

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

SIMULAÇÃO DE INFILTRAÇÃO EM MEIOS POROSOS
POR DIFERENÇA FINITA

Edson Cezar Wendland

Dissertação para obtenção do Título de
Mestre em Engenharia

Porto Alegre

1991

**SIMULAÇÃO DE INFILTRAÇÃO EM MEIOS POROSOS
POR DIFERENÇA FINITA**

Edson Cezar Wendland
Engenheiro Civil

Dissertação submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, PROMEC, da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul como parte dos requisitos para a obtenção do Título de

MESTRE EM ENGENHARIA

Área de Concentração - Fenômenos de Transporte

Aprovado por:

Prof. Dr. Marco T. de Vilhena (Orientador)
Prof. Dr. Julio C. R. Claeysen
Profa. Dra. Regina D. Dias

Porto Alegre, 5 de março de 1991.

Aos amores:

ao que cria;

ao que inspira;

ao que incentiva.

AGRADECIMENTOS

A Denise pela paciência, incentivo e apoio no desenvolvimento, elaboração e revisão deste trabalho.

Ao Prof. Vilhena pela constante orientação e estímulo na realização do mestrado.

Aos professores do PROMEC pelos conhecimentos transmitidos durante o curso.

Aos colegas e funcionários do PROMEC que direta ou indiretamente contribuíram para a conclusão deste trabalho.

Aos companheiros da CEU que tornaram esse período mais alegre.

Ao DENUC pela utilização do espaço físico e equipamentos.

A bibliotecária Juliana Costa Zart Bonilha pela elaboração das referências bibliográficas.

A CAPES pelo auxílio financeiro concedido.

SUMÁRIO

| | |
|---|------|
| LISTA DE FIGURAS..... | vii |
| LISTA DE TABELAS..... | ix |
| LISTA DE SÍMBOLOS..... | x |
| RESUMO..... | xiii |
| ABSTRACT..... | xiv |
| | |
| Capítulo 1 - INTRODUÇÃO | 1 |
| 1.1. Exposição de argumentos..... | 1 |
| 1.2. Revisão bibliográfica..... | 2 |
| 1.3. Objetivos..... | 5 |
| | |
| Capítulo 2 - FORMULAÇÃO DO MODELO..... | 8 |
| 2.1. Noções físicas e simplificações..... | 8 |
| 2.1.1. Natureza do meio poroso..... | 8 |
| 2.1.2. Grandezas físicas..... | 9 |
| 2.2. Modelo matemático..... | 11 |
| 2.3. Aplicabilidade do modelo..... | 13 |
| | |
| Capítulo 3 - APROXIMAÇÃO NUMÉRICA..... | 15 |
| 3.1. Introdução..... | 15 |
| 3.2. Desenvolvimento do esquema..... | 16 |
| 3.3. Condições de fronteira..... | 20 |
| | |
| Capítulo 4 - MEIO POROSO SIMULADO..... | 24 |

| | |
|--|--------|
| Capítulo 5 - RESULTADOS NUMÉRICOS..... | 27 |
| 5.1. Parâmetros de simulação..... | 27 |
| 5.2. Esquemas de discretização do termo convectivo..... | 28 |
| 5.3. Esquemas de discretização da fronteira..... | 34 |
| 5.4. Comparação com esquemas de dois níveis..... | 40 |
| Capítulo 6 - CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES..... | 43 |
| REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS..... | 46 |
| Apêndice A - CONSERVAÇÃO DA ENERGIA - Equação do escoamento..... | 52 |
| Apêndice B - CONSERVAÇÃO DA MASSA - Equação da continuidade..... | 56 |
| Apêndice C - TERMO CONVECTIVO - Esquemas de discretização. | 58 |
| Apêndice D - DOIS NÍVEIS - Esquema de discretização..... | 59 |
| Apêndice E - CONVERGÊNCIA E ESTABILIDADE..... | 60 |

LISTA DE FIGURAS

| | |
|---|----|
| Figura 2.1: Meio poroso característico..... | 8 |
| Figura 3.1: Domínio $R_{n+1, m+1}$ discretizado..... | 16 |
| Figura 3.2: Esquema (II) de discretização de fronteira.... | 22 |
| Figura 4.1: Curva de correlação entre condutividade (K) e tensão capilar (ψ) dada pela expressão (4.2).... | 25 |
| Figura 4.2: Curva de correlação entre fator de umidade (θ) e tensão capilar (ψ) dada pela expressão (4.3).. | 26 |
| Figura 5.1: Perfis de umidade calculados pelo esquema 1 (termo convectivo discretizado por Lees) comparados com dados experimentais..... | 29 |
| Figura 5.2: Perfis de umidade calculados pelo esquema 2 (termo convectivo discretizado por diferença ascendente) comparados com dados experimentais... | 30 |
| Figura 5.3: Perfis de umidade calculados pelo esquema 3 (termo convectivo discretizado por diferença central) comparados com dados experimentais..... | 31 |
| Figura 5.4: Perfis de umidade calculados pelo esquema 4 (termo convectivo discretizado com derivação implícita) comparados com dados experimentais.... | 32 |
| Figura 5.5: Perfis de umidade calculados pelo esquema I (condição na superfície discretizada por diferença ascendente) comparados com dados experimentais..... | 36 |

| | |
|--|----|
| Figura 5.6: Perfis de umidade calculados pelo esquema II (condição na superfície discretizada com ponto fictício) comparados com dados experimentais..... | 37 |
| Figura 5.7: Perfis de umidade calculados pelo esquema III (condição na superfície discretizada com ponto fictício) comparados com dados experimentais..... | 38 |
| Figura 5.8: Perfis de umidade calculados pelo esquema IV (condição na superfície substituída na equação 2.10) comparados com dados experimentais..... | 39 |
| Figura 5.9: Perfis de umidade calculados pelos esquemas de dois e três níveis comparados com dados experimentais..... | 42 |
| Figura A.1: Volume de controle e forças atuantes na direção x..... | 52 |
| Figura B.1: Fluxo em um volume de controle na direção x... | 56 |

LISTA DE TABELAS

| | |
|---|----|
| Tabela 5.1: Balanço de massa e tempo de execução para 0,8 horas de infiltração simulada através dos esquemas de discretização do termo convectivo (Apêndice C)..... | 28 |
| Tabela 5.2: Balanço de massa e tempo de execução para 0,8 horas de infiltração simulada através dos esquemas de discretização da condição de fronteira (Seção 3.3)..... | 35 |
| Tabela 5.3: Balanço de massa e tempo de execução para 0,8 horas de infiltração simulada através dos esquemas de discretização da condição de fronteira (Seção 3.3)..... | 41 |

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolos latinos maiúsculos

| | |
|----------------|--|
| A | → matriz de discretização. |
| C | → capacidade hidráulica. |
| C_z | → resultante das forças de campo. |
| D | → difusividade hidráulica. |
| E | → matriz coluna. |
| F_x | → força viscosa na direção x. |
| G | → centro de gravidade do volume de controle. |
| H_x | → resultante da pressão hidrodinâmica na direção x. |
| K | → condutividade hidráulica. |
| O | → ordem de erro de truncamento. |
| \bar{R} | → resistência viscosa (vetorial). |
| R_e | → número de Reynolds. |
| $R_{n+1, m+1}$ | → domínio discretizado. |
| R_x, R_z | → resistência viscosa por unidade de massa nas direções x e z. |

Símbolos latinos minúsculos

| | |
|-----------------|---|
| a_i, b_i, d_i | → elementos da matriz de discretização A. |
| c_i | → elementos da matriz coluna E. |
| a_x | → aceleração do fluido na direção x. |

| | |
|-----------------|--|
| d | → operador de derivada total. |
| g | → aceleração da gravidade. |
| i | → ponto genérico no espaço ($i = 0, \dots, n$). |
| j | → instante genérico ($j = 0, \dots, m$). |
| m | → número de intervalos de tempo simulados. |
| m_v | → massa de fluido. |
| n | → número de intervalos de espaço simulados. |
| n | → número de pontos da matriz. |
| p | → pressão hidrostática. |
| \bar{q} | → vazão específica (vetorial). |
| q_0 | → taxa de infiltração constante. |
| q_x, q_y, q_z | → vazão específica nas direções x , y e z . |
| t | → variável temporal. |
| v | → velocidade de escoamento do fluido. |
| \bar{v} | → velocidade média de escoamento. |
| v_x | → velocidade de escoamento na direção x . |
| x, y, z | → coordenadas cartesianas (variáveis espaciais). |
| z | → altura da partícula em relação a um nível de referência. |

Símbolos gregos

| | |
|----------|----------------------------------|
| α | → constante de ajuste. |
| β | → constante de ajuste. |
| δ | → operador de diferença central. |
| Δ | → intervalo de discretização. |

| | |
|--------------------------------|--|
| ΔV | → volume elementar. |
| $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ | → intervalos de discretização espacial. |
| Δt | → intervalo de discretização temporal. |
| ϵ_1, ϵ_2 | → constantes de ajuste. |
| γ_v | → peso específico do fluido. |
| η | → porosidade do meio. |
| ψ | → tensão capilar. |
| ψ_s | → tensão capilar do solo seco. |
| λ | → relação entre intervalos de discretização. |
| ρ_v | → densidade específica do fluido. |
| ξ | → operador de diferença genérico. |
| θ | → fator de umidade volumétrico. |
| θ_r | → fator de umidade residual (higroscópica). |
| θ_s | → fator de umidade do solo saturado. |
| ϕ | → potencial hidráulico. |
| ∇ | → operador vetorial (gradiente, divergente). |
| ∂ | → operador de derivada parcial. |

RESUMO

O objetivo do presente trabalho é determinar numericamente o perfil de umedecimento em um meio poroso submetido a um processo de infiltração.

A descrição do movimento transiente de água em solo não-expansivo é dada em termos da equação não-linear de Fokker-Planck ou da equação de Richards. As dificuldades na solução da equação são não somente devido aos termos não-lineares envolvidos mas também às condições de fronteira dependentes do tempo e ao ajuste dos dados experimentais para os parâmetros físicos.

Neste trabalho é considerado um esquema de diferença finita de três níveis para a simulação de infiltração em uma coluna homogênea, semi-infinita satisfazendo a condição de fluxo constante na superfície. O esquema proposto é implícito com erro de truncamento de segunda ordem no tempo e espaço. O termo convectivo é aproximado por quatro diferentes esquemas. A influência da discretização da derivada na fronteira também é analisada através de quatro esquemas.

Os resultados obtidos na simulação numérica pelo esquema de três níveis com termo convectivo aproximado por diferença ascendente (upwind) e condição de fronteira discretizada com ponto fictício apresentam melhor aproximação aos perfis de umedecimento experimentais que os obtidos por esquemas de dois níveis.

ABSTRACT

The purpose of the present work is to determine numerically the water content profile in a porous medium submitted to an infiltration process.

The description of the transient water movement in nonswelling soil is given in terms of the non-linear Fokker-Planck equation or Richards equation. The difficulties in solving this equation are due not only the nonlinearities involved but also to time-dependent boundary conditions and to the fitting of the experimental data for the physical parameters.

In this work, we consider a three-level finite difference scheme for the simulation of infiltration in an homogeneous semi-infinite column satisfying constant flux condition at the surface. This is an implicit scheme which is second-order accurate in time and space. The convective term is approximated by four different schemes. The influence of the discretization of the boundary derivative is also analysed by four schemes.

The results of the numerical simulation by the three-level scheme with convective term approximated by forward difference (upwind) and boundary condition discretized with fictitious point exhibited a closer approximation to the experimental water content profile than the ones obtained by two-level scheme.

Capítulo 1

INTRODUÇÃO

1.1. Exposição de argumentos

Em obras de engenharia como barragens, fundações e pavimentos, a ação destrutiva da água pode ser controlada através da adoção de medidas preventivas baseadas no conhecimento da infiltração e movimento de água no solo.

Por outro lado, a captação de água para consumo humano ou irrigação de áreas produtivas, bem como a preocupação ecológica com a contaminação da natureza tornam necessária a proteção dos lençóis d'água subterrâneos.

Através da formulação de modelos matemáticos, os pesquisadores da área de Hidrologia estudam teoricamente o movimento de águas subterrâneas e o transporte de poluentes a ele associado, reduzindo o tempo e recursos exigidos pelos testes de campo ou ensaios realizados em laboratório.

Recentes resultados na determinação experimental de características físicas do solo associados ao desenvolvimento de equipamento computacional e métodos numéricos adequados,

possibilitam modelar áreas de interesse e simular seu comportamento ao longo do tempo.

Como exemplos de simulação, podemos citar:

- a. obtenção de água em regiões áridas ou centros urbanos;
- b. controle do lençol freático em áreas de prospecção mineral;
- c. contaminação de lençóis subterrâneos por utilização de defensivos agrícolas;
- d. difusão de poluentes em depósitos de lixo ou reservatórios de material tóxico;
- e. alteração do fluxo natural de água em centros urbanos devido a fundações e túneis;
- f. avaliação de perdas em reservatórios de acumulação por infiltração no solo;
- g. penetração de água em barragens;
- h. drenagem em regiões alagadas ou fundações;
- i. saturação do solo sob pavimentos de rolagem.

Devido a essa variedade de aplicações, esforços têm sido realizados no sentido de desenvolver modelos e soluções para os problemas citados.

