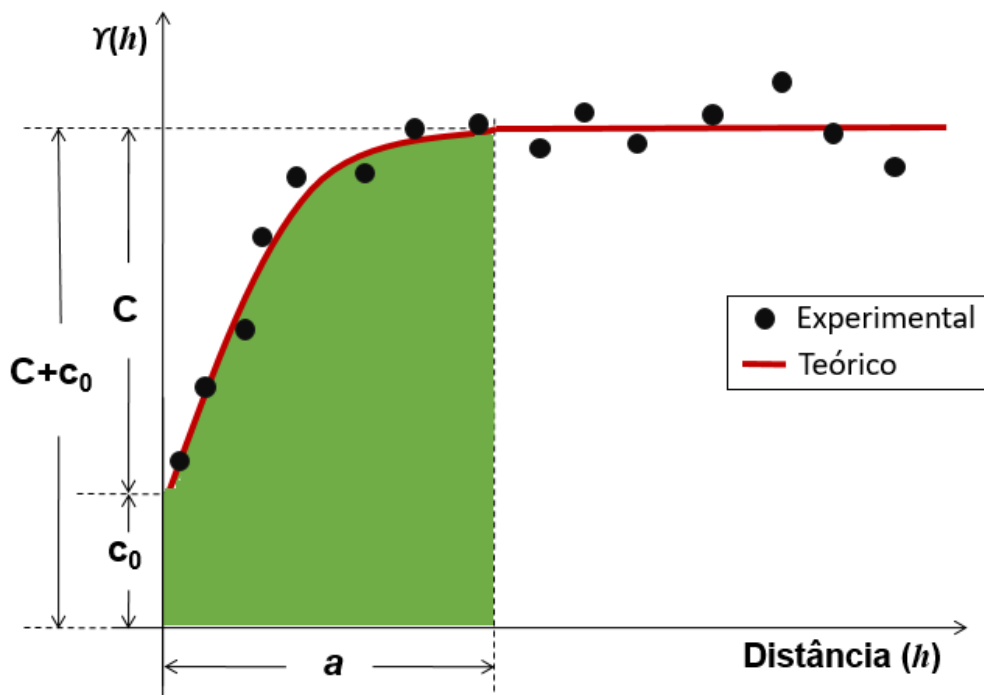
$$y(h) = \frac{1}{2n(h)} \sum_{\alpha=1}^{n(h)} [z(u+h) - z(u)]^2 \quad (8)$$

Onde, $y(h)$ é o valor da semivariância experimental em função de h ; $n(h)$ é o número de pares de observações da variável Z separados por uma distância h ; e h é a distância de separação entre os pares de observações $n(h)$, medidos em u e $u+h$. Os modelos teóricos esférico, exponencial e gaussiano são os mais comuns, podendo ser ajustados aos semivariogramas experimentais, na maioria dos casos (WEBSTER e OLIVER, 2007) e, a partir dos ajustes, os parâmetros da modelagem variográfica são obtidos, tais como: alcance (a), patamar ($C+c_0$), contribuição (C) e efeito pepita (c_0).

A Figura 3 representa o modelo teórico ajustado ao semivariograma experimental e os parâmetros obtidos no ajuste (Reichardt e Timm, 2020). A dependência espacial é observada no semivariograma, pois os pontos de semivariância experimental demonstram um comportamento crescente à medida que a distância aumenta até estabilizarem e se tornarem independentes entre si, com os pontos de semivariância apresentando um comportamento variando em torno da variância a priori dos dados. O alcance (a) representa a distância na qual as observações da variável passam a não se correlacionarem entre si, tornando-se independentes (Yamamoto e Landim, 2013). O valor de semivariância correspondente ao alcance (a) é o patamar ($C+c_0$). E representa a soma da variância explicada pela estrutura de correlação espacial (C) com a variância não explicada, que é representada pelo efeito pepita (c_0) (Reichardt e Timm, 2020). O efeito pepita (c_0), por sua vez, é a descontinuidade no gráfico de semivariância quando a distância h tende a zero, e reflete a incerteza associada ao espaçamento das amostras no espaço, representando a variabilidade não explicada da variável de estudo (Yamamoto e Landim, 2013). A contribuição (C) é a variância explicada pela estrutura de continuidade espacial e de acordo com

Reichardt e Timm (2020), numericamente a contribuição é a diferença entre o patamar ($C+c_0$) e o efeito pepita (c_0).

Figura 3. Esquema de semivariograma experimental e teórico e os parâmetros que o descrevem.
Fonte: adaptado de Soares (2018).



De acordo com Oliver e Webster (2014), a modelagem variográfica é realizada por meio do ajuste de uma função entre os pontos de semivariância experimental, de modo que a curva ajustada represente continuamente o comportamento dos pontos experimentais de semivariância e, conseqüentemente, o padrão da estrutura de continuidade espacial da variável de estudo em um determinado local. Sendo este, um processo supervisionado que depende da experiência do pesquisador e do auxílio de programas computacionais confiáveis.

3.2.5.2. Simulação geoestatística

A simulação geoestatística consiste em métodos estocásticos baseados no desenvolvimento de diversos cenários equiprováveis da distribuição espacial da variável de interesse, também denominados de campos aleatórios

(Goovaerts, 1997). Os campos aleatórios são capazes de reproduzir momentos estatísticos dos valores reais, obtendo assim, uma boa precisão global da variável (reprodução do histograma e do semivariograma) (Nunes e Almeida, 2010; Beretta *et al.*, 2011). Além disso, a simulação geoestatística tem sido uma das técnicas mais utilizadas na análise das incertezas associadas à estimativa da variável de interesse (Goovaerts, 2001). Os campos aleatórios equiprováveis da variável de interesse devem cumprir três condições: (1) reprodução da função de densidade de probabilidade acumulada; (2) capacidade de reprodução do histograma e da variância dos dados; (3) reprodução exata dos dados amostrados.

A simulação geoestatística é popularmente utilizada nas geociências, principalmente em estimativas de depósitos minerais (Marques e Costa, 2014; Takafuji *et al.*, 2017; Narciso *et al.*, 2019; Oliveira *et al.*, 2019; Drummond *et al.*, 2020). Na ciência do solo, Goovaerts (2001) foi um dos percussores em aplicar métodos geoestatísticos em propriedades do solo. Goovaerts (2001) apresentou em seu estudo a aplicação de técnicas geoestatísticas, incluindo a simulação sequencial gaussiana e a simulação sequencial de indicadores na avaliação de incertezas espaciais, bem como a comparação da krigagem com a simulação como métodos de previsão da distribuição espacial de propriedades do solo. A modelagem da incerteza é importante quando um atributo não possui uma média linear no espaço, causando assim, grandes incertezas na sua estimativa (Goovaerts, 2001). Além desse, existem diversas publicações relacionadas à simulação geoestatística para atributos físico-hídricos e químicos do solo (He *et al.*, 2010; Poggio *et al.*, 2010; Silva Júnior *et al.*, 2012; Oliveira *et al.*, 2014a; Silva *et al.*, 2015; Siqueira *et al.*, 2019). Delbari *et al.* (2009), utilizaram a simulação sequencial gaussiana para avaliar as incertezas espaciais do conteúdo de água no solo, na baixa Áustria. Castriganano e Buttafuoco (2004) avaliaram por meio da simulação estocástica condicional, a probabilidade de ocorrência do conteúdo de água no solo atingir o limite crítico que causa o estresse hídrico para os solos, no sul da Itália. Hu *et al.* (2007), geraram campos aleatórios da condutividade hidráulica do solo saturado e da drenagem de água no solo, por meio de simulação condicional, na China. Poggio *et al.* (2010), avaliaram as incertezas espaciais da capacidade de água disponível no solo, na Escócia, por meio da simulação sequencial gaussiana. Emadi *et al.* (2015), também fizeram uso da

simulação condicional para avaliar regimes de temperatura e o conteúdo de água de solos da província de Mazandaran, região norte do Irã.

No entanto, ainda são escassos os estudos relacionados à quantificação das incertezas sobre os valores desconhecidos de indicadores de qualidade física do solo. Dentre os métodos de simulação geoestatística, destacam-se a simulação sequencial gaussiana e a simulação sequencial de indicadores.

3.2.5.2.1. Simulação sequencial gaussiana

A simulação sequencial gaussiana (SSG) é um método estocástico condicional que reproduz campos aleatórios capazes de reproduzir o mesmo grau de variabilidade existente na variável regionalizada de estudo, propiciando assim, a análise das incertezas da distribuição espacial da variável. Goovaerts (1997) denomina como SSG, o procedimento de simulação sequencial para funções aleatórias multigaussianas. Na SSG, a forma da distribuição das incertezas espaciais de uma variável é gerada a partir da média e do desvio padrão da krigagem (Srivastava, 2013).

De acordo com Deustsch e Journel (1998), na simulação geoestatística, em cada pixel do grid será extraído aleatoriamente, a partir da média e da variância da krigagem, um valor da variável utilizando a distribuição de probabilidade acumulada condicionada ao respectivo ponto. Sendo assim, é necessário que em cada nó do grid se obtenha as sucessivas funções de distribuição acumulada condicional (ccdfs), seguindo a Equação (9).

$$F(u; z|(n)) = Prob(Z(u) \leq z|(n)) \quad (9)$$

Onde, u é a localização da variável $Z(u)$, z é um valor de corte da ccdf e n são as informações condicionantes para construir a ccdf dos valores simulados.

Dessa maneira, a partir da amostragem aleatória das ccdfs em todos os nós do grid (Equação 10), inúmeros campos aleatórios da distribuição espacial da variável de interesse podem ser gerados concomitantemente.

$$F(u_1, u_2, \dots, u_n; z_1, \dots, z_N | (n)) = \text{Prob}(Z(u_1) \leq z_1, \dots, Z(u_N) \leq z_N | (n)) \quad (10)$$

Onde, N é o número de nós no grid e u'_i é a localização da variável onde não há dados observados.

Para a realização da SSG é necessário que a modelagem variográfica da variável de interesse já tenha sido realizada (Equação 8). Após, conforme Goovaerts (1997), por meio da SSG, um modelo de blocos deve ser gerado para a variável e para a área de estudo. Para a realização da SSG, os seguintes procedimentos devem ser adotados (Yamamoto e Landim, 2013):

1. O conjunto de dados da variável deve apresentar distribuição normal gaussiana. Para isso, deve ser realizada a normalização da distribuição de frequência a partir da Equação 11. Os dados normalizados devem apresentar média igual a zero e variância igual a um.

$$Y(u) = \phi(Z(u)) \quad (11)$$

Onde, $Z(u)$ é a variável de interesse, $Y(u)$ é a variável normalizada; e ϕ é a função de normalização.

2. Deve-se definir um caminho aleatório dentro do grid a ser simulado.

3. Utilizando o semivariograma dos dados normalizados, deve-se realizar a krigagem simples em cada nó do grid. A partir da estimativa, a média condicional e a variância da distribuição gaussiana serão determinados e irão definir a função de distribuição condicional acumulada.

4. Um valor da distribuição gaussiana deverá ser extraído aleatoriamente e adicionado ao conjunto de dados.

5. O algoritmo irá visitar o próximo nó do grid, seguindo o caminho aleatório. Considerando os dados amostrais e previamente simulados, os passos 3 e 4 se repetem até todos os nós do grid serem visitados.

6. Após a finalização da simulação, será obtido para cada nó do grid um valor simulado. No entanto, esses valores simulados $\{y^{(j)}(u'_j), j = 1, \dots, N\}$ estão na grandeza do espaço gaussiano. Sendo assim, os dados deverão ser retro transformados para o espaço amostral original, a partir da Equação 12.

$$Z^{(1)} = \Phi^{-1}(y^{(1)}(u_j)) \quad (12)$$

$$j = 1, \dots, N$$

7. Uma realização da simulação (um mapa gerado) será obtida ao final do passo 6. Para a realização de n realizações, com o intuito de obter maior precisão da variabilidade espacial da variável, os passos 2 a 5 deverão repetidos.

Dentre os estudos que aplicaram a SSG em solos, descantam-se Qu *et al.* (2013), que avaliaram a variabilidade espacial do nitrogênio total do solo e as incertezas espaciais associadas, utilizando um algoritmo de simulação sequencial gaussiana utilizando informações categóricas de uso do solo, na China. Silva Júnior *et al.* (2012), realizaram a caracterização da variabilidade espacial de óxidos de ferro por meio da simulação sequencial gaussiana, em Catanduva-SP, Brasil. Qu *et al.* (2014), avaliaram as incertezas da contaminação dos solos por metais pesados por meio da simulação sequencial gaussiana, na China. Zhao *et al.* (2017), caracterizaram o padrão de distribuição espacial da salinidade do solo e avaliaram as incertezas da condutividade elétrica do solo, por meio de simulação sequencial gaussiana, na China. Siqueira *et al.* (2019), realizaram uma análise estocástica da condutividade hidráulica do solo saturado e dos parâmetros da curva de retenção de água no solo, por meio da simulação sequencial gaussiana, na região Noroeste do estado do Rio Grande do Sul, no Brasil.

3.2.5.2.2. Simulação sequencial de indicadores

De acordo com Journel (1983), os indicadores possibilitam reduzir as inúmeras possibilidades de valores da variável de interesse e representar o fenômeno em duas possibilidades de ocorrência. A simulação sequencial de indicadores (SSI) é uma técnica não gaussiana (Goovaerts, 1997) e de acordo com Yamamoto e Landim (2013), a vantagem da SSI é que pode ser aplicado tanto em variáveis categóricas, quanto em variáveis contínuas. Um evento k ,

pode assumir quaisquer valores na localização espacial u . A SSI requer que as variáveis aleatórias $z(u)$ sejam transformadas em um conjunto de dados com valor de 0 e 1, por meio da Equação 13, a qual necessita de um valor de corte (z_k).

$$I[z(u); z_k] = \begin{cases} 1, & \text{se } z(u) \leq z_k \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (13)$$

A codificação em indicadores é realizada para um conjunto de valores de cortes (z_k , $k = 1, \dots, K$), com objetivo de gerar distribuições condicionais discretas. Além disso, a SSI tem a vantagem de gerar K realizações que reproduzem a probabilidade de ocorrência espacial em diferentes cortes condicionados pelos dados. Isto permite definir zonas críticas da variável de interesse (Deutsch e Journel, 1998; Juang *et al.*, 2004; He *et al.*, 2010; Oliveira *et al.*, 2014a; Silva *et al.*, 2015). Para a realização da SSI deve-se seguir os seguintes procedimentos (Goovaerts, 1997):

1. Primeiramente, deve-se realizar a discretização da variável em K classes definidas pelos diferentes cortes (z_k), de acordo com a Equação 13.
2. Deve-se definir um caminho aleatório dentro do grid a ser simulado.
3. As cdfs para K classes são obtidas por meio da krigagem indicatriz em cada nó do grid. Caso necessário, deve-se corrigir os desvios do modelo da cdf.
4. Um valor da distribuição deverá ser extraído aleatoriamente e adicionado ao conjunto de dados.
5. O algoritmo irá visitar o próximo nó do grid, seguindo o caminho aleatório. Considerando os dados amostrais e previamente simulados, os passos 3 e 4 se repetem até todos os nós do grid serem visitados.

Existem poucos estudos com aplicação da SSI em solos, em comparação à SSG. Dentre eles, destacam-se o de Juang *et al.* (2004) que utilizaram a simulação sequencial de indicadores para avaliar as incertezas espaciais da contaminação por metais pesados em solos, no Taiwan. He *et al.* (2010) aplicaram a SSI para simular a textura do solo em um grid em 3 dimensões em solos da China. Oliveira *et al.* (2014a) avaliaram por meio da simulação sequencial gaussiana e simulação sequencial de indicadores, as incertezas

espaciais do potássio disponível em área de cana de açúcar em São Paulo, Brasil. Silva *et al.* (2015) utilizaram a simulação sequencial de indicadores para analisar as incertezas dos atributos diagnósticos do solo, dentre eles, o carbono orgânico, em Botucatu-SP, Brasil.

3.2.5.2.3. Validação das simulações

Para os n mapas obtidos pelas simulações serem validados, os mesmos deverão atender os seguintes critérios:

1. Os valores amostrados da variável, nas respectivas posições no espaço, devem ser honrados pela simulação (Equação 12).

$$Z^{(1)} = Z(u_\alpha) \quad (12)$$

$$\forall u = u_\alpha$$

$$\alpha = 1, \dots, n$$

2. Os histogramas dos valores simulados deverão ser semelhantes aos dos dados amostrados da variável em estudo.

3. A estrutura de dependência espacial dos valores (semivariograma) simulados pelas n realizações deverão ser similares ao da variável amostrada.

3.3. Hipóteses

1. Os atributos do solo, tais como a macroporosidade, densidade do solo e o índice S são indicadores capazes de representar a qualidade física, quando são consideradas as incertezas espaciais por meio da simulação geoestatística.
2. A escala de amostragem dos atributos do solo, por meio da escolha do tamanho do lag, podem influenciar a distribuição, bem como impactar no resultado das análises de incertezas.
3. Os valores limitantes índice S que separaram solos degradados ($S = 0,02$) e aqueles com condições físicas ruins e boas ($S = 0,035$), propostos por Dexter (2004a), podem não ser representativos para as condições edafoclimáticas da microbacia hidrográfica Santa Rita, Pelotas, RS.
4. É possível definir valores de índice S e densidade do solo críticos para os solos da microbacia hidrográfica Santa Rita a partir do valor limitante de 10% de macroporosidade do solo.
5. O desenvolvimento de mapas de probabilidade de ocorrência da área da microbacia estar abaixo ou acima de determinados valores limitantes dos atributos do solo, por meio de técnicas de simulação geoestatística, relacionando ao valor limitante de 10% de macroporosidade do solo, pode identificar e confirmar visualmente o valor de índice S limitante mais próximo do real para os solos da microbacia hidrográfica Santa Rita, Pelotas, RS.
6. O desenvolvimento de mapas de probabilidade de ocorrência da área da microbacia estar abaixo ou acima de determinados valores limitantes dos atributos do solo, por meio de técnicas de simulação geoestatística, podem ser eficientes em identificar os valores limitantes destes atributos do solo (à saber: densidade do solo e condutividade hidráulica do solo saturado) mais próximos do real para os solos da microbacia hidrográfica Santa Rita, RS.
7. O índice de vulnerabilidade física desenvolvido a partir da integração dos cenários críticos simulados dos atributos do solo

são capazes de identificar as zonas críticas de qualidade física dos solos da microbacia hidrográfica Santa Rita, Pelotas, RS.

3.4. Objetivos

3.4.1. Gerais

Na microbacia hidrográfica Santa Rita, localizada no interior do Rio Grande do Sul, objetiva-se:

i) Avaliar a influência da escala de amostragem, por meio da definição do lag, na estrutura de dependência espacial e o impacto na análise de incertezas; ii) identificar as zonas de vulnerabilidade da qualidade física do solo considerando as incertezas espaciais dos atributos do solo; iii) definir valores limitantes de índice S e densidade do solo; iv) bem como desenvolver um índice de vulnerabilidade da qualidade física a partir dos indicadores da qualidade física para os solos da microbacia hidrográfica Santa Rita, Pelotas, RS e v) mapear as zonas críticas potenciais, utilizando técnicas de simulação geoestatística.

3.4.2. Específicos

Os objetivos específicos foram:

- I. Caracterizar a distribuição e variabilidade espacial, considerando as incertezas espaciais das variáveis: macroporosidade, densidade do solo, condutividade hidráulica do solo saturado, e índice S, por meio de técnicas de simulação geoestatística, em uma malha amostral estabelecida.
- II. Avaliar a Influência da escala de amostragem, através da escolha do lag, na estrutura de dependência espacial e o impacto na análise de incertezas dos atributos do solo, por meio de técnicas de simulação geoestatística, em uma malha amostral estabelecida.

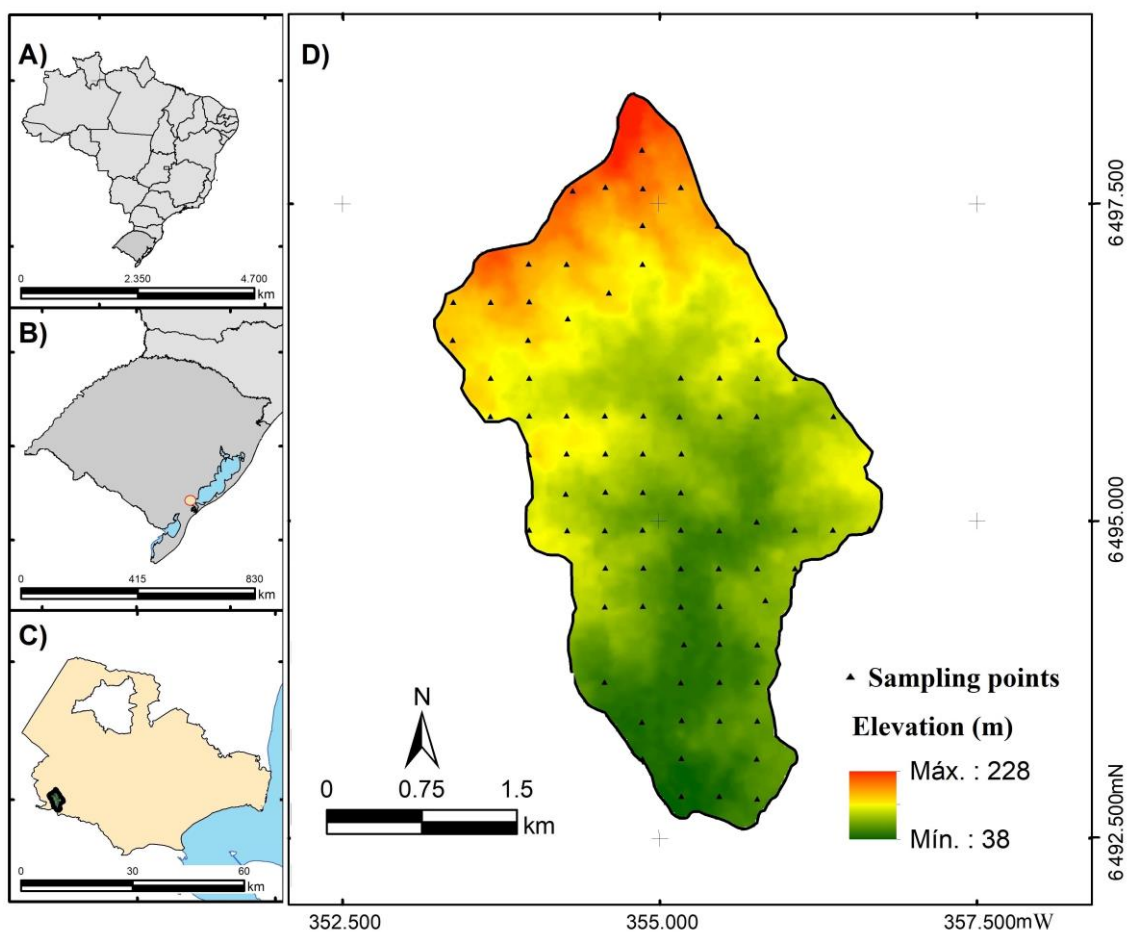
- III. Definir valores limitantes de índice S e densidade do solo a partir da macroporosidade do solo para os solos sob diferentes usos e ocupação.
- IV. Desenvolver mapas de distribuição de probabilidades para os valores críticos propostos na literatura para macroporosidade do solo, densidade do solo, condutividade hidráulica do solo saturado, e índice S, determinando assim cenários equiprováveis de zonas críticas de qualidade física do solo a partir das respectivas variáveis, por meio de simulação geoestatística, em uma malha amostral estabelecida.
- V. Desenvolver mapas de distribuição de probabilidades a partir da curva de distribuição de probabilidade acumulada para macroporosidade do solo, densidade do solo e condutividade hidráulica do solo saturado, determinando assim cenários equiprováveis de zonas críticas de qualidade física do solo utilizando diversos cenários de limites críticos destes atributos, por meio de simulação geoestatística, em uma malha amostral estabelecida.
- VI. A partir dos mapas de distribuição de probabilidades desenvolvidos, averiguar se os valores críticos propostos na literatura são representativos para os solos da microbacia hidrográfica em estudo e, definir valores limitantes que sejam mais próximos da realidade dos solos da microbacia, tomando como base o valor limitante de macroporosidade do solo.
- VII. Desenvolver um índice de vulnerabilidade física do solo, a partir da integração de mapas de distribuição de probabilidade referentes aos cenários críticos dos atributos dos solos.

3.5. Material e Métodos

3.5.1. Descrição da área de estudo

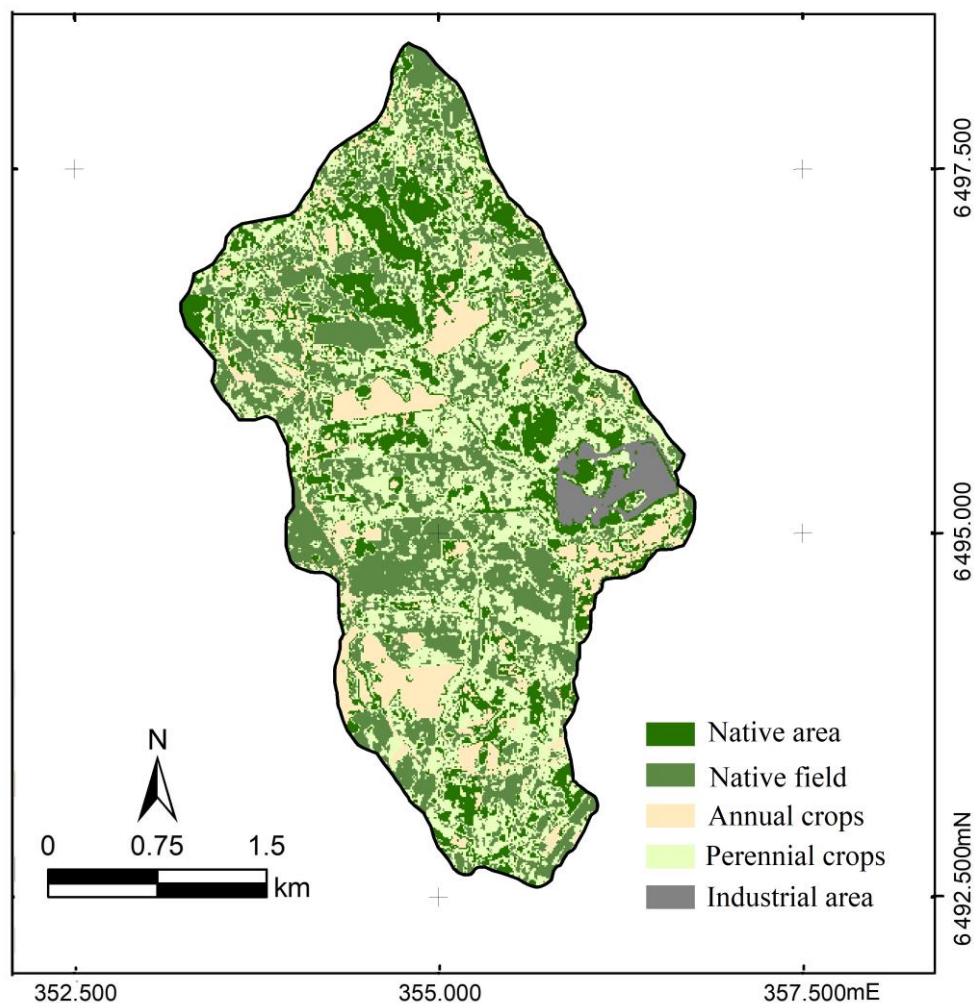
O estudo será realizado na sub-bacia hidrográfica Santa Rita (SBHSR), localizada na Bacia Hidrográfica do Arroio Moreira/Fragata (BHAMF), Pelotas, Rio Grande do Sul. A SBHSR se encontra entre as coordenadas planas 355168,619 L e 6495482,457 N, no sistema de projeção UTM, Zona 22S, Datum SIRGAS 2000, e possui aproximadamente 10,54 km² de área (Figura 4). O clima da região é subtropical úmido, com temperatura média anual de 17.6°C (tipo Cfa), com ventos predominantemente do quadrante leste, que sofrem influência das massas de ar Tropical Atlântica e a umidade relativa do ar varia em torno de 80% (Grupelli, 2003).

Figura 4. Mapa de localização e de elevação da área de estudo: sul do Brasil (A), estado do Rio Grande do Sul (B), município de Pelotas (C), sub-bacia hidrográfica Santa Rita (D). Pontos pretos indicam a malha de amostragem na sub-bacia hidrográfica Santa Rita.



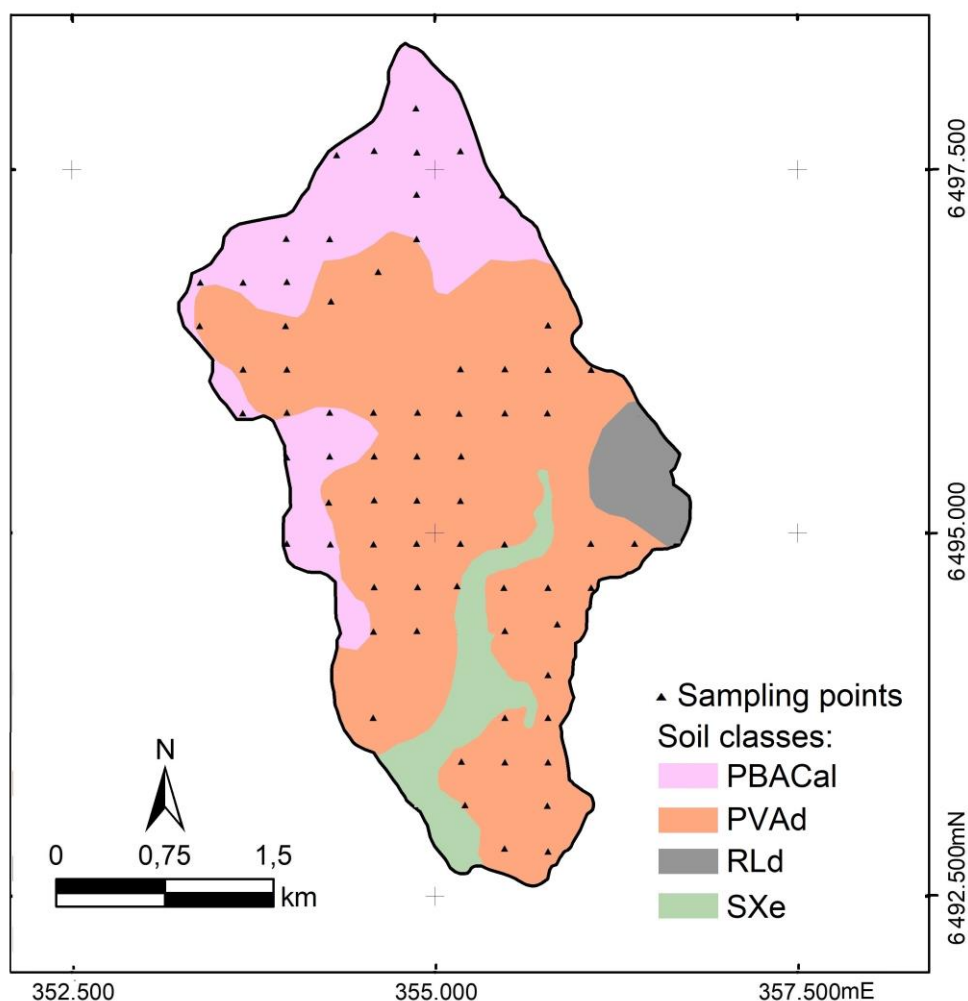
O relevo predominante é ondulado (declividade de 8-20%), ocupando 49.71% da área, seguido pelo suave-ondulado (declividade de 3-8%), com ocupação de 39.44% da área. Menos de 8% da ocupação da área de estudo possui relevo plano (declividade de 0-3%) e forte-ondulado (declividade de 20 a 45%). A altitude máxima do relevo na SBHSR localizada na porção mais ao norte é de 228 m e a altitude mínima localizada na porção mais ao sul é de 38 m. O relevo na região sudeste possui aspecto variando de Norte-Noroeste, enquanto a região oeste varia de Leste-Sudeste. A SBHSR se destaca pela grande variedade de classes e usos dos solos. Os usos dos solos da área possuem 20,74% da sua área correspondente à mata nativa; campo nativo corresponde a cerca de 28,44%; agricultura com cultivo de milho (cultura anual) corresponde a 11,13%; e pêssego (cultura permanente) com 37,14%. Ainda, cerca de 2,50% da área possui área industrial, na qual existe atividade de mineração em funcionamento (Figura 5).

Figura 5. Mapa de uso dos solos da área de estudo, compreendendo área nativa, campo nativo, cultivos anuais cultivos perenes e áreas industriais.



A Figura 6 demonstra as principais classes de solos encontradas na SBHSR de acordo com a classificação de Cunha e Silveira (1996). As classes de solos encontradas foram: PBACal: Argissolo Bruno-Acinzentado alumínico; PVAd: Argissolo Vermelho-Amarelo distrófico; RLd: Neossolo Litólico distrófico; SXe: Planossolo Háplico eutrófico. A SBHSR foi selecionada para o estudo devido à sua importância socioeconômica para a região que possui como atividade econômica a produção de leite de uso principal do solo com pastagens (pastejo natural e pastejo cultivado, 36,49%).

Figura 6. Mapa de amostragem incluindo as classes de solos: PBACal: Argissolo Bruno-Acinzentado alumínico; PVAd: Argissolo Vermelho-Amarelo distrófico; RLd: Neossolo Litólico distrófico; SXe: Planossolo Háplico eutrófico.



3.5.2. Amostragem de solo

Inicialmente foi estabelecida uma malha experimental de 80 pontos amostrais com distribuição espacial irregular, sendo o menor distanciamento entre pontos de 300 m. Em cada ponto foram obtidas as coordenadas UTM utilizando um equipamento de Sistema de posicionamento global (GPS). Os dados (observações) foram coletados durante um período de aproximadamente 15 meses, incluindo as quatro estações do ano, alternando períodos secos e chuvosos na região.

Em cada ponto amostral foram coletadas quatro amostras com estrutura preservada na camada de 0-0,02 m, sendo três destas amostras com anéis

volumétricos de 0,5 m de altura e 0,47 m de diâmetro, para determinação da densidade do solo (D_s), porosidade total (T_p), macroporosidade (M_a) e microporosidade (M_i), seguindo a metodologia proposta pela Embrapa (2011), e uma amostra com anel volumétrico de 0,3 m de altura e 0,48 m de diâmetro para a determinação da curva de retenção de água no solo (CRAS), seguindo a metodologia proposta por Embrapa (2011). Amostras com estrutura não preservada foram coletadas com auxílio de uma pá de corte para a determinação da densidade de partículas (D_p) (Forsythe, 1975), frações granulométricas pelo método da pipeta (Gee; Bauder, 1986), e carbono orgânico do solo (C_o), seguindo a metodologia de Embrapa (2011).

Para a determinação da CRAS foram obtidos os teores volumétricos de água no solo retidos em sete potenciais matriciais. O teor volumétrico de água na saturação, correspondente ao 0 kPa foi determinado a partir da pesagem da amostra saturada e posteriormente seca em estufa, sendo igual à porosidade total. Já nos potenciais matriciais de -1; e -6 kPa utilizando a mesa de tensão e -10; -33; -100; e -1500 kPa utilizando a câmara de pressão de Richards. Em cada ponto amostral a CRAS foi ajustada ao modelo matemático de Van Genuchten (1980) utilizando a restrição de Mualem (1976), por meio do *software* SWRC fit (Seki, 2007).

Após os ajustes da CRAS o índice S será calculado (Equação 4, p. 8) seguindo a metodologia proposta por Dexter (2004a). O teor de água na capacidade de campo (θ_{cc}) foi calculado considerando o potencial mátrico de -10 kPa, e o teor de água no ponto de murcha permanente (θ_{pmp}) foi calculado considerando o potencial mátrico de 1500 kPa (Reichardt e Timm, 2020).

Em uma segunda etapa, serão coletadas amostras em outros 40 pontos amostrais para a determinação dos atributos do solo. Todas as análises laboratoriais serão realizadas no Laboratório de Física do solo da Faculdade de Agronomia Eliseu Maciel (FAEM) da Universidade Federal de Pelotas (UFPeI).

3.5.3. Análises estatísticas

3.5.3.1. Análise exploratória

Os conjuntos de dados serão submetidos a análise exploratória dos dados, por meio da estatística descritiva clássica (média, desvio padrão, coeficiente de variação, valores máximo e mínimo). A variabilidade dos dados será analisada a partir do coeficiente de variação (CV), seguindo a metodologia proposta por Warrick e Nielsen (1980) que considera: baixa variabilidade para $CV < 12\%$, intermediária variabilidade para CV de 12 a 60% e alta variabilidade para $CV > 60\%$. Os conjuntos de dados serão submetidos ao teste de Kolmogorov-Smirnov (KS) (Massey, 1951), no nível de significância de 5%, para verificar a normalidade de cada distribuição dos dados.

3.5.4. Análises geoestatísticas

A modelagem variográfica será realizada com o objetivo de caracterizar a estrutura de dependência espacial do índice S. Primeiramente, será verificada a existência de anisotropia por meio de semivariogramas experimentais direcionais, de acordo com Andriotti (2003), em oito direções principais de pesquisa: 0° , $22,5^\circ$, 45° , $67,5^\circ$, 90° , $112,5^\circ$, 135° , $157,5^\circ$. Os semivariogramas experimentais serão calculados e ajustados por modelos teóricos e a seguir serão obtidos os parâmetros efeito pepita (c_0), contribuição ($C+c_0$), alcance (a) e a função de ajuste.

A partir dos semivariogramas, serão desenvolvidas simulações no suporte de pontos amostrais para toda a área da sub-bacia hidrográfica por meio da aplicação da simulação sequencial gaussiana (SSG) conforme os procedimentos descritos no item 2.5.2.1 (p. 14), por meio de programas executáveis do *software* GSLIB. Serão desenvolvidos campos aleatórios (mapas simulados) de índice S e seus respectivos histogramas de frequência. Todos os campos desenvolvidos e seus respectivos histogramas terão as incertezas avaliadas com o intuito de comprovar a similaridade com os dados amostrais de índice S.

Posteriormente, serão desenvolvidas simulações no suporte de pontos amostrais para toda a área da sub-bacia hidrográfica por meio da aplicação da simulação sequencial de indicadores (SSI), por meio de programas executáveis do *software* GSLIB. Serão desenvolvidos campos aleatórios (mapas simulados) de probabilidade de ocorrência dos valores do atributo serem iguais ou menores que o limite crítico, indicando zonas que possuem problemas relacionados à

qualidade física estrutural do solo. As simulações realizadas pelas técnicas SSG e SSI serão validadas, a fim de verificar se os cenários simulados podem ser utilizados para representar a variabilidade espacial do índice S na área de estudo.

As análises geoestatísticas serão realizadas com o auxílio dos *softwares* de modelagem geoestatística da Universidade de Stanford *SGeMS* (*Stanford Geoestatistical Modeling*; Remy *et al.*, 2009) e *GSLIB* (*Geoestatistical Software Library*; Deutsch e Journel, 1998).

3.6. Metas a serem alcançadas

1. Definir novos limites críticos de índice S para solos subtropicais do sul do Brasil.
2. Gerar mapas críticos da qualidade física do solo baseado nos atributos do solo.
3. Desenvolver mapas indicativos das zonas de degradação física do solo a partir de limites críticos dos atributos do solo, integrando dois ou mais atributos, considerando as incertezas espaciais associadas.

3.7. Impactos esperados

3.7.1. Impactos econômicos

Contribuição na tomada de decisões quanto ao manejo correto e eficiente da água e do solo. O conhecimento da variabilidade espacial do índice S e dos atributos físico-hídricos do solo, permitirá identificar zonas de degradação do solo e o uso racional da água como insumo da agricultura irrigada. Nas áreas agrícolas, o déficit ou o excesso de água pode ocasionar diversos problemas que afetarão a produtividade. Além disso, a água é um insumo com alto custo de produção, podendo atingir mais de 30% do custo total produtivo. Portanto, reduzindo o uso da água, diminuindo gastos de energia e ajustando o solo identificando zonas degradadas, ocasionando no aumento de produtividade. Assim, resultando em uma safra sustentável e bem-sucedida, gerando mais renda para os produtores da região.

3.7.2. Impactos sociais

O mapeamento dos atributos do solo irá subsidiar a modelagem e gestão da sub-bacia, trabalhando nos ajustes da produção local, atribuindo novas propostas e adequação do uso do solo. Resultando assim, no desenvolvimento da região, proporcionando melhores condições de vida para as famílias envolvidas.

3.7.3. Impactos ambientais

Identificação da degradação física associada aos diferentes tipos de usos do solo, auxiliando nas tomadas de decisões. Com novas tomadas de decisões, serão propiciadas corretas práticas de manejo e uso do solo, viabilizando melhores condições para os produtores e mais "respeito" ao ambiente que eles estão inseridos. Sendo assim, as zonas de degradação serão diminuídas no longo prazo se forem consideradas os aspectos do trabalho. Como por exemplo,

redução da compactação do solo, redução da erosão e manutenção da fertilidade. Além disso, possibilitará o manejo racional da água em áreas com agricultura irrigada, conseqüentemente, uma agricultura sustentável.

