

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA INFILTRAÇÃO DA ÁGUA EM MEIOS POROSOS NÃO-SATURADOS HOMOGÊNEOS

Carlos Alexandre Bastos de Vasconcellos¹ e José Carlos Cesar Amorim¹

Resumo – A infiltração de água em meios porosos não-saturados é governada pela equação de Richards, que expressa o princípio da conservação de massa e a lei de Buckingham-Darcy e pode ser escrita em três formas básicas matematicamente equivalentes, “ ψ -based”, “ θ -based” e “mixed”, cujas aproximações numéricas podem levar a resultados significativamente diferentes. As técnicas utilizadas foram o método de diferenças finitas, o método iterativo de Picard e as médias aritmética, harmônica e geométrica na estimativa da condutividade hidráulica. Foram testadas condições de contorno de Dirichlet e Neumann, solos inicialmente muito secos com diferentes permeabilidades. O resultado obtido foi um modelo numérico, validado com uma solução semi-analítica, que satisfaz a conservação de massa, mantém a estabilidade numérica e fornece resultados acurados com o menor esforço computacional possível.

Abstract – Water infiltration into unsaturated porous media is governed by the Richards’ equation expressing the mass conservation law and the Buckingham-Darcy’s law and may be written in three standard forms mathematically equivalents, ψ -based form, θ -based form and mixed-form, whose numeric approaches can lead to significantly different results. The finite difference method, the Picard iterative method, and the arithmetic, harmonic and geometric averages in estimating of the hydraulic conductivity have been the techniques used. Dirichlet and Neumann boundary conditions, and soil initially very dry with different permeability have been tested. The obtained result was a numeric model, validated with a semi-analytical solution, that it satisfies the mass conservation, it maintains the numeric stability and it supplies accurate results with the smallest computational effort.

Palavras-chave. Meios porosos, Infiltração, Diferenças finitas.

¹ Instituto Militar de Engenharia – Departamento de Engenharia de Fortificação e Construção, Praça General Tibúrcio, 80, Praia Vermelha, CEP 22290-270, Rio de Janeiro, RJ. Tel / Fax (21)546-7020, e-mail: jcamorim@ime.eb.br

INTRODUÇÃO

A água da zona não-saturada da crosta terrestre permanece um enigma para o entendimento científico e gerenciamento tecnológico. Esta zona, também chamada zona vadosa, é uma região do subsolo limitada por cima pela superfície física da Terra e por baixo pelo nível d'água, onde ocorrem inúmeros fenômenos físicos tais como: infiltração, evaporação, recarga de aquíferos subterrâneos e outros. Predizer o movimento dos fluidos em meios porosos não-saturados é um problema com importância em muitos ramos da ciência e da engenharia. Esses incluem a mecânica dos solos, a mecânica dos fluidos, a engenharia agrícola, a engenharia ambiental, a engenharia civil e outras.

A equação geral de governo associada a este fenômeno origina-se de uma combinação da Lei de Darcy e do princípio da Conservação da Massa. O escoamento em meios porosos não-saturados envolve um fluxo bifásico de ar e água, entretanto considerou-se somente o fluxo da água, sendo que a fase-ar é contínua e está na pressão atmosférica e, portanto, não afeta a dinâmica da fase aquosa (Freeze, 1971). Além disso, considerou-se o meio poroso isotrópico e homogêneo; o escoamento unidimensional e não-permanente; a densidade da água somente função da pressão capilar; e desprezaram-se os efeitos térmicos e da salinidade. Com isso, o movimento do fluido passa a obedecer à clássica equação diferencial parcial não-linear, conhecida como equação de Richards ou equação de Fokker-Planck.

ANTECEDENTES

Simulações numéricas de escoamentos em meios porosos não-saturados têm uma significativa história nos campos da ciência dos solos e da hidrologia de águas subterrâneas. Revisões gerais e completas na literatura podem ser encontradas nos trabalhos de Nielsen et al. (1986) e Milly (1988).

A primeira experiência que possibilitou a quantificação da densidade de fluxo num meio poroso saturado foi desenvolvida por Darcy em 1856. Porém, em condições de não-saturação, os primeiros argumentos considerados por Buckingham (1907). Alguns anos mais tarde, Gardner e Widtsoe (1921) escreveram a equação de densidade de fluxo em solo não-saturado sendo denominada Lei de Buckingham-Darcy em reconhecimento a ambos.

Em 1928, Richards formulou as bases teóricas a fim de descrever a percolação da água em um meio poroso não-saturado, descrevendo o princípio de Buckingham. Em 1931, utilizando o princípio da Conservação da Massa, Richards apresentou a equação geral do movimento da água em um meio poroso não-saturado.

Em 1971, o primeiro modelo numérico que solucionava a equação de Richards foi proposto por Frezze. Neste trabalho, a equação do escoamento é resolvida pela técnica “Line Successive Overrelaxation (LSOR)”. No entanto, o modelo possuía instabilidades numéricas e dificuldades de convergência.

A partir daí, uma variedade de técnicas de solução utilizando o Método das Diferenças Finitas e o Método dos Elementos Finitos tem sido usada com as formas da equação de Richards conhecidas como “ ψ -based” e “ θ -based”, onde as variáveis dependentes são a carga devido à pressão da água nos meniscos capilares (ψ) e o conteúdo de umidade (θ), respectivamente. Os principais trabalhos foram: Neuman (1973), Narasimham e Witherspoon (1976), Haverkamp et al. (1977), Hayhoe (1978), Haverkamp e Vauclin (1979), Cooley (1983), Hornum e Messing (1983), Huyakorn et al. (1984 e 1986). Todos esses trabalhos apresentavam significantes erros no balanço de massa.

Posteriormente, Allen e Murphy (1986) e Celia e Pinder (1987) apresentaram a forma “mixed” da Equação de Richards para extrair algoritmos de solução numérica. Esta forma é matematicamente equivalente às formas básicas anteriores, mas apresentava resultados diferentes de cada uma delas. Os algoritmos usavam aproximações de colocação (Método dos Elementos Finitos) no espaço, sendo que Celia e Pinder (1987) ainda aplicaram uma versão com direção alternada. Allen e Murphy (1986) chamaram sua aproximação de Método Quasi-Newton enquanto Celia e Pinder (1987) referem-se ao método como Método de Picard Modificado. Ambos demonstraram excelente balanço de massa em suas soluções numéricas. Zarba (1988) usou ao método iterativo de Picard Modificado com aproximações com diferenças finitas e elementos finitos no espaço e demonstraram perfeito balanço de massa. Entretanto, Celia et al. (1990) concluíram que a formulação conservativa de massa não é suficiente para garantir boas soluções numéricas. Para problemas de infiltração em solos inicialmente muito secos, aproximações com elementos finitos produzem soluções oscilatórias mesmo enquanto conservam a massa.