1.2. Revisão bibliográfica

O fenômeno de infiltração em meios porosos é modelado matematicamente pela equação de Fokker-Planck conforme PHILIP [41]. No mesmo trabalho, é apresentada uma

revisão de soluções analíticas e por séries para o problema. No entanto, novos métodos matemáticos ou numéricos têm sido desenvolvidos e aplicados ao problema em questão.

Para solução da equação em regime permanente, GARDNER [18] propôs a linearização do termo difusivo após a aplicação da transformação de Kirchhoff. PHILIP [40] e WOODING [62] analisando a mesma equação com diferentes condições de fronteira apresentaram soluções analíticas considerando para a condutividade hidráulica uma função exponencial da tensão capilar. Recentemente, seguindo o conceito de linearização, PULLAN e COLLINS [43] simularam o mesmo problema quase-linear através do método de elementos de fronteira (BEM). Estudando o problema transiente tridimensional, PHILIP [39] apresentou uma solução analítica através da transformada de Laplace e separação de variáveis. PULLAN [42] simulou o mesmo problema transiente pelo BEM. Cabe, contudo, ressaltar que a quase-linearização é contestada por PARLANGE et al. [36].

A solução da equação de Fokker-Planck na forma transiente e não-linear tem sido obtida, principalmente, através de métodos numéricos de simulação.

GIESEL et al. [19] utilizaram diferenças finitas para a discretização da equação, sendo o sistema de equações não-lineares resultante resolvido através de um esquema iterativo. HAVERKAMP et al. [22] apresentaram uma comparação de seis esquemas de diferença finita para simulação de infiltração unidimensional. Nesses esquemas de dois níveis, o

sistema de equações discretizadas é linear. MLS [31] também desenvolveu um esquema de diferença finita de dois níveis totalmente implícito, aplicável a solos não-homogêneos com diversos tipos de condições de fronteira. Um breve resumo de trabalhos baseados na aplicação de diferenças finitas é apresentado por ANDERSON [4].

Métodos combinados de diferença finita para discretização do tempo e elementos finitos para discretização do espaço foram utilizados por KNABER [27], HUYAKORN et al. [26] e ABRIOLO [1]. Os métodos divergem entre si quanto ao modo de abordagem da equação e quanto ao método de aproximação variacional. SCHMID [49] também resolveu por elementos finitos o problema formulado com base em funções de corrente. HOFFMANN et al. [23] descreveram o desenvolvimento de um modelo baseado em elementos finitos para simulação do comportamento do lençol freático em uma área de prospecção mineral.

Além desses métodos tradicionais de discretização, foram consideradas outras soluções.

VAN DER PLOEG [55] utilizou o sistema S/360 CSMP para simular o fenômeno de infiltração em uma dimensão discretizado através do método de elementos de volume. WARRICK et al. [60] desenvolveram uma solução adimensional generalizada baseada na solução por séries desenvolvida por PHILIP [41]. PERROUX et al. [37] apresentaram um método baseado na relação fluxo-concentração para determinação do perfil de umidade ao longo do tempo. O princípio de

restrições mínimas de Gauss foi utilizado por BOUTROS et al [7] para solução aproximada da equação em coordenadas cilíndricas.

Recentemente foram apresentadas soluções analíticas para o problema. Baseando-se no modelo de fluxo de duas fases de ROGERS [44], BROADBRIDGE e WHITE [8] desenvolveram uma solução analítica para o problema unidimensional com taxa de infiltração constante na superfície, através de transformações sucessivas (Kirchhoff, Storm, Hopf, Cole, Laplace). Em um segundo artigo, WHITE e BROADBRIDGE [61] apresentaram aplicações do método proposto. Ao mesmo tempo, SANDER et al. [47] apresentaram independentemente raciocínio análogo. Discussão em torno do assunto pode ser vista em SANDER et al. [46] e BROADBRIDGE e WHITE [9]. Este método foi estendido por WARRICK et al. [59] para condições iniciais e de fronteira mais gerais.

Uma revisão dos principais métodos de solução do problema de infiltração no solo é feita no artigo em que FEDDES [16] apresenta o estado de arte.

1.3 Objetivos

O presente trabalho tem por objetivo contribuir para o estudo por simulação numérica da infiltração e redistribuição de fluidos em meios porosos. Nesse sentido, foi buscado um método alternativo eficiente, porém simples do ponto de vista matemático e computacional, para a solução do

modelo que descreve o fenômeno.

De forma a eliminar a dependência temporal no desenvolvimento, foi aplicada a transformada de Laplace à equação não-linear, transiente de Fokker-Planck. A equação transformada foi, então, abordada através de outros métodos conhecidos, resultando em métodos híbridos.

O método de Adomian [3], que separa os termos linear e não-linear da equação para integração, necessita de grande número de elementos na solução por série para a correta descrição da não-linearidade do problema. Em consequência, a determinação analítica das constantes dos polinômios de inversão é dificultada, tornando o método insatisfatório.

Seguindo o mesmo raciocínio, foram consideradas para solução da equação transformada, as transformações de Storm e Boltzmann citadas por ÖZİŞIK [35]. Ambas são inviáveis pois as relações exponenciais entre os parâmetros físicos do fenômeno e a variável principal não satisfazem as exigências do método combinado.

A combinação da transformação de Kirchhoff e separação de variáveis esbarra na não-linearidade da equação. No entanto, o método se aplica a equações quase-linearizadas conforme apresentado por PHILIP [39].

Finalmente, foi feita a opção por um esquema de diferença finita de três níveis seguindo o método proposto por LEES [29] para equações parabólicas quase-lineares. A aplicação do método ao problema de infiltração em questão é

discutida neste trabalho através de diferentes esquemas de discretização do termo convectivo. Além disso, é feita uma análise de esquemas de discretização da condição de fronteira. Os resultados numéricos obtidos foram comparados com dados experimentais para comprovação dos diversos esquemas testados.

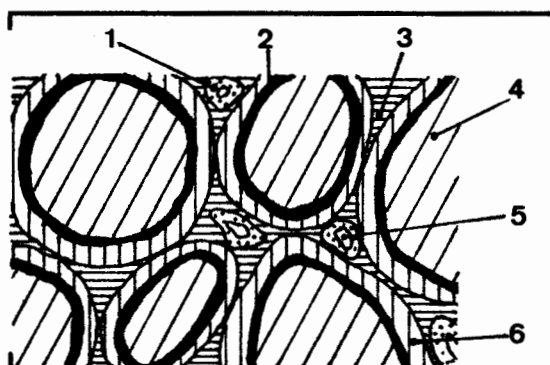
Capítulo 2

FORMULAÇÃO DO MODELO

2.1. Noções físicas e simplificações

2.1.1. Natureza do meio poroso

Os solos são caracterizados por descontinuidades na fase sólida denominadas poros. Essas descontinuidades de diferentes formas e dimensões são ocupadas por água e ar consistindo em um sistema trifásico (FRANCISS [17]) conforme mostrado na fig. 2.1. Quando a fase líquida ou gasosa é contínua formando canais que atravessam o meio geológico, este é dito *permeável*.



1. água funicular (móvel)
2. água higroscópica
3. água pendular
4. partícula sólida
5. bolha de ar
6. película de umidade

Figura 2.1 : Meio poroso característico.

Devido às variações de forma, dimensão e distribuição dos vazios nos meios porosos as formulações em micro-escala não são favorecidas. Assim, os parâmetros físicos envolvidos no fenômeno de infiltração são tratados em termos de valores escalares médios.

A porosidade (η), que é a relação entre o volume de vazios e o volume total do meio sólido, afeta diretamente as grandezas físicas que descrevem a percolação através do mesmo. Tal ocorre, por exemplo, com o fator de umidade (θ) do solo que determina a quantidade de água existente nos poros.

2.1.2. Grandezas físicas

As principais grandezas físicas envolvidas são a vazão específica (\bar{q}) e o potencial hidráulico (θ).

A vazão específica (\bar{q}) é definida como a quantidade de fluido que atravessa uma superfície de controle de área unitária do meio poroso por unidade de tempo, ou seja, é a taxa de transporte de água através de uma seção de controle.

O potencial hidráulico (θ) representa a quantidade de energia acumulada por qualquer partícula fluida em estado de repouso ou em movimento. Segundo a equação de Bernoulli, para escoamento permanente de fluidos incompressíveis e não-viscosos (sem atrito), a energia da partícula por unidade de peso é dada pela soma das energias gravitacional (z), piezométrica (p/γ_v) e cinética ($v^2/2g$). Portanto,

$$\theta = \frac{p}{\gamma_v} + z + \frac{v^2}{2g} \quad (2.1)$$

onde p - pressão hidrostática
 γ_v - peso específico do fluido (água)
 v - velocidade de escoamento do fluido
 g - aceleração da gravidade
 z - altura da partícula em relação a um nível de referência

Em escoamentos lentos ($10^{-8} < v < 10^{-5}$ m/s segundo FRANCISS [17]) a energia cinética pode ser desprezada em presença das demais. O potencial hidráulico simplificado fica

$$\theta = \psi + z \quad (2.2)$$

sendo $\psi = \frac{p}{\gamma_v}$ a tensão capilar discutida em detalhe por CHILDS [14]. De acordo com PHILIP [41] e ANDERSON [4], nessa aproximação foram negligenciados os potenciais de absorção, químico, de pressão osmótica e térmico.

A taxa espacial de dissipação de energia devido á resistência viscosa define o gradiente hidráulico. Em 1856, durante a realização de trabalho experimental em Dijon, Darcy constatou a dependência quase linear entre a vazão específica e o gradiente hidráulico. Introduzindo o fator de proporcionalidade (K), inicialmente conhecido como coeficiente de permeabilidade, foi estabelecida a relação conhecida como " lei de Darcy "

$$\bar{q} = - K \cdot \nabla \theta \quad (2.3)$$

sendo \bar{q} - vazão específica
K - condutividade hidráulica
 $\nabla \theta$ - gradiente hidráulico

HARR [21] mostra que para as condições de escoamento existentes no solo com $Re < 1$, a lei de Darcy se aplica na maioria dos casos.

2.2. Modelo matemático

O movimento de água no solo é modelado matematicamente pela combinação dos princípios da conservação da energia representada pela equação do escoamento e da conservação da massa representada pela equação da continuidade.

Conforme apresentado no apêndice A, a equação do escoamento é aproximada pela lei experimental de Darcy. Por outro lado, a equação da continuidade, desenvolvida no apêndice B é dada por

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\nabla \bar{q} \quad (2.4)$$

Combinando as equações (2.3) e (2.4) resulta

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \nabla [K \cdot \nabla \theta] \quad (2.5)$$

Substituindo a expressão (2.2) do potencial hidráulico na equação (2.5), obtém-se

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \nabla [K \cdot \nabla (\psi + z)] \quad (2.6)$$

ou

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \nabla [K \cdot \nabla \psi] + \frac{\partial K}{\partial z} \quad (2.7)$$

Esta equação é válida para solos homogêneos e heterogêneos conforme ANDERSON [4]. Contudo, para solos homogêneos e isotrópicos é possível reescrever a equação de uma forma mais tratável no sentido de dependência de apenas uma variável.

A lei de Darcy foi observada experimentalmente para solos saturados. No entanto, em solos não-saturados a condutividade (K) bem como a tensão capilar (ψ) dependem do fator de umidade (θ) no solo. Desprezando a existência de histerese na determinação das relações físicas, os parâmetros K e θ podem ser expressos por funções de ψ . Portanto, a equação (2.7) pode ser dada por

$$\frac{d\theta}{d\psi} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \nabla [K(\psi) \cdot \nabla \psi] + \frac{dK(\psi)}{d\psi} \frac{\partial \psi}{\partial z} \quad (2.8)$$

Definindo a capacidade hidráulica como

$$C(\psi) = \frac{d\theta}{d\psi} \quad (2.9)$$

a equação (2.8) resulta na equação de Richards

$$C(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial t} = \nabla [K(\psi) \cdot \nabla \psi] + \frac{\partial K(\psi)}{\partial z} \quad (2.10)$$

De forma alternativa, definindo a difusividade hidráulica

$$D(\theta) = K(\theta) \cdot \frac{d\psi}{d\theta} \quad (2.11)$$

a equação (2.7) pode ser reescrita como

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \nabla [D(\theta) \cdot \nabla \theta] + \frac{\partial K(\theta)}{\partial z} \quad (2.12)$$

Esta equação é conhecida como equação de Fokker-Planck e surge, também, na forma linear em problemas de transmissão de calor com fonte móvel ou difusão sob influência de forças externas de acordo com PHILIP [41]. Assim, a teoria de movimento de fluido em meios porosos faz parte da teoria geral de difusão em campos potenciais [14].

2.3. Aplicabilidade do modelo

A utilização deste modelo na simulação de fenômenos reais é condicionada pela determinação das correlações entre K , θ e ψ para cada tipo de solo. Inúmeros trabalhos têm sido realizados com o objetivo de desenvolver métodos de ajuste dos parâmetros físicos. Nesse sentido servem como referência inicial os artigos de BROOKS e COREY [11], PERROUX et al [38], HOGARTH e PARLANGE [24], VAN GENUCHTEN [56], ZACHMANN et al [63], RUSSO [45], LIBARDI et al [30], WAGENET e

ADDISCOTT [58], MULLA [32], NAKANO et al [33].