3.8. Orçamento detalhado

O desenvolvimento da tese terá o apoio financeiro da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES).

3.8.1. Custeio

3.8.1.1. Material de consumo

Material de consumo	Finalidade	Quantidade	Unitário	Total
Sacos plásticos	Preparação das amostras	100		100,00
Reagentes	Preparação das amostras	4		200,00
Filme plástico	Preparação das amostras	5		50,00
Etiquetas	Preparação das amostras	100		50,00
Análises das amostras	Obtenção dos resultados	100		1.700,00
Sub-total				2.000,00

3.8.1.2. Passagens e diárias

Passagens e diárias	Finalidade	Quantia	Valor	
			Unitário	Total
Inscrições, viagens e outros	Eventos	3	1.000,00	3.000,00
Sub-total				
Sub-total				3.000,00

3.8.2. Capital (Material Permanente)

Materia l Permanente Nacional	Finalidad	Quantia	Valor Unitário	Valor Total
Anéis volumétricos	Análises	100	20,00	2.000,00
Placas porosas e equipamentos	Análises			18.000,00
Sub-total				20.000,00

3.8.3. Orçamento global

Rubrica	Valores totais aproximados (R\$)
Material de consumo	2.000,00
Serviços de terceiros	0,00
Passagens e diárias	3.000,00
Material permanente	20.000,00
Total Geral	25.000,00

3.9. Divulgação dos resultados

Os resultados serão divulgados por meio do desenvolvimento de resumos que serão publicados em congressos e submissão de artigos científicos em revistas com alto fator de impacto. Estes artigos irão compor esta tese de doutorado em formato de capítulos.

3.10. Cronograma de atividades

Descrição	2020/2	2021/1	2021/2	2022/1	2022/2	2023/1
Curso das disciplinas	X	X	X	X	X	
Estudo da proposta do projeto	X	X				
Revisão de literatura	X	X	X	X	X	X
Coleta e análise laboratorial		X	X			
Análise exploratória dos dados		X	X	X		
Análises geoestatísticas		X	X	X		
Redação do projeto de qualificação			X	X		
Redação de artigos científicos			X	X	X	X
Redação da tese			X	X	X	X
Defesa da tese						X

3.11. Equipe

A equipe de trabalho é composta por membros do grupo de pesquisa de Física do Solo inserido no PPG MACSA da UFPel: Rômulo Félix Nunes, Me. Leonir Dutra Júnior, Prof^a. Dr^a. Cláudia Liane Rodrigues de Lima (orientadora), Prof^a. Dr^a. Tirzah Moreira Siqueira, do Centro de Engenharias – UFPel (co-orientadora) e por bolsistas de iniciação científica. Além disso, o trabalho conta com o apoio financeiro da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) (Bolsa DS/Capes) e apoio técnico dos laboratoristas da Faculdade de Agronomia Eliseu Maciel (FAEM), da Universidade Federal de Pelotas (UFPel).

3.12. Referências bibliográficas

ALENCAR, T. L. et al. Atributos físicos de um Cambissolo cultivado e tratado com biofertilizante na Chapada do Apodi, Ceará. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, v. 39, n. 3, p. 737-749, 2015.

ALSAMAMRA, H.; RUIZ-ARIAS, J. A.; POZO-VÁZQUEZ, D.; JOAQUIN, T. P. A comparative study of ordinary and residual kriging techniques for mapping global solar radiation over southern Spain. **Agricultural and Forest Meteorology**, v. 149, p. 1343–1357, 2009.

ANDRADE, R. S; STONE, L.F. O índice S como indicador da qualidade física de solos do Cerrado brasileiro. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, v. 13, p. 382 – 388, 2009.

ANDRIOTTI, J. L. S. **Fundamentos de Estatística e Geoestatística**. Porto Alegre: Editora Unisinos, 2003.

AQUINO, R. E.; CAMPOS, M. C. C.; MARQUES JUNIOR, J.; OLIVEIRA, I. A.; TEXEIRA, D. B.; CUNHA, J. A. Use of scaled semivariograms in the planning sample of soil physical properties in Southern Amazonas, Brazil. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, v. 39, n. 1, p. 21-30, 2015.

ARMINDO, R.A.; WENDROTH, O. Physical Soil Structure Evaluation based on Hydraulic Energy Functions. **Soil Science Society of America Journal**, v. 80, n. 5, p. 1167 – 1180, 2016.

ASCHONITIS, V. G.; KOSTOPOULOU, S. K.; ANTONOPOULOS, V. Z. Methodology to assess the effects of rice cultivation under flooded conditions on van Genuchten's model parameters and pore size distribution. **Transport in Porous Media**, v. 91, p. 861 – 876, 2012.

ASSIS JÚNIOR, R. N.; MOTA, J. C. A.; FREIRE, A. G.; ALENCAR, T. L. Pore network of na Inceptisol under different uses and relativized S index as an

indicator of soil physical quality. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, Brasília, v. 51, n. 9, p. 1575 – 1583, 2016.

BERETTA, F. S.; COSTA, J. F. C. L.; KOPPE, J. C. Redução da variabilidade da qualidade do carvão com otimização do tamanho de pilhas de homogeneização. Rem: **Revista Escola de Minas**, v.64, p.85-90, 2011.

BESKOW, S. et al. Potential of the LASH model for water resources management in data-scarce basins: a case study of the Fragata River basin, southern Brazil. **Hydrological Sciences Journal**, v. 61, p. 2567 – 2578, 2016.

BEUTLER, A.N.; FREDDI, O.S.; LEONEL, C.L. & CENTURION, J.F. Densidade do solo relativa e parâmetro “S” como indicadores da qualidade física para culturas anuais. **Revista de Biologia e Ciências da Terra**, v. 8, p. 27 – 36, 2008.

BÜNEMANN, E.K. et al. Soil quality – A critical review. **Soil Biology and Biochemistry**, v. 120, p. 105–125, 2018.

BURROUGH. P. A.; MCDONNELL, R. A.; LLOYD, C. D. **Principles of Geographical Information Systems**. Oxford-UK: Oxford University Press, 2015.

CASTRIGNANÒ, A.; BUTTAFUOCO, G. Geostatistical Stochastic Simulation of Soil WaterContent in a Forested Area of South Italy. **Biosystems Engineering**, v. 87, n. 2, p. 257 – 266, 2004.

CAVALIERI, K.M.V.; SILVA, A.P.; TORMENA, C.A.; LEÃO, T.P.; DEXTER, A.R. & KÄKANSSON, I. Long-term effects of no-tillage on dynamic soil physical properties in a Rhodic Ferrasol in Paraná, Brazil. **Soil & Tillage Research**, v. 103, p. 158 – 164, 2009.

CAVIGLIONE, J. H. S-Index as an indicator of physical quality in soils of the Paraná state. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, v. 22, n. 7, p. 458-464, 2018.

CHERUBIN, M. R.; EITELWEIN, M. T.; FABBRIS, C.; WEIRICH, S. W.; SILVA, R. F.; BASSO, C. J. Physical, chemical, and biological quality in an oxisol under different tillage and fertilizer sources. **Revista Brasileira de Ciencia do Solo**, v. 39, n. 2, p. 615 – 625, 2015.

CHIBA, M. K.; GUEDES FILHO, O.; VIEIRA, S. R. Variabilidade espacial e temporal de plantas daninhas em Latossolo Vermelho argiloso sob semeadura direta. **Acta Scientiarum Agronomy**, v. 32, n. 4, p. 735 – 742, 2010.

CORNELISSEN, T.; DIEKKRÜGER, B.; BOGENA, H. R. Significance of scale and lower boundary condition in the 3D simulation of hydrological processes and soil moisture variability in a forested headwater catchment. **Journal of Hydrology**, v. 516, p. 140 – 153, 2014.

CUNHA, N. G.; SILVEIRA, R. J. C. **Estudo dos solos do município de Capão do Leão**. EMBRAPA-CPACT (Documentos, 12/96). Pelotas: Ed. UFPel, 1996.

DALMAGO, G. A.; BERGAMASH, H.; BERGONCI, J. I.; KRUGER, A. M. B.; COMIRAN, F.; HECKLER, B. M. M. Retenção e disponibilidade de água às plantas, em solo sob plantio direto e preparo convencional. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, v. 13, p. 855 – 864, 2009.

DELBARI, M.; AFRASIAB, P.; LOISKANDL, W. Using sequential Gaussian simulation to assess the field-scale spatial uncertainty of soil water content. **Catena**, v. 79, p. 163 – 169, 2009.

DE MELO M.T., PEDROLLO, O.C. Artificial neural networks for estimating soil water retention curve using fitted and measured data. **Applied and Environmental Soil Science**, v. 2015, p. 1 – 16, 2015.

DEMARCHI, J. C.; ZIMBACK, C. R. L. Mapeamento, erodibilidade e tolerância de perda de solo na sub-bacia do ribeirão das perobas, **Energia na Agricultura**, v.29, p. 102 – 114, 2014.

DEUTSCH, C.V.; JOURNEL, A.G. **GSLIB: Geostatistical Software Library and User's Guide**, 2nd edition. Oxford University Press, New York, 1998.

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, 2004a.

DEXTER, A. R. Soil physical quality: Part II. Friability, tillage, tilth and hard-setting. **Geoderma**, v. 120, p. 215 – 225, 2004b.

DEXTER, A. R. Soil physical quality: Part III. Unsaturated hydraulic conductivity and general conclusions about S-theory. **Geoderma**, v. 120, p. 227 – 239, 2004c.

DEXTER, A. R.; BIRD, N. R. A. Methods for predicting the optimum and the range of soil water contents for tillage based on the water retention curve. **Soil & Tillage Research**, v. 57, p. 203 – 212, 2001.

DEXTER, A. R.; CZYŻ, E. A. Applications of S-theory in the study of soil physical degradation and its consequences. **Land Degradation & Development**, v. 18, p. 369 – 381, 2007.

DIPPENAAR, M. A. Porosity reviewed: quantitative multidisciplinary understanding, recent advances and applications in vadose zone hydrology. **Geotechnical and Geological Engineering**, v. 32, p. 1 – 19, 2014.

DORAN, J. W.; PARKIN, T. B. Defining and assessing soil quality. In: DORAN, J. W.; COLEMAN, D. C.; BEZDICEK, D. F.; STEWART, B. A., eds. **Defining soil quality for a sustainable environment**. Madison, SSSA, p.1 – 20, 1994.

DRUMOND, D.A.; AMARANTE, F.A.N.; KOPPE, V.C.; COSTA, J. F. C. L. A Chart for Judging Optimal Sample Spacing for Ore Grade Estimation: Part II. **Natural Resources Research**, v. 29, p. 551 – 560, 2020.

EMADI, M.; SHAHRIARI, A.; SADEGH-ZADEH, F.; JALILI, B.; DINDARLOU, A. Geostatistics-based spatial distribution of soil moisture and temperature regime classes in Mazandaran province, Northern Iran. **Archives of Agronomy and Soil Science**, v. 62, p. 1 – 20, 2015.

EMBRAPA - Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária. Centro Nacional de Pesquisa de Solos. **Manual de Métodos de Análise do Solo**. 3. ed. Rio de Janeiro: Embrapa CNPS, 2011.

FILGUEIRAS, R.; OLIVEIRA, V. M. R.; CUNHA, F. F.; MANTOVANI, E. C.; SOUZA, E. J. Modelos de curva de retenção de água no solo. **Irriga**, Edição Especial, IRRIGA & INOVAGRI, p.115 – 120, 2016.

FREITAS, P. S. L.; MANTOVANI, E. C.; SEDIYAMA, G. C.; COSTA, L. C. Efeito da cobertura de resíduo da cultura do milho na evaporação da água do solo. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, v.1, p. 85 – 91, 2004.

FORSYTHE, W. **Física de suelos**. Costa Rica: IICA, 1975.

GEE, G. W.; BAUDER, J. W. Particle size analysis. In: KLUTE, A. (Ed.). **Methods of Soil Analysis**. Part 1. Physical and mineralogical methods. 2. ed. Madison: American Society of Agronomy, 1986.

GOOVAERTS, P. **Geostatistics for natural resources evaluation**. Oxford: Oxford University Press, 1997. 483p.

GOOVAERTS, P. Geostatistics in soil science: state-of-the-art and perspectives. **Geoderma**, v. 89, p. 1 – 45, 1999.

GOOVAERTS, P. Geostatistical modelling of uncertainty in soil Science. **Geoderma**, v. 103, p. 3 – 26, 2001.

GRUPELLI, J. L.; ARAÚJO, N.; CHAPA, S. R. Interrelação entre precipitação e parâmetros meteorológicos para Pelotas- RS. In: **XII Congresso de Iniciação Científica e V Encontro de Pós-Graduação**, Pelotas, 2003.

HE, Y.; HU, K. L.; CHEN, D. L.; SUTER, H. C.; LI, Y.; LI, B. G.; YUAN, X. Y.; HUANG, Y. F. Three dimensional spatial distribution modeling of soil texture under agricultural systems using a sequence indicator simulation algorithm.

Computers

and Electronics in Agriculture, v. 71, p. 524 – 531, 2010.

HEBB, C.; SHODERBEK, D.; HERNANDEZ-RAMIREZ, HEWINS, D. Soil physical quality varies among constrsting land uses in Notyhen Praire regions. **Agriculture, Ecosystems and Environment**, v. 240, p. 14 – 23, 2017.

HEUVELINK, G. Uncertainty quantification of Global Soil Map products, **Global Soil Map: Basis of the Global Spatial Soil Information System - Proceedings of the 1st Global Soil Map Conference**, P. 335 – 340, 2014.

HONDA, M.; OHNO, S.; IIZUKA, A.; KAWAI, K.; OHTA, H. Theoretical evaluation of the mechanical behavior of unsaturated soils. **Geotechnical and Geological Engineering**, v. 29, p. 171 – 180, 2011.

HU, K.; WHITE, R.; CHEN, D.; BAOGUO, L.; LI, W. Stochastic simulation of water drainage at the field scale and its application to irrigation management. **Agricultural Water Management**, V. 89, P. 123 – 130, 2007.

HUIJBREGTS, C. J. Regionalized variables and quantitative analysis of spatial data. In: DAVIS, J. C.; McCULLAGH, M. J. (Eds.). **Display and analysis of spatial data**. New York: J. Wiley, p. 38 - 53, 1975.

ISAAKS, E. H.; SRIVASTAVA, R. M. **An introduction to applied geostatistics**. New York: Oxford University Press, 1989.

JONG VAN LIER, Q. Revisiting the S-index for soil physical quality and its use in Brazil. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, v. 38, n. 1, p. 1 – 10, 2014.

JOURNEL, A. G.; HUIJBREGTS, C. H. J. **Mining geoestatics**. New York: Academic Press Inc., 1978.

JOURNEL, A. G. Non-parametric estimation of spatial distributions. **Mathematical Geology**, v. 15, p. 445 – 468, 1983.

JUANG, K-W.; CHEN, Y-S.; LEE, D-Y. Using sequential indicator simulation to assess the uncertainty of delineating heavy-metal contaminated soils. **Environmental Pollution**, v. 127, n. 2, p. 229 – 238, 2004.

JULIETA, M.R.; JUAN, P.; GERARDO, A.S.; OSVALDO, E.A.A.; MARÍA, C.S. Soil quality indicators selection by mixed models and multivariate techniques in deforested areas for agricultural use in NW of Chaco, Argentina. **Soil & Tillage Research**, v. 53, p. 71 – 85, 2016.

KARLEN, D. L. et al., K.; TIMM, L.C. **Soil, Plant and Atmosphere: Concepts, Processes and Applications**. Switzerland: Springer Nature, 2020.

KIANI, M.; HERNANDEZ-RAMIREZ, G.; QUIDEAU, S.; SMITH, E.; JANZEN, H.; LARNEY, F. J.; PUURVEEN, D. Quantifying sensitive soil quality indicators across contrasting long-term land management systems: Crop rotations and nutrient regimes. **Agriculture, Ecosystems and Environment**, v. 248, p. 123 – 135, 2017.

LANDIM, P. M. B. **Análise estatística de dados geológicos**. 2. ed. rev. ampl. São

Paulo: Editora Unesp, 2003. 253 p.

LAUDONE, G. M.; MATTHEWS, G. P.; GREGORY, A. S.; BIRD, N. R. A.; WHALLEY, W. R. A dual-porous, inverse model of water retention to study biological and hydrological interactions in soil. **European Journal of Soil Science**, v. 64, p. 345 – 356, 2013.

LIMA, H.V.; SILVA, A.P.; GIAROLA, N.F.B.; IMHOFF, S. Index of soil physical quality of hardsetting soils on the Brazilian coast. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, v. 38, p. 1722 – 1730, 2014.

MARQUES, D. M.; COSTA, J. F. C. L. Choosing a proper sampling interval for the ore feeding a processing plant: A geostatistical solution. **International Journal of Mineral Processing**, v. 131, p. 31 – 42, 2014.

MASSEY, F. J. The Kolmogorov–Smirnov test for goodness of fit. **Journal of the American Statistical Association**, v. 46, p. 68 – 78, 1951.

MATHERON, G. **Traité de géostatistique appliquée**. Vol. 14. Paris: Technip, 1962.

MATHERON, G. Principles of Geostatistics. **Economic Geology**, v. 58, n. 8, p. 1246 – 1266, 1963.

MCKENZIE, B. M.; TISDALL, J. M.; VANCE, W. H. Soil physical quality. Murdoch, Austrália: **Encyclopedia of Earth Sciences Series**, p. 770 – 777, 2014.

MOEBIUS-CLUNE, B.N.; VAN ES, H. M.; IDOWU, O. J.; SCHINDELBECK, R. R.; KIMETU, J. M.; NGOZE, S.; LEHMANN, J.; KINYANGI, J. M. Long-term soil quality degradation along a cultivation chronosequence in western Kenya. **Agriculture, Ecosystems & Environment**, v. 141, p. 86 – 99, 2011.

MONCADA, M.P.; BALL, B.C.; GABRIELS, D.; LOBO, D.; CORNELIS, W.M. Evaluation of soil physical quality index S for some tropical and temperate medium-textured soils. **Soil Sci. Soc. Am. J.**, v. 79, p. 9–19, 2015.

MONTANARI, R.; PANACHUKI, E.; LOVERA, L. H.; CORREA, A. R.; OLIVEIRA, I. S.; QUEIROZ, H. A.; TOMAZ, P. K. Variabilidade espacial da produtividade de sorgo e de atributos do solo na Região do Ecótono Cerrado-Pantanal, MS. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, v. 39, n. 2, p. 385 – 396, 2015.

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

NARCISO, J.; ARAÚJO, C. P.; AZEVEDO, L.; NUNES, R.; COSTA, J. F.; SOARES, A. A Geostatistical Simulation of a Mineral Deposit using Uncertain Experimental Data. **Minerals**, v. 9, p. 247 – 260, 2019.

NARJARY, B.; AGGARWAL, P. Evaluation of soil physical quality under amendments and hydrogel applications in a soybean–wheat cropping system. **Communications in Soil Science and Plant Analysis**, v. 45, p. 1167 – 1180, 2014.

NUNES, R.; ALMEIDA, J. A. Parallelization of sequential Gaussian, indicator and direct simulation algorithms. **Computers & Geosciences**. v. 36, p. 1042 – 1052, 2010.

OLIVER, M. A.; WEBSTER, R. A tutorial guide to geostatistics: Computing and modelling variograms and kriging. **Catena**, v. 113, p. 56 – 69, 2014.

OLIVEIRA, C. A. S.; KLOECKENER, J.; RODRIGUES, A. L.; BASSANI, M. A. A.; COSTA, J. F. C. L. Use of heterotopic secondary data in geostatistics using covariance tables. **Applied Earth Science**, v. 129, n.1, p. 15 – 26, 2019.

OLIVEIRA, I. R.; TEIXEIRA, D. B.; PANOSSO, A. R.; MARQUES JÚNIOR, J.; PEREIRA, G. D. Modelagem e quantificação da incerteza espacial do potássio disponível no solo por simulações estocásticas. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, v.49, n.9, p.708 – 718, 2014a.

OLIVEIRA, T. C.; SILVA, L. F. S. D.; COOPER, M. Evaluation of physical quality indices of a soil under a seasonal semideciduous forest. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, v. 38, p. 444 – 453, 2014b.

POGGIO, L.; GIMONA, A.; BROWN, I.; CASTELLAZZI, M. Soil available water capacity interpolation and spatial uncertainty modelling at multiple geographical extents. **Geoderma**, v. 169, p. 175 – 188, 2010.

QU, M; LI, W.; ZHANG, C. Assessing the spatial uncertainty in soil nitrogen mapping through stochastic simulations with categorical land use information. **Ecological Informatics**, v. 16, p. 1 – 9, 2013.

QU, M; LI, W.; ZHANG, C. Spatial Distribution and Uncertainty Assessment of Potential Ecological Risks of Heavy Metals in Soil Using Sequential Gaussian Simulation. **Human and Ecological Risk Assessment: An International Journal**, v. 20, n.3, p. 764 – 778, 2014.

REICHARDT, K.; TIMM, L.C. **Soil, Plant and Atmosphere: Concepts, Processes and Applications**. Switzerland: Springer Nature, 2020.

REMY, N.; BOUCHER, A.; WU, J. **Applied geostatistics with SGeMS: A user's guide**. Cambridge: Cambridge University Press, 2009.

REYNOLDS, W. D.; DRURY, C. F.; YANG, X. M.; FOX, C. A.; TAN, C. S.; ZHANG, T. Q. Land management effects on the near-surface physical quality of a clay loam soil. **Soil and Tillage Research**, v. 96, p. 316 – 330, 2007.

REYNOLDS, W. D.; DRURY, C. F.; TAN, C. S.; FOX, C. A.; YANG, X. M. Use of indicators and pore volume-function characteristics to quantify soil physical quality. **Geoderma**, v. 152, p. 252 – 263, 2009.

RICKSON, R. J.; DEEKS, L. K.; GRAVES, A.; HARRIS, J. A. H.; KIBBLEWHITE, M. G.; SAKRABANI, R. Input constraints to food production: The impact of soil degradation. **Food Security**, v. 7, n. 2, p. 351 – 364, 2015.

SEKI, K. SWRC fit – a nonlinear fitting program with a water retention curve for soils having unimodal and bimodal pore structure. **Hydrology and Earth System Sciences Discussions**, v. 4, p. 407 – 437, 2007.

SHAHAB, H.; EMAMI, H.; HAGHNIA, G.H.; KARIMI, A. Pore size distribution as a soil physical quality index for agricultural and pasture soils in Northeastern Iran. **Pedosphere**, v. 23, p. 312 – 320, 2013.

SILVA, A. P.; TOMENNA, C. A.; DIAS JUNIOR, M. S.; IMHOFF, S.; KLEIN, V. A. Indicadores da qualidade física do solo. IN: **Física do solo**. Jong Van Lier. MG: Sociedade Brasileira de Ciência do solo, 2010.

SILVA, A. F.; PEREIRA, M. J.; ZIMBACK, C. R. L.; LANDIM, P. M. B.; SOARES, A. Simulação sequencial de atributos diagnósticos do solo. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, v. 19, n. 5, p. 418 – 425, 2015.

SILVA JÚNIOR, J. F.; MARQUES JÚNIOR, J.; CAMARGO, L. A.; TEIXEIRA, D. B.; PANOSSO, A. R.; PEREIRA, G. T. Simulação geoestatística na caracterização de óxidos de ferro em diferentes pedoformas. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, v. 36, p. 1690 – 1703, 2012.

SIQUEIRA, T. M.; LOUZADA, J. A. S.; PEDROLLO, O. C.; CASTRO, N. M. R.; OLIVEIRA, M. H. C. Soil physical and hydraulic properties in the Donato

stream basin, RS, Brazil. Part 2: Geostatistical simulation. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, v. 23, n. 9, p. 675 – 680, 2019.

SOARES, A. **Geoestatística para as ciências da terra e do ambiente.**

Colecção

Ensino da Ciência e da Tecnologia: ed.2, IST Press, Lisboa: 2006. 206 p.

SOARES, M. F. **Variabilidade espacial dos atributos físico-hídricos e do carbono orgânico do solo de uma bacia hidrográfica de cabeceira em Canguçu – RS.** 2018. 103f. Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, 2018.

SRIVASTAVA, R. M. Geostatistics: a toolkit for data analysis, spatial prediction and risk management in the coal industry. **International Journal Coal Geology**, v. 112, p. 2 – 13, 2013.

STEFANOSKI, D. C.; SANTOS, G. G.; MARCHÃO, R. L.; PETTER, F. A.; PACHECO, L. P. Uso e manejo do solo e seus impactos sobre a qualidade física. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, v.17, p. 1301 – 1309, 2013.

TAKAFUJI, E. H. M.; ROCHA, G. Z. R.; SILVA, L. A. U. Simulação estocástica aplicada a um banco de dados sintético de cobre. **Geologia USP, Série Científica**, v. 17, n. 2, p. 247 – 256, 2017.

TEFERI, E.; BEWKET, W.; SIMANE, B. Effects of land use and land cover on selected soil quality indicators in the head water area of the Blue Nile basin of Ethiopia. **Environmental Monitoring and Assessment**, v. 188, n. 83, p. 1 – 12, 2016.

TIMM, L. C.; PIRES, L. F.; CENTENO, L. N., BITENCOURT, D. G. B.; PARFITT, J. M. B.; CAMPOS, A. D. S. Assessment of land levelling effects on lowland soil quality indicators and water retention evaluated by multivariate and

geostatistical analyses. **Land Degradation & Development**, v. 31, p. 959 – 974, 2020.

TOLEDO, D. M.; GALANTINI, J.; DALURZO, H.; VAZQUEZ, S.; BOLLERO, G. Methods for Assessing the Effects of Land Use Changes on Carbon Stocks of Subtropical Oxisols. **Soil Science Society of America Journal**, v. 77, p. 1542 – 1552, 2013.

TORMENA, C.A.; SILVA, A.P.; IMHOFF, S.C. & DEXTER, A.R. Quantification of the soil physical quality of a Tropical Oxisol using the S index. **Scientia Agricola**, v. 65, p. 56 – 60, 2008.

VAN DER WERF, H.; PETIT, J. Evaluation of the environmental impact of agriculture at the farm level: a comparison and analysis of 12 indicator-based methods. **Agriculture, Ecosystems & Environment**, v. 93, p. 131 – 145, 2002.

VAN GENUCHTEN, M. T. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. **Soil Science society of American Journal**, v. 44, p. 892 – 898, 1980.

WANG, Z.; SHI, W. Robust variogram estimation combined with isometric log-ratio transformation for improved accuracy of soil particle-size fraction mapping. **Geoderma**, v. 324, p. 56 – 66, 2018.

WARRICK, A. W.; NIELSEN, D. R. Spatial variability of soil physical properties in the field. In: HILLEL, D. (ed). **Applications of soil physics**. New York: Academic Press, 1980.

WEBSTER, R.; OLIVER, M.A. **Geostatistics for Environmental Scientists**. Second Ed. John Wiley & Sons Ltd, Chichester, 2007.

YAMAMOTO, J. K.; LANDIM, P. M. B. **Geoestatística: Conceitos e Aplicações**. São Paulo: Oficina de Textos, 2013. 215 p.

ZHAO, Y.; LEI, J.; TUMARBAY, H.; XUE, J. Using sequential Gaussian simulation to assess the uncertainty of the spatial distribution of soil salinity in arid regions of Northwest China. **Arid Land Research and Management**, v. 32, p. 20 – 37, 2017.

ZONTA, J. H.; BRANDÃO, Z. N.; MEDEIROS, J. C.; SANA, R. S.; SOFIATTI, V. Variabilidade espacial da fertilidade do solo em área cultivada com algodoeiro no Cerrado do Brasil. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, v. 18, n. 6, p. 595 - 602, 2014.

ZORNOZA, R.; ACOSTA, J.; BATISTA, F.; DOMÍNGUEZ, S.; TOLEDO, D.; FAZ, A. Identification of sensitive indicators to assess the interrelationship between soil quality, management practices and human health. **Soil**, v. 1, n. 1, p. 173 – 185, 2015.

4. Relatório do trabalho de campo

O local objeto deste estudo foi a microbacia hidrográfica Santa Rita (BHSR), sendo esta, uma sub-bacia hidrográfica de área reduzida inserida na bacia hidrográfica do Arroio Moreira/Fragata (BHAMF), em Pelotas, no sul do Rio Grande do Sul, Brasil. A BHSR se encontra entre as coordenadas planas 355168,619 L e 6495482,457 N, no sistema de projeção UTM, Zona 22S, Datum SIRGAS 2000, e possui aproximadamente 10,54 km² de área. O clima da região é subtropical úmido, com temperatura média anual de 17.6°C (tipo Cfa), com ventos predominantemente do quadrante leste, que sofrem influência das massas de ar Tropical Atlântica e a umidade relativa do ar varia em torno de 80% (Grupelli, 2003). O relevo predominante é ondulado (declividade de 8-20%), ocupando 49.71% da área, seguido pelo suave-ondulado (declividade de 3-8%), com ocupação de 39.44% da área. Menos de 8% da ocupação da área de estudo possui relevo plano (declividade de 0-3%) e forte-ondulado (declividade de 20 a 45%). A altitude máxima do relevo na BHSR localizada na porção mais ao norte é de 228 m e a altitude mínima localizada na porção mais ao sul é de 37 m. O relevo na região sudeste possui aspecto variando de Norte-Noroeste, enquanto a região oeste varia de Leste-Sudeste. A BHSR se destaca pela grande variedade de classes e usos dos solos

As classes de solos presentes na área de estudo foram: *Hapludult*: Argissolo Bruno-Acinzentado alumínico (PBACal); *Paleudult*: Argissolo Vermelho-Amarelo distrófico (PVAd); *Lithic Udorthent*: Associação de Neossolo Regolítico, Neossolo Litólico e Argissolo Bruno-Acinzentado (RLd); *Albaqualf*: Associação de Planossolo Háplico Eutrófico e Gleissolo Háplico (SXe) (Soil Survey Staff, 2022). Os usos de solo presentes na área são mata nativa, campo nativo, cultivo anual e cultivo perene.

4.1. Amostragem de solo

A amostragem de solo foi realizada em duas etapas: Na primeira foi estabelecida uma malha experimental de 80 pontos amostrais com distribuição

espacial irregular, sendo o menor distanciamento entre pontos de 300 m. Na segunda etapa foi realizado um adensamento amostral de 40 pontos amostrais em formato de cruz, com distanciamento irregular entre os pares de amostras, sendo o menor distanciamento entre os pontos de 1 m e o maior de 150 m.

Na etapa 1, em cada ponto amostral foram coletadas quatro amostras com estrutura preservada na camada intermediária entre 0,075 m e 0,125 m, sendo três destas amostras (triplicatas) com anéis volumétricos de 0,50 m de altura e 0,47 m de diâmetro, para determinação da macroporosidade do solo (M_a) e densidade do solo (D_s), seguindo a metodologia proposta por Teixeira *et al.* (2017), e a condutividade hidráulica do solo saturado (K_{sat}) foi realizada através da utilização do método do permeâmetro de carga constante, conforme descrito por Klute e Dirksen (1986). Uma amostra com anel volumétrico de 0,3 m de altura e 0,48 m de diâmetro para a determinação da curva de retenção de água no solo (CRAS), seguindo Teixeira *et al.* (2017).

A etapa 2, correspondeu a fase de adensamento amostral, sendo coletadas 2 amostras, sendo uma com anel volumétrico de 0,50 m de altura e 0,47 m de diâmetro, para determinação da M_a , D_s e K_{sat} , e uma amostra com anel volumétrico de 0,30 m de altura e 0,48 m de diâmetro para a determinação da curva de retenção de água no solo (CRAS).

Para a determinação da CRAS foram obtidos os teores granulométricos e volumétricos de água no solo retidos em sete potenciais mátricos. O teor volumétrico de água na saturação, correspondente ao 0 kPa foi determinado a partir da pesagem da amostra saturada e posteriormente seca em estufa, sendo igual à porosidade total. Para os potenciais matriciais de -1; e -6 kPa foi utilizado a mesa de tensão e para os potenciais matriciais de -10; -33; -100; e -1500 kPa foi utilizada a câmara de pressão de Richards. Em cada ponto amostral a CRAS foi ajustada ao modelo matemático de van Genuchten (1980) com a restrição de Mualem (1976). A determinação do índice S requer o uso da restrição de Mualem (1976). As curvas foram ajustadas por meio do *software* SWRC fit (Seki, 2007). Após os ajustes da CRAS utilizando a relação entre os potenciais e umidade gravimétrica o índice S foi calculado (Equação 4) seguindo Dexter (2004a).

4.2. Metodologia empregada nos artigos científicos

Dois artigos científicos compõem a tese. O primeiro foi intitulado de “*Índice S na avaliação da qualidade física de solos sob diferentes usos em uma bacia hidrográfica*”, tendo como objetivos avaliar se os valores limítrofes de qualidade física a partir do índice S proposto por Dexter (2004a) são adequados para as condições de contorno dos solos da BHSR; definir novos limites críticos de índice S a partir da Ma; bem como realizar a caracterização da distribuição espacial do índice S e mapear zonas críticas da qualidade física dos solos da microbacia Hidrográfica Santa Rita, Pelotas, no sul do Rio Grande do Sul, utilizando simulação geoestatística.

A Figura 7 demonstra um fluxograma resumido da metodologia empregada no artigo nº 1, constituída pela validação dos limites propostos por Dexter (2004a); definição e análise dos limites críticos de índice S para a BHSR; análise do índice S em função das classes e usos do solo; simulação sequencial gaussiana do índice S e a análise das incertezas espaciais do índice S.

Figura 7. Metodologia empregada no artigo nº 2 da tese, intitulado de “Índice S como indicador da qualidade física de solos sob diferentes usos em escala de bacia hidrográfica”.



O segundo artigo foi intitulado de “*Vulnerabilidade física dos solos em escala de bacia hidrográfica, a partir de simulação geoestatística*” e desenvolvido a partir da Ds, Ma e Ksat, com objetivos de avaliar a qualidade física do solo a partir de diferentes valores de cortes dos atributos do solo BHRS por meio de mapas de probabilidade de ocorrência da área estar abaixo ou acima dos valores de cortes determinados (dependendo do atributo que está sendo analisado), definindo assim, os cenários críticos para cada atributo em estudo, bem como gerar mapas de vulnerabilidade física do solo integrando cenários críticos de dois ou mais atributos físico-hídricos do solo. A Figura 8 demonstra o fluxograma resumido da metodologia empregada no desenvolvimento do artigo, constituída pela definição dos valores de cortes (VC's) a partir da curva de distribuição de probabilidade acumulada (CDPA) de cada atributo do solo; definição de VC's propostos na literatura; desenvolvimento de mapas de probabilidade de ocorrência da área estar acima ou abaixo dos VC's determinados nas etapas anteriores; definição do cenário crítico de cada atributo para a BHSR, a partir de uma checagem entre as variáveis; e desenvolvimento de mapas de vulnerabilidade física do solo da BHSR, a partir da integração de cenários críticos dos atributos estudados.

Figura 8. Metodologia empregada no artigo nº 2 da tese, intitulado de “Vulnerabilidade física dos solos em escala de bacia hidrográfica, a partir de simulação geoestatística”.



Os capítulos 5 e 6 apresentarão os artigos científicos na íntegra. A formatação do texto dos capítulos 5 e 6 seguem as normas da editora Elsevier.

5. Artigo 1: The S-index for evaluating soil physical quality under different land uses on a watershed scale

Abstract

Soil physical quality (SPQ) is related to its conservation and degradation status. Among the indicators of SPQ, the S-index stands out, which is sensitive to different land uses and management practices adopted and capable of identifying structural changes with reference value ranges related to SPQ. These ranges are not suitable for various edaphoclimatic conditions, including the Santa Rita watershed (SRW), municipality of Pelotas, in southern Rio Grande do Sul, Brazil. The S-index is an excellent indicator and allows the mapping of physical vulnerability when considering the spatial uncertainties of the attribute. The general objective of this study is to evaluate whether the proposed S-index reference values by Dexter (2004) are suitable for soil boundary conditions, to define new critical S-index limits based on macroporosity, as well as to characterize the spatial distribution of the S-index and map critical zones of SPQ in the SRW. It was possible to identify a limiting S-index value of 0.039 for the edaphoclimatic conditions of the SRW. Through geostatistical techniques, it was possible to map physical vulnerability from the critical soil limit, thus identifying areas that require remediation. The limiting value proposed by Dexter was able to represent the spatial pattern of physical vulnerability in the SRW. The S-index proved to be an excellent tool for supporting decisions regarding the use, management, and conservation of soil physical quality and the environment.

Keywords: spatial uncertainties; spatial variability; soil physical vulnerability; geostatistics; soil water retention curve; physical-hydraulic attributes

1. Introduction

The knowledge of soil quality is of great importance for socio-environmental development, allowing for the optimization of planning and management of natural resources (Souza et al., 2021), assisting farmers in understanding conservation agriculture (Telles et al., 2022). The physical, chemical, and biological processes that occur in the soil are interrelated, and thus, the soil physical quality (SPQ) affects chemical and biological processes, playing a fundamental role in soil quality (Dexter, 2004; Walia and Dick, 2018). SPQ is designated as the soil's ability to meet the demands of plants and ecosystems, as well as the ability to resist and recover when exposed to processes that may reduce such capacity (Mckenzie et al., 2011). Among the processes that decrease soil functioning and environmental capacity, soil compaction stands out as one of the main indicators of physical degradation and a decrease in SPQ (Vizioli et al., 2021).

The assessment of SPQ has been based on the use of indicators, which simplify and provide information to make a phenomenon perceptible and understandable for decision-making purposes (Toledo et al., 2013; Rojas et al., 2016). There has been an intense research effort in the search for indicators or reference values to analyze the SPQ for agricultural purposes (Assis Júnior et al., 2016; Bünemann et al., 2018). The soil water retention curve (SWRC) has been an important tool for assessing physical quality, as it is a hydraulic function characteristic of the soil (Rickson et al., 2012). Among the important information that can be obtained from the SWRC, the S-index stands out (Dexter, 2004), as it is sensitive to structural changes in the soil related to management practices (Rossetti and Centurion, 2022).

Geostatistics has been applied to characterize the spatial variability of soil attributes through spatial distribution considering the spatial dependence structure of the phenomenon (Siqueira et al., 2019; Timm et al., 2019). Geostatistical simulation not only

allows generating equiprobable scenarios of the variable but also analyzing spatial uncertainties associated with the prediction of it, providing a more reliable analysis of the reality of the phenomenon (Qu et al., 2014; Zhao et al., 2017; Siqueira et al., 2019).

Studies have been developed to evaluate the SPQ based on the S-index and soil attributes (Hebb et al., 2017; Kiani et al., 2017; Timm et al., 2019) and to analyze the spatial uncertainties of soil properties at the rural property and/or watershed scale (Siqueira et al., 2019; Soares et al., 2023). However, studies related to the analysis of spatial uncertainties of soil attributes and the S-index at the watershed scale in Brazil are still scarce. In addition, the limits of physical quality based on the S-index, proposed by Dexter (2004), have not yielded adequate results under diverse edaphoclimatic conditions.

In this context, this study aimed to: a) evaluate whether the physical quality limits based on the S-index proposed by Dexter (2004) are suitable for the boundary conditions of the soils; b) define new critical limits for the S-index based on soil macroporosity (Ma); c) characterize the spatial distribution of the S-index and map critical zones of soil physical quality in the Santa Rita watershed, which is an important management unit in the municipality of Pelotas, in southern Rio Grande do Sul, Brazil.

2. Material and methods

2.1. Study area

The Santa Rita Watershed (SRW) is a sub-basin located in the Arroio Moreira/Fragata watershed, in Pelotas, in the state of Rio Grande do Sul, Brazil (Zanchin et al., 2021). The SRW is located between the flat coordinates 355168.619 E and 6495482.457 N, in the UTM projection system, Zone 22S, Datum SIRGAS 2000, and has an area of approximately 10.54 km² (Figure 1). The climate of the region is humid

subtropical, with an annual average temperature of 17.6°C (type Cfa), with predominantly east winds influenced by the Atlantic Tropical air masses and the relative humidity of the air varying around 80% (Alvares et al., 2013). The soil classes that compose the SRW were classified by Soil Survey Staff (2022) and are: Hapludult (PBACal); Paleudult (PVAd); Lithic Udorthent (RLd); Albaqualf (SXE3) (Figure 1a).