Ross e Bristow (1990) usaram a Transformação de Kirchhoff para linearizar a equação de Richards. Entretanto, esta técnica aumentou os esforços computacionais, além de apresentarem bons resultados apenas para solos homogêneos. Srivastava e Yeh (1991) propuseram uma solução analítica simplificada aproximando as funções não-lineares presentes na equação de Richards como funções exponenciais. Zaidel e Russo (1992) apresentaram o esquema Ponderação Assintótica baseado no comportamento assintótico da função condutividade hidráulica não-saturada.

Soluções validadas destas equações são difíceis de serem obtidas devido à forte não-linearidade entre as funções presentes na mesma. Na falta de soluções analíticas, a acurácia dos diferentes métodos numéricos de solução pode ser avaliada baseada no erro de balanço de massa. Obviamente, isto é somente uma condição necessária que não é suficiente para assegurar a validade

da solução, e apenas será confirmado com base no erro de balanço de massa e na comparação das soluções obtidas por algoritmos diferentes.

Com este propósito, o presente trabalho apresentará um modelo numérico que permitirá simular e verificar a validade de uma solução comparando o erro de balanço de massa e os perfis de umidade correspondentes às diferentes soluções. O modelo será validado em relação à solução semi-analítica de Philip.

EQUAÇÃO DE GOVERNO

A Lei de Buckingham-Darcy é a equação que descreve a densidade de fluxo num meio poroso não-saturado. Esta equação, que na forma tensorial escreve-se como:

$$q_j = -K_{ij}(\psi) \frac{\partial h}{\partial x_j} \quad (1)$$

onde o vetor q_j é a densidade de fluxo [L/T], $\partial h / \partial x_i$ é o vetor gradiente do potencial hidráulico [L/L], o tensor de 2ª ordem $K_{ij}(\psi)$ ou $K_{ij}(\theta)$ é a condutividade hidráulica não-saturada [L/T], em função da carga devido à pressão da água nos meniscos capilares, ψ [L], ou em função do conteúdo de umidade, θ [L³/L³].

Em meios porosos os escoamentos são lentos ($10^{-8} < v < 10^{-5}$ m/s). Com isso, o termo do potencial cinético ($v^2/2g$) é negligenciado em presença das outras parcelas, logo o potencial hidráulico (h), reportado ao peso [L], torna-se a soma do potencial gravitacional (z) e do potencial piezométrico ($\psi = p/\rho g$), onde \bar{v} é a velocidade efetiva do fluido em movimento [L/T], p é a pressão hidrodinâmica [M/LT²], g é a aceleração da gravidade [L/T²] e ρ é a massa específica da água [M/L³].

Em escoamentos em meios porosos não-saturados, supondo-se que o líquido e o sólido são meios contínuos, a equação da Conservação da Massa para a fase aquosa do fluxo é dada por:

$$\nabla \cdot (S n_{ef} \rho \bar{v}) + \frac{\partial (S n_{ef} \rho)}{\partial t} = 0 \quad (2)$$

onde S é o grau de saturação e n_{ef} é a porosidade efetiva [L³/L³], que é definida como a razão entre o volume de vazios interconectados do solo (V_{vi}) e o volume total (V).

Mas, observando-se os conceitos de densidade de fluxo, também conhecida como velocidade de Darcy ou velocidade aparente e o conteúdo de umidade volumétrico; e sendo considerado a massa específica da água constante, pode-se escrever, na forma tensorial:

$$\frac{\partial q_j}{\partial x_j} + \frac{\partial \theta}{\partial t} = 0 \quad (3)$$

Agora, aplicando a Eq.(1) na Eq.(3), tem-se a equação geral de governo do escoamento de água em meio poroso anisotrópico:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[- K_{ij}(\psi) \frac{\partial}{\partial x_j} (\psi + z) \right] \quad (4)$$

Finalmente, admitindo-se um sistema de eixos cartesianos x,y,z (onde z é necessariamente a direção vertical orientada positivamente para cima) que coincidam com as direções principais do tensor da condutividade hidráulica, os elementos não pertencentes à diagonal principal serão nulos. Daí,

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx}(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{yy}(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left[K_{zz}(\psi) \left(\frac{\partial \psi}{\partial z} + 1 \right) \right] \quad (5)$$

Contudo, o fenômeno da infiltração mostra-se ser preferencialmente na direção vertical. Logo, despreza-se os efeitos do movimento no plano xy em relação ao movimento vertical em z, obtendo-se a equação de Richards unidimensional. Esta equação pode ser escrita de três formas básicas, onde a variável dependente será a carga devido à pressão da água nos meniscos capilares, $\psi(z,t)$ [L], ou será o conteúdo de umidade, $\theta(z,t)$ [L³/L³], e relações constitutivas entre ψ e θ permitem a conversão de uma forma na outra. São elas:

Forma “ ψ -based”:

$$C(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial z} \right] - \frac{\partial K(\psi)}{\partial z} \quad (6)$$

Forma “ θ -based”:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial z} \right] - \frac{\partial K(\theta)}{\partial z} \quad (7)$$

Forma “mixed”:

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

onde $C(\psi)=d\theta/dh$ é a função capacidade específica de umidade moisture capacity [1/L] e $D(\theta)=K(\theta)/C(\theta)$ é a difusividade hidráulica não-saturada [L^2/T].

Os termos do lado esquerdo das Eqs. (6), (7) e (8) descreve os efeitos da drenagem e preenchimento dos poros, assim afirmação em termos da variação temporal em relação ao conteúdo de umidade é mais apropriado do que em relação à pressão. Em outras palavras, o termo $(d\theta/dh)\partial h/\partial t$ é mais apropriado escrito na sua forma mais simples: $\partial\theta/\partial t$.

No lado direito das Eqs. (6), (7) e (8), nota-se que a derivada espacial da carga hidráulica é usada para descrever a difusão da água pelo meio poroso. A condutividade hidráulica como uma função da carga devido à pressão não é diretamente representativo do entendimento físico. São os poros preenchidos que facilitam a transmissão da água através do meio poroso. De fato, na modelagem do comportamento da água na zona não-saturada, é secundário o entendimento físico do escoamento, devido o conteúdo de umidade e a carga devido à pressão serem diretamente relacionados. Porém, formalmente, a condutividade hidráulica deveria ser expressa em termos do conteúdo de umidade, $K(\theta)$. Além disso, $K(\psi)$ tipicamente exhibe histerese, enquanto que em $K(\theta)$ é geralmente menos pronunciada (Nielsen et al., 1996).