Outra dificuldade é a forma de abordagem do comportamento histerético nas relações $K-\theta$ ou $\theta-\psi$ observadas experimentalmente por VACHAUD e THONY [54]. Segundo ANDERSON [4], a histerese observada no comportamento da condutividade é suficientemente pequena podendo ser desprezada na maioria das aplicações. Foi observado, ainda, que o comportamento histerético é mais pronunciado em solos arenosos que argilosos e que em vista da variabilidade do solo as relações médias entre θ e ψ são consideradas satisfatórias.

Embora as equações (2.10) e (2.12) sejam equivalentes, a equação (2.10) apresenta a vantagem de ser aplicável a todo o domínio, incluindo zonas saturada e não-saturada distintas. Além disso, em solos multi-regiões (camadas), a tensão capilar (ψ) é uma função contínua, o que não ocorre com o fator de umidade (θ). Em problemas em que a superfície do solo é coberta por uma camada de água, a pressão hidrostática decorrente também pode ser considerada na equação (2.10) através de ψ .

Cabe ainda observar que o modelo descrito não considera o fenômeno do surgimento de canais de escoamento preferenciais (conhecidos na literatura [52] como *fingers*). Esses canais se formam em meios não-saturados na região de avanço da fronteira de umedecimento devido à instabilidade nas interfaces solo-água provocada pela resistência do ar confinado .

Capítulo 3

APROXIMAÇÃO NUMÉRICA

3.1. Introdução

Além dos problemas de ajuste dos parâmetros físicos citados no capítulo 2, as dificuldades na solução do problema apresentado devem-se, também, à não-linearidade da equação que descreve o fenômeno e, em certos casos, à variação no tempo das condições de fronteira. Devido a isso, soluções analíticas são obtidas somente para casos específicos.

Neste capítulo é apresentada a aplicação do método de diferença finita de três níveis proposto por LEES [28,29] para equações parabólicas ao problema em questão. Esse método foi aplicado em problemas de condução de calor com parâmetros dependentes da temperatura por BONACINA e COMINI [5,6].

Segundo conhecimento do autor, o esquema proposto ainda não foi utilizado em equações que apresentam um termo convectivo (como ocorre, neste caso, devido à influência da gravidade).

A análise em questão foi desenvolvida, inicialmente,

para a equação do escoamento unidimensional na direção vertical.

3.2. Desenvolvimento do esquema

Aplicando o esquema de Lees na equação (2.10), para $(z, t) \in R_{n+1, m+1}$ resulta :

$$C(\psi_i^j) \delta_{2t} \psi_i^j = \delta_z [K(\psi_i^j) \delta_z \hat{\psi}_i^j] - \xi [K(\psi_i^j)] \quad (3.1)$$

onde
$$\hat{\psi}_i^j = \frac{1}{3} (\psi_i^{j+1} + \psi_i^j + \psi_i^{j-1}), \quad (3.2)$$

e ξ é um operador de diferença a ser discutido. δ_z e δ_{2t} são os operadores de diferença central usuais [12,15] e $R_{n+1, m+1}$ é o domínio discretizado que segue:

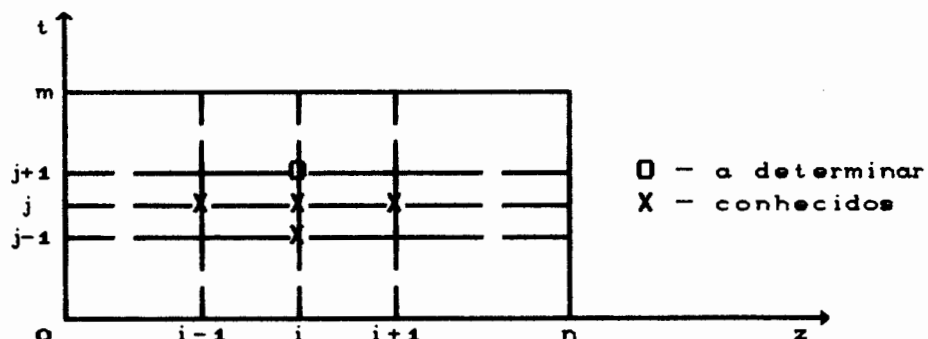


Figura 3.1 : Domínio $R_{n+1, m+1}$ discretizado.

Desenvolvendo os operadores de diferença em um ponto i genérico ($z = i \cdot \Delta z$) num determinado instante j ($t = j \cdot \Delta t$), obtemos:

$$C(\psi_i^j) \frac{\psi_i^{j+1} - \psi_i^{j-1}}{2 \Delta t} = \frac{1}{\Delta z} \left[K_{i+1/2}^j \left[\frac{\hat{\psi}_{i+1} - \hat{\psi}_i}{\Delta z} \right] - K_{i-1/2}^j \left[\frac{\hat{\psi}_i - \hat{\psi}_{i-1}}{\Delta z} \right] \right] - \xi[K(\psi_i^j)] \quad (3.3)$$

A equação (3.3) pode ser reescrita como :

$$C(\psi_i^j) \cdot (\psi_i^{j+1} - \psi_i^{j-1}) = \frac{2 \Delta t}{3 \Delta z^2} \left[K^+ \left[(\psi_{i+1}^{j+1} - \psi_i^{j+1}) + (\psi_{i+1}^j - \psi_i^j) + (\psi_{i+1}^{j-1} - \psi_i^{j-1}) \right] - K^- \left[(\psi_i^{j+1} - \psi_{i-1}^{j+1}) + (\psi_i^j - \psi_{i-1}^j) + (\psi_i^{j-1} - \psi_{i-1}^{j-1}) \right] \right] - 2 \cdot \Delta t \cdot \xi[K(\psi_i^j)] \quad (3.4)$$

sendo $K^+ = K(\psi_{i+1/2}^j) \simeq K \left[\frac{\psi_{i+1}^j + \psi_i^j}{2} \right]$ (3.5)

$$K^- = K(\psi_{i-1/2}^j) \simeq K \left[\frac{\psi_i^j + \psi_{i-1}^j}{2} \right] \quad (3.6)$$

Nessa aproximação a equação discretizada foi linearizada pois os parâmetros físicos $K(\psi)$ e $C(\psi)$ no instante $t+\Delta t$ são determinados para valores de ψ calculados no instante anterior. Desta forma, é evitado o problema de solução iterativa de um sistema de equações não-lineares. A aproximação de K^+ e K^- através da média aritmética dos pontos

vizinhos não altera a ordem de erro de truncamento do esquema.

O termo convectivo, correspondente ao operador ξ , foi discretizado por 4 esquemas distintos que estão apresentados no apêndice C. O esquema (1) segue a discretização proposta por Lees. O esquema (2) utiliza diferença ascendente (upwind), o esquema (3), diferença central e o esquema (4) considera a derivação implícita da condutividade. Nesses esquemas a discretização no instante $t+\Delta t$ é feita na forma explícita, isto é, envolvendo somente valores determinados no instante anterior.

O sistema de equações lineares resultante da discretização da equação nos pontos internos do domínio espacial pode ser escrito na forma matricial

$$[A(\psi^j)].\{\psi^{j+1}\} = \{E(\psi^j, \psi^{j-1})\} \quad (3.7)$$

ou

$$\begin{bmatrix} d_0 & a_0 & & & & & & & \\ b_1 & d_1 & a_1 & & & & & & \\ & b_2 & d_2 & a_2 & & & & & \\ & & b_3 & d_3 & a_3 & & & & \\ & & & & \cdot & \cdot & \cdot & & \\ & & & & & b_i & d_i & a_i & \\ & & & & & & \cdot & \cdot & \cdot \\ & & & & & & & & d_n \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \psi_0 \\ \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \cdot \\ \psi_i \\ \cdot \\ \psi_n \end{Bmatrix}^{j+1} = \begin{Bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \cdot \\ c_i \\ \cdot \\ c_n \end{Bmatrix} \quad (3.8)$$

onde, para $i = 1, \dots, n-1$:

$$a_i = - K^+ \quad (3.9)$$

$$b_i = - K^- \quad (3.10)$$

$$d_i = K^+ + K^- + C(\psi^j) \cdot \lambda \quad (3.11)$$

$$c_i = K^+ \left[(\psi_{i+1}^j - \psi_i^j) + (\psi_{i+1}^{j-1} - \psi_i^{j-1}) \right] - K^- \left[(\psi_i^j - \psi_{i-1}^j) + (\psi_i^{j-1} - \psi_{i-1}^{j-1}) \right] + \psi_i^{j-1} \cdot C(\psi_i^j) \cdot \lambda - 3 \cdot \Delta z^2 \cdot \xi [K(\psi_i^j)] \quad (3.12)$$

$$\lambda = \frac{3 \Delta z^2}{2 \Delta t} \quad (3.13)$$

Expressões para os elementos a_o , d_o , c_o , d_n e c_n das matrizes $A(n \times n)$ e $E(n \times 1)$, dependentes das condições de fronteira e de sua discretização, são apresentados na seção 3.3. A matriz tridiagonal resultante pode ser invertida de maneira eficiente pelo algoritmo de Thomas [34] para $n \leq 100$. Para valores de $n > 100$ deve ser usado um método iterativo [50] (por exemplo, Gauss-Seidel com sobre-relaxação [25]).

O esquema de diferença finita de três níveis desenvolvido é convergente com erro de truncamento de $O(\Delta t^2, \Delta z^2)$ conforme apresentado no apêndice E. Nesse apêndice também é discutida a estabilidade condicional do esquema.

3.3. Condições de fronteira

Neste trabalho, foi considerado um meio semi-infinito com umidade inicial uniforme

$$\psi = \psi_0 \quad , \quad t = 0 \quad , \quad z \geq 0 \quad (3.14)$$

submetido a uma taxa de infiltração constante na superfície

$$K(\psi) - K(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial z} = q_0 \quad , \quad t > 0 \quad , \quad z = 0 \quad (3.15)$$

A equação (3.15) pode ser reescrita como

$$\frac{\partial \psi}{\partial z} = 1 - \frac{q_0}{K(\psi)} \quad , \quad t > 0 \quad , \quad z = 0 \quad (3.16)$$

Para completar a formulação matemática do problema descrito por uma equação de 2ª ordem é necessária mais uma condição de contorno. Portanto, é estabelecida a condição física de que a tensão capilar no infinito não se altera, ou seja,

$$\psi = \psi_0 \quad , \quad t > 0 \quad , \quad z \rightarrow \infty \quad (3.17)$$

resultando para as matrizes A e E da equação (3.8)

$$d_n = 1 \quad (3.18)$$

$$c_n = \psi_0 \quad (3.19)$$

A condição de fronteira na superfície é considerada dependente do tempo pois a tensão capilar do solo na superfície é variável antes de ser atingido o estado de equilíbrio. A influência da discretização da derivada na fronteira foi analisada através de quatro diferentes esquemas discutidos a seguir.

No esquema (I), a fronteira foi discretizada através de um esquema de diferença ascendente de erro de truncamento de $O(\Delta z^2)$

$$\frac{\partial \psi^{j+1}}{\partial z} = \frac{-3\psi_0^{j+1} + 4\psi_1^{j+1} - \psi_2^{j+1}}{2 \cdot \Delta z} = 1 - \frac{q_0}{K(\psi_0^j)} \quad (3.20)$$

o que resulta nos seguintes valores para a_0 , c_0 e d_0 das matrizes A e E

$$a_0 = d_1 + 4 \cdot a_1 \quad (3.21)$$

$$c_0 = c_1 + a_1 \cdot \left[2 \cdot \Delta z \cdot \left(1 - \frac{q_0}{K(\psi_0^j)} \right) \right] \quad (3.22)$$

$$d_0 = b_1 - 3 \cdot a_1 \quad (3.23)$$

No esquema (II) a continuidade da função $\psi(z,t)$ entre a fronteira e o domínio foi garantida através da discretização simultânea das equações (3.1) e (3.16) na superfície utilizando um ponto fictício externo, conforme a figura 3.2.

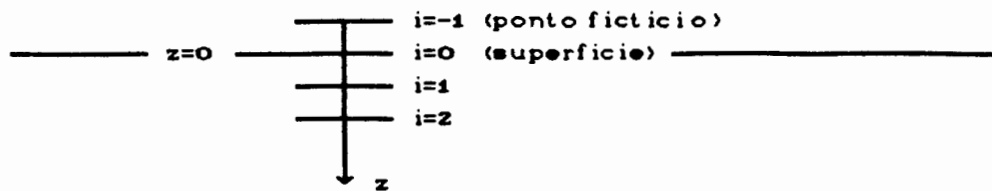


Figura 3.2 :Esquema (II) de discretização da fronteira.

A equação (3.16) é discretizada no ponto $z=0$ utilizando diferença central

$$\frac{\partial \psi^{j+1}}{\partial z} = \frac{\psi_1^{j+1} - \psi_{-1}^{j+1}}{2 \cdot \Delta z} = 1 - \frac{q_o}{K(\psi_o^j)} \quad (3.24)$$

ou

$$\psi_{-1}^{j+1} = \psi_1^{j+1} - 2 \cdot \Delta z \cdot \left(1 - \frac{q_o}{K(\psi_o^j)} \right) \quad (3.25)$$

Substituindo (3.25) na equação (3.4) discretizada para o ponto $z=0$, o ponto fictício é removido e os valores de a_o , c_o e d_o , após algum algebrismo, são dados por

$$a_o = - (K^+ + K^-) \quad (3.26)$$

$$c_o = (K^+ + K^-) \cdot \left[(\psi_1^j - \psi_o^j) + (\psi_1^{j-1} - \psi_o^{j-1}) \right] - 3\Delta z \cdot (K^+ - K^-) - 2\Delta z \cdot K^- \cdot \left[2 \cdot \left(1 - \frac{q_o}{K(\psi_o^j)} \right) + \left(1 - \frac{q_o}{K(\psi_o^{j-1})} \right) \right] + \psi_o^{j-1} \cdot C(\psi_o^j) \cdot \lambda \quad (3.27)$$

$$d_o = K^+ + K^- + C(\psi_o^j) \cdot \lambda \quad (3.28)$$

sendo $K^- = K(\psi_0^j)$. Esse deslocamento para o cálculo de K^- é necessário pois o ponto $i=-1$ é fictício e a equação (3.6) não pode ser aplicada.