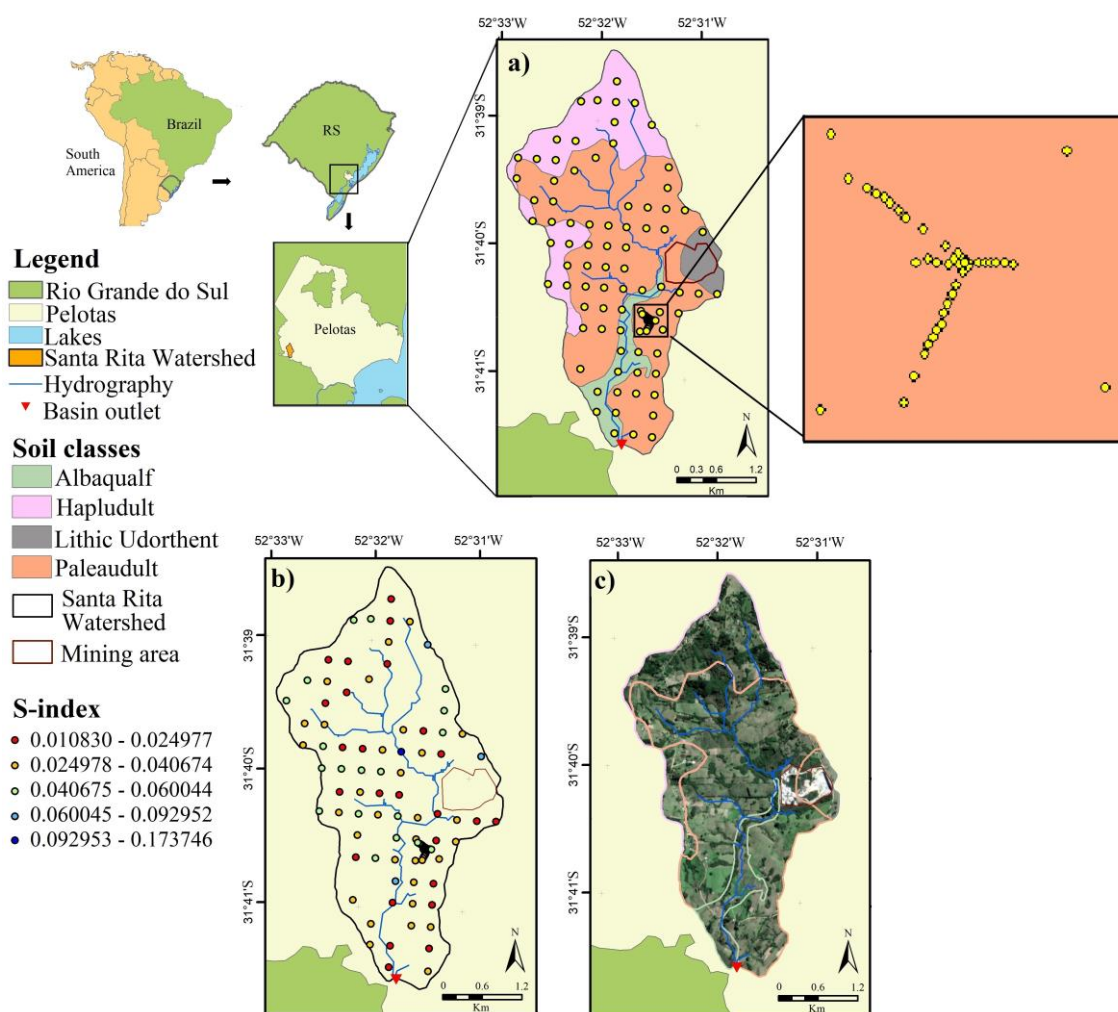


Figure 1 - Location map of Santa Rita watershed, showing different soil classes (a); location of S-index samples (b); and satellite image (c), in the municipality of Pelotas, in southern Rio Grande do Sul, Brazil.

Figure 2 illustrates the general procedure of statistical and geostatistical analyses for the assessment of SPQ in the SRW based on the S-index. Initially, the S-index data obtained through the SWRC were subjected to exploratory data analysis. The database was subdivided according to the varied edaphoclimatic conditions found in the SRW, such as land use, soil classes, and textural classes. From these subdivisions, the limiting S-index values proposed by Dexter (2004) were validated using linear regression, where macroporosity was the response variable as a function of the S-index value. Subsequently, new limiting S-index values were defined for the edaphoclimatic conditions of the SRW using linear regression, where the limiting S-index value was the response variable of the critical macroporosity of 10%. Geostatistical analyses were performed using the base-10 logarithm of the S-index. Semivariogram modeling was performed and adjustment models were inserted into the Gaussian sequential simulation. Subsequently, the simulated random fields were validated, and spatial uncertainties of the base-10 logarithm of the S-index were analyzed. Finally, probability maps of the area's occurrence below cutoff values related to limiting S-index values were developed to evaluate the physical quality vulnerability. The relationship between the S-index and the physical-hydraulic attributes of the soil was evaluated.

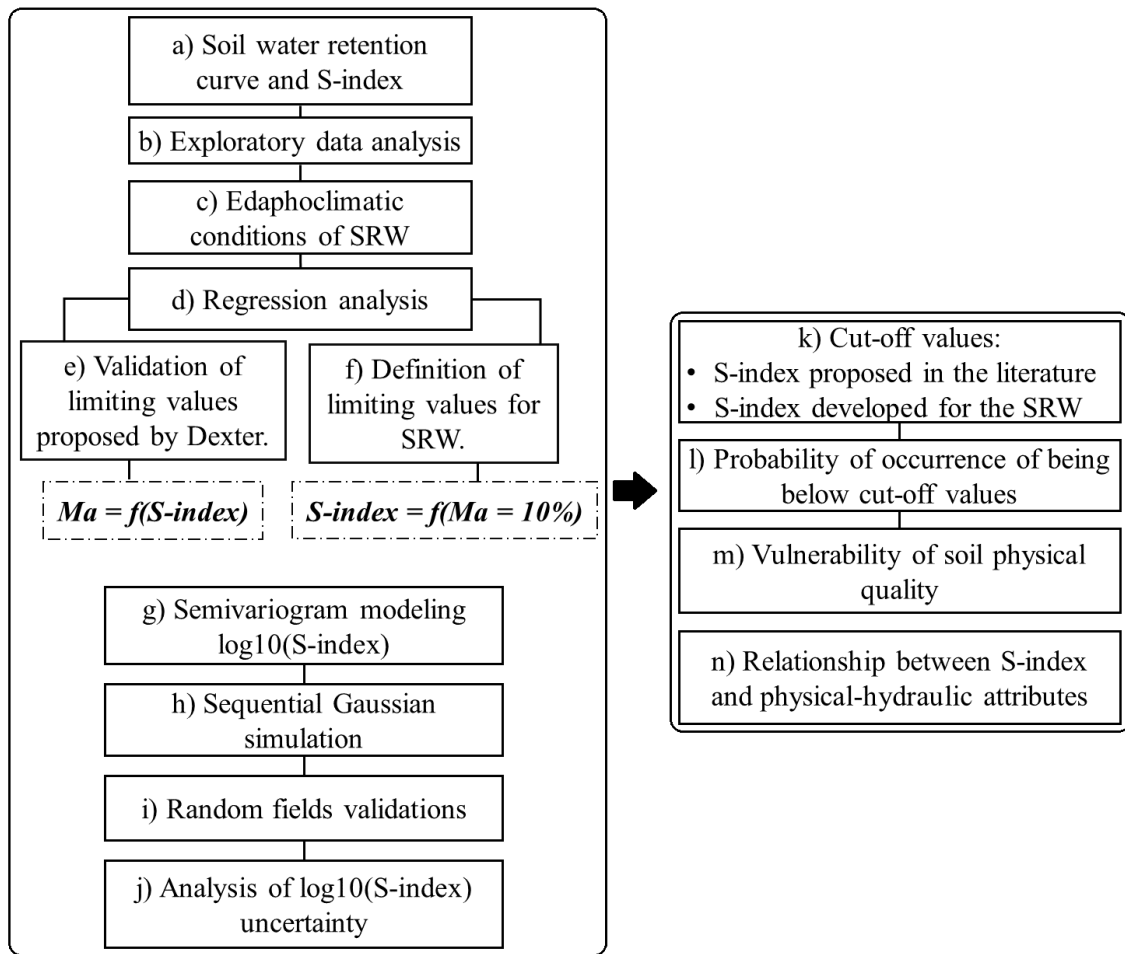


Figure 2 - General procedure of statistical and geostatistical analyses for the assessment of the physical soil quality of the Santa Rita watershed, based on the S-index.

2.2. Experimental design and soil sampling

The soil sampling was conducted in two stages. In the first stage, an experimental grid of 80 sampling points with irregular spatial distribution was established, with a minimum distance of 300 m between points. Subsequently, to model the spatial variability structure of the soil attributes, a denser sampling was performed with an additional 37 points in two transversal sections, with irregular distances between sample pairs, ranging from 1 m to 150 m (Figure 1a).

At each sampling point, samples were collected with preserved structure in the intermediate layer between 0.075 - 0.125 m, with the aid of volumetric rings of 0.5 m in

height and 0.47 m in diameter. In the same samples, the macroporosity (Ma) and bulk density (Bd) were determined, following the methodology proposed by Teixeira et al. (2017). The saturated hydraulic conductivity (Ks) was determined using the constant head method (Klute and Dirksen, 1986). Samples with disturbed structure were collected with the aid of a cutting shovel to determine the granulometric fractions by the pipette method (Gee and Bauder, 1986) and soil organic carbon (OC) was determined by wet combustion method (Walkley and Black, 1934). In addition, a soil sample was collected using a volumetric ring with a height of 0.30 m and a diameter of 0.48 m for the determination of the SWRC, following Teixeira et al. (2017).

2.3. *S-index*

The volumetric water content of soil retained at seven matric potentials was obtained for the entire sample grid. The volumetric water content at matric potentials of 0, -1, and -6 kPa were measured using a tension table, and the potentials of -10, -33, -100, and -1500 kPa were measured using a Richards pressure chamber. At each sampling point, the SWRC was fitted to the van Genuchten mathematical model (1980) with the restriction of Mualem (1976) following Equation 1. The curves were adjusted using the SWRC fit software (Seki, 2007).

$$\theta(\Psi_m) = \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{[1 + (\alpha|\Psi_m|)^n]^m} \quad (9)$$

where $\theta(\Psi_m)$ is the volumetric water content as a function of the matric potential Ψ_m ; θ_s and θ_r represent the volumetric water content at saturation (total porosity) and residual (permanent wilting point), respectively; Ψ_m is the total water potential in the soil (kPa); α , n , and m are empirical parameters of the equation and are obtained by mathematical fitting. It is convenient to use the Mualem (1976) restriction, where $m = 1 - (1/n)$ and $n > 1$.

After fitting the SWRC, the S-index was calculated (Equation 2), following Dexter (2004):

$$S = -n(\theta_{gs} - \theta_{gr}) \left(1 + \frac{1}{m}\right)^{-(1+m)} \quad (10)$$

where S is the S-index; θ_{gs} is the gravimetric water content at saturation; θ_{gr} is the gravimetric water content at residual; α , m , and n are empirical parameters of the equation and are obtained by mathematical adjustment. Dexter (2004) and Dexter and Czyz (2007) defined ranges of physical (structural) quality limits of soil based on the S-index. S-index ≥ 0.05 indicates very good physical quality, while $0.035 \leq \text{S-index} < 0.05$ is considered good physical quality, $0.02 \leq \text{S-index} < 0.035$ is considered poor physical quality, and S-index < 0.02 is considered very poor or degraded physical quality.

2.4. Statistical and geostatistical analysis

The S-index database was subjected to exploratory analysis using classical descriptive statistics (mean, standard deviation, coefficient of variation, maximum and minimum values). Variability was analyzed based on the coefficient of variation (CV), following the methodology proposed by Warrick and Nielsen (1980), which considers low variability for $CV < 12\%$, intermediate variability for CV between 12 and 60%, and high variability for $CV > 60\%$. Due to the number of samples, normality of data distribution was checked using the Shapiro-Wilk test (1965) at a significance level of 5%, analyzing the P-value ($P \geq 0.05$) (Razali and Wah, 2011).

Subsequently, regression analyses (Kutner et al., 2005) were performed to validate the S-index limits proposed by Dexter (2004) for the edaphoclimatic conditions of the SRW, based on soil macroporosity as a function of the S-index. In order to determine new critical limits for the edaphoclimatic conditions of the SRW, regression models of the S-index were developed based on a critical macroporosity of 10%, which is considered

essential for plant development (Baver, 1949; Grable, 1968; Reinert, 2001; Suzuki et al., 2022).

The critical limits determination of the S-index was carried out for different boundary conditions of the SRW. To accomplish this, the S-index database was subdivided by: (i) land use: native field and native forest; (ii) soil classes: Hapludult, Paleudult, and Lithic Udorthent; (iii) texture classes: sandy loam and sandy clay loam; (iv) soil classes combined with land use: Hapludult under native field and native forest, Paleudult under native field and native forest, and Lithic Udorthent under native field and native forest; (v) texture classes combined with land use: sandy loam under native field and sandy loam under native forest, sandy clay loam under native field and sandy clay loam under native forest; (vi) soil classes combined with texture classes: sandy loam Hapludult and sandy clay loam Hapludult, sandy loam Paleudult and sandy clay loam Paleudult, sandy loam Lithic Udorthent and sandy clay loam Lithic Udorthent.

For the geostatistical analyses, the S-index data were transformed using the base-10 logarithmic function ($\log_{10}(\text{S-index})$). The spatial dependence structure was evaluated using Matheron's classical estimator (Matheron, 1963), according to Equation 3:

$$y(h) = \frac{1}{2n(h)} \sum_{\alpha=1}^{n(h)} [Z(u+h) - Z(u)]^2 \quad (11)$$

where $y(h)$ is the experimental semivariance value as a function of h ; $n(h)$ is the number of observation pairs of the variable Z separated by a distance h ; and h is the separation distance between observation pairs $n(h)$, measured in u and $u+h$. To identify anisotropic conditions, the directional experimental semivariograms (Equation 3) were determined according to Goovaerts (1997) in eight main research directions: 0° , 22.5° , 45° , 67.5° , 90° , 112.5° , 135° , 157.5° , adjusting the parameters of nugget effect (c_0), contribution (C), sill equal to the sample variance ($C+c_0$), range (R), and the theoretical model.

Sequential Gaussian simulation (SGS) is a conditional stochastic method that reproduces random fields capable of reproducing the same degree of variability existing in the regionalized variable under study, thus providing an analysis of the uncertainties of the spatial distribution of the variable. Goovaerts (1997) describes SGS as the sequential simulation procedure for multigaussian random functions. In SGS, the shape of the spatial uncertainty distribution of a variable is generated from the mean of the kriging variance (Srivastava, 2013). According to Deutsch and Journel (1998), in geostatistical simulation, at each pixel of the grid, a value of the variable will be randomly extracted from the mean and variance of kriging using the conditioned cumulative probability distribution of the respective point. Therefore, it is necessary to obtain successive conditional cumulative distribution functions (ccdfs) at each node of the grid, following Equation 4:

$$F(u; z|(n)) = Prob(Z(u) \leq z|(n)) \quad (12)$$

where u is the location of variable $Z(u)$, z is a threshold value of the ccdf, and n is the conditioning information used to construct the ccdf of the simulated values.

From the random sampling of ccdfs in all nodes of the grid (Equation 5), numerous random fields of the spatial distribution of $\log_{10}(\text{S-index})$ can be concurrently generated.

$$F(u_1, u_2, \dots, u_n; z_1, \dots, z_N | (n)) = Prob(Z(u_1) \leq z_1, \dots, Z(u_N) \leq z_N | (n)) \quad (13)$$

where N is the number of nodes in the grid and u_i is the location of the variable where there are no observed data.

To perform the SGS, it is necessary that the variographic modeling of the $\log_{10}(\text{S-index})$ has already been carried out (Equation 1). According to Goovaerts (1997), a grid must be generated for the variable and study area using SGS. The following procedures must be adopted for SGS: (i) the dataset of the $\log_{10}(\text{S-index})$ must have a normal Gaussian distribution. Therefore, frequency distribution normalization must be

performed by obtaining Gaussian scores that have a mean of zero and variance of one; (ii) a random path within the grid to be simulated must be defined; (iii) using the semivariogram of the Gaussian scores from $\log_{10}(\text{S-index})$, simple kriging must be performed at each node of the grid. Based on the estimate, the conditional mean and variance of the Gaussian distribution will be determined and will define the cumulative conditional distribution function; (iv) a value of the Gaussian distribution must be randomly extracted and added to the data set; (v) the algorithm will visit the next node of the grid, following the random path.

Considering the sampled and previously simulated data, steps (iii) and (iv) are repeated until all nodes of the grid have been visited; (vi) after completing the simulation, a simulated value is obtained for each node of the grid. However, these simulated values $\{y^{(l)}(u_j), j = 1, \dots, N\}$ are in the magnitude of the Gaussian space. Therefore, the data must be back-transformed to the original sample space, S-index; (vii) a realization of the simulation (a generated map) is obtained at the end of step 6. To perform l realizations, in order to obtain greater precision of the spatial variability of the $\log_{10}(\text{S-index})$, steps (ii) to (v) must be repeated.

The validation of the l maps obtained by the simulations was performed according to the following criteria:

1. The sampled values of the $\log_{10}(\text{S-index})$, at their respective spatial locations, must be honored by the simulation (Equation 6). The Pearson correlation coefficient between the observed and simulated data at the previously sampled locations was used to evaluate the quality of the simulations.

$$Z^{(1)} = Z(u_\alpha) \tag{14}$$

$$\forall u = u_\alpha$$

$$\alpha = 1, \dots, n$$

2. The histograms of the simulated values should be similar to those of the sampled data of the $\log_{10}(\text{S-index})$.

3. The spatial dependency structure of the simulated values (semivariogram) for the l realizations should be similar to that of the sampled $\log_{10}(\text{S-index})$.

The analysis of $\log_{10}(\text{S-index})$ uncertainties was evaluated from the spatial variability analysis performed with SGS and the 24 equiprobable random fields (Siqueira et al., 2019). The following steps were carried out: i) calculation of the mean $\log_{10}(\text{S-index})$ in each field; ii) development of the cumulative frequency curve of the 24 mean values of the random fields; iii) calculation of the 5th and 95th percentiles; iv) selection of fields whose means are close to the 5th and 95th percentiles of probability of not exceeding the mean of all fields, thus representing pessimistic and optimistic scenarios of $\log_{10}(\text{S-index})$, respectively. Using the fields corresponding to the 5th and 95th percentiles, the global effects of $\log_{10}(\text{S-index})$ spatial variability on the classification of soil physical quality according to the ranges proposed by Dexter (2004) were analyzed.

In order to identify potential zones of vulnerability of soil physical quality based on the S-index, probability maps were developed ranging from 0 to 100% of the SRW area being below the threshold values of S-index proposed by Dexter (2004) and developed for the edaphoclimatic conditions of the SRW. Table 1 shows the cut-off values used for the development of physical vulnerability maps based on the S-index.

Tab.1 - Cut-off values for the S index, according to limits proposed in the literature and developed for the data from the Santa Rita watershed, located in the municipality of Pelotas, in southern Rio Grande do Sul, Brazil.

Physical vulnerability	Cut-off	Reference
Areas prone to degradation or degraded	$\text{S-index} < 0.035$	Dexter (2004)
	$\text{S-index} < 0.039$	Author

Aiming to evaluate the interrelationships between the S-index and the physical-hydraulic attributes, soil samples were grouped into increasing intervals of S-index values, following the limits proposed by Dexter (2004). From the S-index ranges, the corresponding means of Ks, Bd, Ma, OC, and granulometric fractions (clay, silt, and sand contents) were determined.

To perform the exploratory data analysis, the R software (R Core Team, 2008) was used. The geostatistical analyses of spatial variability modeling and sequential Gaussian simulation were carried out using the geostatistical modeling software SGeMS/AR2GeMS (Remy et al., 2009). ArcGIS, version 10.6.1 (ESRI) was used for spatial data processing and visualization.

3. Results and discussion

3.1. Exploratory analysis

The mean S-index in SRW was 0.040 (Table 2), which is above the critical values proposed by Dexter (2004), indicating that, on average, the soil is in good physical and structural conditions according to the criteria adopted by Dexter (2004). The coefficient of variation shows, according to Warrick and Nielsen (1980), that the variability of the S-index is intermediate in practically all classifications performed, except for the analyses of soils under native forest and Paleudult under native forest, where the variability was high (> 60%). The S-index has a non-normal distribution, with a P-value less than 5% significance, which is supported by the discrepancy between the skewness and kurtosis coefficients.

Table 2 - Descriptive statistics of the S-index subdivided by land uses, soil classes, and textural classes for data from the Santa Rita watershed, situated in the municipality of Pelotas, in the southern region of Rio Grande do Sul, Brazil.

Subdivision	Mean	Median	CV	Skew	Kurt	P-value
All	0.040	0.036	56.27	3.53	18.67	3.71E-14
NFI	0.040	0.038	47.38	3.61	23.38	2.64E-11
NFO	0.048	0.037	73.76	2.67	8.57	9.00E-05
PBACal	0.037	0.033	43.46	0.72	0.26	0.4152*
PVAd	0.040	0.038	57.94	3.85	20.14	2.14E-13
SXe3	0.035	0.034	48.13	1.43	2.21	0.1279*
SL	0.035	0.033	37.08	1.14	1.22	0.0017
SCL	0.033	0.033	40.30	0.05	-1.10	0.2707*
PBACal NFI	0.034	0.030	51.59	1.21	1.63	0.2725*
PBACal NFO	0.041	0.045	38.46	-0.18	-1.52	0.8083*
PVAd NFI	0.041	0.039	47.23	3.88	24.56	5.30E-11
PVAd NFO	0.051	0.036	79.64	2.40	6.52	6.62E-04
SXe3 NFI	-	-	-	-	-	NS
SXe3 NFO	-	-	-	-	-	NS
SL NFI	0.035	0.032	36.40	1.38	1.19	0.0108
SL NFO	0.040	0.035	39.15	1.19	0.80	0.1414*
SCL NFI	0.033	0.032	31.36	0.78	-0.16	0.1918*
SCL NFO	0.037	0.037	44.43	-0.91	-1.14	0.1743*
SL PBACal	0.040	0.037	38.15	1.21	1.03	0.1689*
SCL PBACal	0.038	0.045	39.52	-0.52	-3.20	0.0703*
SL PVAd	0.033	0.032	31.52	0.59	-0.45	0.0629*
SCL PVAd	0.031	0.032	40.90	0.15	-0.45	0.7111*
SL SXe3	0.037	0.034	49.85	1.22	1.37	0.3604*
SCL SXe3	-	-	-	-	-	NS

All: complete database without subdivisions; NFI: native field; NFO: native forest; SL: sandy loam; SCL: sandy clay loam; PBACal: Hapludult; PVAd: Paleudult; SXe3: Albaqualf; PBACal NFI: Hapludult under native field; PBACal NFO: Hapludult under native forest; PVAd NFI: Paleudult under native field; PVAd NFO: Paleudult under native forest; SXe3 NFI: Albaqualf under native field; SXe3 NFO: Albaqualf under native forest; SL NFI: sandy loam under native field; SL NFO: sandy loam under native forest; SCL NFI: sandy clay loam under native field; SCL NFO: sandy clay loam under native forest; SL PBACal: sandy loam Hapludult; SCL PBACal: sandy clay loam Hapludult; SL PVAd: sandy loam Paleudult; SCL PVAd: sandy clay loam Paleudult; SL SXe3: sandy loam Albaqualf; SCL SXe3: sandy clay loam Albaqualf; CV: coefficient of variation; Skew: skewness; Kurt: kurtosis; NS: non-significant regression model for estimating the critical S-index; (*): normality trend with a significance level of 5% was verified using the Shapiro-Wilk normality test.

The S-index was sensitive to capturing structural changes among different land uses and soil management practices (Hebb et al., 2017; Rosseti and Cernturion, 2022). Differences in S-index values occur due to changes in soil porosity and pore size, which influence the SWRC, modifying its graphical shape (Narjary and Aggarwal, 2014). Among land uses, the S-index was higher in native forest compared to native field. This result is supported by the study of Pinto et al. (2018), who found higher S-index values

in soils under native forests, associated with low values of density and organic matter. Regarding soil classes, Paleudult had a higher mean S-index compared to Hapludult and Albaqualf. Regarding soil textures, sandy loam soils were higher than sandy clay loam soils, however, with a small variation between them.

Among all subdivisions made, the highest mean S-index was found in Paleudult under native forest, Hapludult under native forest, and Paleudult under native field, respectively. These soils have better structural quality compared to those with lower S-values, such as sandy clay loam Paleaudult, sandy loam Paleaudult, and sandy clay loam soils under native field. Therefore, it is noted that for the SRW, the greatest contribution to an increase in the S-index was due to land use, specifically native forest. This result is explained by the fact that soils under native forest have their structural conditions better preserved due to their vegetal cover and organic matter input (Lee and Foster, 1991; Jardini and Amori, 2017), and consequently have higher aeration and macroporosity, in agreement with results found by Baiamonte et al. (2017).

3.2. Validation of the S-index limits proposed by Dexter (2004) in the Santa Rita watershed

The S-index has a direct relationship with Ma (Andrade and Stone, 2009; Caviglione, 2018). Table 3 shows the Ma values corresponding to the regression models as a function of the S-index limits proposed by Dexter (2004). The S-index value of 0.02 separates soils with low physical quality and degraded soils. In all classifications of S-index data sets analyzed, Ma was lower than the limiting value. For S-index of 0.035, which limits soils with low and good physical quality, values lower than 10% of Ma were also found, indicating that the actual limits for SWR conditions are higher than the limits proposed by Dexter (2004), corroborating with Beutler et al. (2008) and Andrade and

Stone (2009). Similarly, Rosseti and Centurion (2018) found that the structural physical quality of a Eutroferic Red Latosol was evaluated using the critical limits proposed by Dexter (2004). Other authors, under their boundary conditions, assert that the limits proposed by Dexter (2004) have been effective in evaluating structural quality, such as Naderi-Boldaji and Keller (2016), in soils with different textural classes and organic matter contents. Rosseti and Centurion (2018) identified that, in a Dystrophic Red Latosol under corn cultivation, the S-index proved to be a good complementary parameter to Ma in evaluating soil structural quality. Although the S-index value of 0.035 resulted in Ma values below 10%, it was the one that presented values closest to this Ma, except for sandy loam soils and soils under native forest, which obtained values below 9% of Ma. When analyzing the S-index value of 0.05, which according to Dexter (2004) is the limiting value between soils with good and optimal physical quality, a Ma value lower than the critical Ma was still found in soils under native forest.

Table 3 - Macroporosity as a function of the S-index limits proposed by Dexter (2004) was analyzed using data from the Santa Rita watershed located in the municipality of Pelotas, in the southern region of Rio Grande do Sul, Brazil.

Subdivision	S-index = 0.02	S-index = 0.035	S-index = 0.05
All	6.62%**	9.54%**	12.46%**
NFI	8.45%**	9.75%**	11.45%**
NFO	4.72%**	6.47%**	8.23%**
PBACal	7.82%**	11.60%**	15.39%**
PVAd	7.52%**	9.13%**	10.75%**
SXe3	NS	NS	NS
SL	4.70%**	8.52%**	12.34%**
SCL	6.61%**	10.38%**	14.15%**
PBACal NFI	7.54%**	12.13%**	16.72%**
PBACal NFO	NS	NS	NS
PVAd NFI	8.80%*	9.72%*	10.65%*
PVAd NFO	5.09%**	7.80%**	10.50%**
SXe3 NFI	NS	NS	NS
SXe3 NFO	NS	NS	NS
SL NFI	4.87%**	8.68%**	12.49%**
SL NFO	2.45%**	7.15%**	11.85%**
SCL NFI	4.16%*	10.40%*	16.64%*
SCL NFO	NS	NS	NS

SL PBACal	7.46%**	12.25%**	17.04%**
SCL PBACal	NS	NS	NS
SL PVAd	5.42%*	7.05%*	8.67%*
SCL PVAd	5.04%**	10.29%**	15.55%**
SL SXe3	3.43%**	7.54%**	11.65%**
SCL SXe3	WS	WS	WS

All: complete database without subdivisions; NFI: native field; NFO: native forest; SL: sandy loam; SCL: sandy clay loam; PBACal: Hapludult; PVAd: Paleudult; SXe3: Albaqualf; PBACal NFI: Hapludult under native field; PBACal NFO: Hapludult under native forest; PVAd NFI: Paleudult under native field; PVAd NFO: Paleudult under native forest; SXe3 NFI: Albaqualf under native field; SXe3 NFO: Albaqualf under native forest; SL NFI: sandy loam under native field; SL NFO: sandy loam under native forest; SCL NFI: sandy clay loam under native field; SCL NFO: sandy clay loam under native forest; SL PBACal: sandy loam Hapludult; SCL PBACal: sandy clay loam Hapludult; SL PVAd: sandy loam Paleudult; SCL PVAd: sandy clay loam Paleudult; SL SXe3: sandy loam Albaqualf; SCL SXe3: sandy clay loam Albaqualf; WA: without samples; NS: non-significant; (*): regression model with a significance level of 5%; (**): regression model with a significance level of 1%.

Table 3 shows a large variation in the Ma values associated with the limit values proposed by Dexter (2004), which is related to the variety of land uses, soil classes and textural classes in the SRW. Therefore, it is assumed that the limits proposed by Dexter (2004) are not suitable for the boundary conditions of the SWR (Jong Van Lier, 2014; Oliveira et al., 2016). Thus, it is necessary to determine more suitable limit values for the S-index for the edaphoclimatic conditions present in the area.

3.3. Analysis and definition of critical limits for the S-index based on macroporosity

The S-index showed a positively significant correlation with Ma, considering the complete dataset, as well as in Mota et al. (2020), with a direct relationship with soil pore dynamics. With the complete dataset, the S-index value corresponding to Ma of 10% was 0.039, which is above the limit values proposed by Dexter (2004) of 0.02 and 0.035, as well as the results obtained by Beutler et al. (2008) and Andrade and Stone (2009). Table 4 shows the critical values of S-index for the complete dataset and subdivided by land uses, soil classes and texture classes.

Table 4 - S-index values corresponding to the critical macroporosity of 10%, were obtained from regression models using data from the Santa Rita watershed, located in the municipality of Pelotas, in the southern region of Rio Grande do Sul, Brazil.

Dados	Function	Correlation	P-value	S
All	$S=0.01805+0.002128Ma$	0.54	$1.97E-10^{**}$	0.039
NFI	$S=0.02604+0.001355Ma$	0.34	0.0013^{**}	0.040
NFO	$S=0.00335+0.004116Ma$	0.85	$3.26E-6^{**}$	0.045
PBACal	$S=0.01304+0.001942Ma$	0.70	0.0012^{**}	0.032
PVAd	$S=0.01693+0.002423Ma$	0.51	$3,74E-7^{**}$	0.041
SXe3	-	-	NS	-
SL	$S=0.020431+0.00173Ma$	0.66	$4.97E-07^{**}$	0.038
SCL	$S=0.018573+0.00149Ma$	0.60	0.0065^{**}	0.033
PBACal NFI	$S=0.007107+0.00228Ma$	0.83	0.0026^{**}	0.030
PBACal NFO	-	-	NS	-
PVAd NFI	$S=0.02933+0.00115Ma$	0.27	0.0247^{**}	0.041
PVAd NFO	$S=0.00126+0.00466Ma$	0.92	$4.01E-6^{**}$	0.048
SXe3 NFI	-	-	NS	-
SXe3 NFO	-	-	NS	-
SL NFI	$S=0.02134+0.001606Ma$	0.64	0.0003^{**}	0.037
SL NFO	$S=0.02281+0.001964Ma$	0.61	0.0072^{**}	0.042
SCL NFI	$S=0.02159+0.001263Ma$	0.71	0.0141^{**}	0.034
SCL NFO	-	-	NS	-
SL PBACal	$S=0.01291+0.00196Ma$	0.63	0.0063^{**}	0.033
SCL PBACal	-	-	NS	-
SL PVAd	$S=0.02338+0.001462Ma$	0.40	0.0359^{**}	0.038
SCL PVAd	$S=0.016775+0.00168Ma$	0.56	0.0021^{**}	0.033
SL SXe3	$S=0.011945+0.00310Ma$	0.92	0.0031^{**}	0.043
SCL SXe3	-	-	NS	-

S: índice S; All: complete database without subdivisions; NFI: native field; NFO: native forest; SL: sandy loam; SCL: sandy clay loam; PBACal: Hapludult; PVAd: Paleudult; SXe3: Albaqualf; PBACal NFI: Hapludult under native field; PBACal NFO: Hapludult under native forest; PVAd NFI: Paleudult under native field; PVAd NFO: Paleudult under native forest; SXe3 NFI: Albaqualf under native field; SXe3 NFO: Albaqualf under native forest; SL NFI: sandy loam under native field; SL NFO: sandy loam under native forest; SCL NFI: sandy clay loam under native field; SCL NFO: sandy clay loam under native forest; SL PBACal: sandy loam Hapludult; SCL PBACal: sandy clay loam Hapludult; SL PVAd: sandy loam Paleudult; SCL PVAd: sandy clay loam Paleudult; SL SXe3: sandy loam Albaqualf; SCL SXe3: sandy clay loam Albaqualf; NS: non-significant; (*): regression model with a significance level of 5%; (**): regression model with a significance level of 1%.

Regarding land use, soils under native forest obtained a higher critical limit than those under native field, indicating better structural quality (Rosseti and Centurion, 2022). In this case, the critical S-index was the highest (S-index = 0.045), a value also found by Andrade and Stone (2009) for tropical soils in Brazil. Soils under native field showed a reduction in quality due to cattle trampling, increasing soil density and reducing the slope

of the tangent line to the inflection point of the soil water retention curve (Dexter, 2004; Yang et al., 2015). Critical S-index values of 0.032 for Hapludult and 0.041 for Paleudult were found, indicating the influence of soil class on the index. In both soil classes, the critical limits were higher than that proposed by Dexter (2004) to identify degraded soils (S-index = 0.02). The Paleudult had an S-index higher than the limit of 0.035 that limits soils with good physical quality from those with a tendency to degradation. In the Lithic Udorthent, the correlation between Ma and S-index was not significant. With regard to textural classes, sandy loam soils had a higher critical limit compared to sandy clay loam soils, as observed in Oliveira et al. (2016).

The highest critical limits of S-index were found for Paleudult under native forest (S-index = 0.048) and for soils under native forest (S-index = 0.045), values closer to Dexter's (2004) limit of 0.05, which separates soils with good physical quality from soils with excellent physical quality. The lowest critical limits of S-index were found for Hapludult (S-index = 0.032) and Hapludult under native field (S-index = 0.030). These results highlight the fragility of Hapludult, which becomes even more vulnerable when under native field use. Soils under native field in the SRW have a higher density due to compaction (Mainuri and Owino, 2013), having reduced values of S-index (Yang et al., 2015; Caviglione, 2018).

All subdivisions of land uses, soil classes and textural classes, as well as their combinations, obtained critical upper limits above the soil degradation threshold proposed by Dexter (2004) of 0.02. Only sandy clay loam soils and Hapludults presented critical values below the 0.035 threshold.

Various intrinsic and extrinsic soil conditions and characteristics influence the evaluation of the limiting value of the S-index. Soil texture influences the behavior of the SWRC and consequently the S-index. Different land uses directly affect soil structure due

to anthropogenic actions. The S-index proves to be an excellent tool for assessing structural conditions, with a direct relationship with Ma. However, the faithful use of S-index limits proposed by Dexter (2004) without considering the edaphoclimatic characteristics of the study area in the evaluation of physical quality can generate erroneous results and not be consistent with reality (Jong Van Lier, 2014).

In general, sandy loam soils, such as sandy loam Lithic Udorthent, sandy loam Paleudult, sandy loam soils under native forest and under native fields, presented lower means than the critical limits determined for such classifications, demonstrating the fragility of these soils (Table 5). This behavior also occurred with sandy clay loam soils in general, without subdivisions regarding soil use and classes. Although Hapludults presented lower critical values of S-index, the means found were lower than these limits, indicating good physical quality. Regarding land uses, in general, without considering soil texture and subdivisions of soil classes, native forest or native field presented mean values of S-index equal to or higher than the critical limits, also indicating good structural conditions.

Table 5 - Comparison of the mean values and respective critical values of the S-index under the boundary conditions of the Santa Rita watershed, located in the municipality of Pelotas, in the southern region of Rio Grande do Sul, Brazil.

Subdivision	Mean	Critical S-index
All	0.040	0.039
NFI	0.040	0.040
NFO	0.048	0.045
PBACal	0.037	0.032
PVAd	0.040	0.041
SXe3	0.035	NS
SL	0.035	0.038
SCL	0.033	0.033
PBACal NFI	0.034	0.030
PBACal NFO	0.041	NS
PVAd NFI	0.041	0.041
PVAd NFO	0.051	0.048
SXe3 NFI	-	NS

SXe3 NFO	-	NS
SL NFI	0.035	0.037
SL NFO	0.040	0.042
SCL NFI	0.033	0.034
SCL NFO	0.037	NS
SL PBACal	0.040	0.033
SCL PBACal	0.038	NS
SL PVAd	0.033	0.038
SCL PVAd	0.031	0.033
SL SXe3	0.037	0.043
SCL SXe3	-	NS

All: complete database without subdivisions; NFI: native field; NFO: native forest; SL: sandy loam; SCL: sandy clay loam; PBACal: Hapludult; PVAd: Paleudult; SXe3: Albaqualf; PBACal NFI: Hapludult under native field; PBACal NFO: Hapludult under native forest; PVAd NFI: Paleudult under native field; PVAd NFO: Paleudult under native forest; SXe3 NFI: Albaqualf under native field; SXe3 NFO: Albaqualf under native forest; SL NFI: sandy loam under native field; SL NFO: sandy loam under native forest; SCL NFI: sandy clay loam under native field; SCL NFO: sandy clay loam under native forest; SL PBACal: sandy loam Hapludult; SCL PBACal: sandy clay loam Hapludult; SL PVAd: sandy loam Paleudult; SCL PVAd: sandy clay loam Paleudult; SL SXe3: sandy loam Albaqualf; SCL SXe3: sandy clay loam Albaqualf; NS: non-significant regression model for estimating the critical S-index.

3.4. S-index simulation

The transformation of the S-index, using the base-10 logarithmic function, was established to continue the geostatistical analysis (Table 6).

The modeling of the semivariograms of $\log_{10}(\text{S-index})$ data was performed, identifying the direction of greatest spatial continuity at an azimuth of 135° and the direction of least spatial continuity at an azimuth of 45° . Table 6 shows the geostatistical parameters of the spatial continuity model for $\log_{10}(\text{S-index})$. The $\log_{10}(\text{S-index})$ has a spatial continuity of 630.0 m in the direction of 135° and 180.0 m in its perpendicular direction of lesser spatial continuity. The theoretical spherical model best represented the experimental semivariance points. It should be noted that the sill reached the data's clustered variance, approximately 0.038 of $\log_{10}(\text{S-index})$.

Table 6 - Parameters of semivariogram models fitted to the base-10 logarithm of the S-index for data from the Santa Rita watershed, located in the municipality of Pelotas in the southern region of Rio Grande do Sul, Brazil.

Azimuth	Variance	c ₀	C	R (m)	Theoretical model
45°	0.038	0.0099	0.0281	180.0	Spherical
135°	0.038	0.0099	0.0281	630.0	Spherical

c₀: nugget effect; C: contribution; R(m): range in meters.

The theoretical semivariogram models fitted to log₁₀(S-index) for the directions of greater continuity (Azimuth 135°) and lesser continuity (Azimuth 45°) are represented by Equations 7 and 8, respectively.

$$\gamma(h) = \begin{cases} 0.0099 + 0.0281 \cdot \left[1.5 \frac{h}{630m} - 0.5 \left(\frac{h}{630m} \right)^3 \right] & \text{if } 0 < h \leq a \\ 0.0099 + 0.0281, & \text{if } h > a \\ 0.0099, & \text{if } h = 0 \end{cases} \quad (15)$$

$$\gamma(h) = \begin{cases} 0.0099 + 0.0281 \cdot \left[1.5 \frac{h}{180m} - 0.5 \left(\frac{h}{180m} \right)^3 \right] & \text{if } 0 < h \leq a \\ 0.0099 + 0.0281, & \text{if } h > a \\ 0.0099, & \text{if } h = 0 \end{cases} \quad (8)$$

where h is the lag, the distance between pairs of samples.

The unclustered variance was 0.038, equal to the sample variance of the log₁₀(S-index) data, therefore, it was not necessary to correct the semivariogram.

The log₁₀(S-index) data were transformed into scores with dimension in Gaussian space, using the nscore function, with mean zero and variance one. Subsequently, the semivariogram modeling of the Gaussian scores from log₁₀(S-index) was performed for the direction of greater and lesser spatial continuity, with the sill equal to variance 1.0. Table 7 shows the geostatistical parameters for fitting the spatial continuity model of log₁₀(S-index) scores. The log₁₀(S-index) in Gaussian space has 630.0 m of spatial continuity in the 135° direction and 180.0 m in its perpendicular direction of lesser spatial continuity (45°). The spherical theoretical model best represented the experimental semivariance points.

Table 7 - Parameters of the semi-variogram models fitted to the gaussian scores of the base-10 logarithm of the S-index for data from the Santa Rita watershed, located in the municipality of Pelotas in the southern region of Rio Grande do Sul, Brazil.

Azimuth	Variance	c ₀	C	R (m)	Theoretical model
45°	1.0	0.26	0.74	180.0	Spherical
135°	1.0	0.26	0.74	630.0	Spherical

c₀: nugget effect; C: contribution; R(m): range in meters.