Então, a expressão que melhor representa o fenômeno físico do escoamento em meios porosos não-saturados é a equação de Richards na forma “mixed” apresentada na Eq.(8).

Para a resolução das equações acima, considerou-se as seguintes condições iniciais e de contorno:

1º Tipo – Condição de Dirichlet (carga constante ψ ou θ):

$$\begin{cases} h(z,0) = h_{\text{initial}}, & 0 < z < L \\ h(0,t) = h_0, & t > 0 \\ h(L,t) = h_{\text{initial}}, & t > 0 \end{cases} \quad (9)$$

2º Tipo – Condição de Neumann (fluxo constante):

$$\begin{cases} h(z,0) = h_{\text{initial}}, & z \neq 0 \\ h(0,0) = h_0 \\ h(L,t) = h_{\text{initial}}, & t > 0 \\ q(0,t) = q_0, & t > 0 \end{cases} \quad (10)$$

SOLUÇÃO NUMÉRICA

Nesta seção são mostradas as aproximações numéricas para as três formas da equação de Richards. A discretização numérica dessas três equações diferenciais parciais pelo método de diferenças finitas (DF) centrado no espaço usando o esquema de Euler implícito atrasado no tempo leva ao sistema de equações tridiagonal não-linear que pode ser escrito forma matricial como

$$\begin{bmatrix} \beta_1^m & \gamma_1^m & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \alpha_2^m & \beta_2^m & \gamma_2^m & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_3^m & \beta_3^m & \gamma_3^m & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_4^m & \beta_4^m & \gamma_4^m & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \alpha_5^m & \beta_5^m & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \dots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \beta_{N-2}^m & \gamma_{N-2}^m & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \alpha_{N-1}^m & \beta_{N-1}^m & \gamma_{N-1}^m \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & \alpha_N^m & \beta_N^m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta_1^{m+1} \\ \delta_2^{m+1} \\ \delta_3^{m+1} \\ \delta_4^{m+1} \\ \delta_5^{m+1} \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \delta_{N-2}^{m+1} \\ \delta_{N-1}^{m+1} \\ \delta_N^{m+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R_1^m \\ R_2^m \\ R_3^m \\ R_4^m \\ R_5^m \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ R_{N-2}^m \\ R_{N-1}^m \\ R_N^m \end{bmatrix} \quad (11)$$

onde os coeficientes $\alpha_i^m, \beta_i^m, \gamma_i^m$, and R_i^m ($i = 1, 2, \dots, N$; onde N é o número de nós) são funções não-lineares das variáveis ψ or θ . As variáveis dependentes são os incrementos das variáveis ψ or θ passando do nível de iteração m para o nível de iteração $m+1$ e são escritas como

$$\delta_j^{m+1} = \psi_j^{m+1} - \psi_j^m \quad \text{ou} \quad \delta_j^{m+1} = \theta_j^{m+1} - \theta_j^m, \quad (j = i-1, i, i+1) \quad (12)$$

Entretanto o sobrescrito n refere-se ao tempo, onde $\Delta t = t^{n+1} - t^n$. Então, a Eq. (12) pode ser reescrita como

$$\delta_j^{n+1,m+1} = \psi_j^{n+1,m+1} - \psi_j^{n+1,m} \quad \text{ou} \quad \delta_j^{n+1,m+1} = \theta_j^{n+1,m+1} - \theta_j^{n+1,m}, \quad (j = i-1, i, i+1) \quad (13)$$

Os termos com sobrescrito são as aproximações das funções correspondentes. Assim, $K_{i\pm 1/2}^{n+1,m}$ indica a aproximação da condutividade hidráulica num ponto intermediário da malha, analogamente para as funções $C_i^{n+1,m}$ e $D_{i\pm 1/2}^{n+1,m}$. Além disso, o termo $R_i^{n+1,m}$ é definido como o resíduo associado com a iteração de Picard. Na convergência, o resíduo e a diferença na iteração, Eq.(13), aproximam-se de zero. Todavia, o sistema de equações algébricas não-lineares das Eqs.(11) é resolvido usando o método iterativo de Picard (técnica que pode ser substituída por Newton-Raphson) e o algoritmo de Thomas. Os algoritmos das três formas da equação de Richards são dados pelos coeficientes a seguir:

Aproximação “ ψ -based” (HFD)

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha_i^{n+1,m} = -\frac{K_{i-1/2}^{n+1,m}}{(\Delta z)^2}; \\ \beta_i^{n+1,m} = \frac{C_i^{n+1,m}}{\Delta t} + \frac{K_{i-1/2}^{n+1,m}}{(\Delta z)^2} + \frac{K_{i+1/2}^{n+1,m}}{(\Delta z)^2}; \\ \gamma_i^{n+1,m} = -\frac{K_{i+1/2}^{n+1,m}}{(\Delta z)^2}; \\ R_i^{n+1,m} = \frac{K_{i-1/2}^{n+1,m}}{(\Delta z)^2} (\psi_{i-1}^{n+1,m} - \psi_i^{n+1,m}) + \frac{K_{i+1/2}^{n+1,m}}{(\Delta z)^2} (\psi_{i+1}^{n+1,m} - \psi_i^{n+1,m}) - \\ \quad - \frac{K_{i+1/2}^{n+1,m} - K_{i-1/2}^{n+1,m}}{\Delta z} - C_i^{n+1,m} \frac{\psi_i^{n+1,m} - \psi_i^n}{\Delta t} \end{array} \right. \quad (14)$$

Aproximação “ θ -based” (TDF)

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha_i^{n+1,m} = -\frac{D_{i-1/2}^{n+1,m}}{(\Delta z)^2}; \\ \beta_i^{n+1,m} = \frac{1}{\Delta t} + \frac{D_{i-1/2}^{n+1,m}}{(\Delta z)^2} + \frac{D_{i+1/2}^{n+1,m}}{(\Delta z)^2}; \\ \gamma_i^{n+1,m} = -\frac{D_{i+1/2}^{n+1,m}}{(\Delta z)^2}; \\ R_i^{n+1,m} = \frac{D_{i-1/2}^{n+1,m}}{(\Delta z)^2} (\theta_{i-1}^{n+1,m} - \theta_i^{n+1,m}) + \frac{D_{i+1/2}^{n+1,m}}{(\Delta z)^2} (\theta_{i+1}^{n+1,m} - \theta_i^{n+1,m}) - \\ \quad - \frac{K_{i+1/2}^{n+1,m} - K_{i-1/2}^{n+1,m}}{\Delta z} - \frac{\theta_i^{n+1,m} - \theta_i^n}{\Delta t} \end{array} \right. \quad (15)$$