No esquema (III), todo o processo descrito anteriormente é repetido fazendo $K^+ = K(\psi_1^j)$ para acompanhar o deslocamento feito na determinação de K^- .

No esquema (IV), a condição de fronteira (equação (3.16)) foi substituída diretamente no processo de discretização de Lees conforme mostrado a seguir. Desenvolvendo os operadores de diferença δ_z da equação (3.1) por diferença ascendente para o ponto $z=0$, obtém-se:

$$C(\psi_0^j) \frac{\psi_0^{j+1} - \psi_0^{j-1}}{2 \Delta t} = \frac{1}{\Delta z} \left[K(\psi_1^j) \hat{\delta}_z \psi_1^j - K(\psi_0^j) \hat{\delta}_z \psi_0^j \right] - \frac{K(\psi_1^j) - K(\psi_0^j)}{\Delta z} \quad (3.29)$$

Por outro lado, a equação (3.16) também pode ser aproximada pelo operador δ_z

$$\delta_z \hat{\psi}_0^j = \frac{\partial \psi}{\partial z} = 1 - \frac{q_0}{K(\psi)} \quad (3.30)$$

Substituindo a expressão (3.30) na equação (3.29), resulta

$$a_0 = - K(\psi_1^j) \quad (3.31)$$

$$c_0 = K(\psi_1^j) \cdot \left[(\psi_1^j - \psi_0^j) + (\psi_1^{j-1} - \psi_0^{j-1}) \right] + \psi_0^{j-1} \cdot C(\psi_0^j) \cdot \lambda - 3 \cdot \Delta z \cdot \left[K(\psi_1^j) - q_0 \right] \quad (3.32)$$

$$d_0 = K(\psi_1^j) + C(\psi_0^j) \cdot \lambda \quad (3.33)$$

Capítulo 4

MEIO POROSO SIMULADO

O teste de um método numérico geralmente é feito pela comparação dos resultados da simulação com dados experimentais obtidos em ensaios de laboratório.

O método proposto foi aplicado à areia para a qual HAVERKAMP et al [22] realizaram medidas experimentais do fator de umidade e da tensão capilar. As condições inicial e de fronteira do experimento foram

$$\begin{aligned}\psi &= -61.5 \text{ cm} & , t = 0 , 0 \leq z < 70 \text{ cm} \\ q_0 &= 13.69 \text{ cm/h} & , t > 0 , z = 0 \\ \psi &= -61.5 \text{ cm} & , t > 0 , z = 70 \text{ cm}\end{aligned}\tag{4.1}$$

As relações entre condutividade hidráulica (K), fator de umidade (θ) e potencial capilar (ψ) foram ajustadas pelas seguintes expressões

$$K(\psi) = K_s \frac{\beta}{\beta + |\psi|^{\epsilon_1}} \quad , K_s = 34 \text{ cm/h} \tag{4.2}$$
$$\beta = 1.175 \times 10^6$$
$$\epsilon_1 = 4.74$$

$$\theta(\psi) = \frac{\alpha \cdot (\theta_s - \theta_r)}{\alpha + |\psi|^{\epsilon_2}} + \theta_s \quad , \theta_r = 0.075 \quad (4.3)$$

$$\theta_s = 0.287$$

$$\alpha = 1.611 \times 10^6$$

$$\epsilon_2 = 3.96$$

sendo K_s - condutividade do solo saturado
 θ_s - fator de umidade do solo saturado
 θ_r - fator de umidade residual (higroscópica)
 $\beta, \alpha, \epsilon_1, \epsilon_2$ - constantes de ajuste

Nas figuras 4.1 e 4.2, respectivamente, são apresentadas as curvas de correlação de $K(\psi)$ e $\theta(\psi)$.

Os perfis de umedecimento medidos no experimento ao longo do tempo foram apresentados no artigo citado podendo ser usados para a verificação do método numérico discutido.

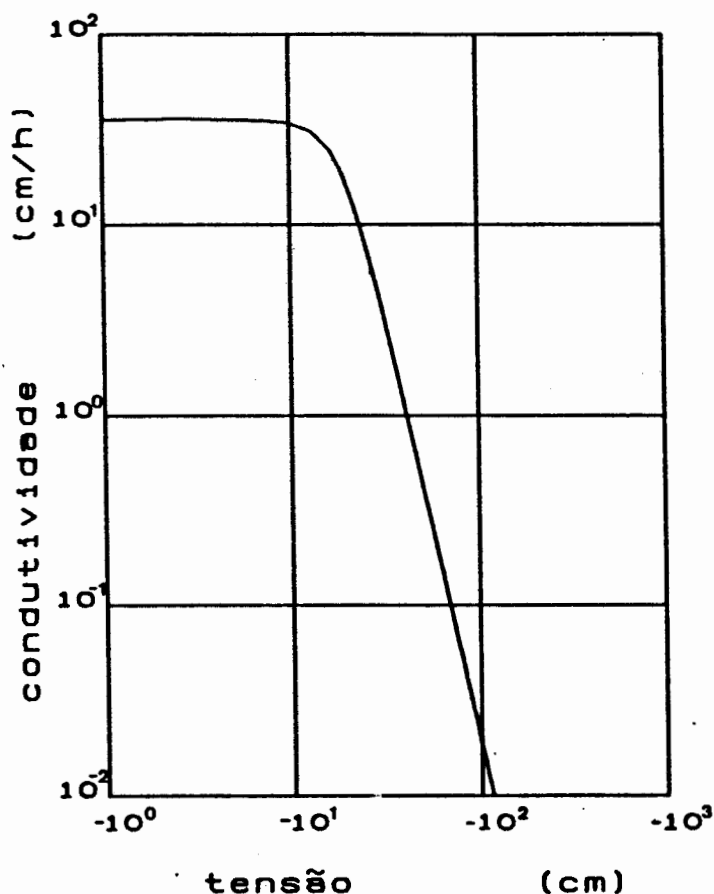


Figura 4.1 : Curva de correlação entre condutividade (K) e tensão capilar (ψ) dada pela expressão (4.2).

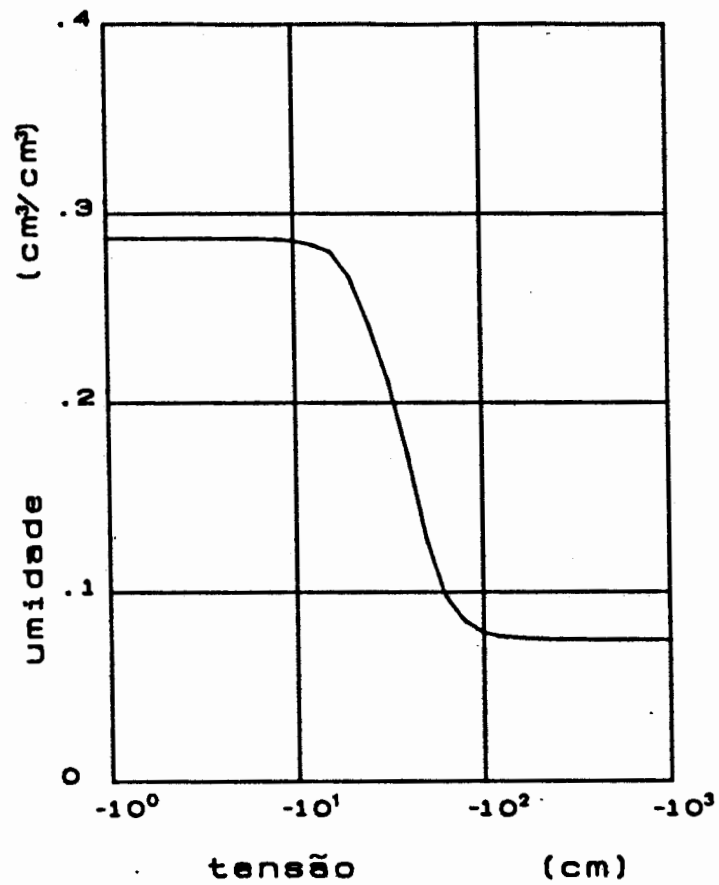


Figura 4.2 : Curva de correlação entre fator de umidade (θ) e tensão capilar (ψ) dada pela expressão (4.3).

Capítulo 5

RESULTADOS NUMÉRICOS

5.1. Parâmetros de simulação

Os esquemas discutidos no capítulo 3 foram testados através da simulação da infiltração e escoamento de água em uma coluna de areia sujeita às condições iniciais e de contorno dadas pelas equações (4.1). Os parâmetros físicos do meio poroso (areia) são descritos pelas expressões (4.2).

O processo foi simulado até 2880 segundos (0.8 horas) de infiltração sendo a variável temporal discretizada em intervalos $\Delta t=5$ seg.

O domínio espacial foi discretizado em intervalos $\Delta z=1$ cm. Para reduzir o tempo de execução, a simulação de cada esquema foi iniciada com apenas 5 pontos da malha na direção z e a ampliação da mesma ocorria de modo a acompanhar o avanço da fronteira de umedecimento com o decorrer do tempo.

5.2. Esquemas de discretização do termo convectivo

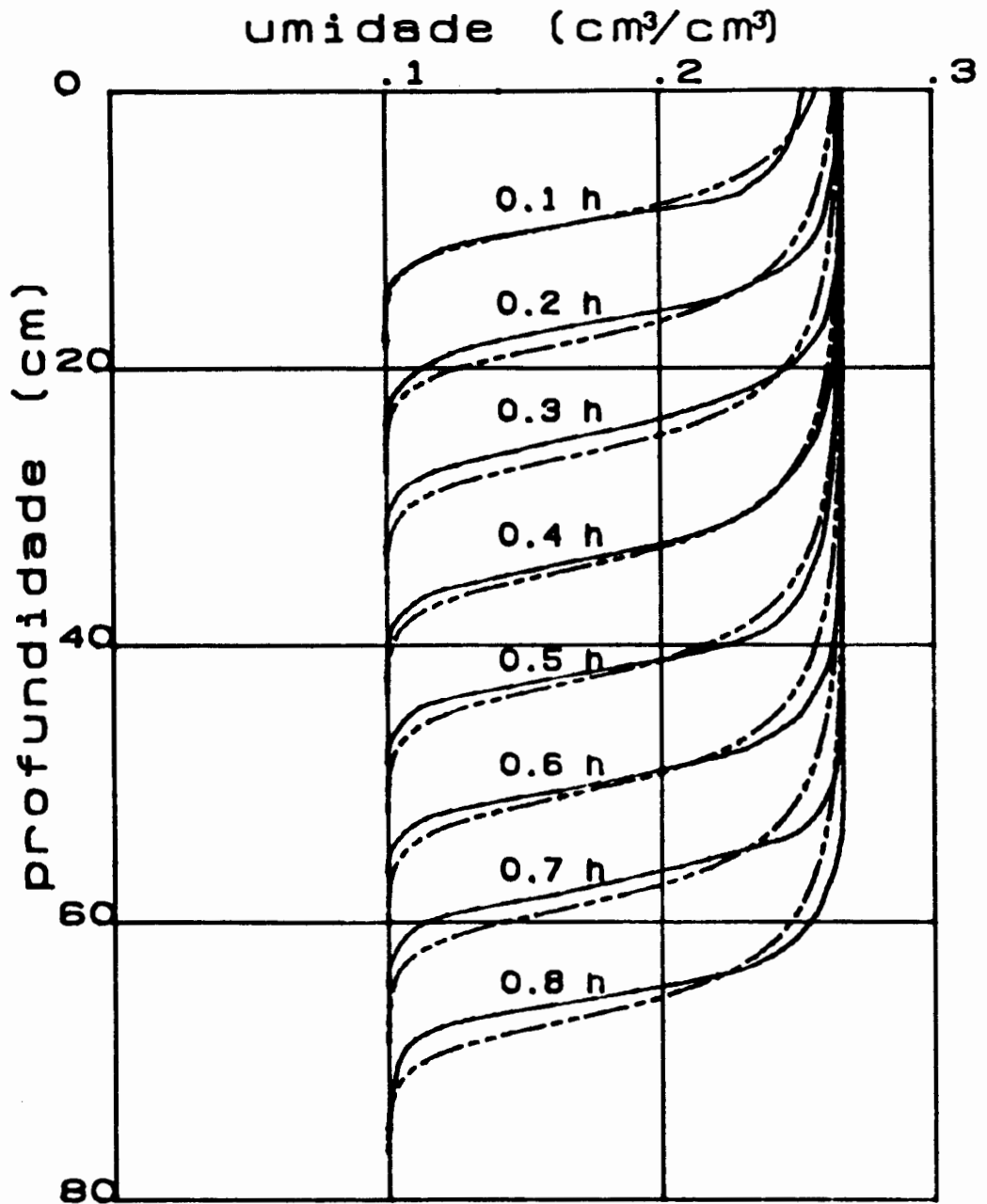
Na simulação dos esquemas apresentados no apêndice C a condição de fronteira na superfície foi discretizada de acordo com o esquema (I) desenvolvido na seção 3.3.