The theoretical semivariogram models fitted to Gaussian scores of log₁₀(S-index) for the directions of greater continuity (Azimuth 135°) and lesser continuity (Azimuth 45°) are represented by Equations 9 and 10, respectively.

$$\gamma(h) = \begin{cases} 0.26 + 0.74 \cdot \left[1.5 \frac{h}{630m} - 0.5 \left(\frac{h}{630m} \right)^3 \right] & \text{if } 0 < h \leq a \\ 0.26 + 0.74, & \text{if } h > a \\ 0.26, & \text{if } h = 0 \end{cases} \quad (9)$$

$$\gamma(h) = \begin{cases} 0.26 + 0.74 \cdot \left[1.5 \frac{h}{180m} - 0.5 \left(\frac{h}{180m} \right)^3 \right] & \text{if } 0 < h \leq a \\ 0.26 + 0.74, & \text{if } h > a \\ 0.26, & \text{if } h = 0 \end{cases} \quad (10)$$

where h is the lag, the distance between pairs of samples.

The sequential Gaussian simulation of log₁₀(S-index) was performed using a maximum of 16 observed and 16 simulated data points per location. The semivariogram model of Gaussian scores from log₁₀(S-index) was used, which was modeled with a spherical structure. The effect of clustering due to sample density was assessed by comparing the prior variances of clustered and unclustered S-index data (the original variable). The clustered variance was found to be 0.0005, while the unclustered variance was 0.00041, indicating a significant clustering effect of approximately 22%. Consequently, the unclustered distribution of log₁₀(S-index), obtained using the nearest neighbor method, was used as a reference in the sequential Gaussian simulation algorithm.

Figure 3 shows that the fluctuations of the standard deviation value of the accumulated random fields are practically negligible from the twentieth simulated

random field onwards when new random fields are added (Soares et al., 2023), stabilizing in the twenty-fourth simulation.

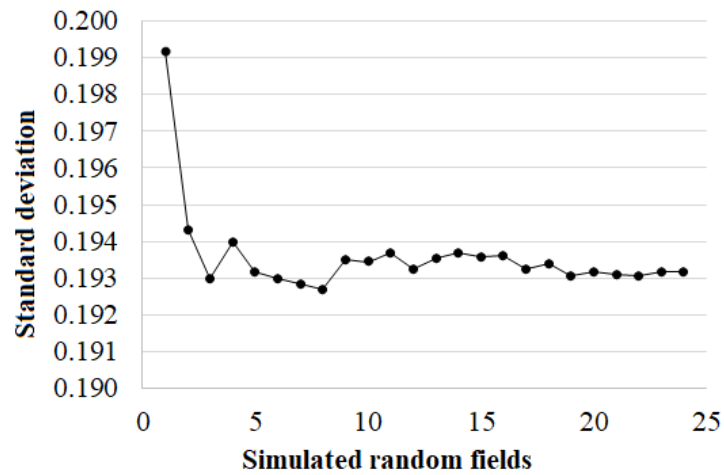


Figure 3 - Standard deviation of the accumulated simulated random fields values of base-10 logarithm of the S-index in the Santa Rita watershed, Pelotas, in southern Rio Grande do Sul, Brazil.

Figure 4 shows the probability distribution curve of the means of the simulated random fields, indicating the 5th and 95th percentiles. The simulated random fields for the S-index, corresponding to the 5th and 95th percentiles of the means from 24 simulations, were random fields 2 and 23, respectively.

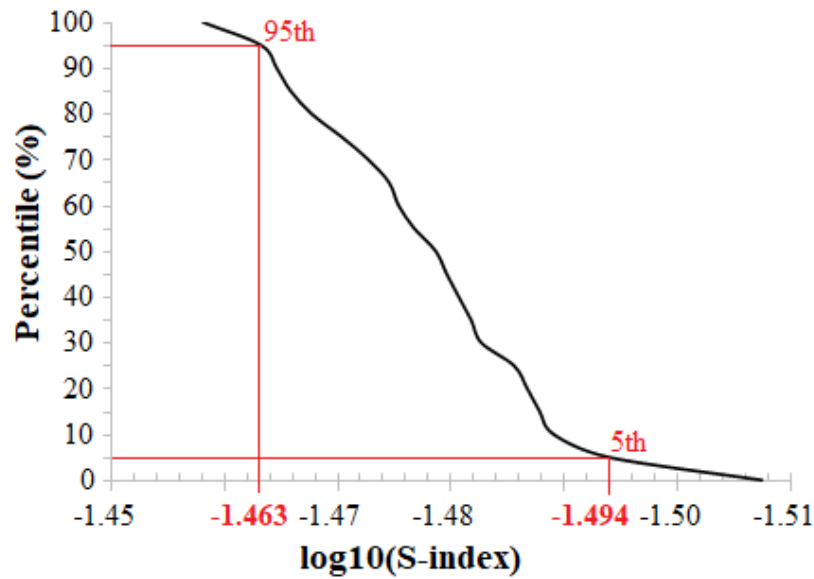


Figure 4 - Cumulative distribution curve of the means of simulated random fields of base-10 logarithm of the S-index in the Santa Rita watershed, Pelotas, in southern Rio Grande do Sul, Brazil.

The pessimistic (5th percentile) and optimistic (95th percentile) S-index scenarios can be seen in Figure 5a and 5b, respectively. It can be observed that the two scenarios are similar, with the largest discrepancies in the northern region of SRW, where larger areas of soil with optimal physical quality ($S\text{-index} \geq 0.05$) were found in random field 23 (Figure 5a) compared to random field 2 (Figure 5b). In random field 2, more degraded regions (orange) and regions with poor physical quality, but with the potential for recovery (yellow), were found.

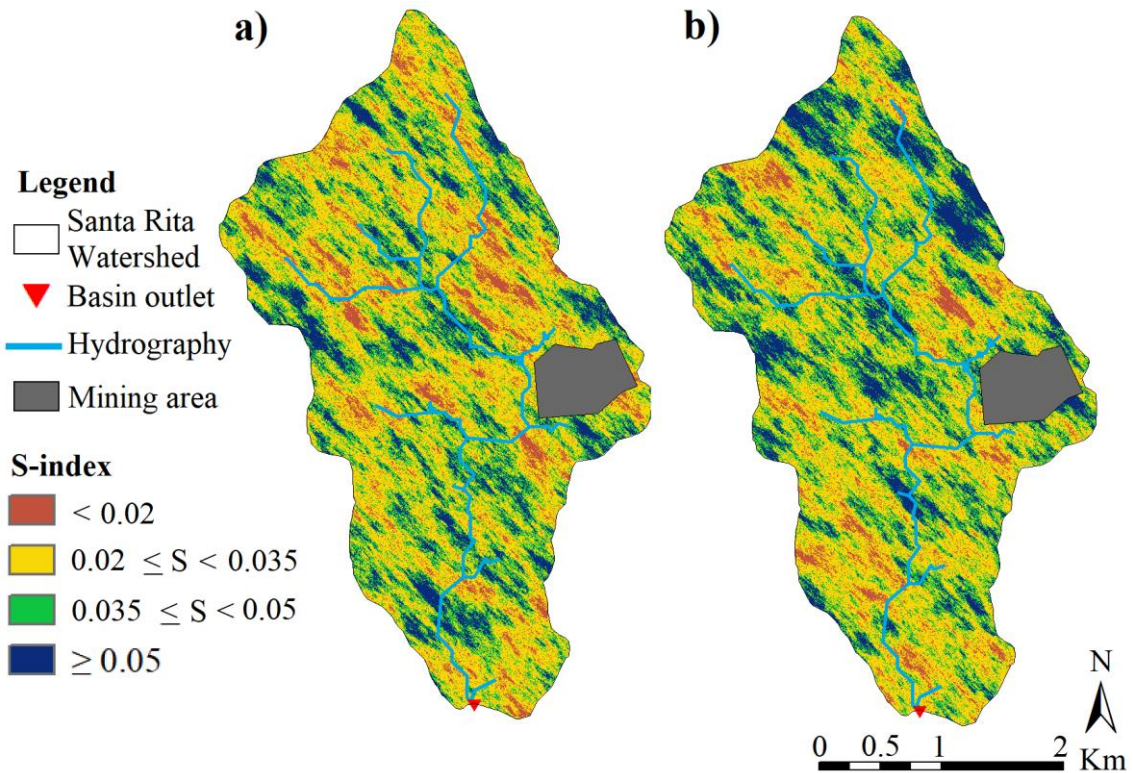


Figure 5 - Simulated random field 2 (a) and 23 (b) of base-10 logarithm of the S-index in the Santa Rita watershed, Pelotas, in southern Rio Grande do Sul, Brazil.

Figure 6 shows the coefficient of variation map at each node of the grid for the 24 simulated random fields. It can be observed that the variability is low to intermediate throughout the SRW, according to the classification by Warrick and Nielsen (1980), which corroborates with the similarity between the pessimistic and optimistic S-index scenarios (Figure 5). The maximum coefficient of variation value for the S-index simulations was 24.57%, and the mean value for the SRW was 12.35%.

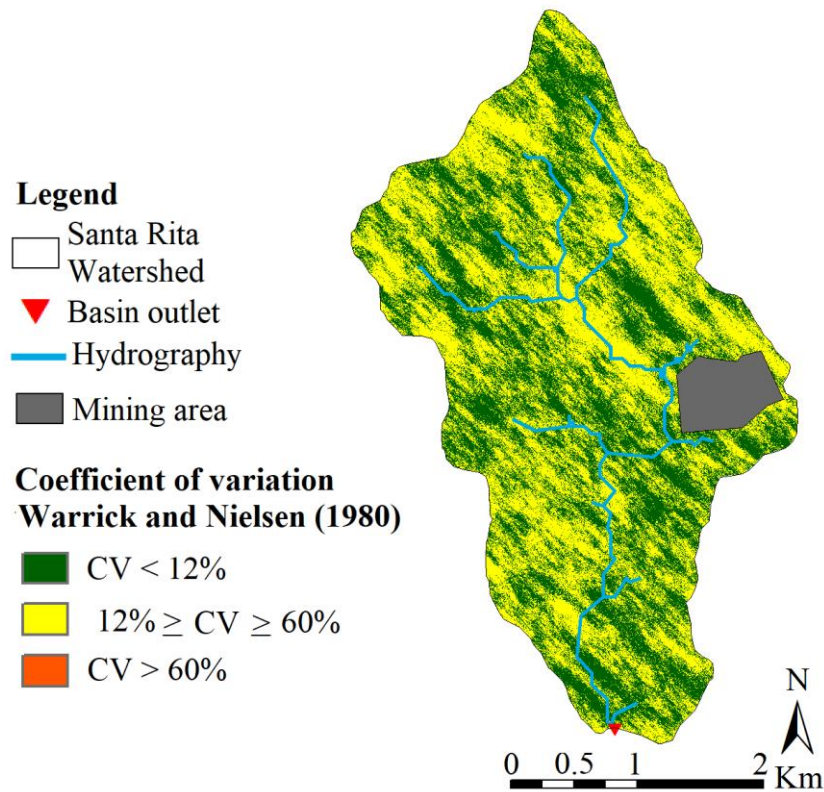


Figure 6 – Coefficient of variation map using limits proposed by Warrick and Nielsen (1980) for values of simulated base-10 logarithm of the S-index in the Santa Rita watershed, Pelotas, in southern Rio Grande do Sul, Brazil.

For simulation validation, the pessimistic (random field 2) and optimistic (random field 23) random fields were chosen. Figure 7 shows the residual dispersion of the simulated random fields 2 (Figure 7a) and 23 (Figure 7b). It can be observed that both equiprobable scenarios had low residual dispersion and an average of approximately zero. Some residual points stood out in the dispersion due to the fact that some sampled points in the field did not coincide with the nearest simulation grid nodes.

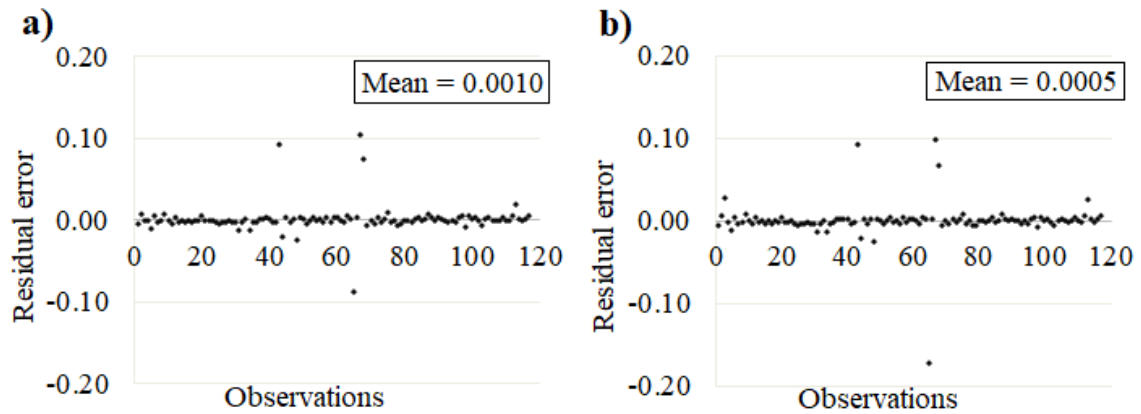


Figure 7 – Dispersion of residual errors of simulated field 2 (a) and simulated field 23 of the base-10 logarithm of the S-index in the Santa Rita watershed, located in Pelotas, in the southern region of Rio Grande do Sul, Brazil.

Figure 8 shows the histograms of the validated random fields in comparison to the $\log_{10}(\text{S-index})$. Both scenarios honored the histogram of the unclustered $\log_{10}(\text{S-index})$ data.

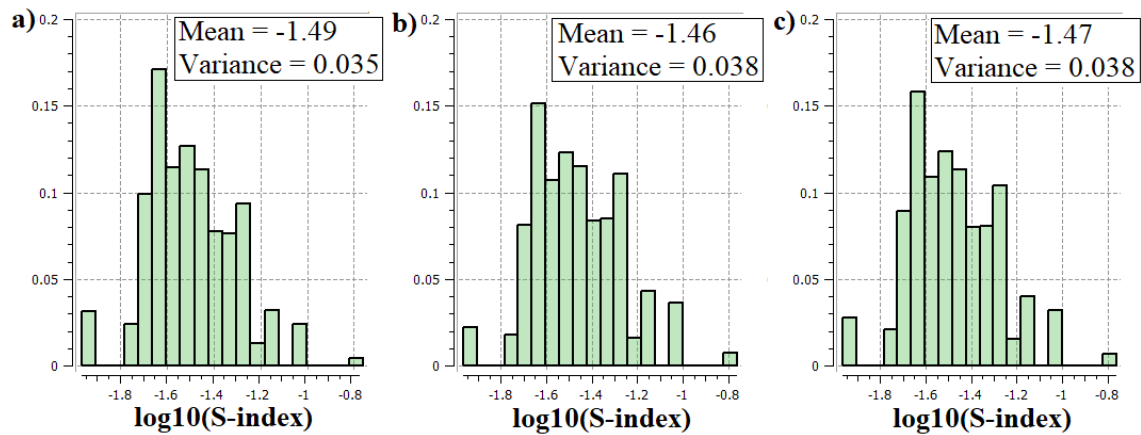


Figure 8 - Comparison of the histograms of simulated random field 2 (a); simulated random field 23 (b); and the base-10 logarithm of the unclustered S-index (c) in the Santa Rita watershed, Pelotas, in southern Rio Grande do Sul, Brazil.

Figure 9 shows the comparison of the semivariograms of the simulated random fields 2 and 23 of $\log_{10}(\text{S-index})$ with the theoretical model of $\log_{10}(\text{S-index})$ for the direction of greater spatial continuity, azimuth 135° (Equation 7). The spatial continuity of the simulated random fields reached the level of the unclustered data, however, there were differences in the semivariances in the first meters of lag causing ergodic fluctuations (Goovaerts, 1997). These fluctuations occurred because the theoretical semivariogram was unable to fit perfectly to the experimental semivariance points, referring to the field data. Thus, the semivariograms of the simulated fields are more influenced by the experimental semivariance points than by the adjusted theoretical one. Thus, the S-index simulations were satisfactorily validated by the representation of the original data, histograms, and the semivariogram of the unclustered data (Goovaerts, 1997).

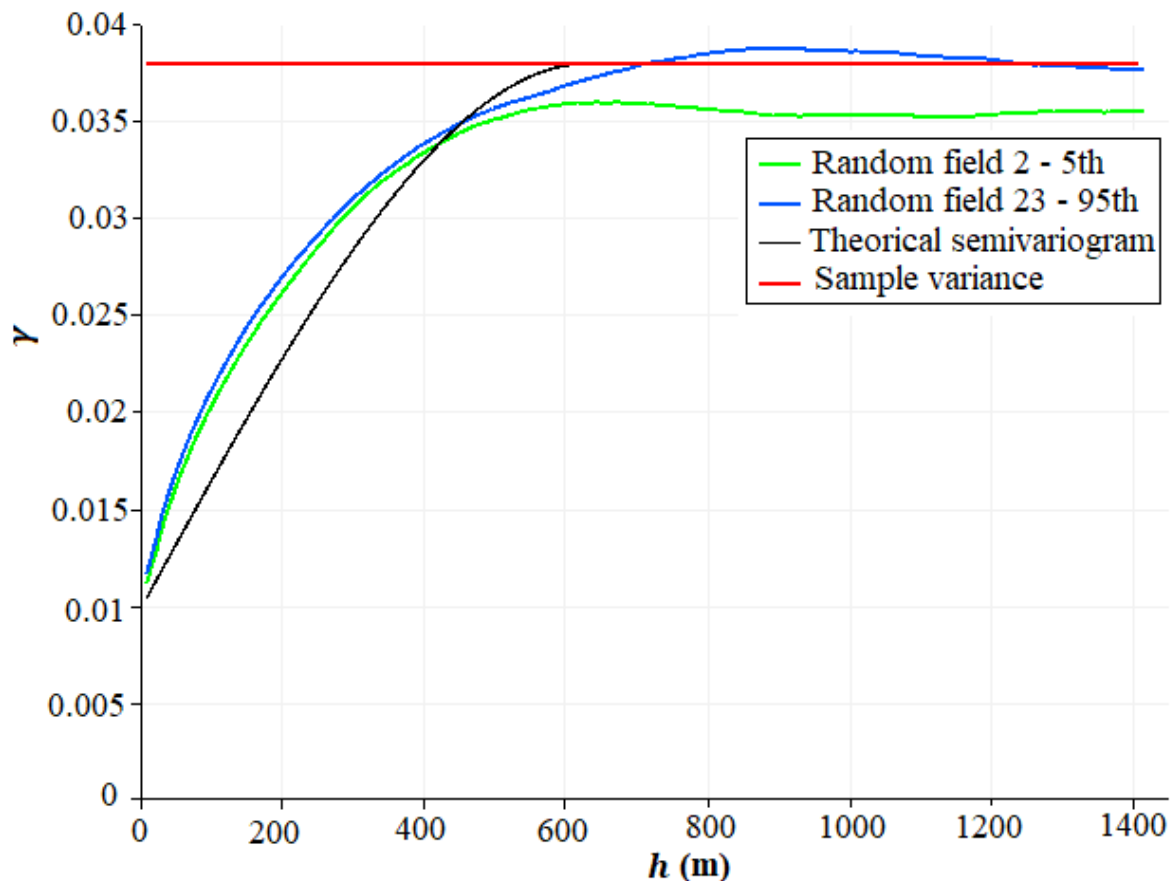


Figure 9 - Comparison of the semivariograms of random fields 2 and 23 of the base-10 logarithm of the S-index, and the ungrouped theoretical semivariogram of the base-10 logarithm of the S-index in the Santa Rita watershed, Pelotas, in southern Rio Grande do Sul, Brazil.

The simulated random fields were effective in capturing the spatial uncertainties of the variable. The mean was 0.032 for random field 2 and 0.034 for random field 23, optimistic and pessimistic, respectively. Both scenarios were below the limiting S-index value proposed by Dexter (2004) of 0.035 and below the critical S-index value of 0.039 for the SRW. Therefore, the SRW has a significant amount of areas prone to degradation or degraded.

3.5. Mapping critical zones of physical quality based on the S-index

The mapping of critical zones was performed based on the development of physical vulnerability maps. From the 24 simulated random fields, vulnerability maps were developed indicating the probability of the SRW being below the cutoff values described in Table 1, of 0.035 proposed by Dexter (2004) and 0.039 obtained from a 10% macroporosity for the soils in the SRW.

Figure 10 shows the probability of the SRW area is prone to degradation or degraded. Figure 10a shows the physical vulnerability taking S-index value equal to 0.035 (Dexter, 2004) as the limiting value, while Figure 10b shows S-index equal to 0.039, developed for the edaphoclimatic conditions of the SRW. When comparing the spatial distribution of soil physical vulnerability based on different limiting values, it can be observed that the spatial patterns are similar. A large area of the SRW has a high probability of having poor physical quality, thus requiring intervention and the use of soil

management and conservation practices, according to Dexter (2004). Although the critical limit proposed by Dexter (2004) is lower than the limit found for the SRW when considering all land uses, soil classes and textures classes, the literature value was able to capture the spatial distribution of physical vulnerability from the S-index for the study area.

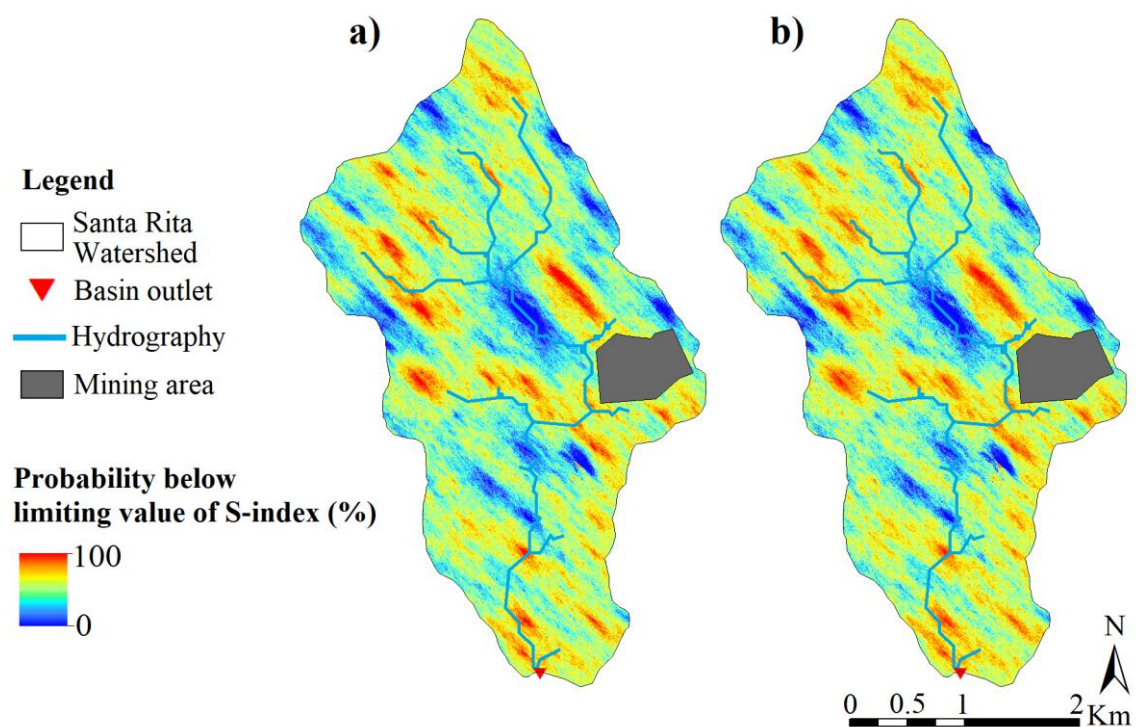


Figure 10 - Probability of occurrence of the S-index below 0.035 (a) and below 0.039 (b) in the Santa Rita watershed, located in Pelotas, southern Rio Grande do Sul, Brazil.

The S-index has been shown to be suitable for evaluating soil physical quality based on structural conditions of the SRW (Rossetti and Centurion, 2018; Timm et al., 2019), and the S-index threshold of 0.035 proposed by Dexter (2004) captures the spatial distribution of physical vulnerability through the index. However, when applied to different edaphoclimatic conditions, such as those found in the SRW when analyzing soils separately by land uses, soil classes and textural classes, these thresholds should be

carefully considered as they may not be suitable under certain boundary conditions (Jong Van Lier, 2014, Assis Júnior et al., 2016, Armindo and Wendroth, 2016).

The S-index has a direct relationship with important soil physical-hydraulic attributes commonly used in the evaluation of physical and structural quality (Dexter, 2004; Andrade and Stone, 2009; Cavalieri et al., 2009; Naderi-Boldaji and Keller, 2016; Caviglione, 2018) (Table 8). As the S-index increases, the mean values of Ks, Ma, Oc, and sand content also increase. The decrease in the S-index is proportional to the increase in Bd and clay content. Areas with a high probability of low physical quality (Figure 10) are related to native field areas with cattle presence, higher Ds, lower Ma, and consequently lower Ks (Zimmermann et al., 2006; Mainuri and Owino, 2013). The contribution of animal trampling to the reduction of Ma in some regions of the study area is also observed, as reported by Balbinot et al. (2009), Moreira et al. (2014), and Ortigara et al. (2014). The pressure exerted by animal trampling causes macropores to transform into micropores, modifying the soil structure (Bertol et al., 2004; Bonell et al., 2010; Salemi et al., 2013). The areas with a lower tendency to degradation, with high S-index values, were those under native forest. In the forest areas, the highest values of Ma, Oc, and consequently high Ks were found. This occurs because of better soil structure, higher Ma, and organic matter conditioned by root development (Baiaamonte et al., 2017).

Table 8 - Relationship between S-index ranges and the mean values of physical-hydraulic attributes of soils in the Santa Rita watershed, located in the municipality of Pelotas, in the southern region of Rio Grande do Sul, Brazil.

S-index	Ks	Bd	Ma	OC	Cl	Si	Sa
<0.02	26.63	1.58	5.84	11.38	27.52	22.30	50.18
$0.020 \leq S < 0.035$	40.69	1.54	8.03	11.82	20.63	21.12	58.25
$0.035 \leq S < 0.05$	77.61	1.53	10.23	10.97	17.22	21.10	61.68
$S \geq 0.05$	158.19	1.46	14.98	12.96	15.79	22.39	61.82

S: S-index; Ks: saturated hydraulic conductivity (mm h^{-1}); Bd: bulk density (Mg m^{-3}); Ma: macroporosity (%); OC: organic carbon (g Kg^{-1}); Cl: clay fraction content (%); Si: silt fraction content (%); Sa: sand fraction content (%).

Although the S-index is related to physical-hydraulic attributes and is sensitive to the uses and conditions in which the soil is inserted, its use in an absolute manner to evaluate the structural physical quality of soils is not recommended (Rosseti and Centurion, 2022). The application of the S-index in soil quality evaluation should be done in a complementary way, combined with other easily obtainable soil attributes (Reynolds et al., 2009; Moncada et al., 2015).

4. Conclusions

Limiting values of the S-index were identified for soils and boundary conditions of the watershed. The Paleudult under native forest presented the best structural physical quality among the studied land uses, soil classes and texture classes, with the highest critical S-index limit occurring in this group. The lowest critical limit was found in the Hapludult under native field.

The limiting value of S-index of 0.035 was able to represent the physical vulnerability pattern of the critical value developed for the entire watershed when related to a macroporosity of 10%.

The S-index proves to be an important tool in assessing physical and structural quality, as it is directly related to soil macroporosity, bulk density, organic carbon, saturated hydraulic conductivity, and fractions of the granulometric distribution.

The sequential Gaussian simulation proved to be efficient in characterizing the spatial variability of the S-index and allowed for the identification of critical areas and the development of soil physical vulnerability maps. This approach can assist in proper soil management, promoting sustainable use of natural resources and contributing to environmental protection.

5. Acknowledgments

This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Finance Code 001.

6. References

Andrade, R.S, Stone, L.F., 2009. S index as an indicator of physical quality of Brazilian ‘Cerrado’ soils. *R. Bras. Eng. Agríc. Ambiental*. (in Portuguese). 13(4), 382-388.

<https://doi.org/10.1590/S1415-43662009000400003>

Alvares, C.A., Stape, J.L., Sentelhas, P.C., Gonçalves, J.L.M., Sparovek, G., 2013. Koppen’s climate classification map for Brazil. *Meteorol. Z.* 22(6), 711-728.

<https://doi.org/10.1127/0941-2948/2013/0507>

Armindo, R.A., Wendroth, O., 2016. Physical Soil Structure Evaluation based on Hydraulic Energy Functions. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 80(5), 1167-1180.

<https://doi.org/10.2136/sssaj2016.03.0058>

Assis Júnior, R.N., Mota, J.C.A., Freire, A.G., Alencar, T.L., 2016. Pore network of an Inceptisol under different uses and relativized S index as an indicator of soil physical quality. *Pesq. agropec. bras.* 51(9), 1575-1583.

<https://doi.org/10.1590/S0100-204X2016000900057>

Baiamonte, G., Bagarello, V., D’Asaro, F., Palmeri, V., 2017. Factors Influencing Point Measurement of Near-surface Saturated Soil Hydraulic Conductivity in a Small Sicilian Basin. *Land degrad. develop.* 28(3), 970-982.

<https://doi.org/10.1002/ldr.2674>

Balbinot Junior, A.A., Moraes, A., Veiga, M., Pelissari, A., Dieckow, J., 2009. Crop-livestock system: intensified use of agricultural lands. *Cienc. Rural* (in Portuguese), 39(6), 1925-1933.

<https://doi.org/10.1590/S0103-84782009005000107>

Baver, L.D., 1949. Practical values from physical analyses of soils. *Soil Sci.* 68(1), 1-14.

<https://doi.org/10.1097/00010694-194907000-00002>

Bertol, I., Albuquerque, J.A., Leite, D., Amaral, A.J., Zoldan Junior, W.A., 2004. Propriedades físicas do solo sob preparo convencional e semeadura direta em rotação e sucessão de culturas, comparadas às do campo nativo. *Rev. Bras. Ciênc. Solo* 28(1), 155-163.

<https://doi.org/10.1590/S0100-06832004000100015>

Beutler, A.N., Freddi, O.S., Leonel, C.L., Centurion, J.F., 2008. Densidade do solo relativa e parâmetro “S” como indicadores da qualidade física para culturas anuais. *Rev. Biol. Ciênc. Terra* 8(2), ISSN 1519-5228, 27-36.

Bonell, M., Purandara, B.K., Venkatesh, B., Jagdish Krishnaswamy, Acharya, H.A.K., Singh, U.V., Chappell, n., 2010. The impact of forest use and reforestation on soil hydraulic conductivity in the Western Ghats of India: Implications for surface and sub-surface hydrology. *J. Hydrol.* 391(1-2), 47-62.

<https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2010.07.004>

Bünemann, E. K., Bongiorno, G., Bai, Z., Creamer, R. E., De Deyn, G., de Goede, R., Fleskens, L., Geissen, V., Kuyper, T.W., Mader, P., Pulleman, M., Sukkel, W., van Groenigen, J., W. Brussaard, L., 2018. Soil quality – A critical review. *Soil Biology and Biochemistry*, 120, 105-125.

<https://doi.org/10.1016/j.soilbio.2018.01.030>

Cavaliere, K.M.V., Silva, A.P., Tormena, C.A., Leão, T.P., Dexter, A.R., Kåkanasson, I., 2009. Long-term effects of no-tillage on dynamic soil physical properties in a Rhodic Ferrasol in Paraná, Brazil. *Soil Tillage Res.* 103(1), 158-164.

<https://doi.org/10.1016/j.still.2008.10.014>

Cavaglione, J.H., 2018. S-Index as an indicator of physical quality in soils of the Paraná state. *Rev. bras. eng. agríc. ambient.* 22(7), 458-464.

<https://doi.org/10.1590/1807-1929/agriambi.v22n7p458-464>

Cunha, N.G., Silveira, R.J.C., Severo, C.R.C., 2006. Solos e terras do planalto Sul-Rio-Grandense e planícies costeiras, Pelotas, Embrapa Clima Temperado.

Mota, P.K., Silva, B.M., Borghi, E., Viana, J.H.M., Resende, A.V., Moura, M.S., 2020. Soil physical quality in response to intensification of grain production systems. *Revista Rev. bras. eng. agríc. ambient.* 24(10), 647-655.

<https://doi.org/10.1590/1807-1929/agriambi.v24n10p647-655>

Deutsch, C.V., Journel, A.G., 1998. GSLIB: Geostatistical Software Library and User's Guide, Oxford University Press, New York.

Dexter, A. R., Czyż, E.A., 2007. Applications of S-theory in the study of soil physical degradation and its consequences. *Land degrad develop.* 18(4), 369-381.
<https://doi.org/10.1002/ldr.779>

Dexter, A.R., 2004. Soil physical quality Part I. Theory, effects of soil texture, density and organic matter and effects on root growth. *Geoderma*. 120(3-4), 201-214.
<https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2003.09.004>

Doran, J.W., Parkin, T.B., 1994. Defining and assessing soil quality. In: Doran, J.W., Coleman, D.C., Bezdicek, D.F., Stewart, B.A., eds. *Defining soil quality for a sustainable environment*. Madison, SSSA, 1-20.
<https://doi.org/10.2136/sssaspecpub35.c1>

Gee, G.W., Bauder, J.W., 1986. Particle-size analysis. In: Klute, A. (Ed.), *Methods of Soil Analysis*, 9, Part 1, Agronomy Monograph, (2 eds.). ASA-SSSA, Madison, pp. 383–411. <https://doi.org/10.2136/sssabookser5.1.2ed.c15>

Goovaerts, P., 1997. *Geostatistics for natural resources evaluation*. Applied Geostatistics Series, Oxford University Press.

Grable, A.R., Siemer, E.G., 1968. Effects of bulk density, aggregate size, and soil water suction on oxygen diffusion, redox potential and elongation of corn roots. *Soil Sci. Soc. Amer. Proc.* 32(2), 180-186.

<https://doi.org/10.2136/sssaj1968.03615995003200020011x>

Hebb, C., Schoderbek, D., Hernandez-Ramirez, G., Hewins, D., Carlyle, C. N., Bork, E., 2017. Soil physical quality varies among contrasting land uses in Northern Prairie regions. *Agric Ecosyst Environ* 240, 14–23.

<https://doi.org/10.1016/j.agee.2017.02.008>

Jardini, D.C., Amorim, R.S.S., 2017. Uso do índice-S na avaliação da qualidade físico-hídrica de solos do cerrado mato-grossense. *Revista Engenharia Agrícola na Agricultura.* 25(2), 107-115.

<https://doi.org/10.13083/reveng.v25i2.728>

Jong van Lier, Q. de., 2014. Revisiting the S-index for soil physical quality and its use in Brazil. *R. Bras. Ci. Solo* 38(1), 1-10.

<https://doi.org/10.1590/S0100-06832014000100001>

Rojas, J.M., Prause, J., Sanzano, G.A., Arce, O.E.A., Sánchez, M.C., 2016. Soil quality indicators selection by mixed models and multivariate techniques in deforested areas for agricultural use in NW of Chaco, Argentina. *Soil Tillage Res.* 155, 250–262.

<https://doi.org/10.1016/j.still.2015.08.010>

Kiani, M., Hernandez-Ramirez, G., Quideau, S., Smith, E., Janzen, H., Larney, F. J., Puurveen, D., 2017. Quantifying sensitive soil quality indicators across contrasting long-term land management systems: Crop rotations and nutrient regimes. *Agric Ecosyst Environ* 248, 123-135.

<https://doi.org/10.1016/j.agee.2017.07.018>

Klute, A., Dirksen, C., 1986. Hydraulic conductivity and diffusivity: laboratory methods. In: Klute, A. (Ed.), *Methods of Soil Analysis. Agronomy Monograph*, ASA-SSSA, Madison, pp. 687–734.

<https://doi.org/10.2136/sssabookser5.1.2ed.c28>

Kutner, M.H., Nachtsheim, C.J., Neter, J., LI, W., 2005. *Applied linear statistical models*, New York: McGraw-Hill.

Lee, K.E., Foster, R.C., 1991. Soil fauna and soil structure. *Aust. J. Soil Res.* 29(6), 745-774.

<https://doi.org/10.1071/SR9910745>

Mainuri, Z.G., Owino, J.O., 2013. Effects of land use and management on aggregate stability and hydraulic conductivity of soils within River Njoro Watershed in Kenya. *Int. Soil Water Conserv. Res.* 1(2), 80-87.

[https://doi.org/10.1016/s2095-6339\(15\)30042-3](https://doi.org/10.1016/s2095-6339(15)30042-3)

Matheron, G., 1963. Principles of geostatistics. *Econ Geol* 58(8), 1246–1266.

<https://doi.org/10.2113/gsecongeo.58.8.1246>

McKenzie, B.M., Tisdall, J.M. and Vance, W., 2011. Soil physical quality. In: Gliński, J., Horabik, J. and Lipiec, J., (eds.) *Encyclopedia of Agrophysics*. Springer, Dordrecht, The Netherlands, pp. 770-777.

https://doi.org/10.1007/978-90-481-3585-1_153

Moncada, M.P., Ball, B.C., Gabriels, D., Lobo, D., Cornelis, W.M., 2015. Evaluation of Soil Physical Quality Index S for Some Tropical and Temperate Medium-Textured Soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 79(1), 9-19.

<https://doi.org/10.2136/sssaj2014.06.0259>

Moreira, W.H., Tormena, C.A., Betioli Junior, E., Petean, L.P., Alves, S.J., 2014. Influence of the grazing height of ryegrass and oat on the physical properties of an Oxisol after seven years of crop-livestock system. *R. Bras. Ci. Solo* (in Portuguese). 38(4), 1315-1326.

<https://doi.org/10.1590/s0100-06832014000400027>

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>

Naderi-Boldaji, M., Keller, T., 2016. Degree of soil compactness is highly correlated with the soil physical quality index S. *Soil Tillage Res.* 159, 41-46.

<https://doi.org/10.1016/j.still.2016.01.010>

Narjary, B., Aggarwal, P., 2014. Evaluation of Soil Physical Quality under Amendments and Hydrogel Applications in a Soybean–Wheat Cropping System. *Commun. Soil Sci. Plant Anal.* 45(9), 1167-1180.

<https://doi.org/10.1080/00103624.2013.875191>

Oliveira, P.D. de, Sato, M.K., Rodrigues, S., Lima, H.V. de, 2016. S-index and soybean root growth in different soil textural classes. *Rev. bras. eng. agríc. ambient.* 20(4), 329-336.

<https://doi.org/10.1590/1807-1929/agriambi.v20n4p329-336>

Ortigara, C., Koppe, E., Luz, F.B. da, Bertollo, A.M., Kaiser, D.R., Silva, V.R. da, 2014. Soil use and physical-mechanical properties of a Red Oxisol. *Rev. Bras. Ciênc. Solo* (in Portuguese) 38(2), 619-626.

<https://doi.org/10.1590/s0100-06832014000200026>

Pinto, L.C., Mello, C.R., Norton, L.D., Poggere, G.C., Owens, P.R., CurI, N., 2018. A hydropedological approach to a mountainous Clayey Humic Dystrudept in the Mantiqueira Range, Southeastern Brazil. *Sci. Agric.* 75(1), 60-69

<https://doi.org/10.1590/1678-992X-2016-0144>

Qu, M., Li, W., Zhang, C., 2014. Spatial Distribution and Uncertainty Assessment of Potential Ecological Risks of Heavy Metals in Soil Using Sequential Gaussian Simulation. *Hum. ecol. risk assess.* 20(3), 764-778.

<https://doi.org/10.1080/10807039.2013.770352>

R Core Development Team., 2008. R: A language and environment for statistical computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, p. 2673.

Razali, N.M., Wah, Y.B., 2011. Power comparisons of Shapiro-Wilk, Kolmogorov-Smirnov, Lilliefors and Anderson-Darling tests. *J. Stat. Model. Analytics* 2(1), 11-33, 2011.

Reinert, D. J.; Reichert, J. M.; Silva, V. R., 2001. Propriedades físicas de solos em sistema de plantio direto irrigado. In: Carlesso, R.; Petry, M.T.; Rosa, G.M.; Ceretta, C. A. Irrigação por aspersão no Rio Grande do Sul, (ed.), Santa Maria, 112-133.

Remy, N., Boucher, A., Wu, J., 2009. Applied geostatistics with SGeMS: A user's guide. Cambridge: Cambridge University Press.

Reynolds, W.D., Drury, C.F., Tan C.S., Fox, C.A., Yang, X.M., 2009. Use of indicators and pore volume-function characteristics to quantify soil physical quality. *Geoderma*. 152(3-4), 252-263.

<https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2009.06.009>

Rickson, R.J, Deeks, L.K, Corstanje, R, Newell-Price, P., Kibblewhite, M.G., Chambers, B., Bellamy, P., Holman, I., James, I.T., Jones, R., Kechavarsi, C., Mouazen, A.M., Ritz, K., Waiane, T., 2012. Indicators of soil quality: Physical properties (SP1611). Final report. Defra, UK.