Aproximação “mixed” (MDF)

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha_i^{n+1,m} = \frac{K_{i-1/2}^{n+1,m}}{(\Delta z)^2}; \\ \beta_i^{n+1,m} = \frac{C_i^{n+1,m}}{\Delta t} + \frac{K_{i-1/2}^{n+1,m}}{(\Delta z)^2} + \frac{K_{i+1/2}^{n+1,m}}{(\Delta z)^2}; \\ \gamma_i^{n+1,m} = -\frac{K_{i+1/2}^{n+1,m}}{(\Delta z)^2}; \\ R_i^{n+1,m} = \frac{K_{i-1/2}^{n+1,m}}{(\Delta z)^2} (\psi_{i-1}^{n+1,m} - \psi_i^{n+1,m}) + \frac{K_{i+1/2}^{n+1,m}}{(\Delta z)^2} (\psi_{i+1}^{n+1,m} - \psi_i^{n+1,m}) - \\ \quad - \frac{K_{i+1/2}^{n+1,m} - K_{i-1/2}^{n+1,m}}{\Delta z} - \frac{\theta_i^{n+1,m} - \theta_i^n}{\Delta t} \end{array} \right. \quad (16)$$

Discretização das condições de contorno

No presente trabalho, as condições de contorno de Dirichlet e Neumann são permitidas. A primeira simula uma carga constante de água que pode ser um lago ou um rio, e a segunda simula uma chuva constante. Para cada tipo, a Eq. (11) é modificada no nó do topo e do fundo da amostra analisada. Na condição de 1º tipo, onde a carga devido à pressão é prescrita e constante, os coeficientes $\alpha_2^m, \alpha_n^m, \gamma_1^m, \gamma_{n-1}^m, R_1^m$ e R_n^m da matriz da Eq.(11) são igualados a zero, e β_1^m e β_n^m são igualados a unidade. Por outro lado, a condição de 2º tipo, onde o fluxo é prescrito e constante no nó do topo, é dado por:

$$q = -\left(K \frac{\partial h}{\partial z} + K \right) \quad \text{or} \quad q = -\left(D \frac{\partial \theta}{\partial z} + D \right) \quad (17)$$

Assim sendo, os coeficientes da Eq.(11) para o primeiro bloco são obtidos daqueles blocos internos genéricos como a seguir:

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha_1^m = 0; \\ \beta_1^m \text{ de } \beta_i^m, \text{ colocando } K_{i-1/2}^m = 0 \text{ ou } D_{i-1/2}^m = 0; \\ \gamma_1^m \text{ de } \gamma_i^m; \\ R_1^m \text{ de } R_i^m, \text{ colocando } \frac{K_{i-1/2}^m}{(\Delta z)^2} (h_0^m - h_1^m) + \frac{K_{i-1/2}^m}{\Delta z} = 0 \text{ ou } \frac{D_{i-1/2}^m}{(\Delta z)^2} (\theta_0^m - \theta_1^m) + \frac{D_{i-1/2}^m}{\Delta z} = 0. \end{array} \right. \quad (18)$$

Estimativa das funções não-lineares K e D

A aplicação do operador de diferenças finites provoca o problema de aproximar as funções K e D em pontos intermediários da malha espacial ($i \pm 1/2$). Para isso, deve-se determinar a ponderação necessária para a determinação dos valores da condutividade hidráulica $K_{i \pm 1/2}$ ou valores da difusividade não-saturada $D_{i \pm 1/2}$. No presente trabalho usou-se três médias diferentes propostas por Haverkamp and Vauclin (1979):

Média aritmética

$$K_{i \pm 1/2} = \frac{K_i + K_{i \pm 1}}{2} \quad \text{and} \quad D_{i \pm 1/2} = \frac{D_i + D_{i \pm 1}}{2} \quad (19)$$

Média harmônica

$$K_{i \pm 1/2} = \frac{2 \cdot K_i \cdot K_{i \pm 1}}{K_i + K_{i \pm 1}} \quad \text{and} \quad D_{i \pm 1/2} = \frac{2 \cdot D_i \cdot D_{i \pm 1}}{D_i + D_{i \pm 1}} \quad (20)$$

Média Geométrica

$$K_{i \pm 1/2} = \sqrt{K_i \cdot K_{i \pm 1}} \quad \text{and} \quad D_{i \pm 1/2} = \sqrt{D_i \cdot D_{i \pm 1}} \quad (21)$$

Avaliação do erro no balanço de massa

Uma forma de avaliar o simulador numérico é quantificando sua capacidade de conservar a massa no seu domínio de interesse. Segundo Celia et al. (1990), conservação global de massa

adquada é uma condição necessária, mas não suficiente para a aceitação de um modelo numérico. No seu artigo, eles propuseram uma medição da habilidade de um modelo numérico através da seguinte definição:

$$BM(\Delta t) \equiv \frac{\text{massa total adicional no domínio}}{\text{fluxo total dentro do domínio}} \quad (22)$$

onde a massa adicional é medida com respeito a massa inicial do sistema. Para aproximações com diferenças finites com condições de contorno de Dirichlet, isto é avaliada como:

$$BM(t^{n+1}) = \frac{\sum_{i=1}^N (\theta_i^{n+1} - \theta_i^0) (\Delta z)}{\sum_{j=1}^{n+1} \left\{ K_{1/2}^j \left[\frac{\psi_2^j - \psi_1^j}{\Delta z} + 1 \right] - K_{N-1/2}^j \left[\frac{\psi_N^j - \psi_{N-1}^j}{\Delta z} + 1 \right] \right\} (\Delta t)} \quad (23)$$

onde N são os nós $\{z_1, z_2, \dots, z_N\}$, e é assumido o espaçamento da malha Δz constante. O erro no balanço de massa é calculado por

$$EBM(\%) = 100,0 |1,0 - BM(\Delta t)| \quad (24)$$

Relações constitutivas experimentais

As relações constitutivas entre θ , ψ e K são dadas por funções experimentais que descrevem as propriedades do solo. Foram utilizados três tipos de relações constitutivas usuais da literatura para caracterizar os diferentes tipos de solo. O primeiro e o segundo tipo foram propostos por Haverkamp et al. (1977) para um solo arenoso “Sand” e para o solo argiloso siltoso de cor clara denominado “Yolo light clay”, enquanto o terceiro tipo foi proposto por van Genuchten (1980) para modelar o solo arenoso orgânico fino “Berino loamy fine sand” e o solo orgânico siltoso “Glendale clay loam”. Os valores numéricos dos parâmetros desses quatro tipos de solo são dados na Tabela 1 (Gottardi e Venutelli, 1993).