Nas figuras 5.1 a 5.4, os perfis de umidade calculados pelos diferentes esquemas de discretização do termo convectivo são comparados com as curvas experimentais de HAVERKAMP et al [22] para determinados instantes do processo de infiltração.

Na tabela 5.1, estão apresentados o tempo computacional de simulação e o balanço de massa ao final do processo de infiltração para cada esquema. O balanço de massa é dado pela diferença percentual entre a quantidade de água na coluna, segundo o perfil de umidade calculado, e a água teoricamente infiltrada pela superfície com taxa constante.

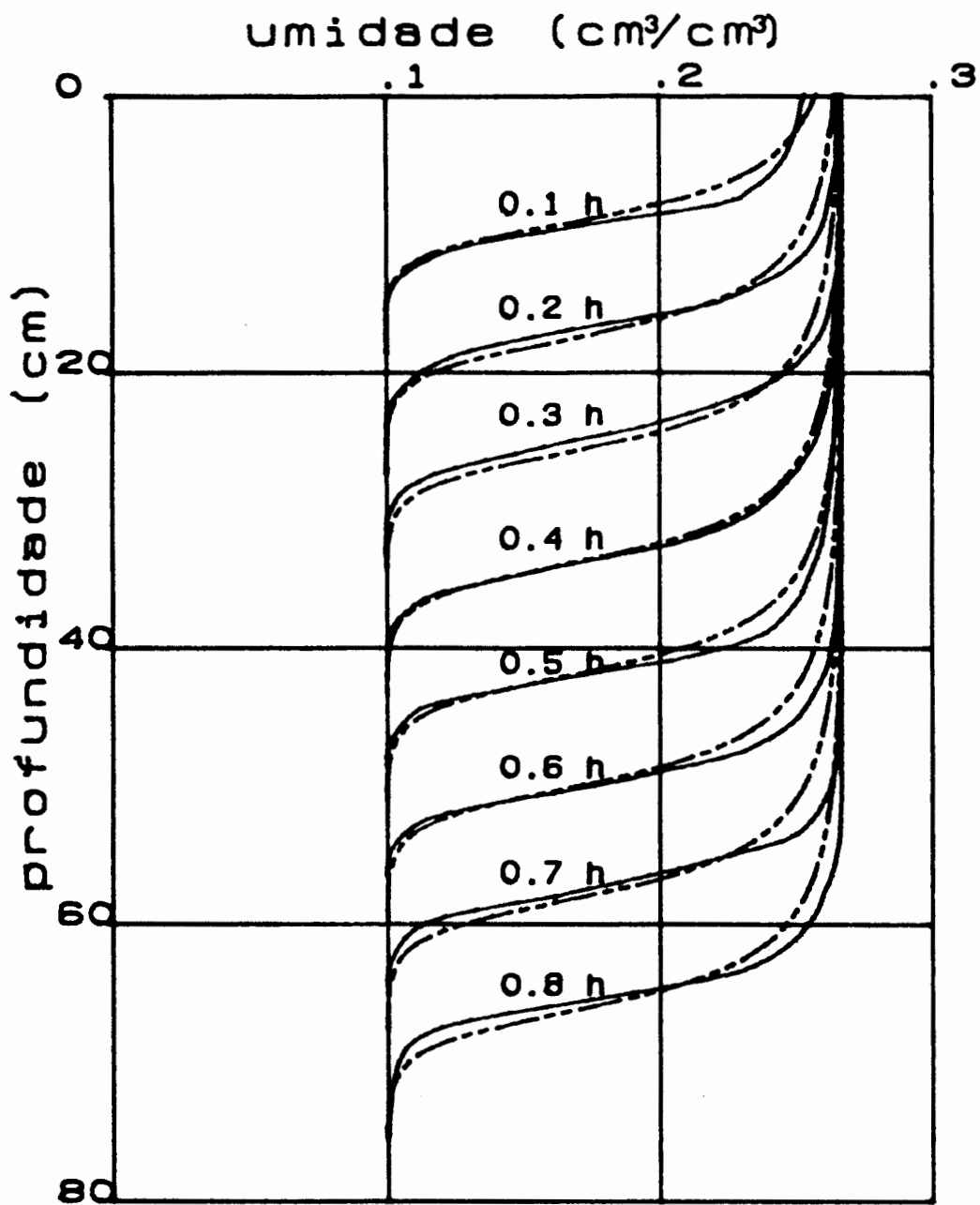
Tabela 5.1 - Balanço de massa e tempo de execução para 0.8 horas de infiltração simulada através dos esquemas de discretização do termo convectivo (apêndice C).

| | esquema de discretização | | | |
|-----------|--------------------------|------|-------|-------|
| | 1 | 2 | 3 | 4 |
| balanço % | 0.97 | 0.24 | 31.51 | 33.01 |
| tempo seg | 345 | 409 | 488 | 502 |



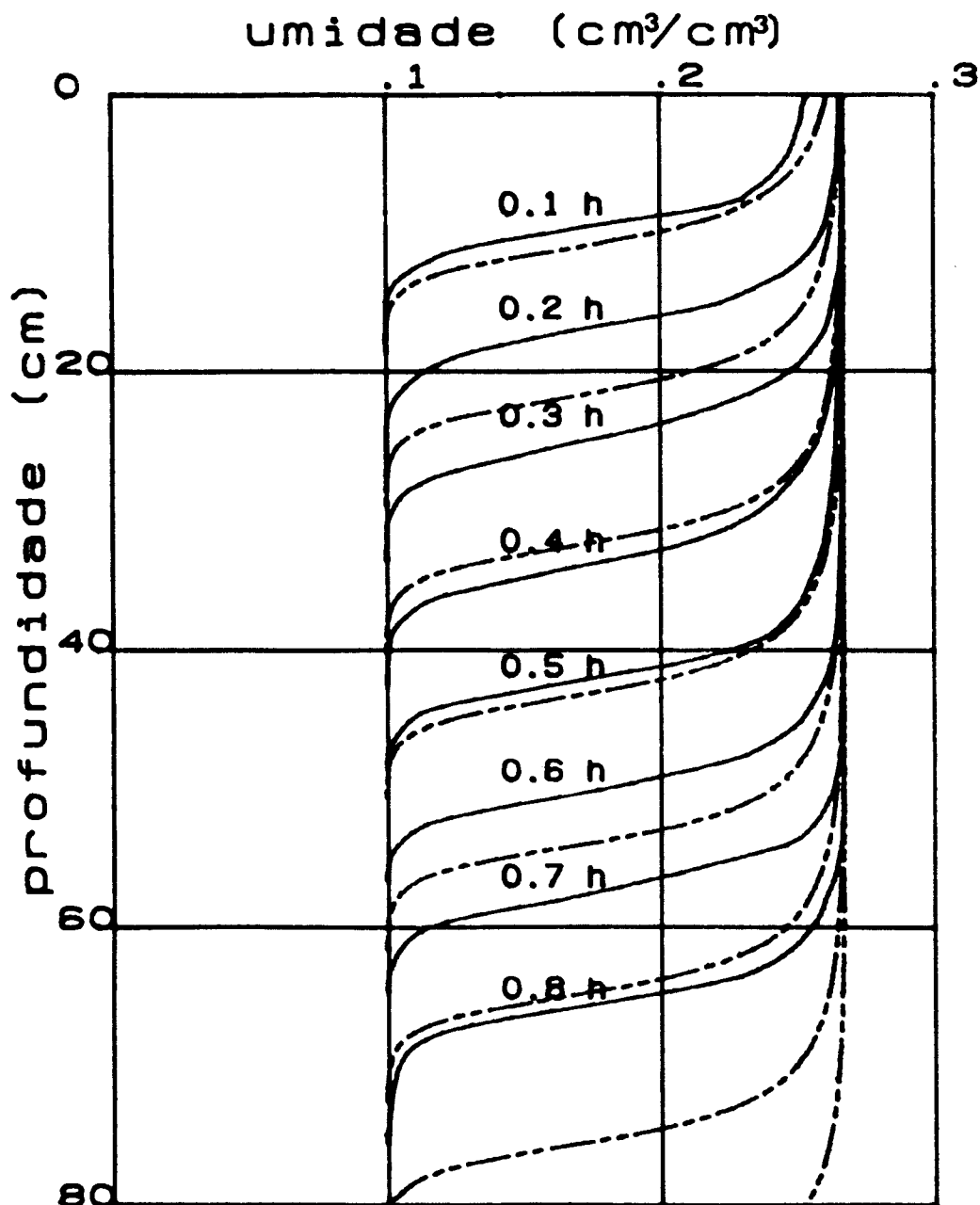
experimental. _____
lees (1). _____

Figura 5.1 : Perfis de umidade calculados pelo esquema 1 (termo convectivo discretizado por Lees) comparados com dados experimentais.



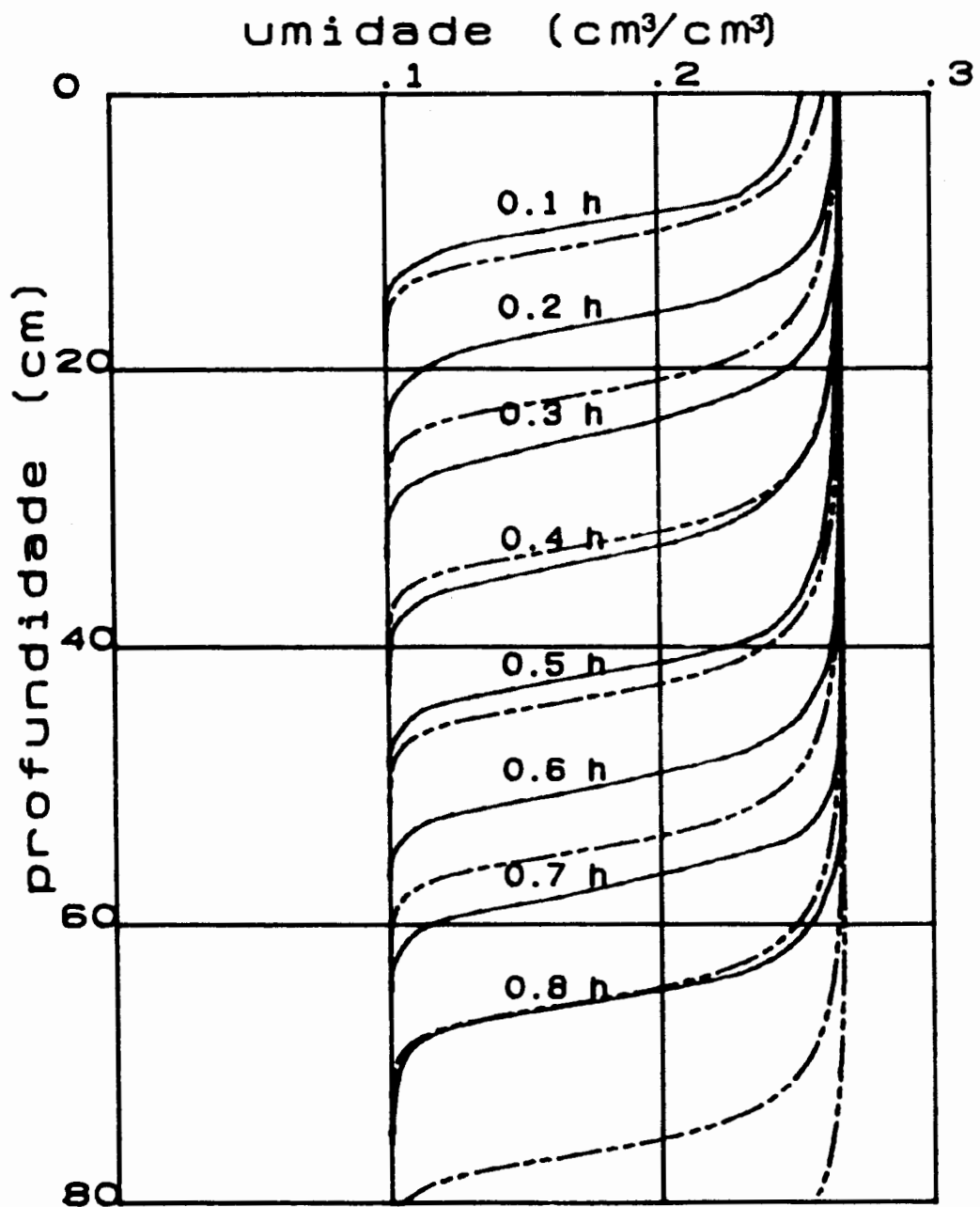
experimental. _____
ascendente (2). _____

Figura 5.2 : Perfis de umidade calculados pelo esquema 2 (termo convectivo discretizado por diferença ascendente) comparados com dados experimentais.



experimental. _____
central (3). _____

Figura 5.3 : Perfis de umidade calculados pelo esquema 3 (termo convectivo discretizado por diferença central) comparados com dados experimentais.



experimental. _____
der. impl. (4). - - - - -

Figura 5.4 : Perfis de umidade calculados pelo esquema 4 (termo convectivo discretizado com derivação implícita) comparados com dados experimentais.