Rossetti, K. V., Centurion, J. F., 2022. S-index use as complementary parameter of physical quality in Oxisols. *Rev. Ciênc. Agroamb.* (in Portuguese) 20(2), 104-116.

<https://doi.org/10.30681/rcaa.v20i1.6528>

Rossetti, K. V., Centurion, J. F., 2018. Use of S-index as a structural quality indicator for compacted Latosols cultivated with maize. *Rev. Caatinga* 31(2), 455-465.

<http://dx.doi.org/10.1590/1983-21252018v31n222rc>

Salemi, L.F., Groppo, J D., Trevisan, R., de Moraes, J.M., de Barros Ferraz, S.F., Villani, J.P., Duarte-Neto, P.J., Martinelli, L.A., 2013. Land-use change in the Atlantic rainforest region: Consequences for the hydrology of small catchments. *J. Hydrol.* 499, 100-109.

<https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2013.06.049>

Seki, K., 2007. 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.

<https://doi.org/10.5194/hessd-4-407-2007>

Shapiro, S.S., Wilk, M.B., 1965. An Analysis of Variance Test for Normality (Complete Samples). *Biometrika* 52(3-4), 591.

<https://doi.org/10.2307/2333709>

Siqueira, T.M., Louzada, J.A.S., Pedrollo, O.C., Castro, N.M.R., Oliveira, M.H.C., 2019. Soil physical and hydraulic properties in the Donato stream basin, RS, Brazil. Part 2: Geostatistical simulation. *Rev. bras. eng. agríc. ambient.* 23(9), 675-680.

<https://doi.org/10.1590/1807-1929/agriambi.v23n9p675-680>

Soares, M.F., Timm, L.C., Siqueira, T.M., Santos, R.C.V., Reichardt, K., 2023. Assessing the spatial variability of saturated soil hydraulic conductivity at the watershed scale using the sequential Gaussian co-simulation method. *Catena*. 221 Part A, 106756. <https://doi.org/10.1016/j.catena.2022.106756>

Souza, J.C., Nunes, N.N.A., Herculano, R.M.C.S., 2021. Unidades de paisagem e dinâmica temporal do uso e cobertura do solo na bacia hidrográfica do Rio das Pedras, Goiás, Brasil. *Ver. Cerrados* 19(1), 03-22. <https://doi.org/10.46551/rc24482692202101%20>

Srivastava, R.M., 2013. Geostatistics: A toolkit for data analysis, spatial prediction and risk management in the coal industry. *Int. J. Coal Geol.* 112, 2-13. <https://doi.org/doi:10.1016/j.coal.2013.01.011>

Suzuki, L.E.A.S., Reinert, D.J., Alves, M.C., Reichert, J.M., 2022. Critical Limits for Soybean and Black Bean Root Growth, Based on Macroporosity and Penetrability, for Soils with Distinct Texture and Management Systems. *Sustainability* (14), 2958. <https://doi.org/10.3390/su14052958>

Teixeira, P.C., Donagemma, G.K., Fontana, A., Teixeira, W.G., 2017. Manual de métodos de análise de solo, (3 Eds.), Brasília, DF: Embrapa.

Telles, T., Melo, T., Righetto, A., Didoné, E., BARbosa, G., 2022. Soil management practices adopted by farmers and how they perceive conservation agriculture. *Rev. Bras. Ciênc. Solo* 46, 0210151.

<https://doi.org/10.36783/18069657rbcs20210151>

Timm, L.C., Pires, L.F., Centeno, L.N., Bitencourt, D.G.B., Parfitt, J.M.B., De Campos, A.D.S., 2019. Assessment of land levelling effects on lowland soil quality indicators and water retention evaluated by multivariate and geostatistical analyses. *Land degrad. develop.* 31(8), 959-974.

<https://doi.org/10.1002/ldr.3529>

Toledo, D. M., Galantini, J., Dalurzo, H., Vazquez, S., Bollero, G., 2013. Methods for Assessing the Effects of Land Use Changes on Carbon Stocks of Subtropical Oxisols. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 77(5), 1542-1552.

<https://doi.org/10.2136/sssaj2013.03.0087>

van Genuchten, M.T., 1980. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 44, 892–897.

<https://doi.org/10.2136/sssaj1980.03615995004400050002x>

Vizioli, B., Cavalieri-Polizeli, K.M.V., Tormena, C.A., Barth, G., 2021. Effects of long-term tillage systems on soil physical quality and crop yield in a Brazilian Ferralsol. *Soil Tillage Res.* 209, 104935.

<https://doi.org/10.1016/j.still.2021.104935>

Walia, M.K., Dick, W.A., 2018. Selected soil physical properties and aggregate-associated carbon and nitrogen as influenced by gypsum, crop residue, and glucose. *Geoderma* 320, 67-73.

<https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2018.01.022>

Walkley, A., Black, I.A., 1934. An Examination of the Degtjareff Method for Determining Soil Organic Matter and a Proposed Modification of the Chromic Acid Titration Method. *Soil Sci.* 37, 29–38.

<https://doi.org/10.1097/00010694-193401000-00003>.

Warrick, A.W., Nielsen, D.R., 1980. Spatial variability of soil physical properties in the field, in: Hillel, D., (Eds.), *Applications of soil physics*. New York: Academic Press, pp. 319-344.

Yang, D., Bian, Z., Zhang, K., Xiong, J., Lei, S., 2015. Quantitative Assessment of Soil Physical Quality in Northern China Based on S-theory. *Rev. Bras. Ciênc. Solo* 39(5), 1311-1321.

<https://doi.org/10.1590/01000683rbcs20150030>

Zanchin, M., Moura, M.M. de, Nunes, M.C.M., Tuchtenhagen, I.K., Lima, C.L.R. de, 2021. Assessment of soil loss susceptibility in Santa Rita Watershed in Southern Brazil. *Eng. Agríc.* 41(4), 485-495.

<https://doi.org/10.1590/1809-4430-Eng.Agric.v41n4p485-495/2021>

Zhao, Y., Lei, J., Tumarbay, H., Xue, J., 2017. Using sequential Gaussian simulation to assess the uncertainty of the spatial distribution of soil salinity in arid regions of Northwest China. *Arid Land Res. Manag.* 32(1), 20-37.

<https://doi.org/10.1080/15324982.2017.1378771>

Zimmermann, B., Elsenbeer, H., De Moraes, J.M., 2006. The influence of land-use changes on soil hydraulic properties: Implications for runoff generation. *For. Ecol. Manag.* 222(1-3), 29-38.

<https://doi.org/10.1016/j.foreco.2005.10.070>

6. Artigo 2: Geostatistical simulation in assessing spatial uncertainties of soil physical vulnerability at the watershed scale

Abstract

Evaluating the physical quality of soil (SPQ) at the watershed scale is crucial for improved management and conservation of soil and water within the watershed. This study aims to assess the spatial uncertainties of soil physical vulnerability (SPV), based on the characterization of the distribution and spatial variability of physical-hydric attributes (PHA), using geostatistical simulation within the established sample grid in the Santa Rita watershed (SRW), located in Pelotas, Rio Grande do Sul, Southern Brazil. Variability and spatial distribution were assessed using the Matheron estimator and the sequential Gaussian simulation (SGS) method, respectively. Uncertainties of macroporosity (Ma), bulk density (Bd), and saturated hydraulic conductivity (Ks) were evaluated based on cumulative frequency distribution curves and coefficient of variation mapping from simulations. The SPV was assessed by integrating different critical zone maps based on Ma, Bd, and Ks. Among the studied attributes, Ks exhibited the highest heterogeneity. SGS effectively characterized the variability and spatial distribution of Ma, Bd, and Ks, identifying critical areas and developing maps highlighting zones with compromised soil quality. Ks required more simulated random fields, while Ma presented fewer uncertainties. The spatial uncertainties for SPV were minimal, despite using different combinations of PHA in the assessment. Soils under native forest showed a lower tendency for physical degradation, whereas soils under crops and native field in the southern portion of the SRW exhibited a higher tendency for physical degradation. Mapping SPV is crucial for assessing SPQ, identifying areas prone to fragility, and promoting sustainable soil and water management.

Keywords: geostatistics; spatial variability; sequential Gaussian simulation; land use; saturated hydraulic conductivity; physical-hydric attributes

1. Introduction

Knowledge about soil quality plays a significant role in the context of socio-environmental development and ecosystem preservation (Demarchi and Zimback, 2014). The physical, chemical, and biological processes that occur in the soil are interconnected, such that the soil physical quality (SPQ) influences chemical and biological processes, thereby playing a crucial role in determining overall soil quality (Dexter, 2004; Walia and Dick, 2018).

Inadequate land management and soil use practices in these areas of rapid population growth have led to detrimental phenomena to soil quality and functioning, such as erosion, degradation of water and soil resources, as well as river siltation (Cherubin et al., 2016; Tavares et al., 2022). Soil compaction stands out as one of the primary indicators of physical degradation and reduction of SPQ among the numerous processes that contribute to soil function deterioration and environmental capacity decline (Vizioli et al., 2021; Oliveira et al., 2022).

The soil physical-hydric attributes have a fundamental role in the analysis of structural changes and the SPQ, as well as in decision-making at the watershed scale. Several studies, such as those conducted by Aschonitis et al. (2012), Laudone et al. (2013), Daly et al. (2023) and Demir et al. (2023), have utilized these attributes to assess these soil characteristics. Furthermore, the evaluation of SPQ has relied on the use of indicators, which simplify and provide understandable and perceptible information, contributing to decision-making. In this context, the assessment of SPQ in watersheds is important, as they are key units for water resource and soil management (Beskow et al., 2016; Soares et al., 2020; Dos Santos et al., 2021).

In a watershed scale, a high sampling density in the area is required for a more effective monitoring of SPQ. However, the high cost renders it economically unfeasible.

Consequently, the low sampling density results in significant uncertainties in spatial variability. Geostatistics has been employed to characterize the spatial variability of physical-hydric attributes (Siqueira et al., 2019; Timm et al., 2019, Kavaklıgil and Erşahin, 2023) and analyze the spatial uncertainties associated with the prediction of the phenomenon through the technique of sequential Gaussian simulation (Zhao et al., 2017; Siqueira et al., 2019; Soares et al., 2023). A proper characterization of the phenomenon, as well as the associated spatial uncertainties, can aid in the identification of critical zones of SPQ and facilitate the selection of more suitable practices for soil management and conservation.

The Santa Rita watershed (SRW) is located in the southern region of Rio Grande do Sul, in the municipality of Pelotas, and encompasses a variety of land classes and uses. Among these uses, dairy farming and family agriculture are particularly prominent, playing a crucial role in the economic development of the local residents. Additionally, the SRW stands out as a socioeconomically fundamental planning unit for the cities in the region, as it contributes to the water supply for the population of Pelotas through its role in feeding the water bodies. Consequently, this study aims to assess the spatial uncertainties of soil physical vulnerability, based on the characterization of the spatial distribution and spatial variability of physical-hydric attributes, using geostatistical simulation within the established sample grid in the Santa Rita watershed. The results will provide support for decision-making regarding soil management and conservation in the region.

2. Material and methods

2.1. Study area

The SRW is a sub-basin located within the Arroio Moreira/Fragata watershed, situated in Pelotas, Rio Grande do Sul, Brazil (Zanchin et al., 2021). Geographically, the SRW spans the coordinates 355168.619 E and 6495482.457 N, in the UTM projection system, Zone 22S, Datum SIRGAS 2000, encompassing an area of approximately 10.54 km² (Figure 1). The region exhibits a humid subtropical climate, characterized by an mean annual temperature of 17.6°C (type Cfa). The prevailing winds in the area are influenced by the Tropical Atlantic air masses. Additionally, the relative air humidity fluctuates around 80% (Alvares et al., 2013). The soil classification at great group level by Soil Survey Staff (2022) are: Albaqualf (SXE3), Hapludult (PBACal), Udorthent (RLd), and Paleudult (PVAd) (Figure 1).

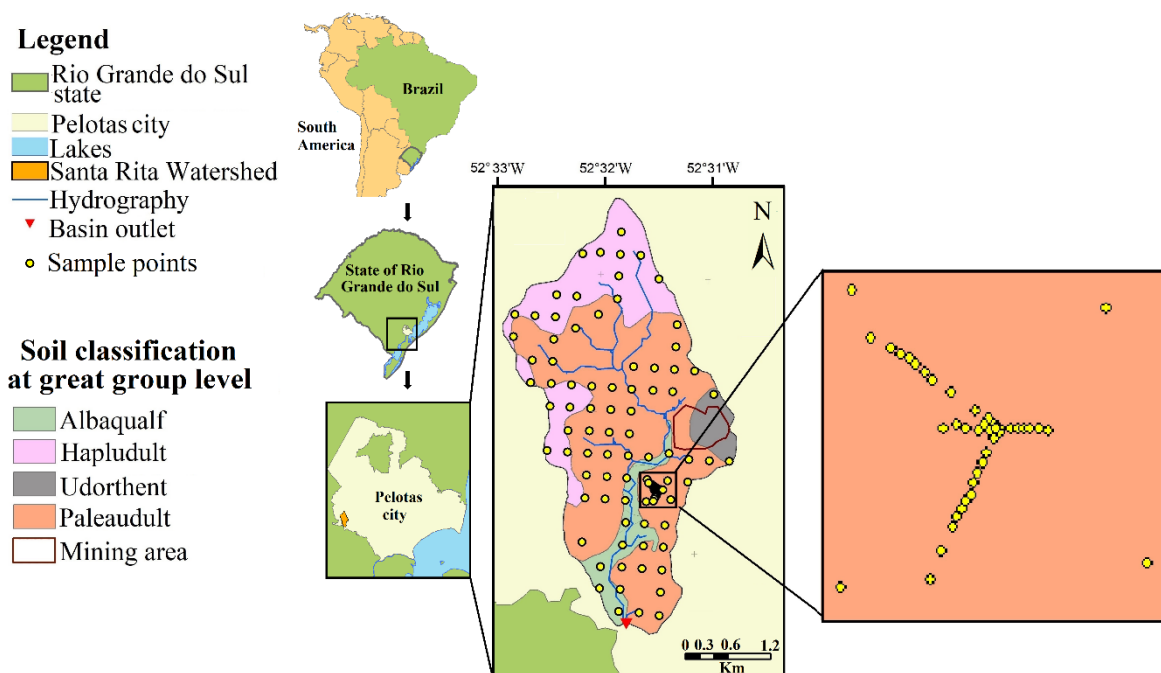


Figure 1. Location map of the Santa Rita watershed, displaying sampling points with a zoomed-in focus on the sampling density, within the soil classification map at the great group level, situated in the municipality of Pelotas, in the southern region of Rio Grande do Sul, Brazil.

2.2. Experimental design and soil sampling

The soil sampling was conducted using a two-stage process. In the first stage, an experimental grid composed of 81 sampling points was established, which exhibited a spatial distribution with a distance of 300 m between points. During this stage, certain regions of the area were not able to be sampled due to accessibility challenges. However, there were some shortcomings in the sampling process due to the difficult accessibility of certain locations within dense forest areas. The presence of a mining area in the SRW hindered sample collection due to rocky outcrops. Subsequently, to capture the spatial variability structure of the soil attributes more comprehensively, a denser sampling scheme was implemented. Additional 40 sample points were strategically placed in two cross-sections, with varying distances between each pair of samples ranging from 1 meter to 150 m (Figure 1). This sample densification was performed to better characterize the spatial variability of the studied attributes at lower distances. Samples were gathered at each sampling point, specifically from the intermediate layer between 0.075 m and 0.125 m, while ensuring the preservation of their structure. Volumetric rings measuring 0.5 m high and 0.47 m in diameter were employed to aid in the collection process. In these samples, the macroporosity (Ma) and bulk density (Bd) were measured utilizing the methodology outlined by Teixeira et al. (2017). The determination of saturated hydraulic conductivity (Ks) was accomplished through the utilization of the constant head permeameter method, as described by Klute and Dirksen (1986).

Figure 2 illustrates the general procedure of statistical and geostatistical analyses to assess spatial uncertainties of soil physical vulnerability, based on the characterization of the distribution and spatial variability of physical-hydric attributes.

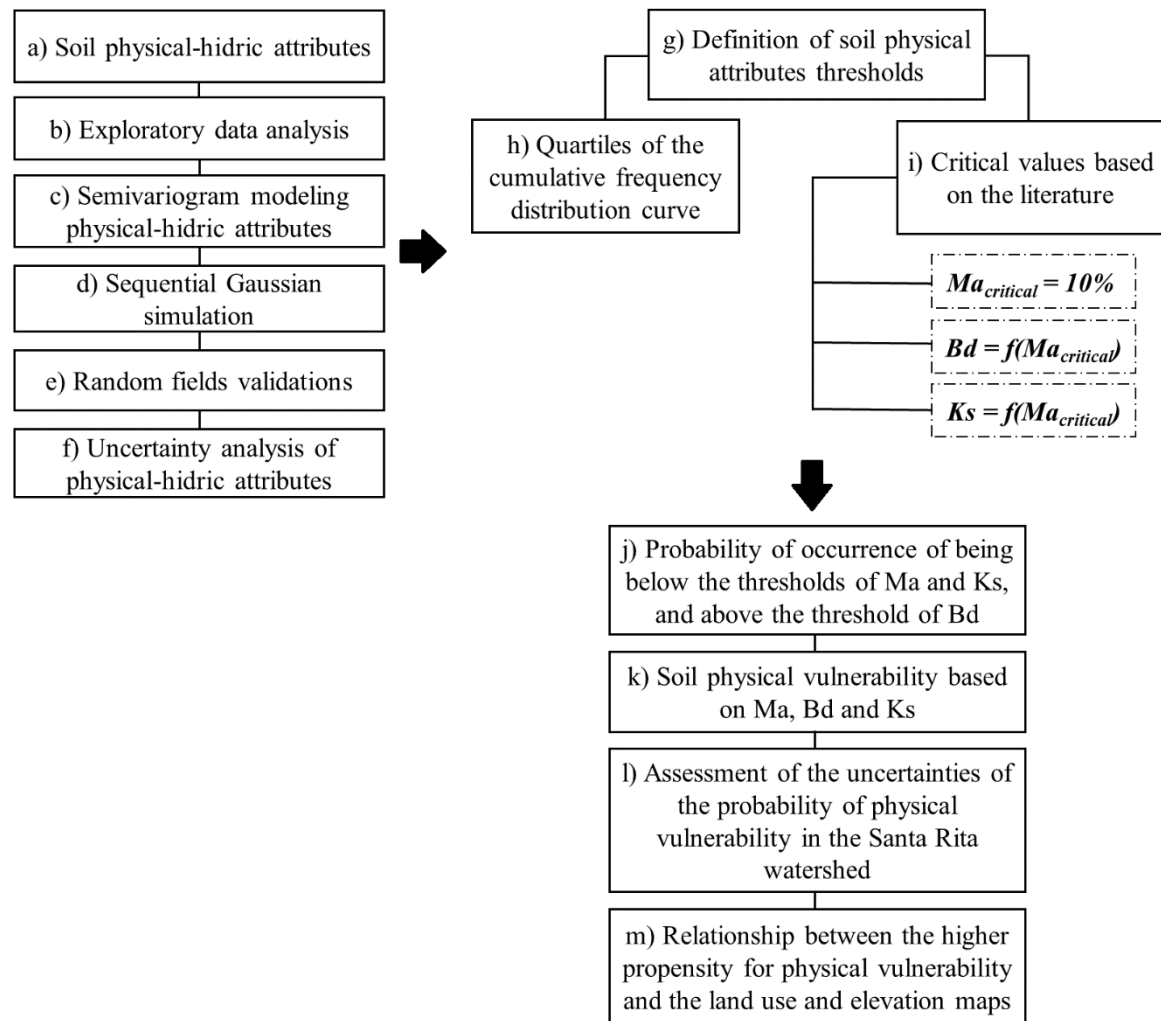


Figure 2. General procedure of statistical and geostatistical analyses for assessing the spatial uncertainties of the physical vulnerability of the soil in the Santa Rita watershed, based on physical-hidric attributes.

Initially, the data of physical-hidric attributes underwent exploratory data analysis. Geostatistical analyses were performed using the original magnitudes of macroporosity and bulk density, as well as the transformed magnitude of saturated hydraulic conductivity using the natural logarithm function. Semivariogram modeling was carried out, and the fitted models were incorporated into sequential Gaussian simulation. Subsequently, the simulated random fields of physical-hidric attributes were validated, and spatial uncertainties were analyzed. Thresholds for the soil attributes

analyzed in this study were defined in two ways: i) the quartiles of the cumulative frequency distribution curve were determined, and ii) values and methodologies proposed in the literature were used to define critical values for macroporosity, bulk density, and saturated hydraulic conductivity. Probability maps of areas below the thresholds for soil physical attributes were developed to assess the vulnerability of physical quality based on each attribute separately. Then, by combining the vulnerability maps of physical-hydraulic attributes, integrated maps of physical vulnerability were generated, incorporating the information from the attributes into a single map. An assessment of the uncertainty of the probability of physical vulnerability in the watershed was conducted. Finally, the relationship between the higher propensity for physical vulnerability and the land use and elevation maps of the Santa Rita watershed was analyzed.

2.3. Statistical and geostatistical analysis

An exploratory analysis was conducted on the physical-hydraulic attributes using conventional descriptive statistical techniques. These techniques included determining the mean, standard deviation, coefficient of variation, maximum and minimum values. The variability of the attributes was evaluated using the coefficient of variation (CV), following the methodological approach proposed by Warrick and Nielsen (1980). According to this approach, CV values below 12% indicated low variability, values between 12% and 60% indicated intermediate variability, and values above 60% indicated high variability. Furthermore, the CV indicates the level of difficulty in performing kriging within the simulation methodology, with difficulty being directly proportional to the CV value. To test the normality of the data distribution, the Shapiro-Wilk test (Shapiro and Wilk, 1965) was used with a significance level of 5%. A P-value ($P \geq 0.05$) was considered to determine data normality (Razali and Wah, 2011).

To perform the geostatistical analyses, the variables Mac and Bd were kept in their original magnitude, while the data related to the variable Ks were subjected to a transformation using the napierian logarithm function ($\ln(Ks)$). The spatial dependence structure was evaluated using the classical estimator proposed by Matheron (Matheron, 1963), as described in Equation 3:

$$y(h) = \frac{1}{2n(h)} \sum_{\alpha=1}^{n(h)} [Z(u+h) - Z(u)]^2 \quad (16)$$

where $y(h)$ is the experimental semivariance value as a function of h ; $n(h)$ is the number of observation pairs of the variable Z separated by a distance h ; and h is the separation distance between observation pairs $n(h)$, measured in u and $u+h$.

To confirm the presence of anisotropic conditions, we calculated the directional experimental semivariograms (using Equation 3) following the methodology proposed by Goovaerts (1997). This involved examining eight main research orientations: 0° , 22.5° , 45° , 67.5° , 90° , 112.5° , 135° , and 157.5° . The parameters of interest, such as the nugget effect (c_0), contribution (C), the sill ($C+c_0$) representing the sample variance, range (R), and the theoretical model, were adjusted accordingly.

Sequential Gaussian simulation (SGS) is a probabilistic approach that generates stochastic realizations of random fields capable of replicating the same level of variability observed in the regionalized variable being studied, thereby enabling an assessment of the uncertainties associated with the spatial distribution of the variable. According to Goovaerts (1997), SGS can be defined as a sequential simulation technique applied to multigaussian random functions. Within the framework of SGS, the shape of the spatial uncertainty distribution for a given variable is derived from the mean kriging variance, as explained by Srivastava (2013). In geostatistical simulation, as described by Deutsch and Journel (1998), the value of the variable at each cell in the grid is randomly drawn from

the conditioned cumulative probability distribution, which is constructed based on the mean and variance of kriging. Consequently, it becomes necessary to obtain successive conditional cumulative distribution functions (ccdfs) at each grid node, following Equation 4:

$$F(u; z|n) = \text{Prob}(Z(u) \leq z|n) \quad (17)$$

where u is the location of variable $Z(u)$, z is a threshold value of the ccdf, and n is the conditioning information used to construct the ccdf of the simulated values.

From the random sampling of cumulative distribution functions (CCDFs) at all grid nodes (Equation 5), multiple random fields of the spatial distribution of physical-hydric attributes can be concurrently generated:

$$F(u_1, u_2, \dots, u_n; z_1, \dots, z_N | n) = \text{Prob}(Z(u_1) \leq z_1, \dots, Z(u_N) \leq z_N | n) \quad (18)$$

where N is the number of nodes in the grid and u'_i is the location of the variable where there are no observed data.

To perform the SGS, it is necessary that the variographic modeling of the physical-hydric attributes has already been carried out (Equation 1). According to Goovaerts (1997), a grid must be generated for the variable and study area using SGS. The following procedures must be adopted for SGS: (i) the dataset of the physical-hydric attributes must have a normal Gaussian distribution. Therefore, frequency distribution normalization must be performed by obtaining normal scores that have a mean of zero and variance of one; (ii) a random path within the grid to be simulated must be defined; (iii) using the semivariogram of normal scores of the physical-hydric attributes, simple kriging should be performed solely at a specific node of the grid. Based on the estimate, the conditional mean and variance of the Gaussian distribution will be determined, defining the cumulative conditional distribution function (Gaussian distribution), where the kriged value at the point becomes the mean of the Gaussian distribution, and the kriging variance

becomes the variance of the Gaussian distribution at that point; (iv) a value of the Gaussian distribution must be randomly extracted and added to the data set; (v) the algorithm will visit the next node of the grid, following the random path.

Considering the sampled and previously simulated data, steps (iii) and (iv) are repeated until all nodes of the grid have been visited; (vi) after completing the simulation, a simulated value is obtained for each node of the grid. However, these simulated values $\{y^{(l)}(u_j), j = 1, \dots, N\}$ are in the magnitude of the Gaussian space. Therefore, the data must be transformed back to the original sample space of the attribute; (vii) a realization of the simulation (a generated map) is obtained at the end of step vi. To generate a new random field, a new value must be drawn from the Gaussian distribution at each point, and so on until l realizations are generated.

The validation of the l maps obtained by the simulations was performed according to the following criteria:

1. The sampled values of the physical-hydric attributes, at their respective spatial locations, must be honored by the simulation (Equation 4).

$$Z^{(1)} = Z(u_\alpha) \tag{19}$$

$$\forall u = u_\alpha$$

$$\alpha = 1, \dots, n$$

2. The histograms of the simulated values should be similar to those of the sampled data of the of the physical-hydric attributes.

3. The spatial dependency structure of the simulated values (semivariogram) for the l realizations should be similar to that of the sampled physical-hydric attributes.

The analysis of uncertainties in the physical-hydric attributes was evaluated through spatial variability analysis performed by SGS and equiprobable random fields (Siqueira et al., 2019). The optimal number of random fields for uncertainty analysis of

each attribute was determined based on the fluctuation of the standard deviation of the accumulated random fields, selecting the number at which stabilization occurs.

2.4. Uncertainty analysis

The uncertainties were assessed following the subsequent steps: i) calculation of the attribute in each field; ii) development of the cumulative frequency curve of the mean values of the random fields; iii) calculation of the 5th and 95th percentiles; iv) selection of fields whose averages are close to the 5th and 95th percentiles of the probability of not exceeding the mean of all fields, representing pessimistic and optimistic scenarios for Ma and Ks, respectively, and optimistic and pessimistic scenarios for Bd, respectively (Figure 3). Using the fields corresponding to the 5th and 95th percentiles, the overall effects of spatial variability of the physical-hydric attributes were analyzed.

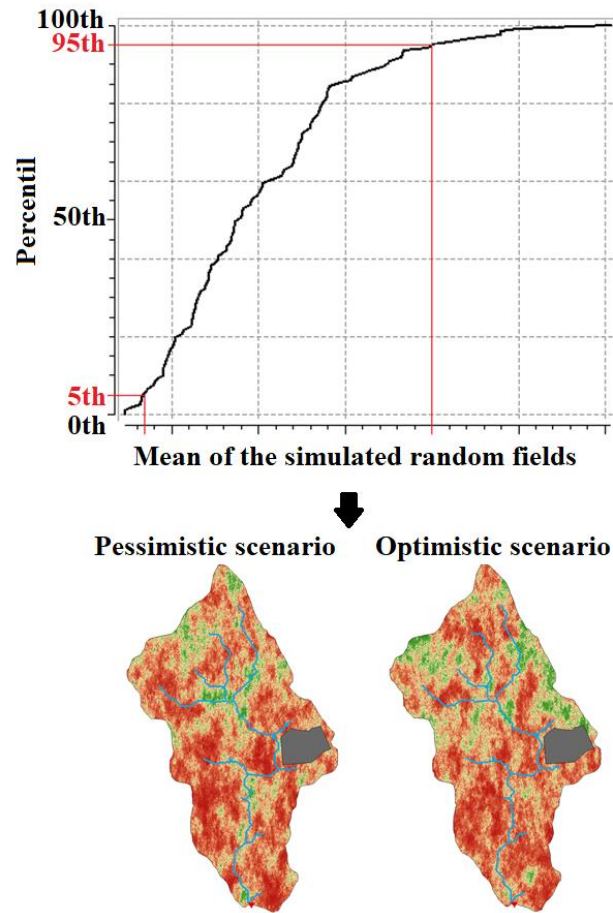


Figure 3. General procedure for the selection of simulated scenarios for the uncertainty analysis of physical-hydric attributes in the Santa Rita watershed.

The uncertainties regarding the simulations of random fields of physical-hydric attributes were assessed by calculating the absolute difference between the optimistic and pessimistic scenarios, as described by Equation 7.

$$Uncertainty = |Scenario_{optimistic} - Scenario_{pessimistic}| \quad (7)$$

where Uncertainty will be introduced in the magnitude of the assessed physical-hydric attribute.

In order to identify potential zones of vulnerability regarding the physical quality of soil, maps of probability were developed, ranging from 0% to 100%, indicating probability of the SRW area falling below the threshold values for physical-hydric

attributes determined from the cumulative frequency curve of the attributes and values proposed in the literature.

The critical values of the physical-hydric attributes were determined in two ways: i) by using the 25th, 50th, and 75th quartiles of the cumulative frequency curves as thresholds, and ii) by employing values and methodologies published in the literature.

The thresholds for Ma, Bd, and Ks based on cumulative frequency curves will be the attribute values corresponding to the 25th (lower quartile), 50th (median), and 75th (upper quartile) percentiles, respectively. Proposed cutoff values from the literature will be evaluated for soil attributes, such as the values defined for Ma used by various authors like Baver (1949), Grable (1968), Reinert (2001), Suzuki et al. (2022); Bd proposed by Reichert et al. (2003) and Suzuki et al. (2022); and Ks proposed by Reichert et al. (2003) (Table 1).

Table 1. Thresholds proposed by the literature for the physical-hydric attributes.

Attribute	Thresholds	Reference
Ma	Ma < 10%	Baver (1949), Grable (1968), Reinert (2001), Suzuki et al. (2022)
Bd	Bd > 1.65 Mg m ⁻³ Function of 10% macroporosity	Reichert et al. (2003) Suzuki et al. (2022)
Ks	Function of 10% macroporosity	Reichert et al. (2003)

Ma: macroporosity; Bd: bulk density; Ks: saturated hydraulic conductivity.

Critical zones of SPQ, based on physical-hydric attributes, were evaluated through probability maps of the occurrence of SRW area below the Ma and Ks thresholds and above the Bd based on cumulative frequency curves and cutoff values published in the literature. Subsequently, various combinations of these critical zone scenarios based on physical-hydric attributes were generated, resulting in integrated soil physical vulnerability maps (SPV). Equations 7, 8, and 9 demonstrate the probabilities of SPV

based on different combinations of critical scenarios, as well as the respective weights assigned to SPV. Equation 8 establishes the SPV based on thresholds of Ks and Bd, which are determined as a function of a 10% Ma, which are 25.86 mm h⁻¹ and 1.53 Mg m⁻³, respectively. Equation 9 determines SPV based on Ks, Bd based on thresholds of Ks and Bd, which are determined as a function of a 10% Ma, and 10% Ma. Equation 10 establishes the SPV relying on the Ma and Bd thresholds, as reported in Reichert et al. (2003), which are 10% and 1.65 Mg m⁻³, respectively.

$$SPV = 0.5 (Prob[Ks < TR_{Ks}]) + 0.5 (Prob[Bd > TR_{Bd}]) \quad (8)$$

$$SPV = 0.4 (Prob[Ks < TR_{Ks}]) + 0.4 (Prob[Bd > TR_{Bd}]) \quad (9)$$

$$+ 0.2 (Prob[Ma < TR_{Ma}])$$

$$SPV = 0.5 (Prob[Ma < TR_{Ma}]) + 0.5 (Prob[Bd > TR_{Bd}]) \quad (10)$$

where SPV represents the soil physical vulnerability, Prob denotes the probability of the area being physically vulnerable (%), and TR is the threshold.

In each node of the grid, the 5th and 95th percentiles of probability values were determined. Subsequently, optimistic and pessimistic maps of the probability of the area being physically vulnerable were generated based on these percentiles. Next, the uncertainty regarding the probability values of physical vulnerability was assessed by calculating the absolute difference between the optimistic and pessimistic scenarios, as described by Equation 11.

$$Uncertainty = |Prob_{optimistic} - Prob_{pessimistic}| \quad (11)$$

Where uncertainty will be presented in probability (%), Prob is the probability of the area being physically vulnerable (%).

A visual analysis was conducted comparing the pessimistic and optimistic SPV maps with the land use map and elevation map of the Santa Rita Watershed, aiming to identify which land uses are more detrimental to the physical quality of soils and to

explore the relationship between the physical-hydric attributes and physical fragility in these land uses.

To perform the exploratory data analysis, the R software (R Core Team, 2008) was used. The geostatistical analyses of spatial variability modeling and sequential Gaussian simulation were carried out using the geostatistical modeling software SGeMS/AR2GeMS (Remy et al., 2009). ArcGIS, version 10.6.1 (ESRI) was used for spatial data processing and visualization.

3. Results and discussion

3.1. Exploratory analysis

Table 2 displays that the mean and median values for Ma (10.17% and 9.01%, respectively) and Bd (1.52 Mg m^{-3} and 1.54 Mg m^{-3} , respectively) are closer in proximity. However, regarding Ks, the mean and median values are significantly disparate (77.47 mm h^{-1} and 26.10 mm h^{-1} , respectively), in accordance with Centeno et al. (2020) and Soares et al. (2020). According to Warrick and Nielsen (1980), the variability of Ma is intermediate, Bd is low, and Ks is high. Wang et al. (2021) found coefficients of variation of 21.7% for Ma and 18.3% for Bd, both classified as intermediate. The high variability of Ks is associated with the diverse land uses found in the study area, consistent with findings reported by Hu et al. (2009). According to Papanicolaou et al. (2015) and Baiamonte et al. (2017), the extensive diversity of variations in Ks data is widely acknowledged, regardless of the measurement method, sampling scale, soil class, and land use. Both Ma and Ks demonstrate a tendency towards non-normal distribution, as indicated by the $p\text{-value} \leq 0.05$ ($p\text{-value} = 5.56\text{E-}6$ and $1.29\text{E-}17$, respectively). On the other hand, Bd shows a tendency towards normality, with a $p\text{-value} \geq 0.05$ ($p\text{-value} = 0.1226$). The coefficients of Skewness and Kurtosis indicate that Bd presents less

variability and tends towards a normal distribution, whereas Ma and Ks exhibit higher variability and a tendency towards a non-normal distribution, owing to the differences in their values.

Table 2. Descriptive statistics for exploratory analysis of physical-hydric attributes of soils in the Santa Rita watershed, located in the municipality of Pelotas, in the southern region of Rio Grande do Sul, Brazil.

Attributte	N	$\bar{X}$	Med.	S	CV	Skew	Kurt
Ma	121	10.17	9.01	5.35	52.59	1.07	1.31
Bd	120	1.52	1.54	0.12	7.93	-0.33	-0.31
Ks	121	77.47	26.10	141.72	182.93	3.47	14.11

Ma: Macroporosity (%); Bd: Bulk density (Mg m^{-3}); Ks: saturated hydraulic conductivity (mm h^{-1}); N: Number of data points; $\bar{X}$: Mean; Med.: Median; S: Standard deviation; CV (%): Coefficient of Variation; Skew: Coefficient of Skewness; Kurt.: Coefficient of Kurtosis.

3.2. Sequential Gaussian simulation of physical-hydric attributes

Table 3 presents the parameters of the semivariogram models fitted to the data of Ma, Bd, and $\ln(\text{Ks})$. For all the studied hydrological physical attributes, the theoretical spherical model exhibited the best fit to the experimental points of semivariance, consistent with the findings of Rabbi et al. (2014) and Godoy et al. (2019). It is worth noting that the spatial continuity of the variables was very close, with ranges of 880.0 m, 750.0 m, and 850.0 m for Ma, Bd, and $\ln(\text{Ks})$, respectively. However, it becomes evident that assessing the presence of anisotropy in the phenomenon is important, given that the directions of higher spatial continuity of Ma and Ks were distinct from the direction of higher spatial continuity of Bd. Ma exhibits a spatial continuity of 880.0 m in the direction of 0° and 450.0 m in its perpendicular direction with lower spatial continuity (90°). Bd has a spatial continuity of 750.0 m in the direction of higher continuity, 880.0 m, and 150.0 m in the direction of lower continuity (0°). On the other hand, $\ln(\text{Ks})$ has a spatial continuity of 850.0 m in the direction of higher continuity (0°) and 250.0 m in the

direction of lower continuity, 90°. Catione et al. (2019) found ranges of 41.3 m for Ma and 22.2 m for Bd in the soil layer at a depth of 0.0 - 10.0 m. Wang et al. (2021), in their findings, identified a range of 32.46 m for Ma, 25.2 m for Bd, and 25.2 m for $\log_{10}K_s$. Huang et al. (2016) observed a range of 158.0 m for Ks. Meanwhile, Soares et al. (2020) reported a range of 131.0 m for Ks. These results indicate that spatial continuity is proportional to the sampling scale. The analysis of spatial variability at the field scale will yield smaller ranges compared to those found at the watershed scale. However, there is uncertainty associated with increased heterogeneity as the area expands (Picciafuoco et al., 2019).

Table 3 - Parameters of the semivariogram models fitted to the physical-hydric attributes for data from the Santa Rita watershed, located in the municipality of Pelotas in the southern region of Rio Grande do Sul, Brazil.

Attribute	Azimuth	Variance	c_0	C	R (m)	Theoretical model
Ma	0°	28.6	6.6	22.0	880.0	Spherical
	90°	28.6	6.6	22.0	450.0	Spherical
Bd	90°	0.0146	0.002	0.0126	750.0	Spherical
	0°	0.0146	0.002	0.0126	150.0	Spherical
Ln(Ks)	0°	2.33	0.33	2.0	850.0	Spherical
	90°	2.33	0.33	2.0	250.0	Spherical

Ma: macroporosity; Bd: bulk density; ln(Ks): napierian logarithm of saturated hydraulic conductivity; c_0 : nugget effect; C: contribution; R(m): range in meters.

The transformation of the physical-hydric attributes into Gaussian space was performed using the Nscore function. The transformation of data into normal scores results in a change in the proportion of variance. However, it does not alter the spatial dependence structure. In the Gaussian space, the normal scores of the attributes have a mean of zero and a variance of one. Thus, for use in Gaussian sequential simulation, the semivariograms had their variance adjusted to the Gaussian space, with a variance of one.

The effect of clustering resulting from sample density was evaluated by comparing the variances of clustered and declustered data for the physical-hydric

attributes using the nearest neighbor method (Table 4). Table 4 demonstrates the significant impact of sample density on data variance, with the highest effect observed in Ks, showing a difference of 54.3% in variances. On the other hand, Bd exhibited the lowest effect, with a difference of 13.1% between clustered and declustered variances. All evaluated attributes showed a significant difference in variance (Percentage > 5%).

Table 4. Evaluation of the preferential clustering effect resulting from the sample density of the physical-hydric attributes for data from the Santa Rita watershed, situated in the municipality of Pelotas in the southern region of Rio Grande do Sul, Brazil.

Attribute	Clustered variance	Declustered variance	Percentage (%)
Ma	28.6	38.6	25.9
Bd	0.0146	0.0168	13.1
Ks	11785.4	25768.7	54.3
ln(Ks)	2.15	2.51	14.3

Ma: macroporosity; Bd: bulk density; Ks: saturated hydraulic conductivity; ln(Ks): naperian logarithm of saturated hydraulic conductivity.

For the validation of semivariograms of simulated random fields of physical-hydric attributes, the correction of semivariograms was performed based on the declustered variance of the attributes. Equations 12, 13, and 14 describe the spatial continuity function in the direction of higher continuity, with declustered variance, for Ma (azimuth 0°), Bd (azimuth 90°), and ln(Ks) (azimuth 0°), respectively, considering spherical models.

$$\gamma(h) = \begin{cases} 8.9 + 29.7 \cdot \left[1.5 \frac{h}{880m} - 0.5 \left(\frac{h}{880m} \right)^3 \right] & \text{if } 0 < h \leq a \\ 8.9 + 29.7, & \text{if } h > a \\ 8.9, & \text{if } h = 0 \end{cases} \quad (12)$$

$$\gamma(h) = \begin{cases} 0.0024 + 0.0144 \cdot \left[1.5 \frac{h}{750m} - 0.5 \left(\frac{h}{750m} \right)^3 \right] & \text{if } 0 < h \leq a \\ 0.0024 + 0.0144, & \text{if } h > a \\ 0.0024, & \text{if } h = 0 \end{cases} \quad (13)$$

$$\gamma(h) = \begin{cases} 0.35 + 2.16 \cdot \left[1.5 \frac{h}{850m} - 0.5 \left(\frac{h}{850m} \right)^3 \right] & \text{if } 0 < h \leq a \\ 0.35 + 2.16, & \text{if } h > a \\ 0.35, & \text{if } h = 0 \end{cases} \quad (14)$$

where h is the lag, the distance between pairs of samples.