Tipo 1

$$K(\psi) = K_s \frac{A}{A + |\psi|^\phi}; \quad \theta(\psi) = \frac{\lambda(\theta_s - \theta_r)}{\lambda + |\psi|^\xi} + \theta_r \quad (25)$$

Tipo 2

$$K(\psi) = K_s \frac{A}{A + |\psi|^\phi}; \quad \theta(\psi) = \frac{\lambda(\theta_s - \theta_r)}{\lambda + (\ln|\psi|)^\xi} + \theta_r \quad (26)$$

Tipo 3

$$K(S_e) = K_s S_e^{1/2} \left[1 - (1 - S_e^{1/\mu})^\mu \right]^2; \quad \theta(S_e) = S_e (\theta_s - \theta_r) + \theta_r \quad (27)$$

onde

$$S_e(\psi) = \left[1 + (\varphi\psi)^\eta \right]^{-\mu}; \quad \mu = 1 - \eta^{-1} \quad (28)$$

onde $A, \phi, \lambda, \xi, \eta, \mu$ são parâmetros adimensionais, $\varphi [L^{-1}]$ é a função densidade dos tamanhos dos poros, $\theta_s [L^3/L^3]$ é o conteúdo de umidade saturado, $\theta_r [L^3/L^3]$ é o conteúdo de umidade residual e S_e é a saturação efetiva.

Tabela 1 – Valores dos parâmetros dos quatro tipos de solo.

Solo	Tipo	K_s (cm/h)	A	λ	ϕ	ξ	φ (cm ⁻¹)	η	θ_s	θ_r
Sand	1	33,98	1,18 10 ⁶	1,61 10 ⁶	4,47	3,96	-	-	0,287	0,075
Yolo	2	0,04	1,25 10 ²	7,39 10 ²	1,77	4,00	-	-	0,495	0,124
Berino	3	22,54	-	-	-	-	2,80 10 ⁻²	2,239	0,366	0,029
Glendale	3	0,55	-	-	-	-	1,04 10 ⁻²	1,395	0,469	0,106

SIMULAÇÕES E RESULTADOS

Simulações numéricas da infiltração em solos homogêneos são apresentados nos problemas a seguir. As simulações foram realizadas com base na teoria descrita previamente, onde todos os três modelos numéricos de aproximação foram usados.

Simulação 1

Esta simulação consiste na infiltração da água em um solo arenoso orgânico não-saturado inicialmente seco (“Berino loamy fine sand”, tipo 3 - Tabela 1) colocado em uma coluna com profundidade $L=60$ cm. A sua execução foi feita sob condições de contorno de Dirichlet, com um intervalo de malha espacial de $\Delta z = 1,0$ cm, e um passo de tempo inicial de $\Delta t = 1,0$ s durante um tempo total de 4000 s. O passo de tempo pode variar de 10^{-6} s a 10^2 s na busca da convergência. A média aritmética foi usada para estimar as funções K e D , pois é a que melhor mantém a equivalência na aproximação das derivadas espaciais no método numérico empregado. Os resultados desta simulação estão nas Figuras 1 e 2, onde serão mostrados os perfis de umidade e a análise do erro do balanço de massa para os métodos MDF, HDF e TDF. As condições iniciais e de contorno utilizadas foram:

$$\begin{cases} h(z,0) = -350 \text{ cm} \quad (\theta = 0,0485 \text{ cm}^3 / \text{cm}^3), & 0 < z < 60 \text{ cm} \\ h(0,t) = -10 \text{ cm} \quad (\theta = 0,3547 \text{ cm}^3 / \text{cm}^3), & t > 0 \\ h(60,t) = -350 \text{ cm}, & t > 0 \end{cases} \quad (29)$$

Simulação 2

Esta simulação consiste na infiltração da água em um solo orgânico silteoso não-saturado inicialmente seco (“Glendale clay loam”, tipo 3 - Tabela 1) colocado em uma coluna com profundidade $L=120$ cm. A sua execução foi feita sob condições de Neumann, com um intervalo de malha espacial de $\Delta z = 2,0$ cm, e um passo de tempo inicial de $\Delta t = 10$ s durante um tempo total de 41,67 h. Da mesma forma, o passo de tempo pode variar de 10^{-2} s a 10^3 s na busca da convergência e a média aritmética foi usada para estimar as funções K e D . Os resultados desta simulação estão nas Figuras 3 e 4, onde serão mostrados os perfis de umidade e a análise do erro do balanço de massa para os métodos MDF, HDF e TDF. As condições iniciais e de contorno utilizadas foram:

$$\begin{cases} h(z,0) = -600 \text{ cm}, & z \neq 0 \\ h(0,0) = -20 \text{ cm} \quad (\theta = 0.4579 \text{ cm}^3 / \text{cm}^3) \\ h(120,t) = -600 \text{ cm} \quad (\theta = 0.2781 \text{ cm}^3 / \text{cm}^3), & t > 0 \\ q(0,t) = 0.0001 \text{ cm/s}, & t > 0 \end{cases} \quad (30)$$