Os resultados calculados pelos esquemas (1) e (2) (figs. 5.1 e 5.2, respectivamente) estão de acordo com os dados experimentais, particularmente na descrição do avanço da fronteira de umedecimento. O afastamento entre as curvas experimentais e calculadas, principalmente na região de teor de umidade mais elevado ($\sim 0.25-0.26$), ocorrem, provavelmente, devido a incertezas no ajuste dos parâmetros físicos. O erro de menos de 1% no balanço de massa é considerado satisfatório. O esquema (1) em termos de tempo de processamento é melhor, porém o balanço de massa indica um erro de aproximação maior que no esquema (2).

Por outro lado, os esquemas de discretização (3) e (4) (figs. 5.3 e 5.4, respectivamente), não descrevem corretamente o fenômeno de infiltração e redistribuição de água no solo. A observação é comprovada pelos erros de mais de 30% no balanço de massa.

O erro observado na discretização (3) ocorre devido ao esquema de aproximação do termo convectivo. GREENSPAN e CASULLI [20] mostraram matematicamente que o esquema de diferença finita central é condicionalmente estável para equações com termo convectivo. BROOKS e HUGHES [10] também observaram que os resultados obtidos com a discretização por diferença central são inadequados devido a oscilações espúrias na solução. Esse fato ocorre face à não-simetria da matriz de discretização introduzida pelo termo convectivo. O problema de instabilidade numérica constatada é resolvido discretizando o termo convectivo por esquemas ascendentes

(upwind) [10, 20].

Na simulação considerada (3), a aproximação por diferença central em um determinado ponto introduz, no termo convectivo da equação, informação de um ponto anterior (mais próximo da superfície portanto com fator de umidade (θ) maior). Esse ponto apresenta condutividade mais alta e, em consequência o resultado final é um aumento da velocidade de avanço da fronteira de umedecimento, conforme observado.

A discussão apresentada nos parágrafos anteriores também se aplica ao esquema (4). Além disso, o incremento no erro deve-se, possivelmente, à utilização da derivada da expressão (4.2) que descreve a condutividade (K) como função da tensão capilar (ψ). No capítulo 2 foram discutidos os problemas para utilização do modelo matemático devido, principalmente, à dificuldade de ajuste dos parâmetros físicos envolvidos. Evidentemente, não dispondo de dados experimentais relativos a gradientes, a descrição da derivada no esquema numérico é aproximada e os erros introduzidos na simulação são maiores.

5.3. Esquemas de discretização da fronteira

Os esquemas de discretização da fronteira apresentados na seção 3.3 foram testados utilizando o esquema (1) do apêndice C para a aproximação do termo convectivo nos pontos interiores do domínio espacial. A comparação entre os perfis calculados e as curvas experimentais são apresentados

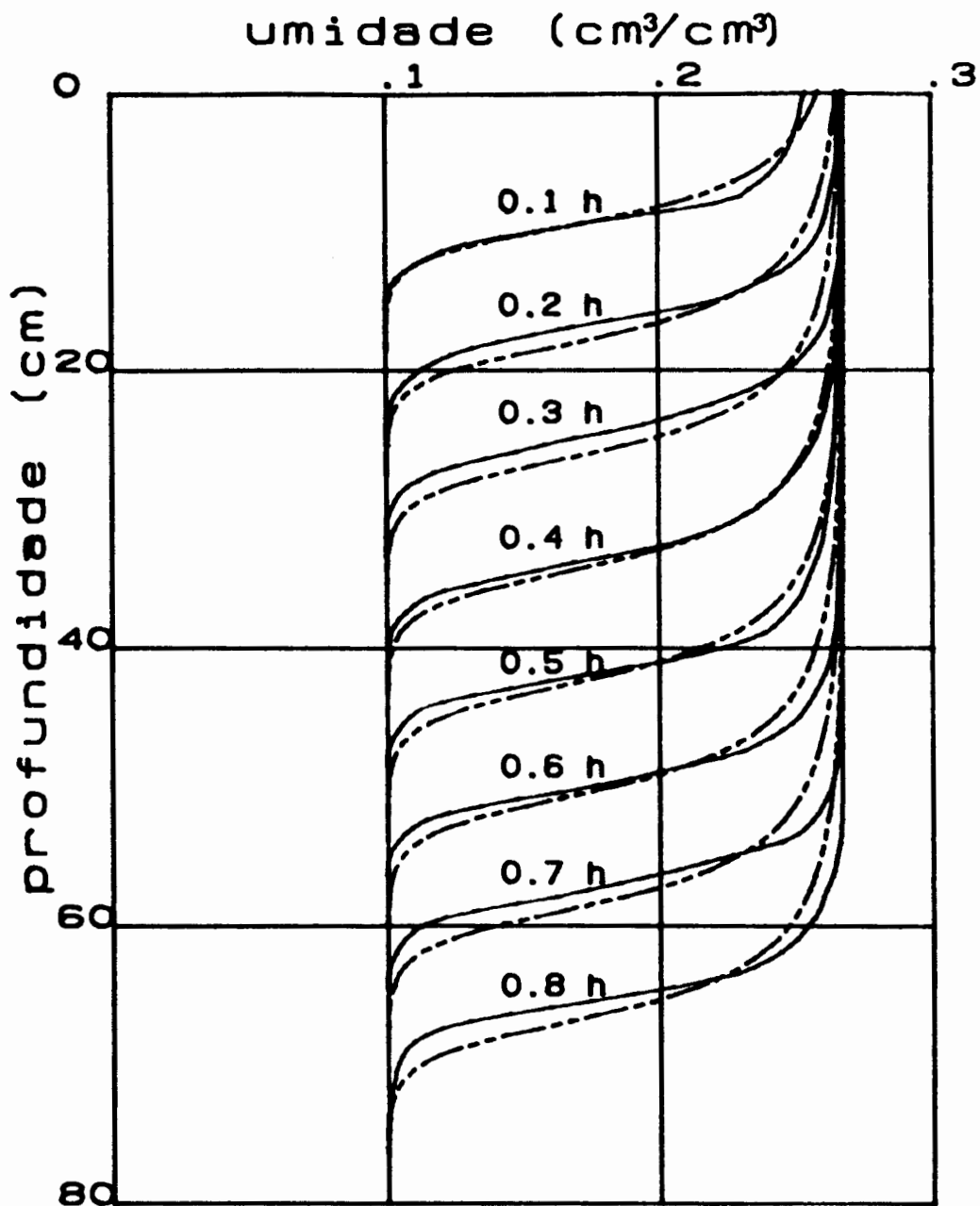
nas figuras 5.5 a 5.8. A figura 5.5, referente ao esquema (I) foi obtida pelo mesmo esquema (1) da seção anterior, contudo foi repetido nesta seção para facilitar a comparação entre os vários esquemas.

Os tempos de simulação e o balanço de massa ao final do processo de infiltração são dados na tabela 5.2.

Tab. 5.2.- Balanço de massa e tempo de execução para 0.8 horas de infiltração simulada através dos esquemas de discretização da cond. de fronteira (Seção 3.3)

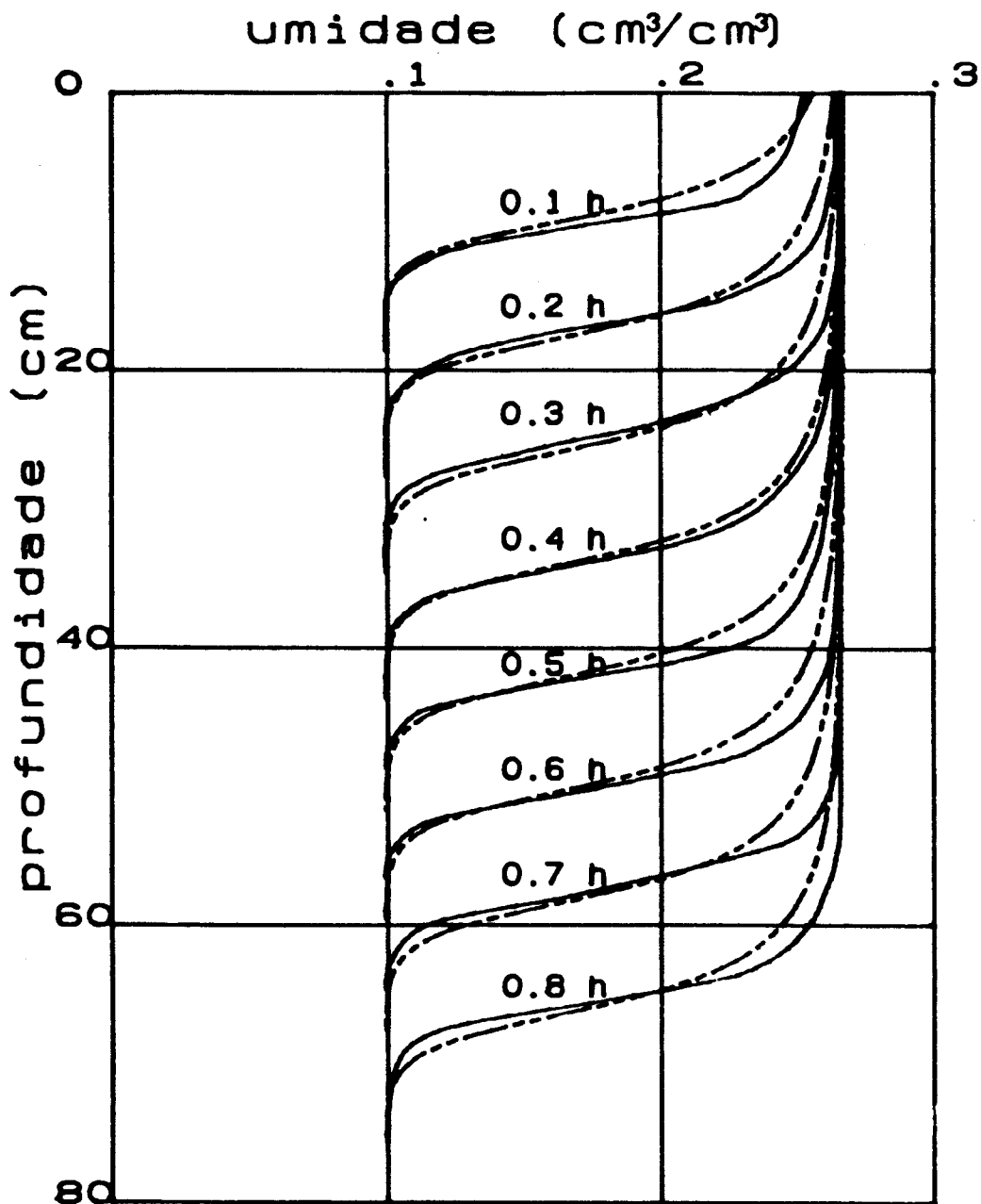
| | esquema de discretização | | | |
|-----------|--------------------------|-------|------|------|
| | I | II | III | IV |
| balanço % | 0.97 | -0.21 | 0.66 | 1.71 |
| tempo seg | 345 | 346 | 350 | 353 |

Conforme se observa, todos os esquemas são operacionais e descrevem adequadamente o fenômeno. Contudo, os resultados obtidos diferem entre si, o que justifica a preocupação na escolha do esquema de discretização na fronteira. A curva que mais se aproxima dos valores experimentais é dada pelo esquema (II) (fig. 5.6), o que se comprova, também, pelo balanço de massa (-0.21% de erro). Em termos de tempo de processamento, os esquemas são equivalentes, conforme a tabela 5.2.



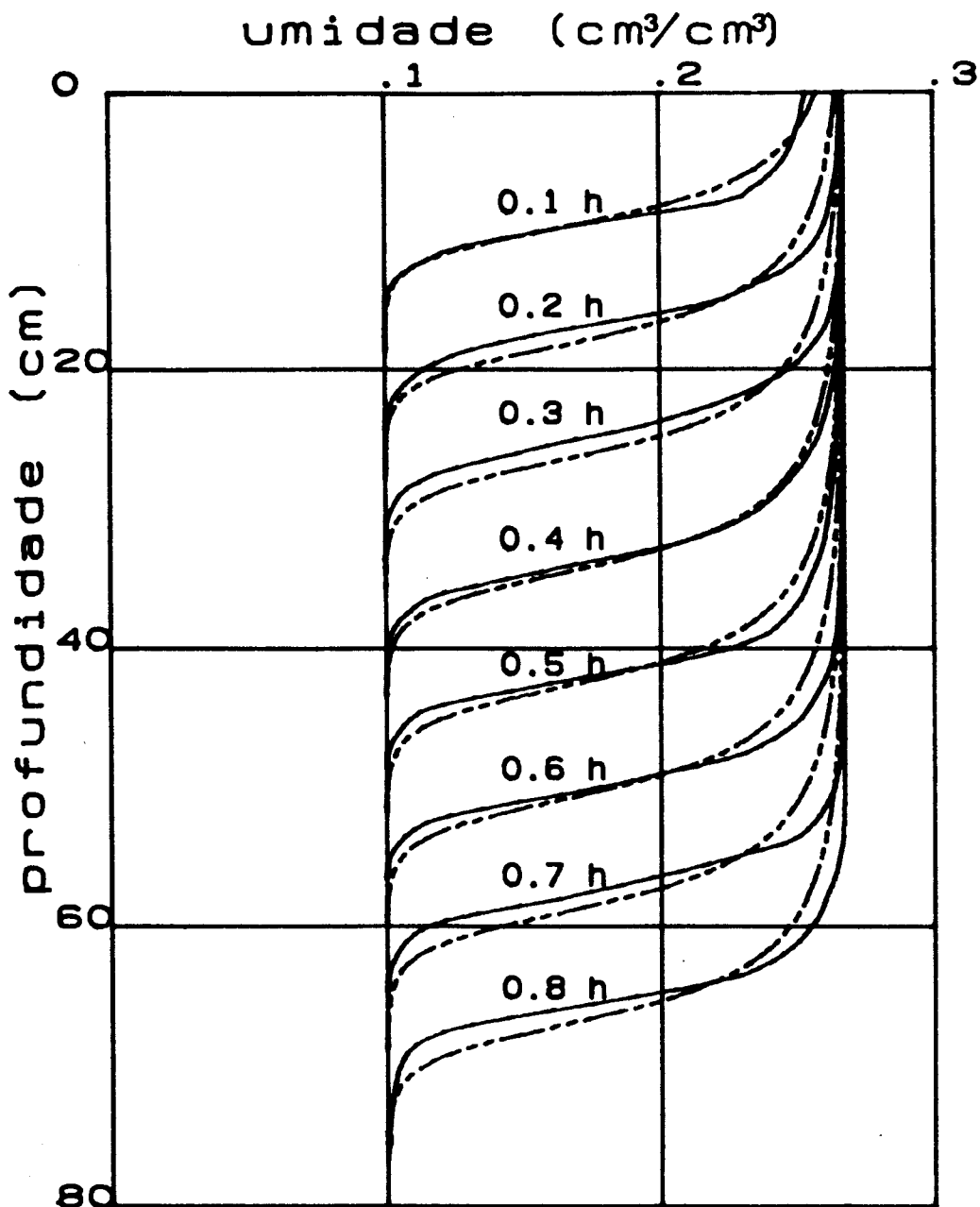
experimental. _____
dif. ascend. (I). _____

Figura 5.5 : Perfis de umidade calculados pelo esquema I (condição na superfície discretizada por diferença ascendente) comparados com dados experimentais.