The semivariogram model of the normal scores was employed for simulating the physical-hydric attributes by SGS. Due to the occurrence of the preferential clustering effect (Table 4), the declustered distributions of the physical-hydric attributes, obtained using the nearest neighbor method, were used as a reference in the SGS algorithm.

Figure 4 demonstrates the fluctuations in the standard deviation value of the accumulated random fields of Ma, Bd, and $\ln(K_s)$. The standard deviation curve of accumulated simulated random field values visually stabilizes with the addition of new random fields (Soares et al., 2023). It can be observed that for Ma and Bd (Figures 4a and 4b, respectively), fluctuations stabilize after approximately the thirtieth simulated random field. However, for $\ln(K_s)$ (Figure 4c), significant variability is present, with fluctuations stabilizing after the ninety-seventh simulated random field.

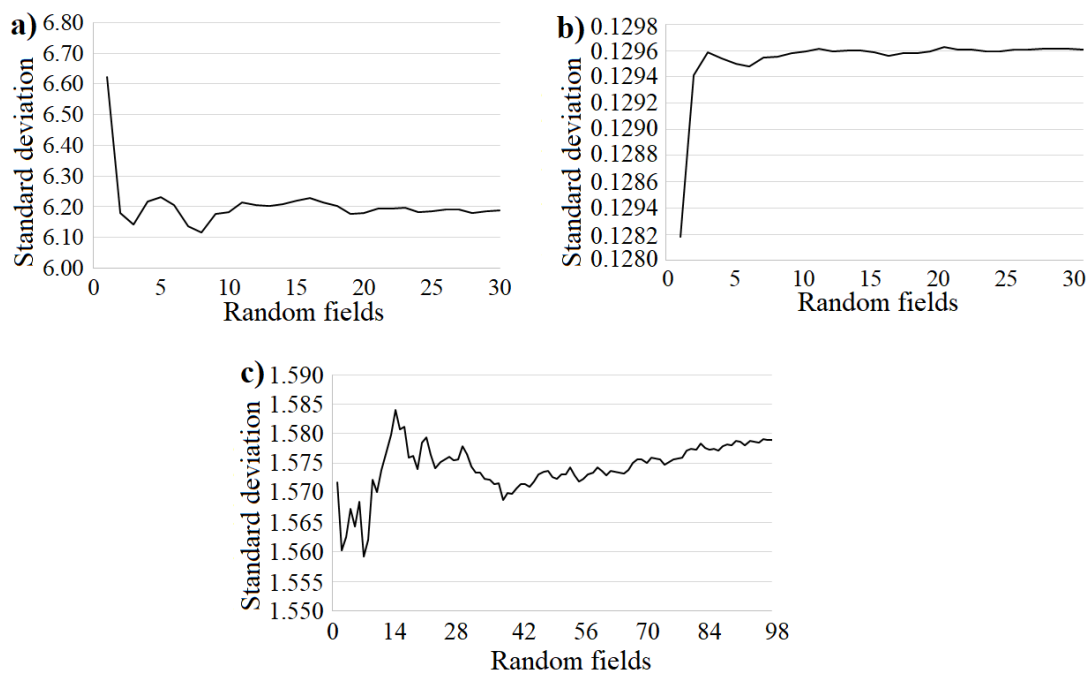


Figure 4. Standard deviation of the accumulated simulated random fields values of macroporosity (a); bulk density (b); and napierian logarithm of saturated hydraulic conductivity (c), in the Santa Rita watershed, Pelotas, in southern Rio Grande do Sul, Brazil.

The pessimistic (5th percentile) and optimistic (95th percentile) scenarios of Ma can be observed in Figures 5a and 5b, respectively. It can be observed that the two scenarios are similar, indicating low variation between the pessimistic and optimistic scenarios of Ma in the SRW. Figure 5c demonstrates that the uncertainties of Ma are low, with the majority of the area having uncertainties below 5%. The coefficient of variation of the simulated random fields of Ma was intermediate in the majority of the basin (yellow region) with some regions exhibiting high variability (red region), according to Warrick and Nielsen's classification (1980). Ma is regarded as an indirect gauge for the arrangement of soil (Zhang et al., 2019) and a reliable indicator of the physical state of soils (Ball et al., 2007). We can observe that a significant portion of the SRW exhibits low Ma values (red on the map), while certain areas display high Ma values (green on the map). These high Ma areas correspond to the native forest areas adjacent to watercourses.

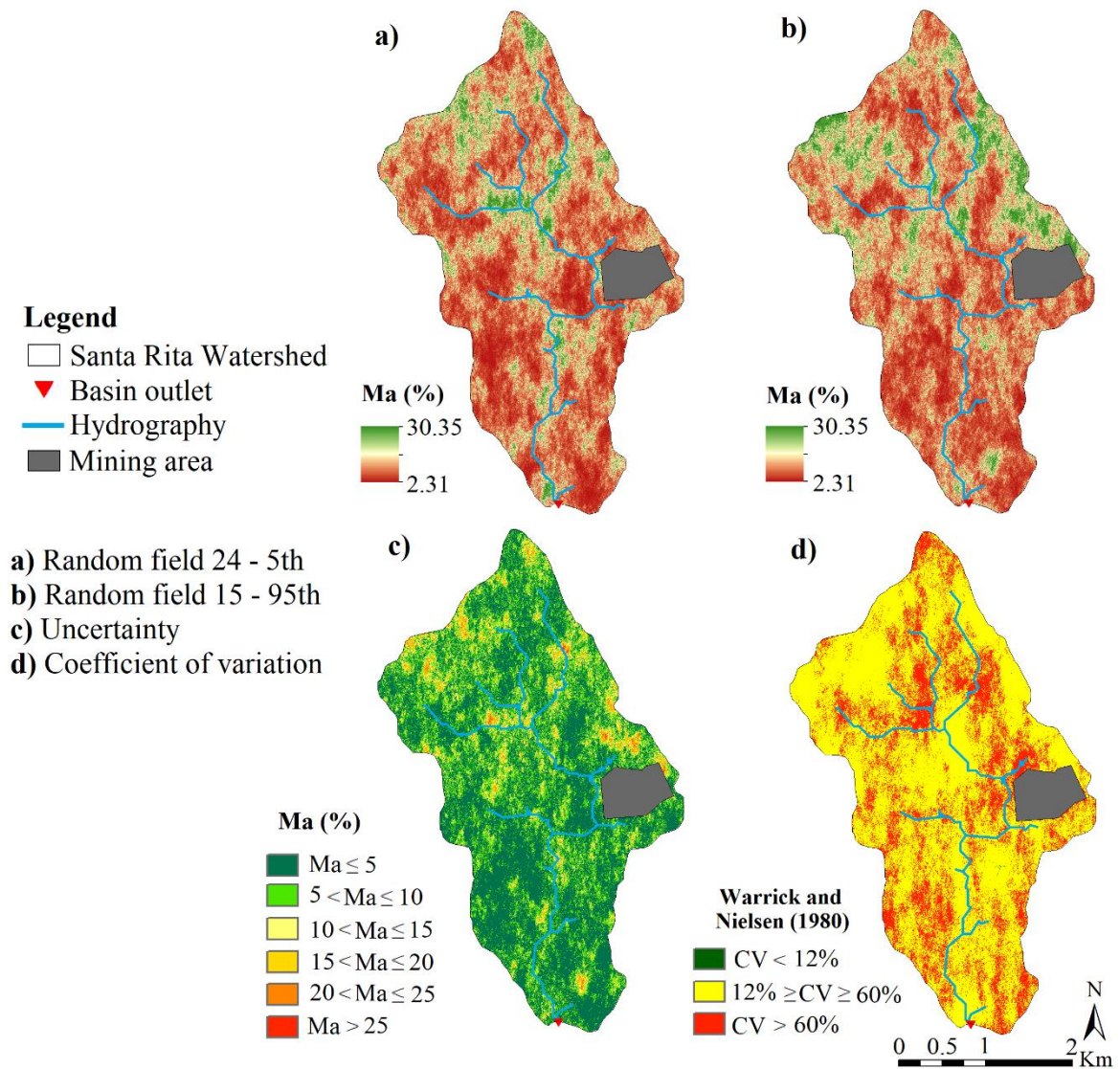


Figure 5. Simulated random field 24 (a); simulated random field 15 (b); uncertainty of the simulated random fields (c); and coefficient of variation of the simulated random fields (d) of macroporosity, in the Santa Rita watershed, Pelotas, in southern Rio Grande do Sul, Brazil.

The pessimistic (95th percentile) and optimistic (5th percentile) Bd scenarios can be seen in Figures 6a and 6b, respectively. It can be observed that both scenarios are similar in the southern region of the SRW; however, greater discrepancies are visible in the northern region. Figure 6c demonstrates that the uncertainties of Bd are low in the majority of the SRW, with uncertainties below 0.1 Mg m^{-3} . The coefficient of variation

for the simulated random fields of Bd was low for the entire SRW area, in accordance with the classification by Warrick and Nielsen (1980). This result demonstrates the low variability of the attribute when compared to Ma and $\ln(K_s)$. Bd is an important indicator as it can indicate the degree of soil fragility. Agricultural areas tend to exhibit higher values of Bd (Obour et al., 2018). We can observe that a significant portion of the SRW exhibits high Bd values (red on the map), whereas areas with low Bd values (blue on the map) are located in the native forest areas north of the SRW, corroborating the findings of Centeno et al. (2020).

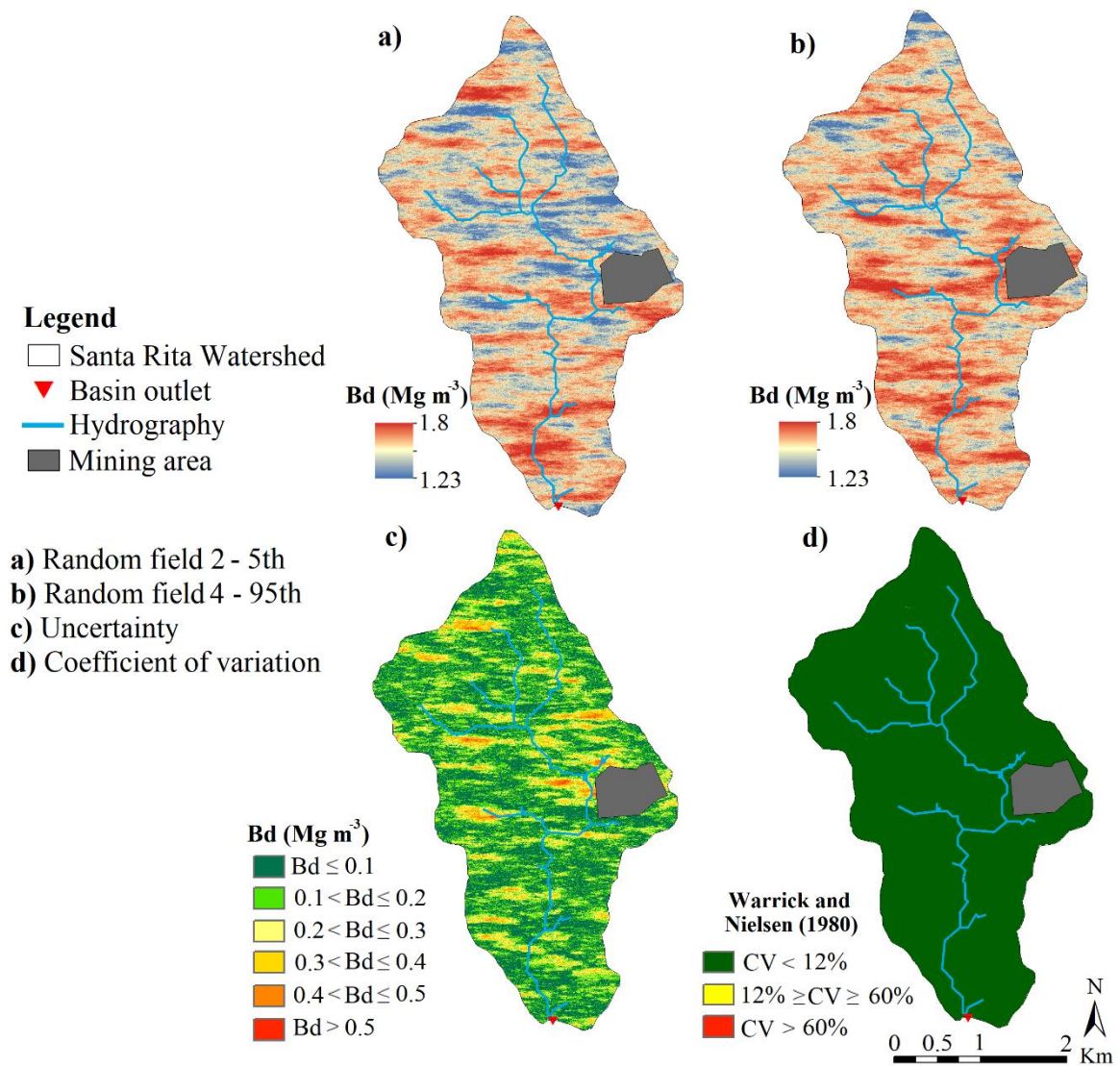


Figure 6. Simulated random field 2 (a); simulated random field 4 (b); uncertainty of the simulated random fields (c); and coefficient of variation of the simulated random fields (d) of bulk density, in the Santa Rita watershed, Pelotas, in southern Rio Grande do Sul, Brazil.

The pessimistic (5th percentile) and optimistic (95th percentile) scenarios of $\ln(K_s)$ can be observed in Figures 7a and 7b, respectively. It can be observed that the two scenarios are similar, highlighting, as in Ma and Bd, a low variation between the pessimistic and optimistic scenarios in SRW. The southernmost region of SRW exhibited the greatest discrepancy between the two scenarios. Figure 7c demonstrates that the uncertainties of $\ln(K_s)$ are low, with the majority of the area having uncertainties below 5 mm h^{-1} . The coefficient of variation of the simulated random fields of $\ln(K_s)$, as well as for Ma, was intermediate in the majority of the basin (yellow region) with some regions showing high variability (red region), according to the classification by Warrick and Nielsen (1980). In general, the areas with higher values of $\ln(K_s)$ are associated with native forest present in the SRW. $\ln(K_s)$ is directly related to higher Ma values and lower Bd values (Alletto et al., 2010; Sacco et al., 2012; Linh et al., 2017; Centeno et al., 2020).

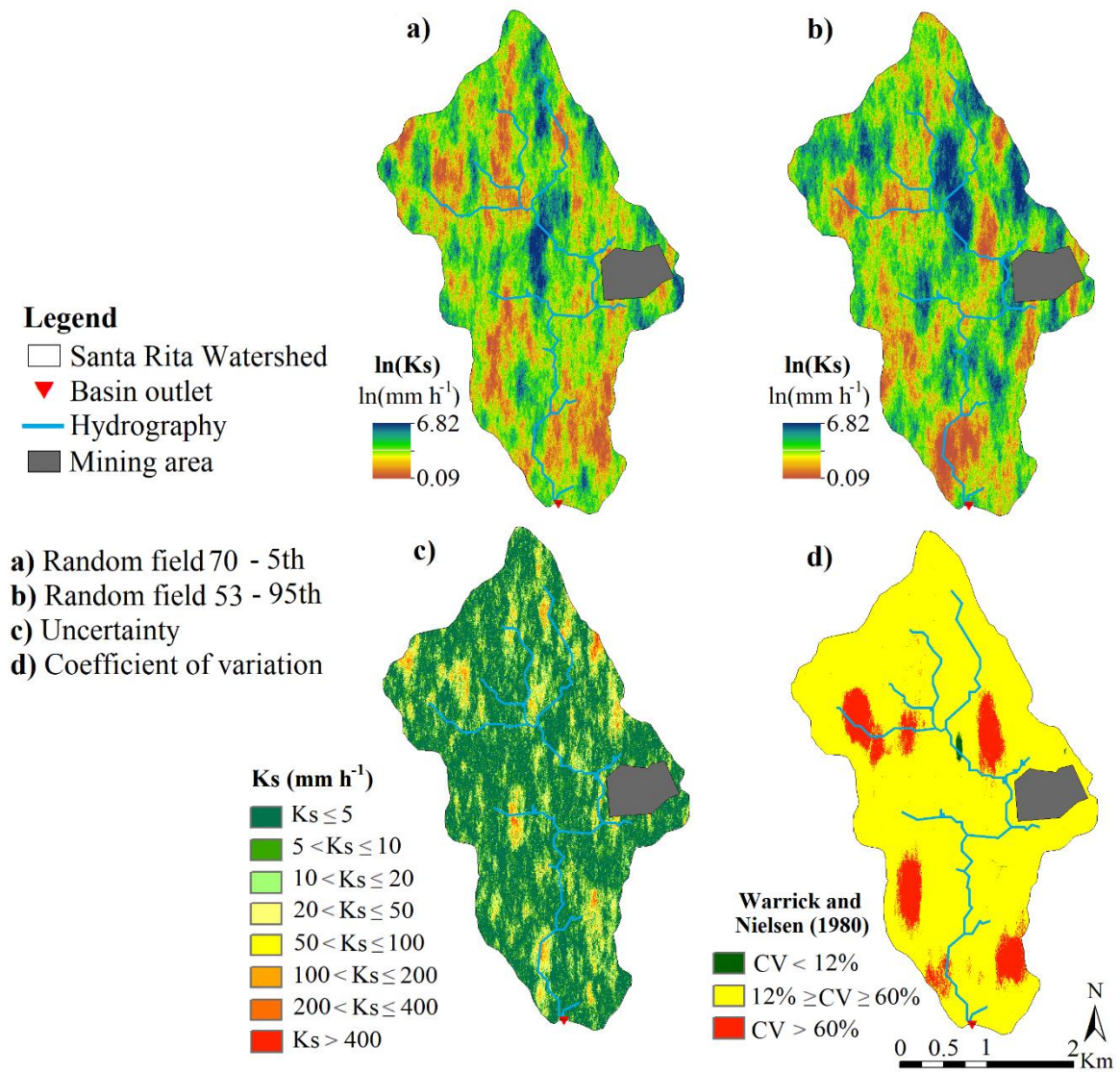


Figure 7. Simulated random field 70 (a); simulated random field 53 (b); uncertainty of the simulated random fields (c); and coefficient of variation of the simulated random fields (d) of napierian logarithm of saturated hydraulic conductivity, in the Santa Rita watershed, Pelotas, in southern Rio Grande do Sul, Brazil.

All simulated random fields were validated by assessing their agreement with the sampled data, histograms, and semivariograms of the sampled data. For representational purposes, random fields corresponding to the 5th and 95th percentiles were chosen for each analyzed physical-hydric attribute.

To assess whether the simulation honored the sampled data, a scatter plot of the residuals, which represent the differences between the simulated and sampled values at each of the surveyed locations, was generated. Figure 8 displays the residual dispersion of the simulated random fields for Ma (Figures 8a and 8b), Bd (Figures 8c and 8d), and $\ln(K_s)$ (Figures 8e and 8f). It can be observed that both equiprobable scenarios exhibited little variation in residual values and a mean close to zero. Some residual points stood out in terms of variation due to the occurrence of samples in the field that did not coincide with the nodes of the simulation grid.

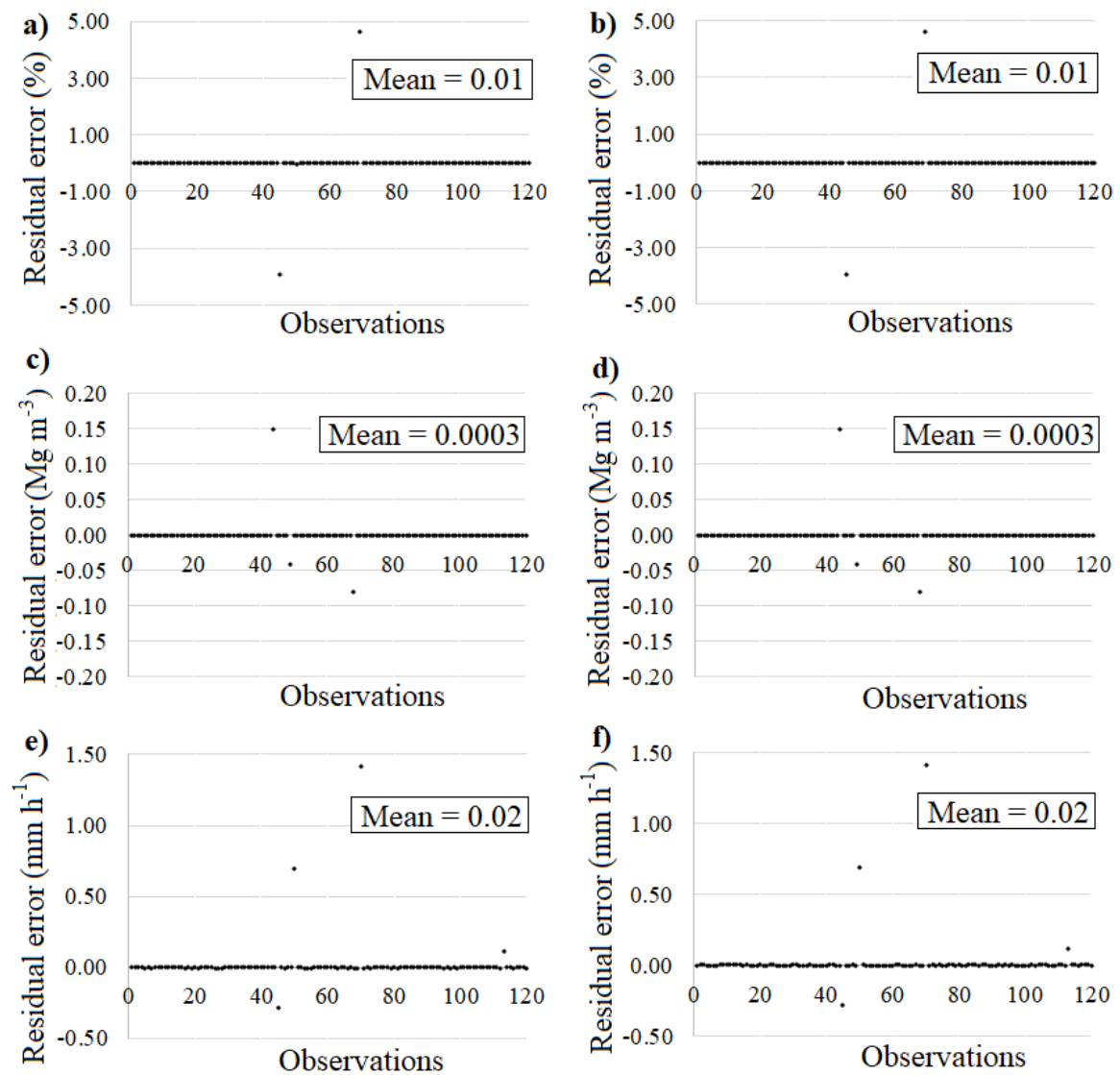


Figure 8. Dispersion of residual errors of simulated field 24 of the macroporosity (a); simulated field 15 of the macroporosity (b); simulated field 2 of the bulk density (c); simulated field 4 of the bulk density (d); simulated field 70 of the of napierian logarithm of saturated hydraulic conductivity (e); simulated field 53 of the of napierian logarithm of saturated hydraulic conductivity (f), in the Santa Rita watershed, located in Pelotas, in the southern region of Rio Grande do Sul, Brazil.

Figure 9 presents the histograms of the simulated pessimistic and optimistic random fields of Ma, Bd, and $\ln(K_s)$, validated against the declustered histograms of the observed data of Ma, Bd, and $\ln(K_s)$. It can be observed that both scenarios of the physical-hydric attributes accurately reproduced the declustered data histograms.

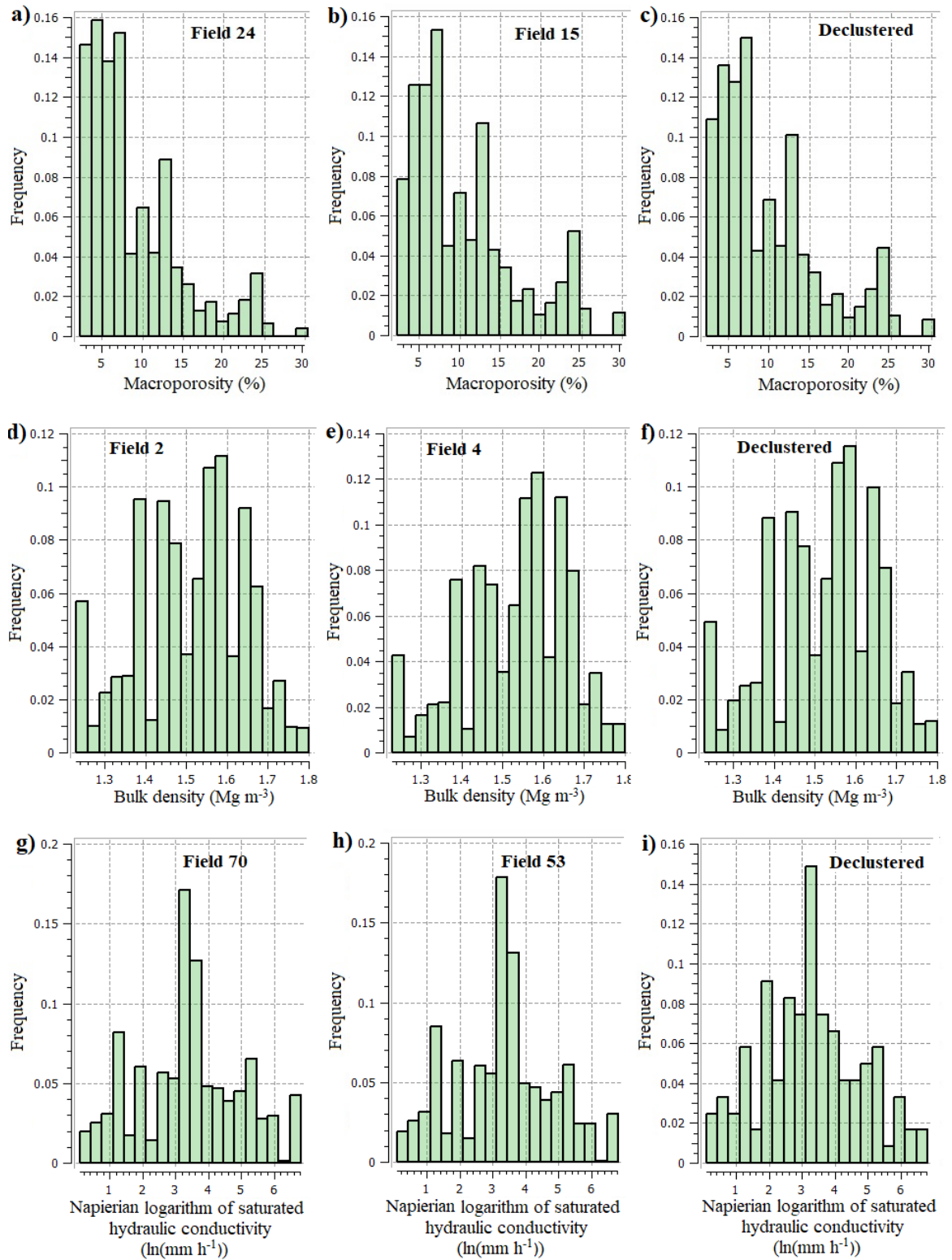


Figure 9. Comparison of the histograms of simulated field 24 of the macroporosity (a); simulated field 15 of the macroporosity (b); declustered macroporosity (c); simulated field 2 of the bulk density (d); simulated field 4 of the bulk density (e); declustered bulk density (f); simulated field 70 of the of napierian logarithm of saturated hydraulic

conductivity (g); simulated field 53 of the of napierian logarithm of saturated hydraulic conductivity (h), unclustered napierian logarithm of saturated hydraulic conductivity (i), in the Santa Rita watershed, located in Pelotas, in the southern region of Rio Grande do Sul, Brazil.

Figure 10 depicts the comparison of semivariograms between simulated pessimistic and optimistic random fields of Ma, Bd, and $\ln(K_s)$ with the theoretical models of Ma, Bd, and $\ln(K_s)$ in the direction of higher spatial continuity. The spatial continuity of the simulated random fields Ma (Figure 10a) reached the level of declustered data, however, there were differences in the semivariances in the initial lag distances, leading to ergodic fluctuations (Goovaerts, 1997). These fluctuations occurred because the theoretical semivariogram was unable to perfectly fit the points of the experimental semivariance, which corresponded to field data. Thus, the semivariograms of the simulated fields are more influenced by the points of the experimental semivariance than by the adjusted theoretical semivariogram. Figures 10b and 10c demonstrate that for Bd and $\ln(K_s)$, respectively,. The semivariograms of the simulated random fields of Ma and $\ln(K_s)$ performed well in matching the theoretical semivariograms of their respective attributes. In particular, the simulated random fields of Bd provided the best representation, while those of Ma exhibited the highest variability in the semivariograms. Overall, the simulations of Ma, Bd, and $\ln(K_s)$ were satisfactorily validated through the representation of observed data, histograms, and semivariograms of declustered data (Goovaerts, 1997).

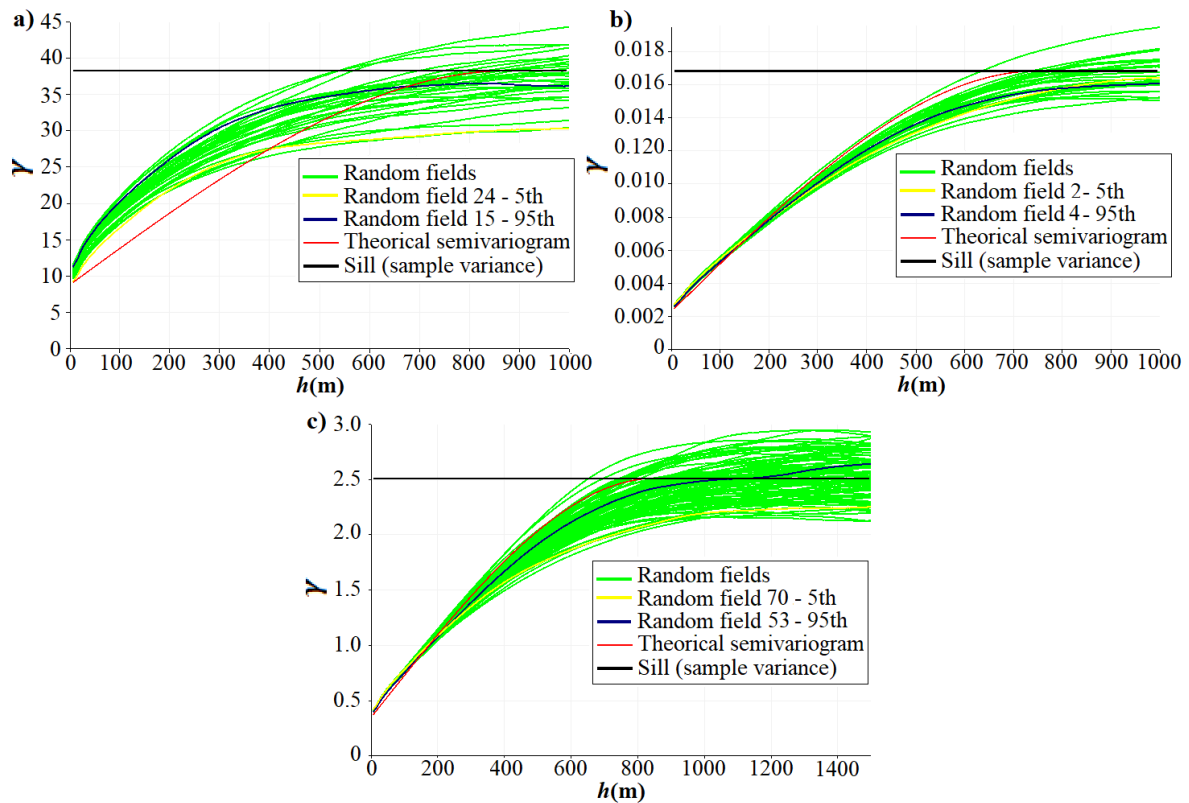


Figure 10. Comparison of the semivariograms of random fields and the declustered theoretical semivariogram of macroporosity (a); bulk density (b); and napierian logarithm of saturated hydraulic conductivity (c), in the Santa Rita watershed, Pelotas, in southern Rio Grande do Sul, Brazil.

3.3. Mapping critical zones of physical quality based on the physical-hydric attributes

The mapping of critical zones in the SRW was conducted through the development of physical-hydric vulnerability maps for each studied physical attribute. Vulnerability maps were created based on 30 simulated random fields of Ma, 30 simulated random fields of Bd, and 98 simulated random fields of $\ln(K_s)$. These maps indicate the probability of the SRW area being below the threshold values of Ma and K_s and above the threshold values of Bd, as described in Table 5.

Table 5. Thresholds values for the physical-hydric attributes, according to limits proposed in the literature and developed for the data from the Santa Rita watershed, located in the municipality of Pelotas, in southern Rio Grande do Sul, Brazil.

Attribute	Reference	Thresholds
Macroporosity	Lower quartile	< 6.26%
	Median	< 9.01%
	Upper quartile	< 13.09%
	Value of literature	< 10.00%
Bulk density	Lower quartile	> 1.44 Mg m ⁻³
	Median	> 1.54 Mg m ⁻³
	Upper quartile	> 1.61 Mg m ⁻³
	Value of literature for study area	> 1.53 Mg m ⁻³
Napierian logarithm of the saturated hydraulic conductivity	Lower quartile	< 2.18 (= 8.83 mm h ⁻¹)
	Median	< 3.26 (= 26.10 mm h ⁻¹)
	Upper quartile	< 4.22 (=67.79 mm h ⁻¹)
	Value of literature for study area	< 3.25 (= 25.86 mm h ⁻¹)

Figures 11, 12, and 13 illustrate the probability of the SRW area being prone to degradation or degraded based on Ma, Bd, and ln(Ks). Figures 11a, 11b, and 11c demonstrate the critical zones of physical quality using thresholds represented by the quartiles of the cumulative probability curve of Ma, while Figure 11d illustrates based on the critical value of 10% of Ma disseminated in the literature (Baver, 1949; Grable, 1968; Reinert, 2001; Suzuki et al., 2022). For Bd, Figures 12a, 12b, and 12c demonstrate the critical zones of physical quality using thresholds represented by the quartiles of the cumulative probability curve, while Figure 12d illustrates based on the Bd of 1.53 Mg m⁻³, defined from Suzuki et al., 2022. As for ln(Ks), Figures 13a, 13b, and 13c demonstrate the critical zones of physical quality using thresholds represented by the quartiles of the cumulative probability curve, while Figure 13d illustrates based on the ln(Ks) of 3.25 (Ks = 25.86 mm h⁻¹), defined from Reichert et al., 2003.

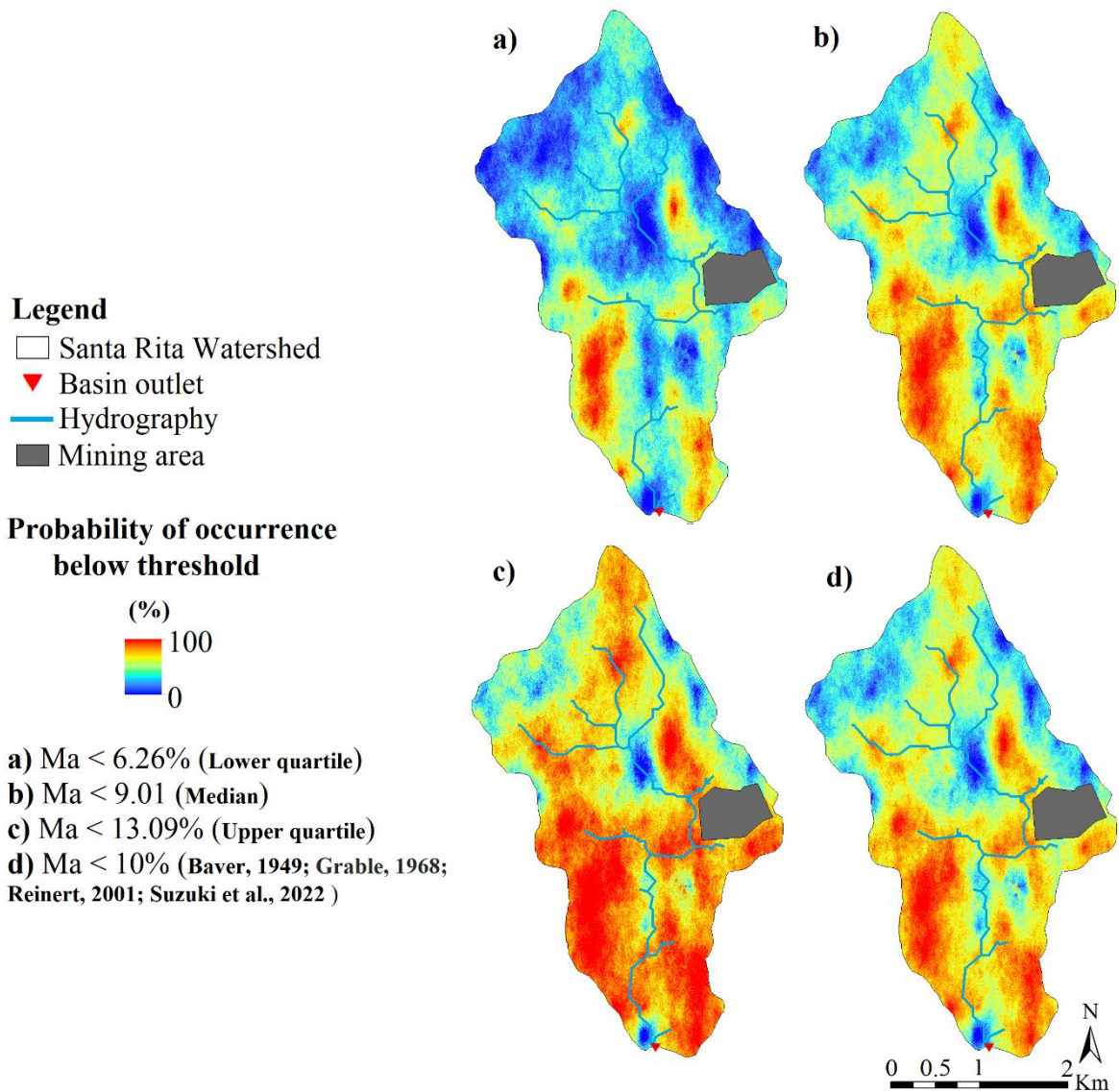


Figure 11. Probability of occurrence of macroporosity below 6.26% (a); below 9.01% (b); below 13.09% (c); and below 10% (d), in the Santa Rita watershed, located in Pelotas, southern Rio Grande do Sul, Brazil.