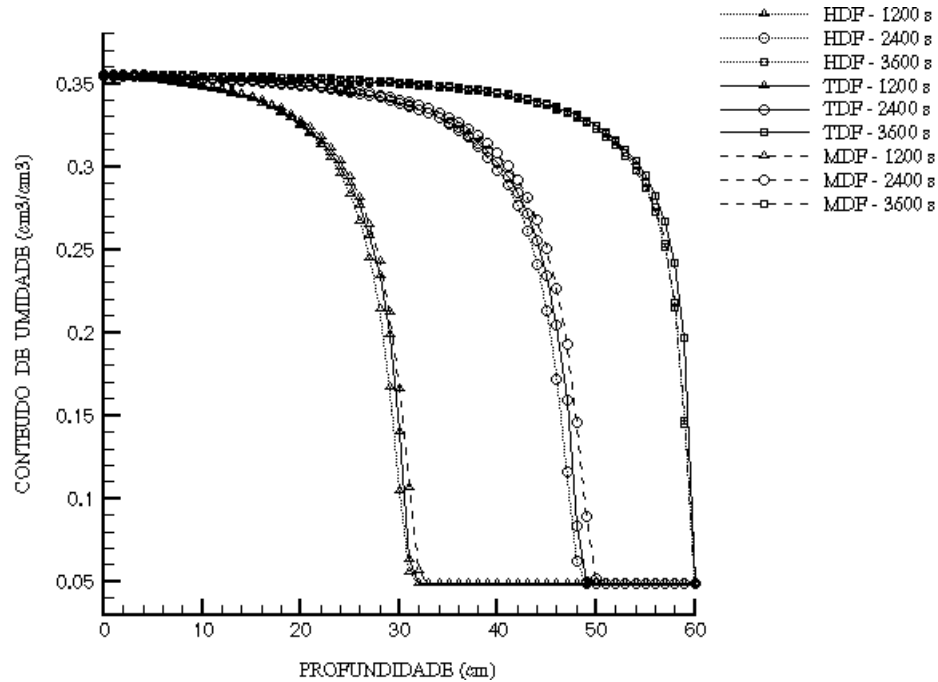


Figura 1 - Perfis de umidade versus profundidade, nos tempos: 1200, 2400 e 3600 segundos, para os métodos MDF, HDF e TDF.

Simulação 3

Esta simulação consiste na infiltração da água em um solo arenoso não-saturado inicialmente seco (“Sand”, tipo 1 – Tabela 1) colocado em uma coluna com profundidade $L=100$ cm. A sua execução foi feita sob condições de contorno de Dirichlet, com um intervalo de malha espacial de $\Delta z = 1,0$ cm, e um passo de tempo inicial de $\Delta t = 0,1$ s durante um tempo total de 1,0 h, sendo que o passo de tempo pode variar de 10^{-6} s a 10 s na busca da convergência. O método HDF foi testado com os três tipos de média diferentes na estimativa da função K , e foram comparados com a solução semi-analítica de Philip (Kaverkamp et al., 1977). Os resultados desta simulação estão na Figura 5, onde serão mostrados os perfis de umidade em três tempos distintos. As condições iniciais e de contorno utilizadas foram:

$$\begin{cases} h(z,0) = -61.50 \text{ cm} & (\theta = 0.100 \text{ cm}^3 / \text{cm}^3), & 0 < z < 100 \\ h(0,t) = -20.73 \text{ cm} & (\theta = 0.267 \text{ cm}^3 / \text{cm}^3), & t > 0 \\ h(100,t) = -61.50 \text{ cm}, & t > 0 \end{cases} \quad (31)$$

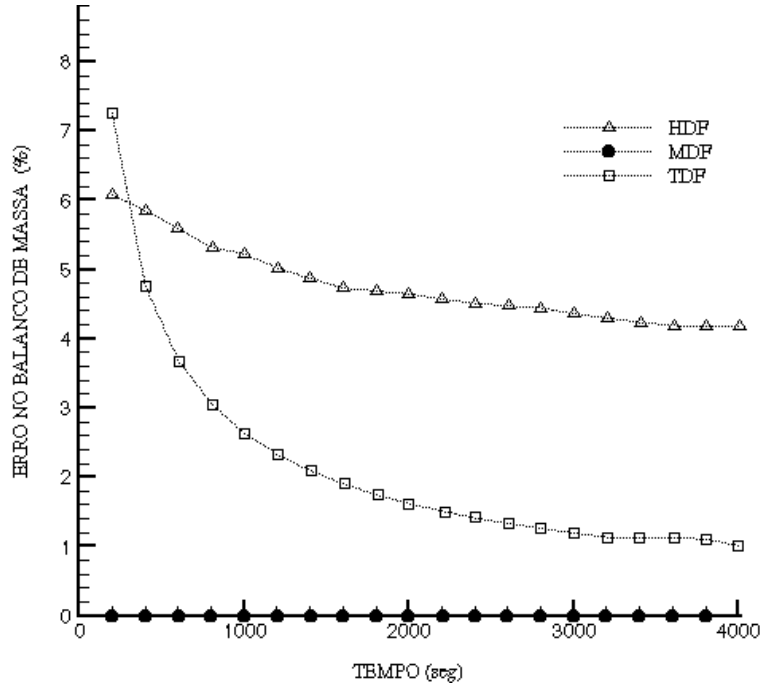


Figura 2 - Erro de balanço de massa versus tempo para os métodos MDF, HDF e TDF.

Simulação 4

Finalmente, a última simulação consiste na infiltração da água em um solo argiloso siltoso não-saturado inicialmente seco (“Yolo light clay”, tipo 2 – Tabela 1) colocado em uma coluna com profundidade $L=220$ cm. A sua execução foi feita sob condições de contorno de Dirichlet, com um intervalo de malha espacial de $\Delta z = 1,0$ cm, e um passo de tempo inicial de $\Delta t = 100$ s durante um tempo total de 46,3 dias, sendo que o passo de tempo pode variar de 10^{-6} s a 10^3 s na busca da convergência. O método MDF com a média geométrica na estimativa da função K foi comparado com a solução semi-analítica de Philip (Kaverkamp et al., 1977). Os resultados desta simulação estão na Figura 6, onde serão mostrados os perfis de umidade em três tempos distintos. As condições iniciais e de contorno utilizadas foram:

$$\begin{cases} h(z,0) = -600.0 \text{ cm} & (\theta = 0.2376 \text{ cm}^3 / \text{cm}^3), & 0 < z < 220 \\ h(0,t) = -1.0 \text{ cm} & (\theta = \theta_s = 0.4950 \text{ cm}^3 / \text{cm}^3), & t > 0 \\ h(220,t) = -600.0 \text{ cm}, & & t > 0 \end{cases} \quad (32)$$