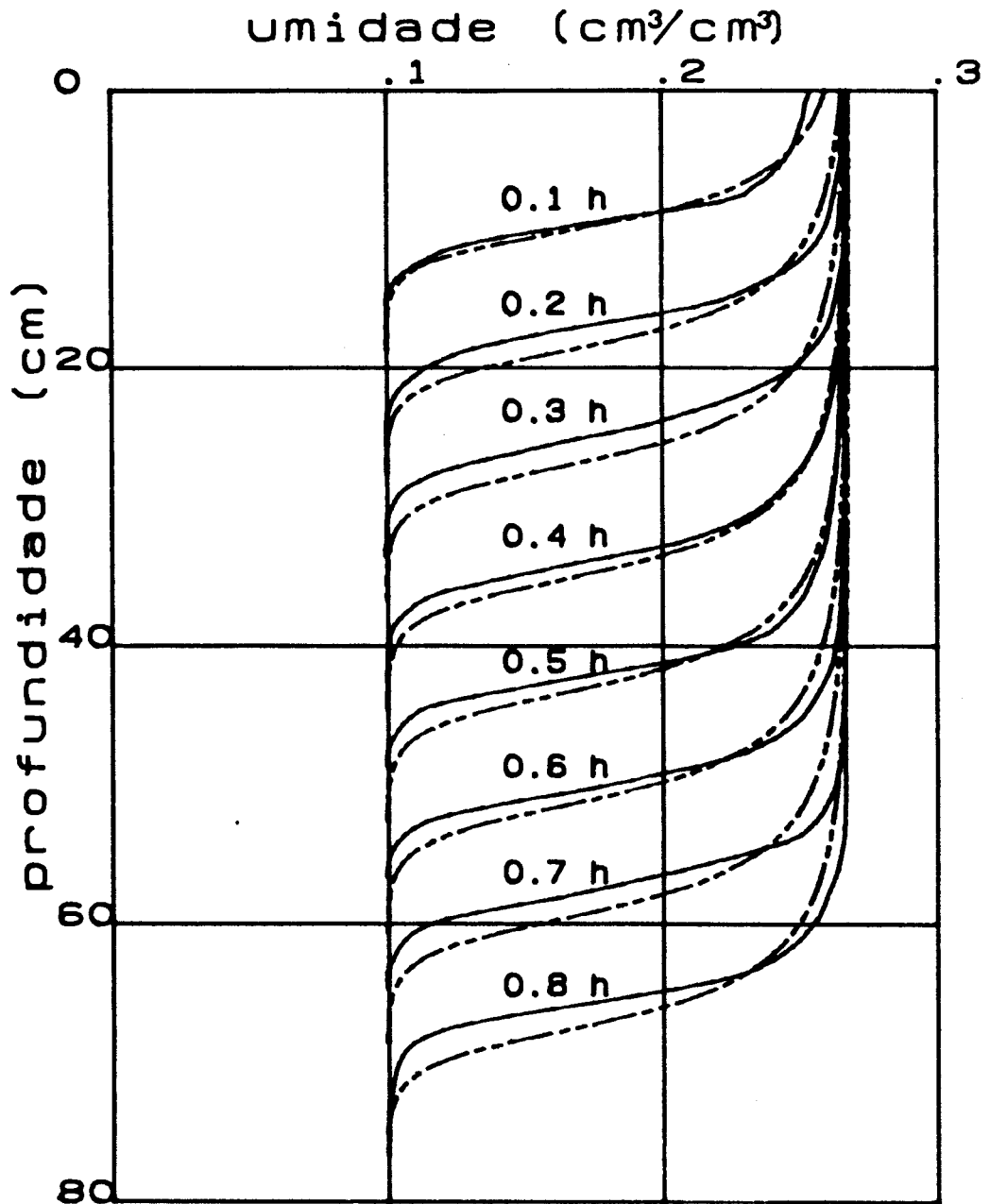
experimental. _____
fictício 1 (II). - - - - -

Figura 5.6 : Perfis de umidade calculados pelo esquema II (condição na superfície discretizada com ponto fictício) comparados com dados experimentais.



experimental. _____
fictício 2 (III). - - - - -

Figura 5.7 : Perfis de umidade calculados pelo esquema III (condição na superfície discretizada com ponto fictício) comparados com dados experimentais.



experimental. _____
subst. (IV) .-----

Figura 5.8 : Perfis de umidade calculados pelo esquema IV (condição na superfície substituída na equação 2.10) comparados com dados experimentais.

5.4 Comparação com esquemas de dois níveis

Na fase final do trabalho foi estruturado um esquema de discretização baseado na combinação das diferentes alternativas propostas. Considerando as discussões apresentadas nas seções 4.2 e 4.3 e novas simulações realizadas, optou-se pelo esquema (2) (termo convectivo aproximado por diferença ascendente) para discretização do domínio e pelo esquema (III) (com ponto fictício) para discretização da condição de fronteira.

Para avaliar a eficiência computacional do esquema foram utilizados os resultados de um método de diferença finita de dois níveis como comparação. O método denominado h-implícito por HAVERKAMP et al [22] é apresentado no apêndice D.

Ambos os métodos foram simulados utilizando os mesmos parâmetros físicos e intervalos de discretização citados na seção 4.1.

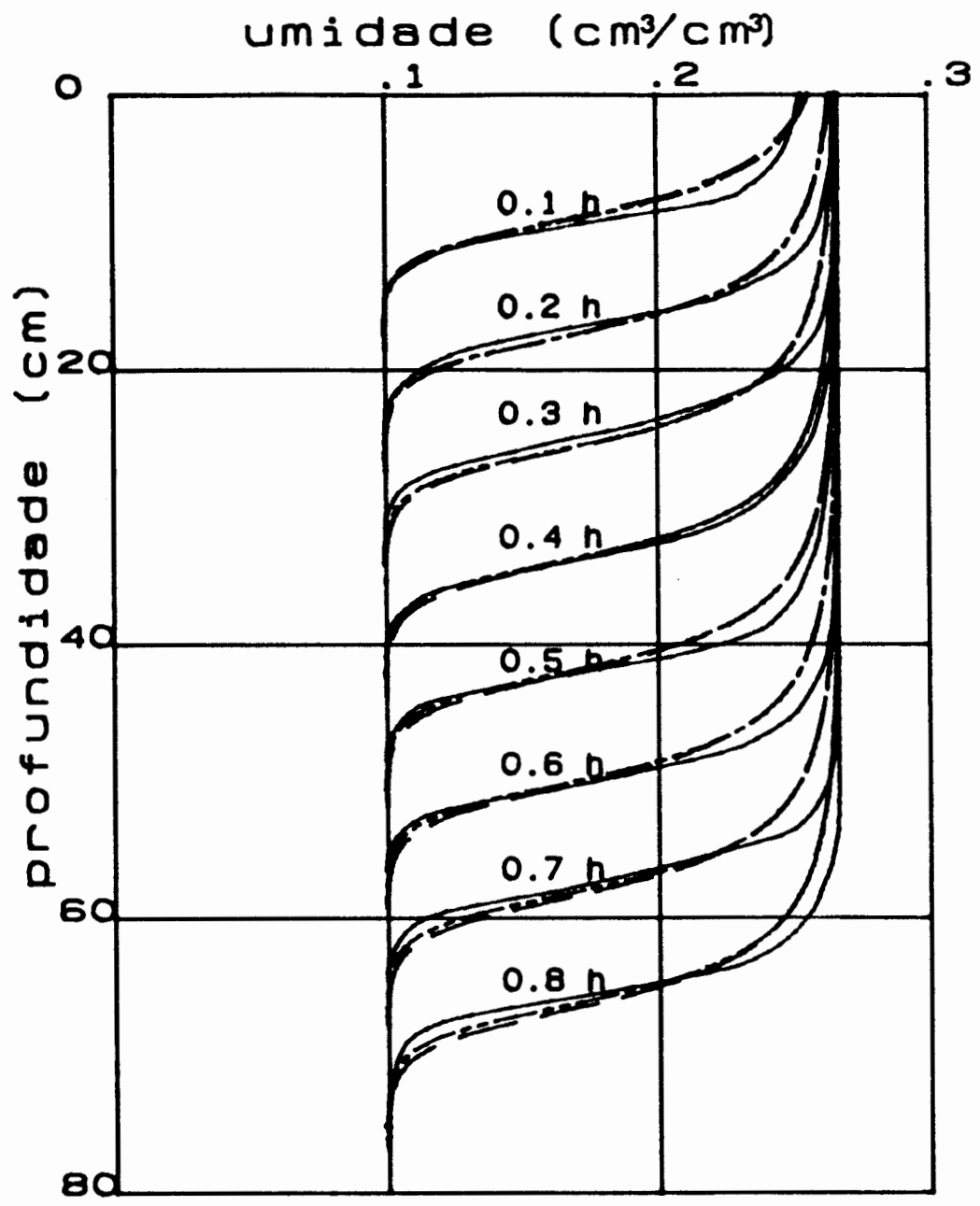
Na figura 5.9, os resultados de simulação obtidos pelos métodos de dois e três níveis são comparados com os dados experimentais.

O tempo de processamento bem como o balanço de massa para cada instante apresentado na figura 5.9 são dados na tabela 5.3.

Tab. 5.3.- Balanço de massa e tempo de execução para 0.8 horas de infiltração simulada através dos esquemas de dois e três níveis.

| instante simulado (segs) | esquema de discretização | | | |
|-----------------------------|--------------------------|-----------|-------------|-----------|
| | três níveis | | dois níveis | |
| | balanço % | tempo (s) | balanço % | tempo (s) |
| 360 | 7.86 | 14.7 | 6.79 | 13.4 |
| 720 | 3.00 | 42.4 | 3.00 | 39.1 |
| 1080 | 1.55 | 80.5 | 1.82 | 74.1 |
| 1440 | 0.88 | 128.3 | 1.24 | 117.9 |
| 1800 | 0.49 | 185.8 | 0.90 | 170.3 |
| 2160 | 0.24 | 252.9 | 0.68 | 231.4 |
| 2520 | 0.06 | 329.8 | 0.52 | 300.9 |
| 2880 | 0.08 | 416.2 | 0.40 | 379.0 |

Verifica-se que os resultados obtidos pelo esquema de três níveis aproximam-se mais das curvas experimentais que os do esquema de dois níveis. Os balanços de massa para cada instante considerado também comprovam essa observação. Contudo, o tempo computacional necessário para o esquema de três níveis é maior e a programação é um pouco mais trabalhosa, além de requerer mais espaço de memória do computador.



experimental. _____
dois níveis. - - - - -
três níveis. - . - . - .

Figura 5.9 : Perfis de umidade calculados pelos esquemas de dois e três níveis comparados com dados experimentais.

Capítulo 6

CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

Com base no trabalho apresentado, conclui-se que o método de diferença finita de três níveis proposto por Lees apresenta vantagem na simulação de fenômenos de difusão descritos por equações que apresentam termo convectivo. Em comparação com esquema de diferença finita de dois níveis, o esquema de três níveis apresenta resultados percentualmente mais precisos. No entanto, o esforço computacional é maior, sendo o tempo de processamento (CPU) da simulação aumentado em aproximadamente 10%.

O esquema de discretização do termo convectivo tem importância fundamental na solução, podendo, em certos casos, gerar resultados totalmente errados. A discretização por diferença ascendente (upwind) apresentou melhores resultados em termos de precisão, o que confirma as afirmações encontradas na literatura [10,20].