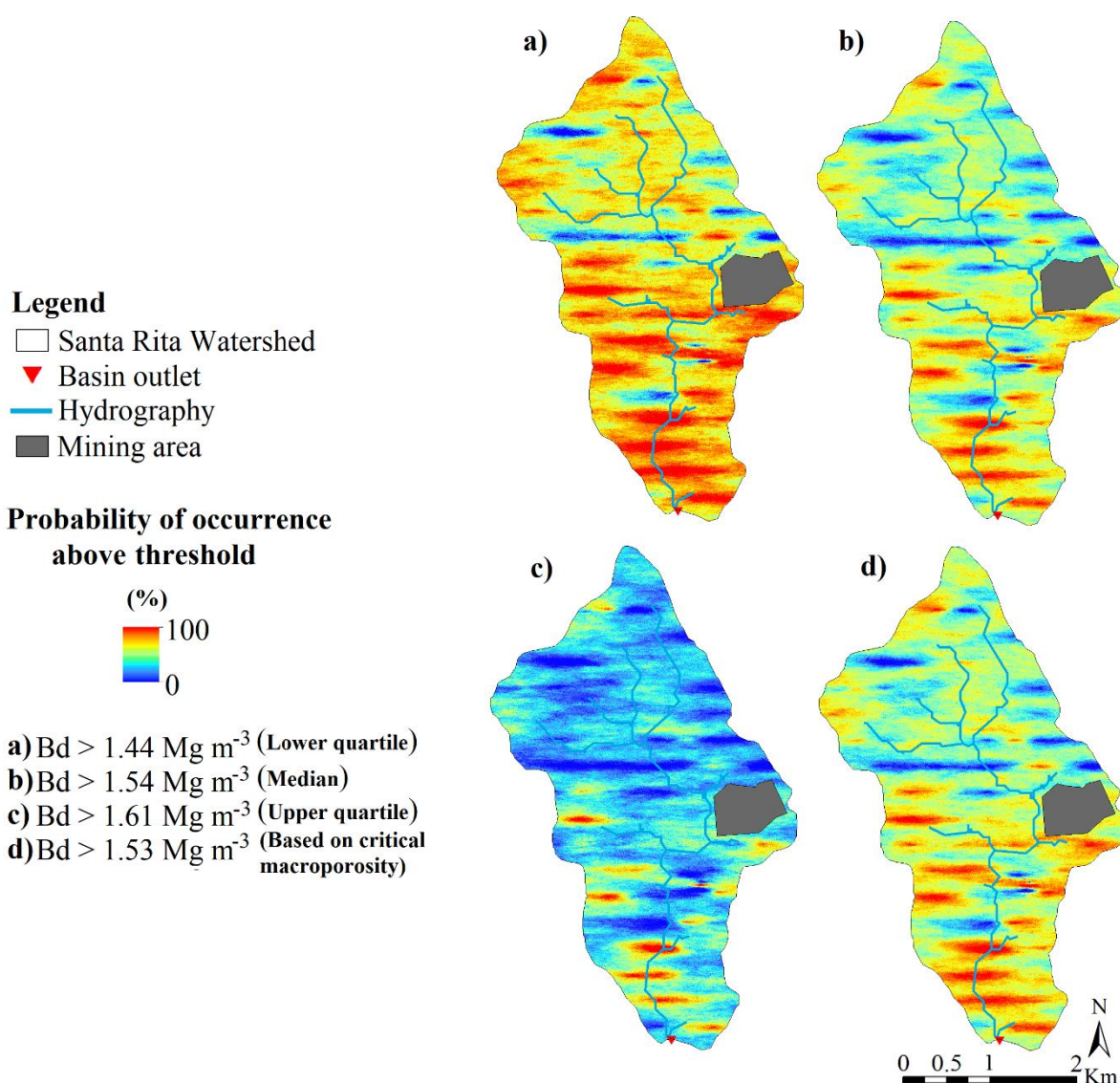


Figure 12. Probability of occurrence of bulk density above 1.44 Mg m^{-3} (a); above 1.54 Mg m^{-3} (b); above 1.61 Mg m^{-3} (c); and above 1.53 Mg m^{-3} (d) in the Santa Rita watershed, located in Pelotas, southern Rio Grande do Sul, Brazil.

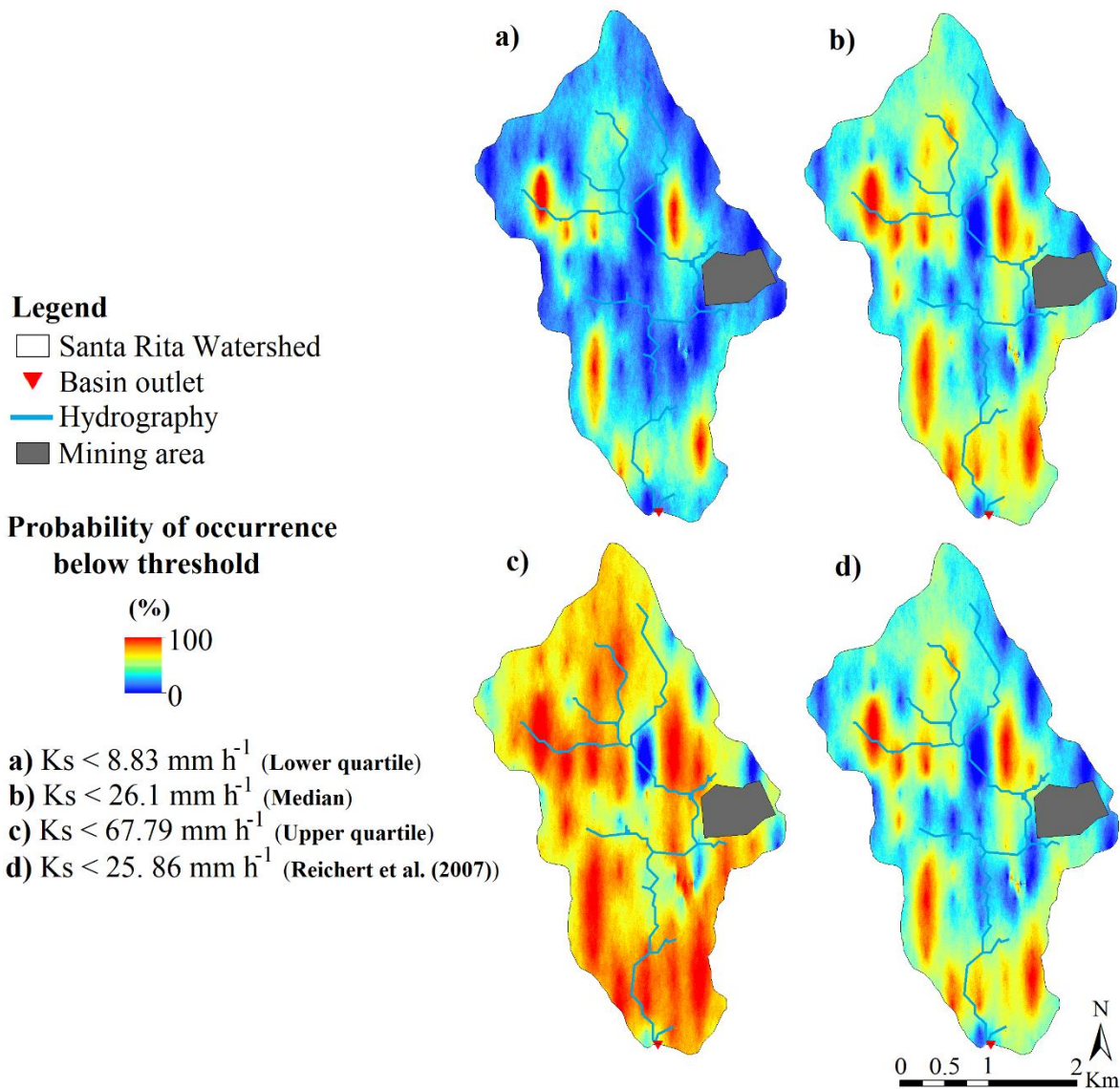


Figure 13. Probability of occurrence of saturated hydraulic conductivity below 8.83 mm h^{-1} (a); below 26.1 mm h^{-1} (b); below 67.79 mm h^{-1} (c); and below 25.86 mm h^{-1} (d) in the Santa Rita watershed, located in Pelotas, southern Rio Grande do Sul, Brazil.

Analyzing the scenarios of the most critical zones of physical quality represented by the maps of the lower quartile of Ma and K_s (Figures 10a and 12a, respectively) and the upper quartile of Bd (Figure 11c), it can be noted that the extremely critical areas, with a 100% probability of being below 6.26% of Ma, 8.83 mm h^{-1} of K_s , and above 1.61 Mg m^{-3} of Bd, coincide. This demonstrates the interrelation that these attributes possess.

The maps of the critical zones of physical quality based on the median of the cumulative probability curve of Ma, Bd, and Ks (Figures 11b, 12b, and 13b, respectively) presented spatial patterns very similar to the maps based on critical literature values for Ma, Bd, and Ks (Figures 11b, 12b, and 13b). Figures 11b, 12b, and 13b illustrate the probability of the area being below 10% of Ma, above 1.53 Mg m^{-3} , and below 25.86 mm h^{-1} , thresholds based on critical literature values. It can be observed that overall, the southern region of SRW has a higher restriction on physical quality when analyzing the three attributes. Although Ma has a larger restricted area and Ks is directly related to it, SRW has fewer restricted areas concerning Ks, as the presence of native forest around the water body contributes to root development and a higher Ks (Lee and Foster, 1991; Baiamonte et al., 2017).

3.4. Soil physical vulnerability based on the physical-hydric attributes

Figures 14a, b, and c depict the SPV maps developed based on Equations 7, 8, and 9, respectively. It can be observed that the SPV scenario utilizing critical Bd and Ks values for the SRW exhibited the most critical zones of physical vulnerability, whereas the map developed using thresholds proposed in the literature presented fewer physically vulnerable regions. However, all three scenarios demonstrated a similar spatial pattern of physical vulnerability, with regions north of the SRW showing fewer vulnerable zones and regions south of the SRW predominantly characterized by critical zones, from a soil physics perspective. Figure 14d demonstrates that the cell-by-cell uncertainty of the probability of physical vulnerability is low in the majority of the SRW area (probability $\leq 25\%$). However, there are some regions with considerably significant uncertainties (probability $> 25\%$), represented by yellow and red regions. In these areas of uncertainty,

a more detailed analysis of the analyzed physical-hydric attributes should be conducted to better understand their behavior and suggest the most suitable management practices.

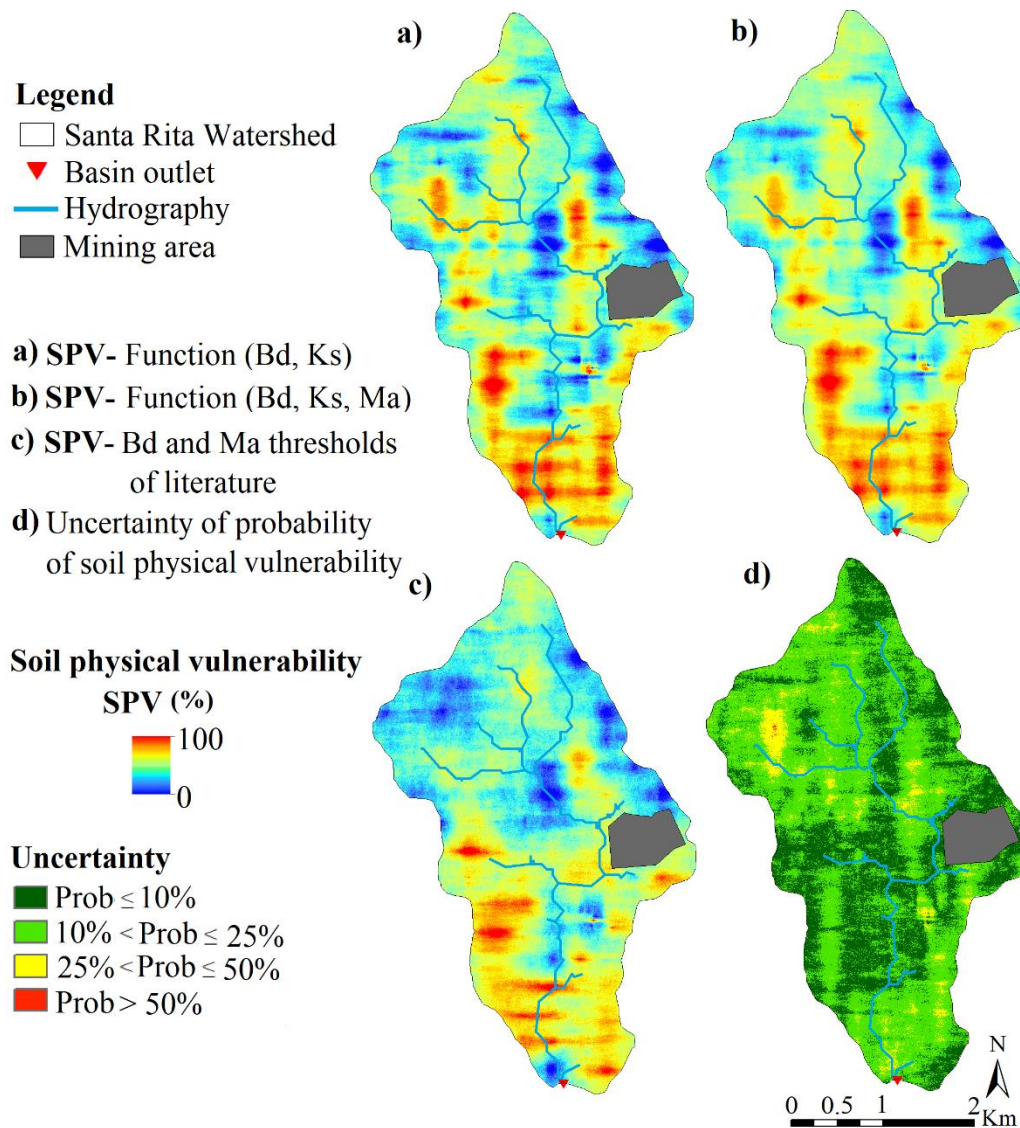


Figure 14. Percentage of soil physical vulnerability based on critical bulk density and saturated hydraulic conductivity, defined for the study area (a); percentage of soil physical vulnerability based on critical bulk density, saturated hydraulic conductivity defined for the study area, and a critical macroporosity of 10% (b); percentage of soil physical vulnerability based on critical bulk density and macroporosity, using threshold values from the literature (c); cell-by-cell map of uncertainties in the probability of soil physical

vulnerability, using three physical vulnerability maps generated from different combinations of physical-hydric attributes described in figures a, b, and c (d), in the Santa Rita watershed, located in Pelotas, southern Rio Grande do Sul, Brazil.

Figures 15a and b depict the pessimistic and optimistic scenarios of soil physical vulnerability, respectively. These scenarios were developed based on the values corresponding to the 5th and 95th percentiles, cell-by-cell, of the physical vulnerability percentage. The generation of these scenarios involved three physical vulnerability maps created using different combinations of physical-hydric attributes (Equations 7, 8, and 9). It can be observed that the pessimistic scenario aligns with the Soil Physical Vulnerability (SPV) developed using critical B_d and K_s values defined for the study area. On the other hand, the optimistic scenario aligns with the SPV developed using the B_d and M_a thresholds proposed in the literature. However, as mentioned earlier, these patterns exhibit limited regions with high associated uncertainty. Analyzing Figures 15c and d, which represent the land use and elevation maps of the study region, a relationship between physical vulnerability and land use becomes evident. In general, the zones with the highest likelihood of being physically vulnerable (red in the map, Figure 15a and b) are associated with areas under annual and perennial crops, followed by low-lying native grassland areas in the southern region of SRW. Conversely, the areas covered by native forest concentrated in the northern region of SRW are less prone to physical vulnerability.

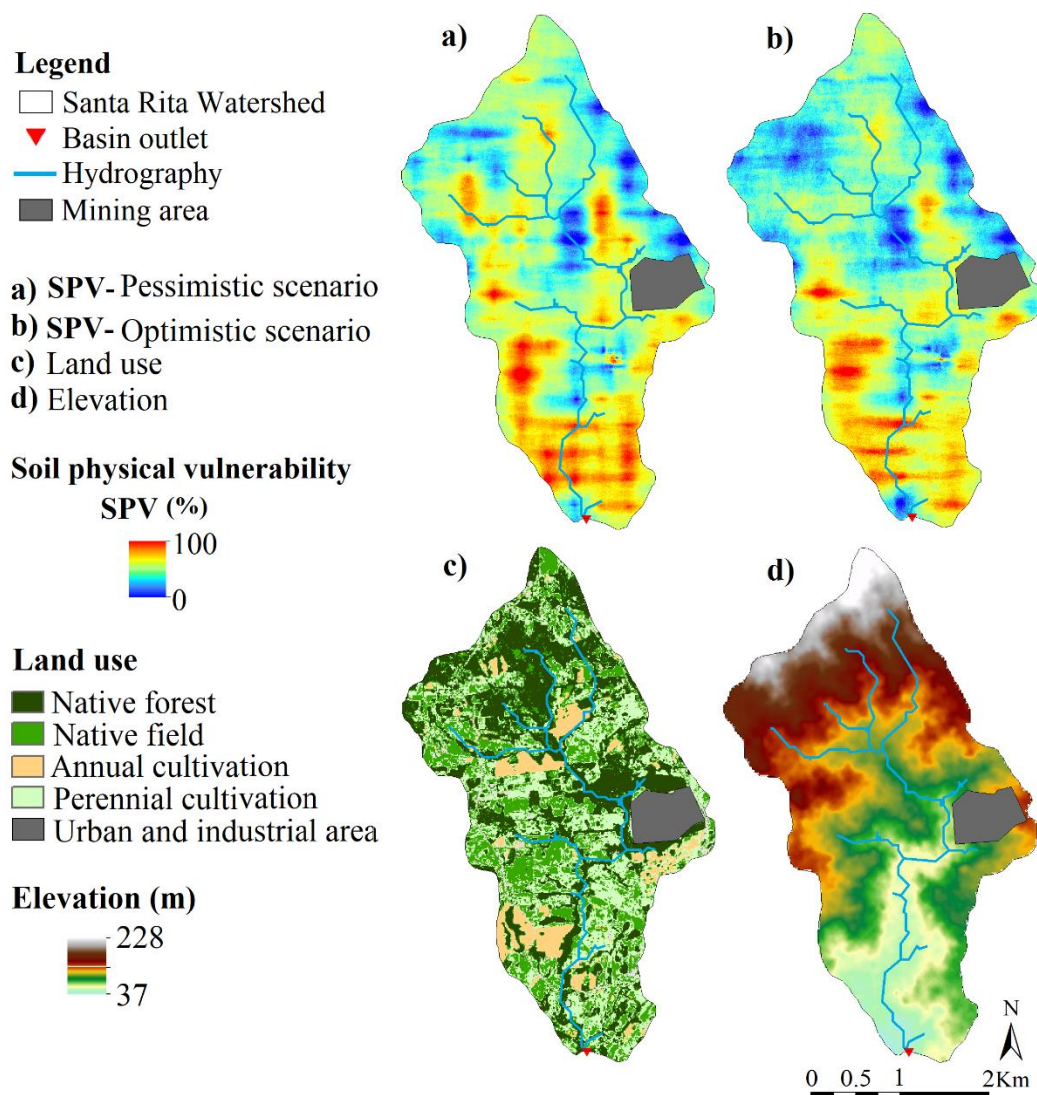


Figure 15. Map representing the pessimistic (a) and optimistic (b) scenarios of soil physical vulnerability, developed on the values corresponding to the 5th and 95th percentiles, cell by cell, of the physical vulnerability percentage, respectively, using three physical vulnerability maps generated from different combinations of physical-hydric attributes; land use map (c); elevation map (d), in the Santa Rita watershed, located in Pelotas, southern Rio Grande do Sul, Brazil.

Soils under native forests typically exhibit high Ma values, attributed to higher vegetation cover, organic matter content, and root development (Lee and Foster, 1991; Centeno et al., 2020). In areas where native vegetation is preserved, a wide variety of

species with different root growth patterns is observed. This contributes to the development and maintenance of porous spaces in the soil, resulting in an increased water storage capacity with higher Ma and a decrease in Bd. Consequently, new pathways for preferential water flow are created, leading to an increase in Ks and an improvement in soil structure. Therefore, it can be observed that the physical-hydric attributes, which form the basis of SPV, are significant indicators of the physical conditions of the soil, reflecting its ability to drain excess water and facilitate root development in plants (Reynolds et al., 2002; Drewry e Paton, 2005; Pulido-Moncada et al., 2014; Timm et al., 2019).

Cultivated areas are particularly susceptible to physical fragility due to the intense use of agricultural machinery and aggressive management practices that negatively affect soils (Avila et al., 2017). Studies conducted by Obour et al. (2018) observed an increase in bulk density due to compaction processes in agricultural areas. Additionally, native field that support livestock activities also exhibit a higher propensity for vulnerability. In these regions, a decrease in biodiversity, a reduction in organic matter, and consequently, a decrease in water infiltration capacity in the soil are observed (Zimmermann et al., 2006; Mainuri and Owino, 2013). It has been found that cattle trampling contributes to the decrease in organic matter in some parts of the studied area, corroborating previous findings by Balbinot et al. (2009), Moreira et al. (2014), and Ortigara et al. (2014). The pressure exerted by animal trampling transforms soil macropores into micropores, causing changes in its structure (Bertol et al., 2004; Bonell et al., 2010; Salemi et al., 2013). The elevation map (Figure 14d) is related to soil physical vulnerability in the sense that in low-lying areas, there is a higher concentration of machinery flow and animal trampling, activities that increase soil compaction and physical fragility.

The SPV maps developed in this study will serve to support decision-making processes both at the field scale, for rural producers, and at the watershed scale, from a

soil management and conservation perspective. Based on the SPV maps, it will be possible to identify locations that require immediate intervention and those that need medium to long-term intervention. Furthermore, by conducting a joint analysis of the SPV maps and critical scenarios derived from each physical-hydric attribute, it will be possible to determine which attribute contributes the most to the physical vulnerability of a given location. This will enable a more effective soil management and conservation practice.

4. Conclusions

The heterogeneity of soils in the Santa Rita watershed was most prominently evident in saturated hydraulic conductivity, compared to macroporosity and bulk density.

The application of sequential Gaussian simulation method proved to be effective in characterizing the variability and spatial distribution of physical-hydric attributes, enabling the identification of critical areas and the development of maps that highlight zones with compromised physical soil quality.

Saturated hydraulic conductivity required the largest number of simulated random fields to represent the variability of observed data. On the other hand, macroporosity had fewer uncertainties associated with the simulated random fields, while bulk density exhibited areas with lower coefficients of variation of the simulated random fields. The spatial uncertainties of the probability of soil physical vulnerability were low, considering the various combinations of physical-hydraulic attributes used in the assessment.

Mapping the physical vulnerability of the soil, based on the maps of critical zones of physical soil quality obtained through the physical-hydric attributes, proves to be a tool of great importance in assessing physical and structural quality, enabling the identification of areas more prone to physical fragility. This approach can assist in proper

soil management, promoting the sustainable utilization of natural resources and contributing to environmental preservation.

5. Acknowledgments

This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Finance Code 001.

6. References

- Alletto, L., Coquet, Y., Roger-Estrade, J., 2010. Two-dimensional spatial variation of soil physical properties in two tillage systems. *Soil Use Manag.* 26(4), 432–444.
<https://doi.org/10.1111/j.1475-2743.2010.00295.x>
- Alvares, C.A., Stape, J.L., Sentelhas, P.C., Gonçalves, J.L.M., Sparovek, G., 2013. Koppen's climate classification map for Brazil. *Meteorol. Z.* 22(6), 711-728.
<https://doi.org/10.1127/0941-2948/2013/0507>
- Aschonitis, V.G., Kostopoulou, S.K., Antonopoulos, V.Z., 2011. Methodology to Assess the Effects of Rice Cultivation Under Flooded Conditions on van Genuchten's Model Parameters and Pore Size Distribution. *Transp. Porous Media* 91(3), 861–876.
<https://doi.org/10.1007/s11242-011-9876-9>
- Avila, P., Alvaro, E., Leiva, B., Rodrigo, F., Darghan, C., Enrique, A., 2017. Friabilidad y su relación con algunas propiedades físicas y químicas de suelos cultivados con caña de azúcar. *Revista de Ciencias Agrícolas* 34, 19–32.
<https://doi.org/10.22267/rcia.173402.69>

Baiamonte, G., Bagarello, V., D'Asaro, F., Palmeri, V., 2017. Factors Influencing Point Measurement of Near-surface Saturated Soil Hydraulic Conductivity in a Small Sicilian Basin. *Land degrad. develop.* 28(3), 970-982.

<https://doi.org/10.1002/ldr.2674>

Balbinot Junior, A.A., Moraes, A., Veiga, M., Pelissari, A., Dieckow, J., 2009. Crop-livestock system: intensified use of agricultural lands. *Cienc. Rural* (in Portuguese), 39(6), 1925-1933.

<https://doi.org/10.1590/S0103-84782009005000107>

Ball, B.C., Watson, C.A., Baddeley, J.A., 2007. Soil physical fertility, soil structure and rooting conditions after ploughing organically managed grass/clover swards. *Soil Use Manag.* 23(1), 20–27.

<https://doi.org/10.1111/j.1475-2743.2006.00059.x>

Baver, L.D., 1949. Practical values from physical analyses of soils. *Soil Sci.* 68(1), 1-14.

<https://doi.org/10.1097/00010694-194907000-00002>

Beskow, S., Timm, L.C., Tavares, V.E.Q., Caldeira, T.L., Aquino, L.S., 2016. Potential of the LASH model for water resources management in data-scarce basins: a case study of the Fragata River basin, southern Brazil. *Hydrol. Sci.* 61(14), 2567–2578.

<https://doi.org/10.1080/02626667.2015.1133912>

Bertol, I., Albuquerque, J.A., Leite, D., Amaral, A.J., Zoldan Junior, W.A., 2004. Propriedades físicas do solo sob preparo convencional e semeadura direta em rotação e sucessão de culturas, comparadas às do campo nativo. *Rev. Bras. Ciênc. Solo* 28(1), 155-163.

<https://doi.org/10.1590/S0100-06832004000100015>

Bonell, M., Purandara, B.K., Venkatesh, B., Jagdish Krishnaswamy, Acharya, H.A.K., Singh, U.V., Chappell, n., 2010. The impact of forest use and reforestation on soil hydraulic conductivity in the Western Ghats of India: Implications for surface and sub-surface hydrology. *J. Hydrol.* 391(1-2), 47-62.

<https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2010.07.004>

Castioni, G.A.F., Souza, Z.M., Nazário, A.A., Borges, B.M.M.N., Torres, J.L.R., Dayron, M.R.S., Campos, M.C.C., 2019. Variability of physical attributes in tropical weathered soil cultivated with irrigated beans (*Phaseolus vulgaris* L.). *Aust. J. Crop Sci.* 13(5), 656-661.

<https://doi.org/10.21475/ajcs.19.13.05.p1115>.

Centeno, L.N., Timm, L.C., Reichardt, K., Beskow, S., Caldeira, T.L., de Oliveira, L.M., Wendroth, O., 2020. Identifying regionalized co-variate driving factors to assess spatial distributions of saturated soil hydraulic conductivity using multivariate and state-space analyses. *Catena*, 191, 104583.

<https://doi.org/10.1016/j.catena.2020.104583>

Cherubin, M.R., Karlen, D.L., Franco, A.L.C., Tormena, C.A., Cerri, C.E.P., Davies, C.A., Cerri, C.C., 2016. Soil physical quality response to sugarcane expansion in Brazil. *Geoderma* 267, 156–168.

<https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2016.01.004>

Daly, E.J., Kim, K., Hernandez-Ramirez, G., Klimchuk, K., 2023. The response of soil physical quality parameters to a perennial grain crop. *Agric. Ecosyst. Environ.* 343, 108265.

<https://doi.org/10.1016/j.agee.2022.108265>

Demarchi, J.C.; Zimback, C.R.L., 2014. Mapeamento, erodibilidade e tolerância de perda de solo na sub-bacia do ribeirão das Perobas. *Energ. Agric.* 29, 102-114.

<https://doi.org/10.17224/EnergAgric.2014v29n2p102-114>

Demir, Y., Demir, A.D., Meral, A., Yüksel, A., 2023. Determination of soil quality index in areas with high erosion risk and usability in watershed rehabilitation applications. *Environ. Monit. Assess.* 195, 572.

<https://doi-org.ez66.periodicos.capes.gov.br/10.1007/s10661-023-11181-1>

Deutsch, C.V., Journel, A.G., 1998. *GSLIB: Geostatistical Software Library and User's Guide*, Oxford University Press, New York.

Dexter, A.R., 2004. Soil physical quality Part I. Theory, effects of soil texture, density and organic matter and effects on root growth. *Geoderma*. 120(3-4), 201-214.

<https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2003.09.004>

Dos Santos, R.C.V., Vargas, M.M., Timm, L.C., Beskow, S., Siqueira, T.M., Mello, C.R., Soares, M.F., Moura, M.M., Reichardt, K., 2021. Examining the implications of spatial variability of saturated soil hydraulic conductivity on direct surface runoff hydrographs. *Catena* 207, 105693.

<https://doi.org/10.1016/j.catena.2021.105693>

Drewry, J.J., Paton, R.J., 2005. Soil physical quality under cattle grazing of a winter-fed brassica crop. *Aust. J. Soil Res.* 43(4), 525.

<https://doi.org/10.1071/sr04122>

Godoy, V.A., Zuquette, L.V., Gómez-Hernández, J.J., 2019. Spatial variability of hydraulic conductivity and solute transport parameters and their spatial correlations to soil properties. *Geoderma* 339, 59–69.

<https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2018.12.015>

Goovaerts, P., 1997. Geostatistics for natural resources evaluation. *Applied Geostatistics Series*, Oxford University Press.

Grable, A.R., Siemer, E.G., 1968. Effects of bulk density, aggregate size, and soil water suction on oxygen diffusion, redox potential and elongation of corn roots. *Soil Sci. Soc. Amer. Proc.* 32(2), 180-186.

<https://doi.org/10.2136/sssaj1968.03615995003200020011x>

Hu, W., Shao, M., Wang, Q., Fan, J., Horton, R., 2009. Temporal changes of soil hydraulic properties under different land uses. *Geoderma*, 149(3-4), 355–366.
<https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2008.12.016>

Huang, M., Zettl, J.D., Lee Barbour, S., Pratt, D., 2016. Characterizing the spatial variability of the hydraulic conductivity of reclamation soils using air permeability. *Geoderma* 262, 285–293.
<https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2015.08.014>

Kavaklıgil, S.S., Erşahin, S., 2023. Spatial Variability of Some Soil Physical Properties on Semi-Arid Cultivated Hillslopes in Hydropedological Perspective. *Eurasian Soil Sc.* 56, 715–726.
<https://doi.org/10.1134/S1064229323700151>

Klute, A., Dirksen, C., 1986. Hydraulic conductivity and diffusivity: laboratory methods. In: Klute, A. (Ed.), *Methods of Soil Analysis. Agronomy Monograph, ASA-SSSA, Madison*, pp. 687–734.
<https://doi.org/10.2136/sssabookser5.1.2ed.c28>

Laudone, G.M., Matthews, G.P., Gregory, A.S., Bird, N.R.A., Whalley, W.R., 2013. A dual-porous, inverse model of water retention to study biological and hydrological interactions in soil. *Eur. J. Soil Sci.* 64(3), 345–356.
<https://doi.org/10.1111/ejss.12055>

Lee, K.E., Foster, R.C., 1991. Soil fauna and soil structure. *Aust. J. Soil Res.* 29(6), 745-774.

<https://doi.org/10.1071/SR9910745>

Linh, T.B., Ghyselinck, T., Khanh, T.H., Van Dung, T., Guong, V.T., Van Khoa, L., Cornelis, W., 2017. Temporal Variation of Hydro-Physical Properties of Paddy Clay Soil under Different Rice-Based Cropping Systems. *Land Degrad. Dev.* 28(5), 1752–1762.

<http://dx.doi.org/10.1002/ldr.2706>.

Mainuri, Z.G., Owino, J.O., 2013. Effects of land use and management on aggregate stability and hydraulic conductivity of soils within River Njoro Watershed in Kenya. *Int. Soil Water Conserv. Res.* 1(2), 80-87.

[https://doi.org/10.1016/s2095-6339\(15\)30042-3](https://doi.org/10.1016/s2095-6339(15)30042-3)

Matheron, G., 1963. Principles of geostatistics. *Econ Geol* 58(8), 1246–1266.

<https://doi.org/10.2113/gsecongeo.58.8.1246>

Moreira, W.H., Tormena, C.A., Betioli Junior, E., Petean, L.P., Alves, S.J., 2014. Influence of the grazing height of ryegrass and oat on the physical properties of an Oxisol after seven years of crop-livestock system. *R. Bras. Ci. Solo* (in Portuguese). 38(4), 1315-1326.

<https://doi.org/10.1590/s0100-06832014000400027>

Oliveira, I.N., Zigomar, Souza, Z.M., Bolonhezi, D., Totti, M.C.V., Moraes, M.T., Lovera, L.H., Lima, E.S., Esteban, D.A.A., Oliveira, C.F., 2022. Tillage systems impact

on soil physical attributes, sugarcane yield and root system propagated by pre-sprouted seedlings, *Soil tillage res.* 223, 105460.

<https://doi.org/10.1016/j.still.2022.105460>

Ortigara, C., Koppe, E., Luz, F.B. da, Bertollo, A.M., Kaiser, D.R., Silva, V.R. da, 2014. Soil use and physical-mechanical properties of a Red Oxisol. *Rev. Bras. Ciênc. Solo* (in Portuguese) 38(2), 619-626.

<https://doi.org/10.1590/s0100-06832014000200026>

Obour, P.B., Kolberg, D., Lamandé, M., Børresen, T., Edwards, G., Sørensen, C.G., Munkholm, L.J., 2018. Compaction and sowing date change soil physical properties and crop yield in a loamy temperate soil. *Soil tillage res.* 184, 153–163.

<https://doi.org/10.1016/j.still.2018.07.014>

Papanicolaou, A. (Thanos) N., Elhakeem, M., Wilson, C.G., Lee Burras, C., West, L.T., Lin, H. (Henry), Clark, B., Oneal, B.E., 2015. Spatial variability of saturated hydraulic conductivity at the hillslope scale: Understanding the role of land management and erosional effect. *Geoderma*, 243-244, 58–68.

<http://dx.doi.org/10.1016/j.geoderma.2014.12.010>.

Picciafuoco, T., Morbidelli, R., Flammini, A., Saltalippi, C., Corradini, C., Strauss, P., Blöschl, G., 2019. On the estimation of spatially representative plot scale saturated hydraulic conductivity in an agricultural setting. *Journal of Hydrology*.

<https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2018.12.044>

Pulido-Moncada, M., Gabriels, D., Cornelis, W.M., 2014. Data-driven analysis of soil quality indicators using limited data. *Geoderma* 235-236, 271–278.

<https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2014.07.014>

R Core Development Team., 2008. R: A language and environment for statistical computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, p. 2673.

Rabbi, S.M.F., Roy, B.R., Miah, M.M., Amin, M.S., Khandakar, T., 2014. Spatial Variability of Physical Soil Quality Index of an Agricultural Field. *Appl. Environ. Soil Sci.* 2014, 1–10. <https://doi.org/10.1155/2014/379012>

Razali, N.M., Wah, Y.B., 2011. Power comparisons of Shapiro-Wilk, Kolmogorov-Smirnov, Lilliefors and Anderson-Darling tests. *J. Stat. Model. Analytics* 2(1), 11-33, 2011.

Reichert, J.M., Reinert, D.J., Braidá, J.A., 2003. Qualidade dos solos e sustentabilidade de sistemas agrícolas. *Ciência & Ambiente* 27, 29-48.

Reinert, D. J.; Reichert, J. M.; Silva, V. R., 2001. Propriedades físicas de solos em sistema de plantio direto irrigado. In: Carlesso, R.; Petry, M.T.; Rosa, G.M.; Ceretta, C. A. *Irrigação por aspersão no Rio Grande do Sul*, (ed.), Santa Maria, 112-133.

Remy, N., Boucher, A., Wu, J., 2009. Applied geostatistics with SGeMS: A user's guide. Cambridge: Cambridge University Press.

Reynolds, W., Bowman, B., Drury, C., Tan, C., Lu, X., 2002. Indicators of good soil physical quality: density and storage parameters. *Geoderma* 110(1-2), 131–146.

[https://doi.org/10.1016/s0016-7061\(02\)00228-8](https://doi.org/10.1016/s0016-7061(02)00228-8)

Salemi, L.F., Groppo, J.D., Trevisan, R., de Moraes, J.M., de Barros Ferraz, S.F., Villani, J.P., Duarte-Neto, P.J., Martinelli, L.A., 2013. Land-use change in the Atlantic rainforest region: Consequences for the hydrology of small catchments. *J. Hydrol.* 499, 100-109.

<https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2013.06.049>

Sacco, D., Cremon, C., Zavattaro, L., Grignani, C., 2012. Seasonal variation of soil physical properties under different water managements in irrigated rice. *Soil tillage res.* 118, 22–31.

<https://doi.org/10.1016/j.still.2011.10.011>

Shapiro, S.S., Wilk, M.B., 1965. An Analysis of Variance Test for Normality (Complete Samples). *Biometrika* 52(3-4), 591.

<https://doi.org/10.2307/2333709>

Siqueira, T.M., Louzada, J.A.S., Pedrollo, O.C., Castro, N.M.R., Oliveira, M.H.C., 2019. Soil physical and hydraulic properties in the Donato stream basin, RS, Brazil. Part 2: Geostatistical simulation. *Rev. bras. eng. agríc. ambient.* 23(9), 675-680.

<https://doi.org/10.1590/1807-1929/agriambi.v23n9p675-680>

Soares, M.F., Centeno, L.N., Timm, L.C., Mello, C.R., Kaiser, D. R., Beskow, S., 2020. Identifying Covariates to Assess the Spatial Variability of Saturated Soil Hydraulic Conductivity Using Robust Cokriging at the Watershed Scale. *J. Soil Sci. Plant Nutr.* <https://doi.org/10.1007/s42729-020-00228-8>

Soares, M.F., Timm, L.C., Siqueira, T.M., Santos, R.C.V., Reichardt, K., 2023. Assessing the spatial variability of saturated soil hydraulic conductivity at the watershed scale using the sequential Gaussian co-simulation method. *Catena*. 221 Part A, 106756. <https://doi.org/10.1016/j.catena.2022.106756>

Soil Survey Staff, 2022. Keys to Soil Taxonomy, 13th edition. USDA Natural Resources Conservation Service.

Srivastava, R.M., 2013. Geostatistics: A toolkit for data analysis, spatial prediction and risk management in the coal industry. *Int. J. Coal Geol.* 112, 2-13. <https://doi.org/doi:10.1016/j.coal.2013.01.011>

Suzuki, L.E.A.S., Reinert, D.J., Alves, M.C., Reichert, J.M., 2022. Critical Limits for Soybean and Black Bean Root Growth, Based on Macroporosity and Penetrability, for Soils with Distinct Texture and Management Systems. *Sustainability* (14), 2958. <https://doi.org/10.3390/su14052958>

Tavares, K.S.R; Mendes, S.O; Ferreira, N.J.B., 2022. Geografia Física e a abordagem geossistêmica aplicada à estudos de suscetibilidade ambiental de bacias hidrográficas. *Rev. Bras. Geogr. Fís.* 15, 634-649.

<https://doi.org/10.26848/rbgf.v15.2.p634-649>

Teixeira, P.C., Donagemma, G.K., Fontana, A., Teixeira, W.G., 2017. Manual de métodos de análise de solo, (3 Eds.), Brasília, DF: Embrapa.

Timm, L.C., Pires, L.F., Centeno, L.N., Bitencourt, D.G.B., Parfitt, J.M.B., De Campos, A.D.S., 2019. Assessment of land levelling effects on lowland soil quality indicators and water retention evaluated by multivariate and geostatistical analyses. *Land degrad. develop.* 31(8), 959-974.

<https://doi.org/10.1002/ldr.3529>

Vizioli, B., Cavalieri-Polizeli, K.M.V., Tormena, C.A., Barth, G., 2021. Effects of long-term tillage systems on soil physical quality and crop yield in a Brazilian Ferralsol. *Soil Tillage Res.* 209, 104935.

<https://doi.org/10.1016/j.still.2021.104935>

Walia, M.K., Dick, W.A., 2018. Selected soil physical properties and aggregate-associated carbon and nitrogen as influenced by gypsum, crop residue, and glucose. *Geoderma* 320, 67-73.

<https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2018.01.022>

Wang, M., Liu, H., Lennartz, B., 2021. Small-scale spatial variability of hydro-physical properties of natural and degraded peat soils. *Geoderma* 399, 115123.

<https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2021.115123>

Warrick, A.W., Nielsen, D.R., 1980. Spatial variability of soil physical properties in the field, in: Hillel, D., (Eds.), Applications of soil physics. New York: Academic Press, pp. 319-344.

Zanchin, M., Moura, M.M. de, Nunes, M.C.M., Tuchtenhagen, I.K., Lima, C.L.R. de, 2021. Assessment of soil loss susceptibility in Santa Rita Watershed in Southern Brazil. Eng. Agríc. 41(4), 485-495.

<https://doi.org/10.1590/1809-4430-Eng.Agric.v41n4p485-495/2021>

Zhang, X., Wendroth, O., Matocha, C., Zhu, J., 2019. Estimating Soil Hydraulic Conductivity at the Field Scale With a State-Space Approach. Soil Sci. 184(3), 101–111. <https://doi.org/10.1097/ss.0000000000000253>

Zhao, Y., Lei, J., Tumarbay, H., Xue, J., 2017. Using sequential Gaussian simulation to assess the uncertainty of the spatial distribution of soil salinity in arid regions of Northwest China. Arid Land Res. Manag. 32(1), 20-37.

<https://doi.org/10.1080/15324982.2017.1378771>

Zimmermann, B., Elsenbeer, H., De Moraes, J.M., 2006. The influence of land-use changes on soil hydraulic properties: Implications for runoff generation. For. Ecol. Manag. 222(1-3), 29-38.

<https://doi.org/10.1016/j.foreco.2005.10.070>

7. Considerações finais

A presente tese foi dividida em dois artigos científicos. A ligação entre estes artigos teve como elo a aplicação da simulação geoestatística na avaliação da qualidade física e estrutural dos solos de uma microbacia hidrográfica, considerando diferentes indicadores na avaliação.

O índice S por estar diretamente relacionado à macroporosidade do solo, densidade, carbono orgânico, condutividade hidráulica do solo saturado e frações da distribuição granulométrica, demonstrou-se uma ferramenta importante na avaliação da qualidade física e estrutural do solo. A partir de valores críticos definidos de índice S foi possível identificar áreas críticas e mapear a vulnerabilidade física do solo.