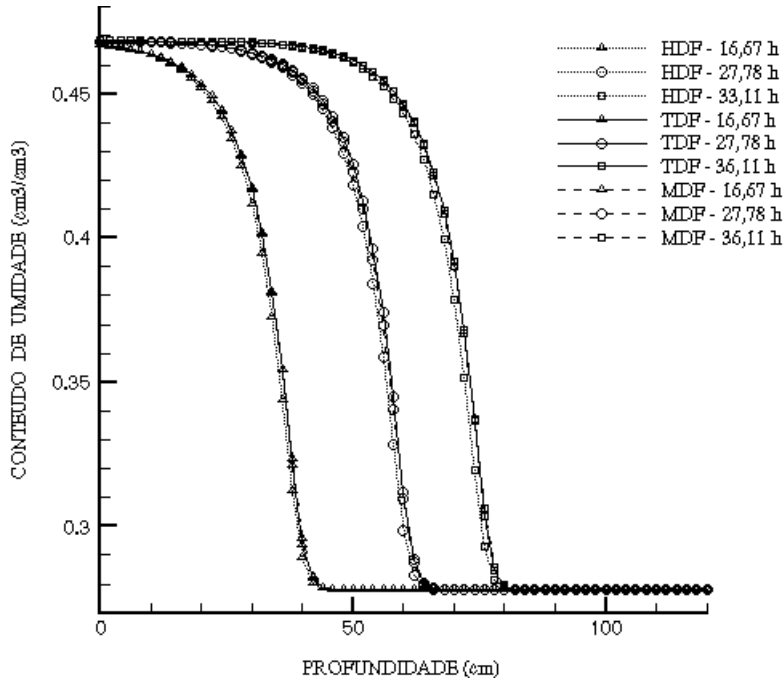


Figura 3 - Perfis de umidade versus profundidade, nos tempos: 16,67, 27,78 e 36,11 horas, para os métodos HDF, TDF e MDF.

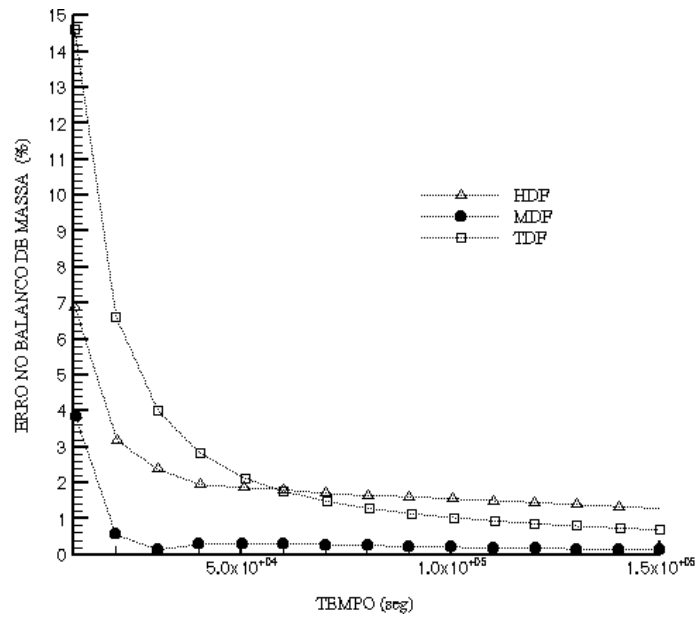


Figura 4 - Erro de balanço de massa versus tempo para os métodos HDF, TDF e MDF.

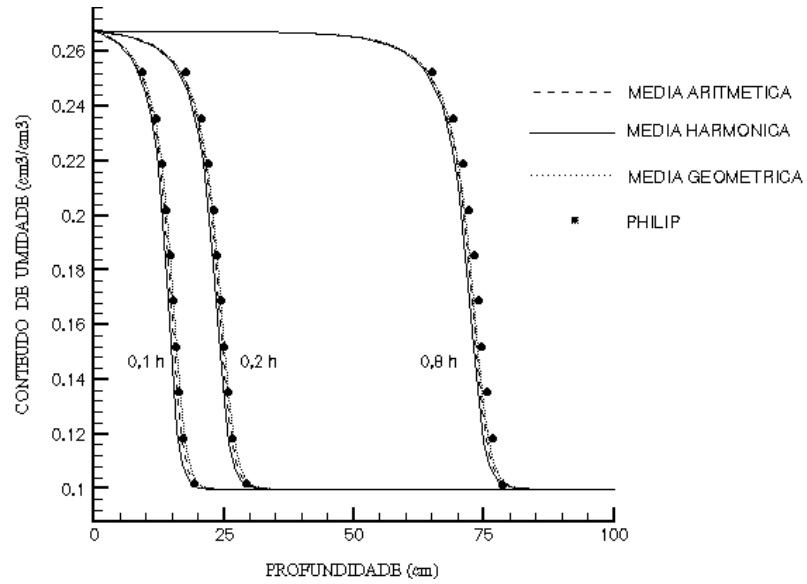


Figura 5 - Perfil de umidade versus profundidade, nos tempos: 0,1, 0,2 e 0,8 horas, para o método HDF com três tipos de média na estimativa de K. Comparação com a solução semi-analítica de Philip (1957).

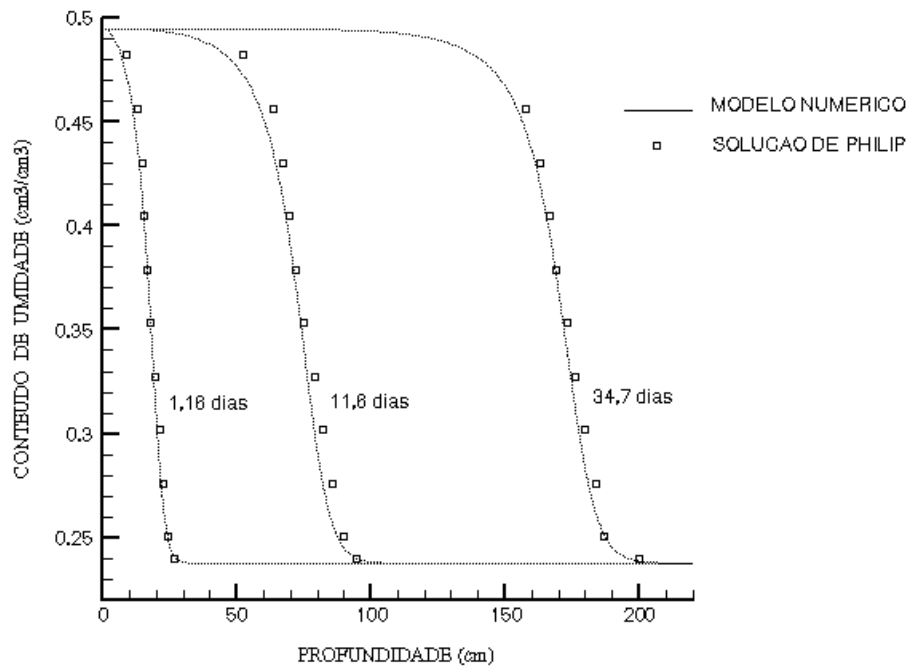


Figura 6 - Perfis de umidade versus profundidade, nos tempos: 1,16, 11,6 e 34,7 dias, para o modelo MDF com média geométrica na estimativa de K. Comparação com a solução semi-analítica de Philip (1957).

CONCLUSÃO

Os problemas mostrados acima permitiram uma comparação do desempenho dos métodos MDF, HDF e TDF e das estimativas das funções não-lineares pelas médias nos pontos intermediários da malha espacial, com base na análise do erro no balanço de massa e na confirmação da validade da solução numérica.

Nas duas primeiras simulações foram mostrados que a forma mista da equação de Richards é a solução numérica que melhor verifica o princípio da conservação da massa, para solos arenosos e argilosos, tanto em condições de contorno de Dirichlet como de Neumann. Este resultado confirma de outro modo a solução obtida por Celia et al.(1990).

Na terceira simulação, foi mostrado que a média geométrica é a solução mais precisa na estimativa da condutividade hidráulica em relação à solução semi-analítica de Philip (1957).

Finalmente, na quarta simulação usou-se o método MDF com a média geométrica, que foi o modelo que obteve previamente os melhores resultados. Neste caso, simulou-se o solo argilo-siltoso “Yolo light clay”, conhecido da literatura, que se caracteriza pela baixa permeabilidade que provoca uma infiltração lenta (devido à combinação do silte com a argila preencher bem os vazios do solo) causando problemas de instabilidade numérica. Contudo, o resultado obtido foi satisfatório confirmando mais uma vez a validade do método numérico empregado.

Com isso, este trabalho apresentou um modelo numérico versátil, que resolve a equação de Richards unidimensional com um equilíbrio de massa preciso e que converge rapidamente à solução teoricamente correta. O modelo numérico permite controlar a infiltração de curta e longa duração e é relativamente fácil de implementar.

Uma razão para que esta pesquisa continue é a busca da diminuição do tempo computacional para alcançar uma solução precisa para solos heterogêneos com variações abruptas de umidade.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Allen, M.B. e Murphy, 1996, “A Finite Element Collocation Method for Variable Saturated Flow in Two Dimensions”, *Water Resour. Res.*, Vol. 22, pp 1537-1542.
- Bear, J., 1972, “Dynamics of Fluids in Porous Media”, Elsevier Science New York, 764 p.
- Bear, J., 1979, “Hydraulics of Groundwater”, McGraw-Hill, International Book Co., 567 p.
- Celia, M.A., Ahuja, L.R. e Pinder, G.F., 1987, “Orthogonal Collocation and Alternating-direction Procedures for Unsaturated Flow Problems”, *Adv. Water Resour.*, Vol. 10, pp 178-187.

- Celia M.A., Bouloutas, E.T. e Zarba, R.L., 1990, "A General Mass-Conservative Numerical Solution for the Unsaturated Flow Equation", *Water Resour. Res.*, Vol. 26, No.7, pp 1483-1496.
- Philip, J. R., 1957, "The Theory of Infiltration: 6 – Effect of Water Depth Over Soil", *Soil Science*, 85, pp 278 – 285.
- Freze, R.A., 1971, "Three-Dimensional, Transient, Saturated-Unsaturated Flow in a Groundwater Basin", *Water Resour. Res.*, Vol. 7, No. 2, pp 347-366.
- Hayhoe, H.N., 1978, "Study of the Relative Efficiency of Finite Difference and Galerkin Techniques for Modeling Soil-water Transfer", *Water Resour. Res.*, Vol. 14, pp 97-102.
- Haverkamp, R., Vauclin, M., Touma, J., Wierenga, P. e Vachaud, G., 1977, "Comparison of Numerical-simulation Models for One-dimensional Infiltration", *Soil Sci. Soc. Am. J.*, Vol. 41, No. 2, pp 285-294.
- Haverkamp, R. e Vauclin, M., 1979, "A Note on Estimating Finite Difference Interblock Hydraulic Conductivity Values for Transient Unsaturated Flow Problems", *Water Resour. Res.*, Vol. 15, pp 181-187.
- Huang, K., Mohanty, B.P. e van Genuchten, M.T., 1996, "A New Convergence Criterion for the Modified Picard Iteration Method to Solve the Variably Saturated Flow Equation", *J. Hydrol.*, Vol. 178, pp 69-91.
- Huyakorn, P.S., Thomas, S.D. e Thompson, B.M., 1984, "Techniques for Making Finite Elements Competitive in Modeling Flow in Variably Saturated Media", *Water Resour. Res.*, Vol. 20, pp 1099-1115.
- Milly, P. C. D., 1988, "Advances in Modeling of Water in the Unsaturated zone", *Transp. Porous Media*, 3, pp 491-514.
- Narasimhan, T.N. e Witherspoon, P.A., 1976, "An Integrated Finite Difference Method for Analyzing Fluid Flow in Porous Media", *Water Resour. Res.*, Vol. 12, pp 57-64.
- Neuman, S.P., 1973, "Saturated-unsaturated Seepage by Finite Elements", *J. Hydraul. Div. Am. Civ. Eng.*, Vol. 99, No. HY12, pp 2233-2250.
- Nielsen, D. R., van Genuchten, M.T. e Biggar, J.W., 1986, "Water Flow and Solute Transport Processes in the Unsaturated Zone", *Water Resour. Res.*, 22(9), pp 89S-108S.
- Ross, P.J. Bristow, K.L., 1990, "Simulating Water Movement in Layered and Gradational Soils using the Kirchhoff Transform", *Soil Sci. Soc. Am. J.*, Vol. 54, pp 1519-1524.
- Srivastava, R. e Yeh, T.J., 1991, "Analytical Solutions for One-dimensional, Transient Infiltration toward the Water Table in Homogeneous and Layered Soils", *Water Resour. Res.*, Vol. 27, No. 5, pp 753-762.

- van Genuchten, M.T., 1980, "A Closed-form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils", *Soil Sci. Soc. Am. J.*, Vol. 44, No. 5, pp 892-898.
- Zaidel, J. e Russo, D., 1992, "Estimation of Finite Difference Interblock Conductivities for Simulation of Infiltration into Initially Dry Soils", *Water Resour. Res.*, 28(9), pp 2285-2295.
- Zarba, R.L., 1988, "A Numerical Investigation of Unsaturated Flow", M.S. Thesis, Dep. of Civ. Eng., Mass. Inst. of Technol., Cambridge.