O mapeamento da vulnerabilidade física do solo, com base nos mapas de zonas críticas de qualidade física do solo obtidos por meio da integração dos atributos físico-hídricos, a saber: macroporosidade, densidade e condutividade hidráulica do solo, mostrou-se uma ferramenta de grande importância na avaliação da qualidade física e estrutural, possibilitando a identificação de áreas mais propensas à fragilidade física.

O uso da técnica de simulação sequencial gaussiana aplicada aos indicadores da qualidade física e estrutural do solo apresentados nesta tese, demonstrou-se eficiente em caracterizar a variabilidade espacial e mapear as áreas que possuem boa qualidade física e estrutural, bem como as áreas restritivas, que necessitam de intervenção no manejo para melhoria de suas condições. A aplicação da simulação geoestatística para caracterizar a variabilidade, considerando as incertezas espaciais das variáveis em estudo, constitui uma ferramenta poderosa para tomada de decisão na escala da bacia hidrográfica. Essa abordagem pode auxiliar no manejo adequado do solo, promovendo a utilização sustentável dos recursos naturais e contribuindo para a preservação ambiental.

REFERÊNCIAS

- ALENCAR, T. L. et al. Atributos físicos de um Cambissolo cultivado e tratado com biofertilizante na Chapada do Apodi, Ceará. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, v. 39, n. 3, p. 737-749, 2015.
- ALLETTO, L.; COQUET, Y.; ROGER-ESTRADE, J. Two-dimensional spatial variation of soil physical properties in two tillage systems. **Soil Use and Management**, v. 26, n. 4, p. 432–444, 2010.
- ALSAMAMRA, H.; RUIZ-ARIAS, J. A.; POZO-VÁZQUEZ, D.; JOAQUIN, T. P. A comparative study of ordinary and residual kriging techniques for mapping global solar radiation over southern Spain. **Agricultural and Forest Meteorology**, v. 149, p. 1343–1357, 2009.
- ALVARES, C. A.; STAPE, J. L.; SENTELHAS, P. C.; GONÇALVES, J. L. M.; SPAROVEK, G. Koppen's climate classification map for Brazil. **Meteorologische Zeitschrift**, v. 22, n. 6, p. 711-728, 2013.
- ANDRADE, R. S.; STONE, L. F. O índice S como indicador da qualidade física de solos do Cerrado brasileiro. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, v. 13, p. 382–388, 2009.
- ANDRIOTTI, J. L. S. **Fundamentos de Estatística e Geoestatística**. Porto Alegre: Editora Unisinos, 2003.
- AQUINO, R. E. et al. Use of scaled semivariograms in the planning sample of soil physical properties in Southern Amazonas, Brazil. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, v. 39, n. 1, p. 21-30, 2015.
- AR2GEMS. Ar2tech products ar2gems: A modern geostatistical platform. Disponível em: <http://www.ar2tech.com>.

ARMINDO, R. A.; WENDROTH, O. Physical soil structure evaluation based on hydraulic energy functions. **Soil Science Society of America Journal**, v. 80, n. 5, p. 1167–1180, 2016.

ASCHONITIS, V. G.; KOSTOPOULOU, S. K.; ANTONOPOULOS, V. Z. Methodology to assess the effects of rice cultivation under flooded conditions on van Genuchten's model parameters and pore size distribution. **Transport in Porous Media**, v. 91, p. 861–876, 2012.

ASSIS JÚNIOR, R. N. et al. Pore network of an Inceptisol under different uses and relativized S index as an indicator of soil physical quality. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, Brasília, v. 51, n. 9, p. 1575–1583, 2016.

AVILA, P. et al. Friabilidade y su relación con algunas propiedades físicas y químicas de suelos cultivados con caña de azúcar. **Revista de Ciencias Agrícolas**, v. 34, p. 19–32, 2017.

BAIAMONTE, G. et al. Factors influencing point measurement of near-surface saturated soil hydraulic conductivity in a small Sicilian basin. **Land Degradation & Development**, v. 28, n. 3, p. 970–982, 2017.

BALBINOT JUNIOR, A. A. et al. Crop-livestock system: intensified use of agricultural lands. **Ciência Rural**, v. 39, n. 6, p. 1925-1933, 2009.

BALL, B. C.; WATSON, C. A.; BADDELEY, J. A. Soil physical fertility, soil structure and rooting conditions after ploughing organically managed grass/clover swards. **Soil Use and Management**, v. 23, n. 1, p. 20–27, 2007.

BAVER, L. D. Practical values from physical analyses of soils. **Soil Science**, v. 68, p. 1–14, 1949.

BERETTA, F. S.; COSTA, J. F. C. L.; KOPPE, J. C. Redução da variabilidade da qualidade do carvão com otimização do tamanho de pilhas de homogeneização. Rem: **Revista Escola de Minas**, v. 64, p. 85-90, 2011.

BERTOL, I. et al. Propriedades físicas do solo sob preparo convencional e semeadura direta em rotação e sucessão de culturas, comparadas às do campo nativo. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, v. 28, n. 1, p. 155-163, 2004.

BESKOW, S. et al. Potential of the LASH model for water resources management in data-scarce basins: A case study of the Fragata River basin, southern Brazil. **Hydrological Sciences Journal**, v. 61, p. 2567–2578, 2016.

BEUTLER, A. N. et al. Densidade do solo relativa e parâmetro “S” como indicadores da qualidade física para culturas anuais. **Revista de Biologia e Ciências da Terra**, v. 8, p. 27–36, 2008.

BONELL, M. et al. The impact of forest use and reforestation on soil hydraulic conductivity in the Western Ghats of India: Implications for surface and sub-surface hydrology. **Journal of Hydrology**, v. 391, n. 1-2, p. 47–62, 2010.

BÜNEMANN, E. K. et al. Soil quality – A critical review. **Soil Biology and Biochemistry**, v. 120, p. 105–125, 2018.

BURROUGH, P. A.; MCDONNELL, R. A.; LLOYD, C. D. **Principles of Geographical Information Systems**. Oxford: Oxford University Press, 2015.

CASTIONI, G. A. F. et al. Variability of physical attributes in tropical weathered soil cultivated with irrigated beans (*Phaseolus vulgaris* L.). **Australian Journal of Crop Science**, v. 13, n. 5, p. 656-661, 2019.

CASTRIGNANÒ, A.; BUTTAFUOCO, G. Geostatistical stochastic simulation of soil water content in a forested area of South Italy. **Biosystems Engineering**, v. 87, n. 2, p. 257-266, 2004.

- CAVALIERI, K. M. V. et al. Long-term effects of no-tillage on dynamic soil physical properties in a Rhodic Ferrasol in Paraná, Brazil. **Soil & Tillage Research**, v. 103, p. 158-164, 2009.
- CAVIGLIONE, J. H. S-Index as an indicator of physical quality in soils of the Paraná state. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, v. 22, n. 7, p. 458-464, 2018.
- CENTENO, L. N. et al. Identifying regionalized co-variate driving factors to assess spatial distributions of saturated soil hydraulic conductivity using multivariate and state-space analyses. **Catena**, v. 191, p. 104583, 2020.
- CHERUBIN, M.R.; KARLEN, D.L.; FRANCO, A.L.C.; TORMENA, C.A.; CERRI, C.E.P.; DAVIES, C.A.; CERRI, C.C. Soil physical quality response to sugarcane expansion in Brazil. **Geoderma**, Amsterdam, v. 267, p. 156- 168, 2016.
- CHIBA, M. K.; GUEDES FILHO, O.; VIEIRA, S. R. Variabilidade espacial e temporal de plantas daninhas em Latossolo Vermelho argiloso sob semeadura direta. **Acta Scientiarum Agronomy**, v. 32, n. 4, p. 735-742, 2010.
- CORNELISSEN, T.; DIEKKRÜGER, B.; BOGENA, H. R. Significance of scale and lower boundary condition in the 3D simulation of hydrological processes and soil moisture variability in a forested headwater catchment. **Journal of Hydrology**, v. 516, p. 140-153, 2014.
- CUNHA, N. G.; SILVEIRA, R. J. C.; SEVERO, C. R. C. **Solos e terras do planalto Sul-Rio-Grandense e planícies costeiras**. Pelotas: Embrapa Clima Temperado, 2006.
- DALMAGO, G. A. et al. Retenção e disponibilidade de água às plantas, em solo sob plantio direto e preparo convencional. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, v. 13, p. 855-864, 2009.

DALY, E. J. et al. The response of soil physical quality parameters to a perennial grain crop. **Agricultural Ecosystems & Environment**, v. 343, p. 108265, 2023.

DELBARI, M.; AFRASIAB, P.; LOISKANDL, W. Using sequential Gaussian simulation to assess the field-scale spatial uncertainty of soil water content. **Catena**, v. 79, p. 163-169, 2009.

DEMARCHI, J. C.; ZIMBACK, C. R. L. Mapeamento, erodibilidade e tolerância de perda de solo na sub-bacia do ribeirão das perobas. **Energia na Agricultura**, v. 29, p. 102-114, 2014.

DEMIR, Y. et al. Determination of soil quality index in areas with high erosion risk and usability in watershed rehabilitation applications. **Environmental Monitoring & Assessment**, v. 195, p. 572, 2023.

DEUTSCH, C. V.; JOURNEL, A. G. **GSLIB: Geostatistical Software Library and User's Guide**. 2. ed. New York: Oxford University Press, 1998.

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, 2004a.

DEXTER, A. R. Soil physical quality: Part II. Friability, tillage, tilth and hard-setting. **Geoderma**, v. 120, p. 215-225, 2004b.

DEXTER, A. R. Soil physical quality: Part III. Unsaturated hydraulic conductivity and general conclusions about S-theory. **Geoderma**, v. 120, p. 227-239, 2004c.

DEXTER, A. R.; CZYŻ, E. A. Applications of S-theory in the study of soil physical degradation and its consequences. **Land Degradation & Development**, v. 18, p. 369-381, 2007.

DEXTER, A. R.; BIRD, N. R. A. Methods for predicting the optimum and the range of soil water contents for tillage based on the water retention curve. **Soil & Tillage Research**, v. 57, p. 203-212, 2001.

DIPPENAAR, M. A. Porosity reviewed: quantitative multidisciplinary understanding, recent advances and applications in vadose zone hydrology. **Geotechnical and Geological Engineering**, v. 32, p. 1-19, 2014.

DORAN, J. W.; PARKIN, T. B. Defining and assessing soil quality. In: DORAN, J. W. et al. **Defining soil quality for a sustainable environment**. Madison: SSSA, p. 1-20, 1994.

DOS SANTOS, R. V. et al. Spatial uncertainty analysis of the saturated soil hydraulic conductivity in a subtropical watershed. **Environmental Earth Sciences**, v. 80, p. 707, 2021.

DREWRY, J. J.; PATON, R. J. Soil physical quality under cattle grazing of a winter-fed brassica crop. **Australian Journal of Soil Research**, v. 43, n. 4, p. 525, 2005.

DRUMOND, D. A. et al. A chart for judging optimal sample spacing for ore grade estimation: Part II. **Natural Resources Research**, v. 29, p. 551-560, 2020.

EMADI, M.; SHAHRIARI, A.; SADEGH-ZADEH, F.; JALILI, B.; DINDARLOU, A. Geostatistics-based spatial distribution of soil moisture and temperature regime classes in Mazandaran province, Northern Iran. **Archives of Agronomy and Soil Science**, v. 62, p. 1–20, 2015.

FILGUEIRAS, R.; OLIVEIRA, V. M. R.; CUNHA, F. F.; MANTOVANI, E. C.; SOUZA, E. J. **Modelos de curva de retenção de água no solo**. Irriga, Edição Especial, IRRIGA & INOVAGRI, p. 115–120, 2016.

FREITAS, P. S. L.; MANTOVANI, E. C.; SEDIYAMA, G. C.; COSTA, L. C. Efeito da cobertura de resíduo da cultura do milho na evaporação da água do solo. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, v. 1, p. 85–91, 2004.

GEE, G. W.; BAUDER, J. W. Particle-size analysis. In: KLUTE, A. (Ed.), *Methods of Soil Analysis*, 9, Parte 1, **Agronomy Monograph (2 eds.)**. ASA-SSSA, Madison, p. 383–411, 1986.

GODOY, V. A.; ZUQUETTE, L. V.; GÓMEZ-HERNÁNDEZ, J. J. Spatial variability of hydraulic conductivity and solute transport parameters and their spatial correlations to soil properties. **Geoderma**, v. 339, p. 59–69, 2019.

GOOVAERTS, P. Geostatistical modelling of uncertainty in soil science. **Geoderma**, v. 103, p. 3–26, 2001.

GOOVAERTS, P. **Geostatistics for natural resources evaluation**. Oxford: Oxford University Press, 1997. 483 p.

GOOVAERTS, P. Geostatistics in soil science: state-of-the-art and perspectives. **Geoderma**, v. 89, p. 1–45, 1999.

GRABLE, A. R.; SIEMER, E. G. Effects of bulk density, aggregate size, and soil water suction on oxygen diffusion, redox potential and elongation of corn roots. **Soil Science Society of America Journal**, v. 32, p. 180–186, 1968.

GRUPELLI, J. L.; ARAÚJO, N.; CHAPA, S. R. Interrelação entre precipitação e parâmetros meteorológicos para Pelotas-RS. In: **XII Congresso de Iniciação Científica e V Encontro de Pós-Graduação**, Pelotas, 2003.

GUIMARÃES, R. M. L.; NEVES JUNIOR, A. F.; SILVA, W. G.; ROGERS, C. D.; BALL, B. C.; MONTES, C. R.; PEREIRA, B. F. F. The merits of the Visual Evaluation of Soil Structure method (VESS) for assessing soil physical quality in

the remote, undeveloped regions of the Amazon basin. **Soil and Tillage Research**, v. 173, p. 75–82, 2017.

HE, Y.; HU, K. L.; CHEN, D. L.; SUTER, H. C.; LI, Y.; LI, B. G.; YUAN, X. Y.; HUANG, Y. F. Three-dimensional spatial distribution modeling of soil texture under agricultural systems using a sequence indicator simulation algorithm. **Computers and Electronics in Agriculture**, v. 71, p. 524–531, 2010.

HEBB, C.; SHODERBEK, D.; HERNANDEZ-RAMIREZ, G.; HEWINS, D. Soil physical quality varies among contrasting land uses in northern prairie regions. **Agriculture, Ecosystems & Environment**, v. 240, p. 14–23, 2017.

HEUVELINK, G. Uncertainty quantification of Global Soil Map products. In: **Global Soil Map: Basis of the Global Spatial Soil Information System - Proceedings of the 1st Global Soil Map Conference**, p. 335–340, 2014.

HONDA, M.; OHNO, S.; IIZUKA, A.; KAWAI, K.; OHTA, H. Theoretical evaluation of the mechanical behavior of unsaturated soils. **Geotechnical and Geological Engineering**, v. 29, p. 171–180, 2011.

HU, K.; WHITE, R.; CHEN, D.; BAOGUO, L.; LI, W. Stochastic simulation of water drainage at the field scale and its application to irrigation management. **Agricultural Water Management**, v. 89, p. 123–130, 2007.

HU, W.; SHAO, M.; WANG, Q.; FAN, J.; HORTON, R. Temporal changes of soil hydraulic properties under different land uses. **Geoderma**, v. 149, n. 3–4, p. 355–366, 2009.

HUANG, M.; ZETTL, J. D.; LEE BARBOUR, S.; PRATT, D. Characterizing the spatial variability of the hydraulic conductivity of reclamation soils using air permeability. **Geoderma**, v. 262, p. 285–293, 2016.

HUIJBREGTS, C. J. Regionalized variables and quantitative analysis of spatial data. In: DAVIS, J. C.; MCCULLAGH, M. J. (Eds.). **Display and analysis of spatial data**. New York: Wiley, p. 38–53, 1975.

ISAAKS, E. H.; SRIVASTAVA, R. M. **An introduction to applied geostatistics**. New York: Oxford University Press, 1989.

JARDINI, D. C.; AMORIM, R. S. S. Uso do índice-S na avaliação da qualidade físico-hídrica de solos do cerrado mato-grossense. **Revista Engenharia Agrícola na Agricultura**, v. 25, n. 2, p. 107–115, 2017.

JONG VAN LIER, Q. Revisiting the S-index for soil physical quality and its use in Brazil. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, v. 38, n. 1, p. 1–10, 2014.

JONG VAN LIER, Q. **Física do solo - baseada em processos**. Piracicaba, 2020. 413 p.

JOURNEL, A. G. Non-parametric estimation of spatial distributions. **Mathematical Geology**, v. 15, p. 445–468, 1983.

JOURNEL, A. G.; HUIJBREGTS, C. H. J. **Mining geostatistics**. New York: Academic Press Inc., 1978.

JUANG, K. W.; CHEN, Y. S.; LEE, D. Y. Using sequential indicator simulation to assess the uncertainty of delineating heavy-metal contaminated soils. **Environmental Pollution**, v. 127, n. 2, p. 229–238, 2004.

JULIETA, M. R.; JUAN, P.; GERARDO, A. S.; OSVALDO, E. A. A.; MARÍA, C. S. Soil quality indicators selection by mixed models and multivariate techniques in deforested areas for agricultural use in NW of Chaco, Argentina. **Soil and Tillage Research**, v. 53, p. 71–85, 2016.

KAVAKLIGIL, S. S.; ERŞAHİN, S. Spatial variability of some soil physical properties on semi-arid cultivated hillslopes in hydropedological perspective. **Eurasian Soil Science**, v. 56, p. 715–726, 2023.

KIANI, M.; HERNANDEZ-RAMIREZ, G.; QUIDEAU, S.; SMITH, E.; JANZEN, H.; LARNEY, F. J.; PUURVEEN, D. Quantifying sensitive soil quality indicators across contrasting long-term land management systems: Crop rotations and nutrient regimes. **Agriculture, Ecosystems and Environment**, v. 248, p. 123–135, 2017.

KLUTE, A.; DIRKSEN, C. Hydraulic conductivity and diffusivity: laboratory methods. In: KLUTE, A. (Ed.), **Methods of Soil Analysis**. Agronomy Monograph, ASA-SSSA, Madison, p. 687–734, 1986.

KUTNER, M. H.; NACHTSHEIM, C. J.; NETER, J.; LI, W. **Applied linear statistical models**. New York: McGraw-Hill, 2005.

LANDIM, P. M. B. **Análise estatística de dados geológicos**. 2. ed. rev. ampl. São Paulo: Editora Unesp, 2003. 253 p.

LAUDONE, G. M.; MATTHEWS, G. P.; GREGORY, A. S.; BIRD, N. R. A.; WHALLEY, W. R. A dual-porous, inverse model of water retention to study biological and hydrological interactions in soil. **European Journal of Soil Science**, v. 64, p. 345 – 356, 2013.

LEE, K. E.; FOSTER, R. C. Soil fauna and soil structure. **Soil Research**, v. 29, n. 6, p. 745-774, 1991.

LIMA, H.V.; SILVA, A.P.; GIAROLA, N.F.B.; IMHOFF, S. Index of soil physical quality of hardsetting soils on the Brazilian coast. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, v. 38, p. 1722 – 1730, 2014.

LINH, T. B. et al. Temporal variation of hydro-physical properties of paddy clay soil under different rice-based cropping systems. **Land Degradation & Development**, v. 28, n. 5, p. 1752-1762, 2017.

MAINURI, Z. G.; OWINO, J. O. Effects of land use and management on aggregate stability and hydraulic conductivity of soils within River Njoro watershed in Kenya. **International Soil and Water Conservation Research**, v. 1, n. 2, p. 80-87, 2013.

MARQUES, D. M.; COSTA, J. F. C. L. Choosing a proper sampling interval for the ore feeding a processing plant: A geostatistical solution. **International Journal of Mineral Processing**, v. 131, p. 31-42, 2014.

MATHERON, G. Principles of geostatistics. **Economic Geology**, v. 58, n. 8, p. 1246-1266, 1963.

MATHERON, G. **Traité de géostatistique appliquée**. Paris: Technip, 1962. Vol. 14.

MCKENZIE, B. M.; TISDALL, J. M.; VANCE, W. H. **Soil physical quality. Encyclopedia of Earth Sciences Series**, Murdoch, Austrália, p. 770-777, 2014.

MCKENZIE, B. M.; TISDALL, J. M.; VANCE, W. Soil physical quality. In: Gliński, J.; Horabik, J.; Lipiec, J. (eds.). **Encyclopedia of Agrophysics**. Dordrecht: Springer, 2011. p. 770-777.

MOEBIUS-CLUNE, B. N. et al. Long-term soil quality degradation along a cultivation chronosequence in western Kenya. **Agriculture, Ecosystems & Environment**, v. 141, p. 86-99, 2011.

MONCADA, M. P. et al. Evaluation of soil physical quality index S for some tropical and temperate medium-textured soils. **Soil Science Society of America Journal**, v. 79, n. 1, p. 9-19, 2015.

MONTANARI, R. et al. Variabilidade espacial da produtividade de sorgo e de atributos do solo na Região do Ecótono Cerrado-Pantanal, MS. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, v. 39, n. 2, p. 385-396, 2015.

MORATELLI, F. A. et al. Effects of land use on soil physical-hydric attributes in two watersheds in the Southern Amazon, Brazil. **Soil Systems**, v. 7, p. 103, 2023.

MOREIRA, W. H. et al. Influence of the grazing height of ryegrass and oat on the physical properties of an Oxisol after seven years of crop-livestock system. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, v. 38, n. 4, p. 1315-1326, 2014.

MOTA, P. K. et al. Soil physical quality in response to intensification of grain production systems. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, v. 24, n. 10, p. 647-655, 2020.

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

NADERI-BOLDAJI, M.; KELLER, T. Degree of soil compactness is highly correlated with the soil physical quality index S. **Soil & Tillage Research**, v. 159, p. 41-46, 2016.

NARCISO, J. et al. A geostatistical simulation of a mineral deposit using uncertain experimental data. **Minerals**, v. 9, p. 247-260, 2019.

NARJARY, B.; AGGARWAL, P. Evaluation of soil physical quality under amendments and hydrogel applications in a soybean-wheat cropping system. **Communications in Soil Science and Plant Analysis**, v. 45, p. 1167-1180, 2014.

NUNES, R.; ALMEIDA, J. A. Parallelization of sequential Gaussian, indicator and direct simulation algorithms. **Computers & Geosciences**, v. 36, p. 1042-1052, 2010.

OBOUR, P. B. et al. Compaction and sowing date change soil physical properties and crop yield in a loamy temperate soil. **Soil & Tillage Research**, v. 184, p. 153-163, 2018.

OLIVEIRA, C. A. S. et al. Use of heterotopic secondary data in geostatistics using covariance tables. **Applied Earth Science**, v. 129, n. 1, p. 15-26, 2019.

OLIVEIRA, I. R. et al. Modelagem e quantificação da incerteza espacial do potássio disponível no solo por simulações estocásticas. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, v. 49, n. 9, p. 708-718, 2014a.

OLIVEIRA, I. N. et al. Tillage systems impact on soil physical attributes, sugarcane yield and root system propagated by pre-sprouted seedlings. **Soil & Tillage Research**, v. 223, p. 105460, 2022.

OLIVEIRA, P. D. et al. S-index and soybean root growth in different soil textural classes. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, v. 20, n. 4, p. 329-336, 2016.

OLIVEIRA, T. C.; SILVA, L. F. S. D.; COOPER, M. Evaluation of physical quality indices of a soil under a seasonal semideciduous forest. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, v. 38, p. 444-453, 2014b.

OLIVER, M. A.; WEBSTER, R. A tutorial guide to geostatistics: Computing and modelling variograms and kriging. **Catena**, v. 113, p. 56 – 69, 2014.

ORTIGARA, C.; KOPPE, E.; LUZ, F. B. DA; BERTOLLO, A. M.; KAISER, D. R.; SILVA, V. R. DA. Soil use and physical-mechanical properties of a Red Oxisol. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, v. 38, n. 2, p. 619-626, 2014.

PAPANICOLAOU, A. N.; ELHAKEEM, M.; WILSON, C. G.; LEE BURRAS, C.; WEST, L. T.; LIN, H.; CLARK, B.; ONEAL, B. E. Spatial variability of saturated hydraulic conductivity at the hillslope scale: Understanding the role of land management and erosional effect. **Geoderma**, v. 243-244, p. 58-68, 2015.

PICCIAFUOCO, T.; MORBIDELLI, R.; FLAMMINI, A.; SALTALIPPI, C.; CORRADINI, C.; STRAUSS, P.; BLÖSCHL, G. On the estimation of spatially representative plot scale saturated hydraulic conductivity in an agricultural setting. **Journal of Hydrology**, 2019.

PINTO, L. C.; MELLO, C. R.; NORTON, L. D.; POGGERE, G. C.; OWENS, P. R.; CURI, N. A hydropedological approach to a mountainous Clayey Humic Dystrudept in the Mantiqueira Range, Southeastern Brazil. **Scientia Agricola**, v. 75, n. 1, p. 60-69, 2018.

POGGIO, L.; GIMONA, A.; BROWN, I.; CASTELLAZZI, M. Soil available water capacity interpolation and spatial uncertainty modelling at multiple geographical extents. **Geoderma**, v. 169, p. 175-188, 2010.

PULIDO-MONCADA, M.; GABRIELS, D.; CORNELIS, W. M. Data-driven analysis of soil quality indicators using limited data. **Geoderma**, v. 235-236, p. 271-278, 2014.

QU, M.; LI, W.; ZHANG, C. Assessing the spatial uncertainty in soil nitrogen mapping through stochastic simulations with categorical land use information. **Ecological Informatics**, v. 16, p. 1-9, 2013.

QU, M.; LI, W.; ZHANG, C. Spatial distribution and uncertainty assessment of potential ecological risks of heavy metals in soil using sequential Gaussian simulation. **Human and Ecological Risk Assessment**, v. 20, n. 3, p. 764-778, 2014.

R CORE DEVELOPMENT TEAM. R: **A language and environment for statistical computing**. Vienna: R Foundation for Statistical Computing, 2008.

RABBI, S. M. F.; ROY, B. R.; MIAH, M. M.; AMIN, M. S.; KHANDAKAR, T. Spatial variability of physical soil quality index of an agricultural field. **Applied and Environmental Soil Science**, 2014, 1-10.

RAZALI, N. M.; WAH, Y. B. Power comparisons of Shapiro-Wilk, Kolmogorov-Smirnov, Lilliefors and Anderson-Darling tests. **Journal of Statistical and Analytical**, v. 2, n. 1, p. 21-33, 2011.

REICHARDT, K.; TIMM, L. C. **Soil, Plant and Atmosphere: Concepts, Processes and Applications**. Switzerland: Springer Nature, 2020.

REICHERT, J. M.; REINERT, D. J.; BRAIDA, J. A. Qualidade dos solos e sustentabilidade de sistemas agrícolas. **Ciência & Ambiente**, v. 27, p. 29-48, 2003.

REINERT, D. J.; REICHERT, J. M.; SILVA, V. R. Propriedades físicas de solos em sistema de plantio direto irrigado. In: CARLESSO, R.; PETRY, M. T.; ROSA, G. M.; CERETTA, C. A. (ed.). **Irrigação por aspersão no Rio Grande do Sul**. Santa Maria: UFSM, 2001, p. 112-133.

REMY, N.; BOUCHER, A.; WU, J. **Applied geostatistics with SGeMS: A user's guide**. Cambridge: Cambridge University Press, 2009.

REYNOLDS, W. D.; DRURY, C. F.; TAN, C. S.; FOX, C. A.; YANG, X. M. Use of indicators and pore volume-function characteristics to quantify soil physical quality. **Geoderma**, v. 152, p. 252-263, 2009.

REYNOLDS, W. D.; DRURY, C. F.; YANG, X. M.; FOX, C. A.; TAN, C. S.; ZHANG, T. Q. Land management effects on the near-surface physical quality of a clay loam soil. **Soil and Tillage Research**, v. 96, p. 316-330, 2007.

REYNOLDS, W. D.; BOWMAN, B.; DRURY, C. F.; TAN, C. S.; LU, X. Indicators of good soil physical quality: density and storage parameters. **Geoderma**, v. 110, n. 1-2, p. 131-146, 2002.

RICKSON, R. J.; DEEKS, L. K.; CORSTANJE, R.; NEWELL-PRICE, P.; KIBBLEWHITE, M. G.; CHAMBERS, B.; BELLAMY, P.; HOLMAN, I.; JAMES, I. T.; JONES, R.; KECHAVARSI, C.; MOUAZEN, A. M.; RITZ, K.; WAINE, T. **Indicators of soil quality: Physical properties** (SP1611). Final report. Defra, UK, 2012.

ROJAS, J. M.; PRAUSE, J.; SANZANO, G. A.; ARCE, O. E. A.; SÁNCHEZ, M. C. Soil quality indicators selection by mixed models and multivariate techniques in deforested areas for agricultural use in NW of Chaco, Argentina. **Soil and Tillage Research**, v. 155, p. 250-262, 2016.

ROSSETTI, K. V.; CENTURION, J. F. S-index use as complementary parameter of physical quality in Oxisols. **Revista de Ciência Agroambiental**, v. 20, n. 2, p. 104-116, 2022.

ROSSETTI, K. V.; CENTURION, J. F. Use of S-index as a structural quality indicator for compacted Latosols cultivated with maize. **Revista Caatinga**, v. 31, n. 2, p. 455-465, 2018.

SACCO, D.; CREMON, C.; ZAVATTARO, L.; GRIGNANI, C. Seasonal variation of soil physical properties under different water managements in irrigated rice. **Soil Tillage Research**, v. 118, p. 22-31, 2012.

SALEMI, L. F. et al. Land-use change in the Atlantic rainforest region: Consequences for the hydrology of small catchments. **Journal of Hydrology**, v. 499, p. 100-109, ago. 2013.

SALEMI, L. F.; GROPPPO, J. D.; TREVISAN, R.; MORAES, J. M.; FERREZ, S. F.; VILLANI, J. P.; DUARTE-NETO, P. J.; MARTINELLI, L. A. Land-use change

in the Atlantic rainforest region: Consequences for the hydrology of small catchments. **Journal of Hydrology**, v. 499, p. 100-109, 2013.

SEKI, K. SWRC fit – a nonlinear fitting program with a water retention curve for soils having unimodal and bimodal pore structure. **Hydrology and Earth System Sciences Discussions**, v. 4, p. 407–437, 2007.

SHAHAB, H.; EMAMI, H.; HAGHNIA, G. H.; KARIMI, A. Pore size distribution as a soil physical quality index for agricultural and pasture soils in Northeastern Iran. **Pedosphere**, v. 23, p. 312–320, 2013.

SHAHANE, A. A.; SHIVAY, Y. S. Soil Health and Its Improvement Through Novel Agronomic and Innovative Approaches. **Frontiers in Agronomy**, v. 3, p. 31, 2021.

SHAPIRO, S. S.; WILK, M. B. An analysis of variance test for normality (complete samples). **Biometrika**, v. 52, n. 3-4, p. 591, 1965.

SILVA JÚNIOR, J. F.; MARQUES JÚNIOR, J.; CAMARGO, L. A.; TEIXEIRA, D. B.; PANOSSO, A. R.; PEREIRA, G. T. Simulação geoestatística na caracterização de óxidos de ferro em diferentes pedoformas. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, v. 36, p. 1690–1703, 2012.

SILVA, A. F.; PEREIRA, M. J.; ZIMBACK, C. R. L.; LANDIM, P. M. B.; SOARES, A. Simulação sequencial de atributos diagnósticos do solo. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, v. 19, n. 5, p. 418–425, 2015.

SILVA, A. P.; TOMENNA, C. A.; DIAS JÚNIOR, M. S.; IMHOFF, S.; KLEIN, V. A. Indicadores da qualidade física do solo. In: VAN LIER, J. Física do Solo. MG: **Sociedade Brasileira de Ciência do Solo**, p. 101–130, 2010.

SILVA, F. G.; ASSIS JÚNIOR, R. N.; TOMA, R. S.; OLIVEIRA, L. S.; MARQUES, E. S.; MOTA, J. C. A. Physical-hydraulic attributes as indicators of

functionality of soil pores under different compaction levels. **Caatinga**, v. 35, p. 884–893, 2022.

SIQUEIRA, T. M.; LOUZADA, J. A. S.; PEDROLLO, O. C.; CASTRO, N. M. R.; OLIVEIRA, M. H. C. Soil physical and hydraulic properties in the Donato stream basin, RS, Brazil. Part 2: Geostatistical simulation. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, v. 23, n. 9, p. 675–680, 2019.

SOARES, A. **Geoestatística para as ciências da terra e do ambiente**. 2. ed. Lisboa: IST Press, 2006. 206 p.

SOARES, M. F. **Variabilidade espacial dos atributos físico-hídricos e do carbono orgânico do solo de uma bacia hidrográfica de cabeceira em Canguçu – RS**. 2018. 103f. Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, 2018.

SOARES, M. F.; CENTENO, L. N.; TIMM, L. C.; MELLO, C. R.; KAISER, D. R.; BESKOW, S. Identifying covariates to assess the spatial variability of saturated soil hydraulic conductivity using robust cokriging at the watershed scale. **Journal of Soil Science and Plant Nutrition**, v. 20, p. 1491–1502, 2020.

SOARES, M. F.; TIMM, L. C.; SIQUEIRA, T. M.; SANTOS, R. C. V.; REICHARDT, K. Assessing the spatial variability of saturated soil hydraulic conductivity at the watershed scale using the sequential Gaussian co-simulation method. **Catena**, v. 221, n. 106756, 2023.

SOIL SURVEY STAFF. **Keys to Soil Taxonomy**. 13th ed. USDA Natural Resources Conservation Service, 2022.

SOUZA, J. C.; NUNES, N. N.; AMARAL, H. R. M.; COSTA, S. Unidades de paisagem e dinâmica temporal do uso e cobertura do solo na bacia hidrográfica do Rio das Pedras, Goiás, Brasil. **Revista Cerrados**, v. 19, p. 03–22, jan./jun. 2021.

SRIVASTAVA, R. M. Geostatistics: a toolkit for data analysis, spatial prediction and risk management in the coal industry. **International Journal of Coal Geology**, v. 112, p. 2–13, 2013.

STEFANOSKI, D. C.; SANTOS, G. G.; MARCHÃO, R. L.; PETTER, F. A.; PACHECO, L. P. Uso e manejo do solo e seus impactos sobre a qualidade física. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, v. 17, p. 1301–1309, 2013.

SUZUKI, L. E. A. S.; REINERT, D. J.; ALVES, M. C.; REICHERT, J. M. Critical limits for soybean and black bean root growth, based on macroporosity and penetrability, for soils with distinct texture and management systems. **Sustainability**, v. 14, p. 2958, 2022.

TAKAFUJI, E. H. M.; ROCHA, G. Z. R.; SILVA, L. A. U. **Simulação estocástica aplicada a um banco de dados sintético de cobre**. Geologia USP, Série Científica, v. 17, n. 2, p. 247-256, 2017.

TAVARES, K. S. R.; MENDES, S. O.; FERREIRA, N. J. B. Geografia Física e a abordagem geossistêmica aplicada a estudos de suscetibilidade ambiental de bacias hidrográficas. **Revista Brasileira de Geografia Física**, v. 15, p. 634-649, 2022.

TEFERI, E.; BEWKET, W.; SIMANE, B. Effects of land use and land cover on selected soil quality indicators in the head water area of the Blue Nile basin of Ethiopia. **Environmental Monitoring and Assessment**, v. 188, n. 83, p. 1-12, 2016.

TEIXEIRA, P. C.; DONAGEMMA, G. K.; FONTANA, A.; TEIXEIRA, W. G. **Manual de métodos de análise de solo**. 3. ed. rev. e ampl. Brasília, DF: Embrapa, 2017.

TELLES, T.; MELO, T.; RIGHETTO, A.; DIDONÉ, E.; BARBOSA, G. Soil management practices adopted by farmers and how they perceive conservation agriculture. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, v. 46, p. 0210151, 2022.

TIMM, L. C.; PIRES, L. F.; CENTENO, L. N.; BITENCOURT, D. G. B.; PARFITT, J. M. B.; CAMPOS, A. D. S. Assessment of land levelling effects on lowland soil quality indicators and water retention evaluated by multivariate and geostatistical analyses. **Land Degradation & Development**, v. 31, p. 959-974, 2020.

TOLEDO, D. M.; GALANTINI, J.; DALURZO, H.; VAZQUEZ, S.; BOLLERO, G. Methods for assessing the effects of land use changes on carbon stocks of subtropical Oxisols. **Soil Science Society of America Journal**, v. 77, p. 1542-1552, 2013.

TORMENA, C. A.; SILVA, A. P.; IMHOFF, S. C.; DEXTER, A. R. Quantification of the soil physical quality of a tropical Oxisol using the S index. **Scientia Agricola**, v. 65, p. 56-60, 2008.

VALANI, G. P.; MARTÍNI, A. F.; PEZZOPANE, J. R. M.; BERNARDI, A. C. C.; COOPER, M. Soil physical quality in the topsoil of integrated and non-integrated grazing systems in a Brazilian Ferralsol. **Soil and Tillage Research**, v. 200, p. 1-10, 2022.

VALANI, G. P.; VEZZANI, F. M.; CAVALIERI-POLIZELI, K. M. V. Soil quality: Evaluation of on-farm assessments in relation to analytical index. **Soil and Tillage Research**, v. 198, n. 1, p. 1-13, 2020.

VAN DER WERF, H.; PETIT, J. Evaluation of the environmental impact of agriculture at the farm level: A comparison and analysis of 12 indicator-based methods. **Agriculture, Ecosystems & Environment**, v. 93, p. 131-145, 2002.

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

VIZIOLI, B.; POLIZELI, K. M. V. C.; TORMENA, C. A.; BARTH, G. Effects of long-term tillage systems on soil physical quality and crop yield in a Brazilian Ferralsol. **Soil and Tillage Research**, Amsterdam, v. 209, p. 104935, 2021.

WALIA, M. K.; DICK, W. A. Selected soil physical properties and aggregate-associated carbon and nitrogen as influenced by gypsum, crop residue, and glucose. **Geoderma**, Amsterdam, v. 320, p. 67-73, 2018.

WALKLEY, A.; BLACK, I. A. An examination of the Degtjareff method for determining soil organic matter and a proposed modification of the chromic acid titration method. **Soil Science**, v. 37, p. 29-38, 1934.

WANG, M.; LIU, H.; LENNARTZ, B. Small-scale spatial variability of hydro-physical properties of natural and degraded peat soils. **Geoderma**, v. 399, p. 115123, 2021.

WANG, Z.; SHI, W. Robust variogram estimation combined with isometric log-ratio transformation for improved accuracy of soil particle-size fraction mapping. **Geoderma**, v. 324, p. 56-66, 2018.

WARRICK, A. W.; NIELSEN, D. R. Spatial variability of soil physical properties in the field. In: HILLEL, D. (ed.). *Applications of Soil Physics*. New York: Academic Press, 1980.

WEBSTER, R.; OLIVER, M. A. **Geostatistics for Environmental Scientists**. 2. ed. John Wiley & Sons Ltd, Chichester, 2007.

YAMAMOTO, J. K.; LANDIM, P. M. B. **Geoestatística: Conceitos e Aplicações**. São Paulo: Oficina de Textos, 2013. 215 p.

YANG, D.; BIAN, Z.; ZHANG, K.; XIONG, J.; LEI, S. Quantitative assessment of soil physical quality in Northern China based on S-theory. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, v. 39, n. 5, p. 1311-1321, 2015.

YAZICI, B.; YOLACAN, S. A comparison of various tests of normality. **Journal of Statistical Computation and Simulation**, v. 77, n. 2, p. 175-183, fev. 2007.

ZANCHIN, M.; MOURA, M. M.; NUNES, M. C. M.; TUCHTENHAGEN, I. K.; LIMA, C. L. R. de. Assessment of soil loss susceptibility in Santa Rita Watershed in Southern Brazil. **Engenharia Agrícola**, v. 41, n. 4, p. 485-495, 2021.

ZHAO, Y.; LEI, J.; TUMARBAY, H.; XUE, J. Using sequential Gaussian simulation to assess the uncertainty of the spatial distribution of soil salinity in arid regions of Northwest China. **Arid Land Research and Management**, v. 32, p. 20-37, 2017.

ZIMMERANN, B.; ELSENBEER, H.; DE MORAES, J. M. The influence of land-use changes on soil hydraulic properties: Implications for runoff generation. **Forest Ecology and Management**, v. 222, n. 1-3, p. 29-38, 2006.

ZONTA, J. H.; BRANDÃO, Z. N.; MEDEIROS, J. C.; SANA, R. S.; SOFIATTI, V. Variabilidade espacial da fertilidade do solo em área cultivada com algodoeiro no Cerrado do Brasil. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, v. 18, n. 6, p. 595-602, 2014.

ZORNOZA, R.; ACOSTA, J.; BATISTA, F.; DOMÍNGUEZ, S.; TOLEDO, D.; FAZ, A. Identification of sensitive indicators to assess the interrelationship between soil quality, management practices and human health. **Soil**, v. 1, n. 1, p. 173-185, 2015.