Em simulações com condições de fronteira que apresentam derivada da função (como neste caso, devido à taxa de infiltração constante na superfície), a discretização deve

ser feita de modo a assegurar a continuidade da função entre fronteira e domínio espacial. Isso pode ser feito discretizando, no ponto da fronteira, a equação que descreve o fenômeno e a condição de fronteira simultaneamente. Verificadas essas condições, os resultados obtidos foram considerados excelentes.

Para a continuidade deste trabalho, o esquema deve ser generalizado para simulações em duas ou mais dimensões. BONACINA e COMINI [6] apresentaram um desenvolvimento teórico do esquema de três níveis para problemas de transmissão de calor em duas dimensões. Além disso, o esquema deve ser avaliado para outras condições de fronteira como, por exemplo, com tensão capilar constante na superfície.

Seguindo essa linha de pesquisa, o mesmo fenômeno pode ser estudado partindo de conceitos da teoria de fronteira móvel [53,57].

Pode-se, também, abordar o problema através da aplicação da transformada de Laplace na variável temporal. Desse modo, o processo iterativo necessário nos métodos em que o tempo é discretizado em pequenos intervalos é evitado. Além disso, as limitações na discretização impostas pelas condições de estabilidade e critérios de erro são atenuadas. A equação transformada é, então, abordada por outros métodos de solução para o domínio espacial como, por exemplo, elementos finitos ou diferenças finitas. Esses métodos híbridos representam, atualmente, uma promissora tendência [13]. Resultados preliminares com a aplicação de diferenças

finitas na equação transformada indicam a viabilidade dessa proposta para o problema apresentado.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. ABRIOLO, L.M. Finite element solution of the unsaturated flow equation using hierarchic basis functions. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON FINITE ELEMENTS IN WATER RESOURCES, 6, 1986, Lisboa. Proceedings ... Berlin: Springer, 1986. p.125-133.
2. ADAM, Y. Nonlinear instability advection-diffusion numerical models. *Applied Mathematical Modelling*, v.9, p.434-440, Dec. 1985.
3. ADOMIAN, G. A review of the decomposition method in applied mathematics. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, v.135, n.2, p.501-544, Nov. 1988.
4. ANDERSON, M.G. Prediction of soil suction for slopes in Hong Kong. Hong Kong: Geotechnical Control Office of Engineering Development Department, 1984. 243p.
5. BONACINA, C., COMINI, G. On a numerical method for the solution of the unsteady state heat conduction equation with temperature dependent parameters. In: INTERNATIONAL CONGRESS OF REFRIGERATING, 13, Washington. p.329-336.
6. _____. On the solution of the nonlinear heat conduction equations by numerical methods. *Journal of Heat and Mass Transfer*, v.16, p.581-589, 1973.
7. BOUTROS, Y.Z., MANSOUR, H., EL-AWADI, I.A. Application of Gauss principle of least constraint to the infiltration into unsaturated soil. *Applied Mathematical Modelling*, v.13, p.716-723, Dec. 1989.
8. BROADBRIDGE, P., WHITE, I. Constant rate rainfall infiltration: a versatile nonlinear model. 1. Analytic solution. *Water Resources Research*, v.24, n.1, p.145-154, Jan. 1988.
9. _____. Reply. *Water Resources Research*, v.24, n.12, p.2109-2110, Dec. 1988.
10. BROOKS, A.N., HUGHES, T.J.R. Streamline upwind / Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v.32, p.199-259, 1982
11. BROOKS, R.H., COREY, A.T. Hydraulic properties of porous media. *Hidrol. Pap. 3*, Civ. Eng. Dept., Colo State Univ., Fort Collins, 1964.

12. CARNAHAN, B., LUTHER, H.A., WILKES, J.O. **Applied Numerical Methods**. New York: John Wiley & Sons, 1969. 604p.
13. CHEN, H.-T., CHEN, C.-K., Hybrid Laplace transform / finite difference method for transiente heat conduction problems. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**. v.26, p.1433-1447, 1988.
14. CHILDS, E.C. Concepts of soil water phenomena. **Soil Science**, v.113, n.44, p.246-253, 1972.
15. DUCHATEAU, P., ZACHMANN, D.W. **Schaum's outline of theory and problems of partial differential equations**. New York: McGraw-Hill, 1986. 241p.
16. FEDDES, R.A., KABAT, P., VAN BAKEL, P.J.T. et al. Modelling soil water dynamics in the unsaturated zone - State of the art. **Journal of Hydrology**, v.100, p.69-111, 1988.
17. FRANCISS, F.O. **Hidráulica de meios permeáveis: escoamento em meios porosos**. São Paulo: Interciência, 1980. 169p.
18. GARDNER, W.R. Some steady-state solutions of the unsaturated moisture flow equation with application to evaporation from a water table. **Soil Science**, v.85, p.244-249, 1958.
19. GIESEL, W., RENGER, M. Numerical treatment of the unsaturated water flow equation: comparison of experimental and computed results. **Water Resources Research**, v.9, n.1, p.174-177, Feb. 1973.
20. GREENSPAN, D., CASULLI, V. **Numerical analysis for applied mathematics, science, and engineering**. New York: Addison-Wesley Publishing Company, 1988. 341p.
21. HARR, M.E. **Groundwater and seepage**. New York: McGraw-Hill, 1962. 315p.
22. HAVERKAMP, R., VAUCLIN, M., JOUMA, J. et al. A comparison of numerical simulation models for one-dimensional infiltration. **Soil Science Society of America Journal**, v.41, p.285-294, 1977.
23. HOFFMANN, C., SCHMID, G., SCHRÖDER, W. Einsatz von mathematischen Grundwassermodellen bei der Entwicklung einer Planungskonzeption für die Ergänzung des Bauplanes der LINEG. In 17. Wasserbauseminar, Aachen, Jan. 1987. 35p.
24. HOGARTH, W.L., PARLANGE, J.-Y. A simple method for the rapid determination of exponential soil-water diffusivity in the laboratory. **Advances in Water Resources**, v.6, p.141-145, Sept. 1983.

25. HORNBECK, R.W. **Numerical methods** New York: Quantum Publishers. 310p.
26. HUYAKORN, P.S., GUVANASEN, V., VADSWORTH, T.D. Three-dimensional finite element techniques for simulating unconfined flow with seepage faces. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON FINITE ELEMENTS IN WATER RESOURCES, 6, 1986, Lisboa. **Proceedings ...** Berlin, Springer, 1986. p.71-85.
27. KNABNER, Peter. Finite element simulation of saturated-unsaturated flow through porous media. In: MEETING ON LARGE SCALE SCIENTIFIC COMPUTING, 1985, Heidelberg. **Proceedings...** Boston: Birkhäuser, 1987. p.83-94.
28. LEES, Milton. Approximate solutions of parabolic equations. **Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics**, v.7, n.2, p.167-183, June 1959.
29. _____. A linear three-level difference scheme for quasilinear parabolic equations. **Mathematics of Computation**, v.20, p.516-522, 1966.
30. LIBARDI, P.L., REICHARDT, K., NIELSEN, D.R. et al. Simple field methods for estimating soil hydraulic conductivity. **Soil Science Society of America Journal**, v.44, p.3-7, 1980.
31. MLS, J. Numerical solution of infiltration. **Transp. Porous Media**, v.2, n.1, p.19-30, Feb. 1987.
32. MULLA, D.J. Estimating spatial patterns in water content, matric content suction, and hydraulic conductivity. **Soil Science Society of America Journal**, v.52, p.1547-1553, 1988.
33. NAKANO, M., AMEMIYA, Y., FUJII, K. Saturated and unsaturated hydraulic conductivity of swelling clays. **Soil Science**, v.141. n.1, p.1-5, Jan. 1986.
34. ONEGA, R.J. The numerical solution of the one group neutron diffusion equation. **Nuclear Engineering Computer Modules, Reactor Statics, RS-2**. Blacksburg: Virginia Polytechnic Institute and State University. 56p.
35. OZISIK, M.N. **Heat conduction**. New York: John Wiley & Sons, 1980. 687p.
36. PARLANGE, J.-Y., HAVERKAMP, R., FUENTES, C. A note on linearized infiltration. **Soil Science**, v.145, n.4, p.310-312, Apr. 1988.
37. PERROUX, K.M., SMILES, D.E., WHITE, I. Water movement in uniform soils during constant-flux infiltration. **Soil Science Society of America Journal**, v.45, p.237-240, 1981.

38. FERROUX, K.M., RAATS, P.A.C., SMILES, D.E. Wetting moisture characteristic curves derived from constant-rate infiltration into thin soil samples. *Soil Science Society of America Journal*, v.46, p.231-234, 1982.
39. PHILIP, J.R. Linearized unsteady multidimensional infiltration. *Water Resources Research*, v.22, n.12, p.1717-1727, Nov. 1986.
40. _____. Steady infiltration from buried point sources and spherical cavities. *Water Resources Research*, v.4, n.5, p.1039-1047, Oct. 1968.
41. _____. Theory of infiltration. *Advances in Hydroscience*, v.5, p.217-297, 1969.
42. PULLAN, A.J. Boundary element solutions of quasilinearised time-dependent infiltration. *Applied Mathematical Modelling*, v.12, p.9-17, Feb. 1988.
43. PULLAN, A.J., COLLINS, I.F. Two-dimensional steady quasi-linear infiltration from buried and surface cavities using boundary element techniques. *Water Resources Research*, v.23, n.8, p.1633-1644, Aug. 1987.
44. ROGERS, C., STALLYBRASS, M.P., CLEMENTS, D.L. On two phase filtration under gravity and with boundary infiltration: Application of a Bäcklund transformation. *Nonlinear Anal. Theory Methods Appl.*, v.7, p.785-799, 1983.
45. RUSSO, David. Determining soil hydraulic properties by parameter estimation: on the selection of a model for the hydraulic properties. *Water Resources Research*, v.24, n.3, Mar. 1988.
46. SANDER, G.C., PARLANGE, J.-Y., KUHNEL, V. et al. Comment on "Constant rate rainfall infiltration: a versatile nonlinear model 1. Analytic solution", by P. Broadbridge and I. White. *Water Resources Research*, v.24, n.12, p.2107-2108, Dec. 1988.
47. _____. Exact nonlinear solution for constant flux infiltration. *Journal of Hydrology*, v.97, p.341-346, 1988.
48. SCHLICHTING, H. *Boundary layer theory*. New York: McGraw-Hill, 1960. 647p.
49. SCHMID, G. Seepage flow in extremely thin aquifers. *Advances in Water Resources*, v.4, p.134-136, Sept. 1981.

50. SCHMID, G., BRAESS, D. Comparison of fast equation solvers for groundwater flow problems. In: CUSTODIO, E. et al. (Eds.) *Groundwater flow and quality modelling*. Dordrecht: D. Reidel Publishing, 1988. p.173-188.
51. SOD, Gary A. *Numerical methods in fluid dynamics*. Cambridge: Cambridge University Press, 1987. 446p.
52. TAMAI, N., ASAEDA, T., JEEVARAJ, G. Fingering in two-dimensional homogeneous, unsaturated porous media. *Soil Science*, v.144, n.2, p.107-112, Aug. 1987.
53. TARZIA, D.A. *Una revision sobre problemas de frontera movil y libre para la ecuacion del calor. El problema de Stefan*. Rosario: Universidad Nacional de Rosario, 1981/82. Separata de MATHEMATICAE NOTAE ANO XXIX, 1981/82. p.147-241.
54. VACHAUD, G., THONY, J.-L. Hysteresis during infiltration and redistribution in a soil column at different initial water contents. *Water Resources Research*, v.7, n.1, p.111-127, 1971.
55. VAN DER PLOEG, R.R. Simulation of moisture transfer in soils: one-dimensional infiltration. *Soil Science*, v.118, n.6, p.349-357, 1974.
56. VAN GENUCHTEN, M. Th. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Science Society of America Journal*, v.44, p.892-898, 1980.
57. VILHENA, M.T., CLAEYSSSEN, J.R. Transient neutron flux modelling in a fluidized bed power reactor. *Atomkernenergie-Kerntechnik*, v.49, n.3, p.174, 1987.
58. WAGENET, R.J., ADDISCOTT, T.M. Estimating the variability of unsaturated soil hydraulic conductivity using simple equations. *Soil Science Society of America Journal*, v.51, p.42-47, 1987.
59. WARRICK, A.W., LOMEN, D.O., ISLAS, A. An analytical solution to Richards' equation for a draining soil profile. *Water Resources Research*, v.26, n.2, p.253-258, Feb. 1990.
60. WARRICK, A.W., LOMEN, D.O., YATES, S.R. A generalized solution to infiltration. *Soil Science Society of America Journal*, v.49, p.34-38, 1985.
61. WHITE, I., BROADBRIDGE, P. Constant rate rainfall infiltration: a versatile nonlinear model. 2. Applications of solutions. *Water Resources Research*, v.24, n.1, p.155-162, Jan. 1988.

62. WOODING, R.A. Steady infiltration from a shallow circular pond. *Water Resources Research*, v.4, n.7, p.1259-1273, Dec. 1968.
63. ZACHMANN, D.W., DU CHATEAU, P.C., KLUTE, A. Simultaneous approximation of water capacity and soil hydraulic conductivity by parameter identification. *Soil Science*, v.134, n.3, p.157-163, Sept. 1982.

Apêndice A

CONSERVAÇÃO DA ENERGIA
Equação do Escoamento

O princípio da conservação da energia pode ser desenvolvido a partir do balanço das forças atuantes sobre um volume de controle do meio considerado.

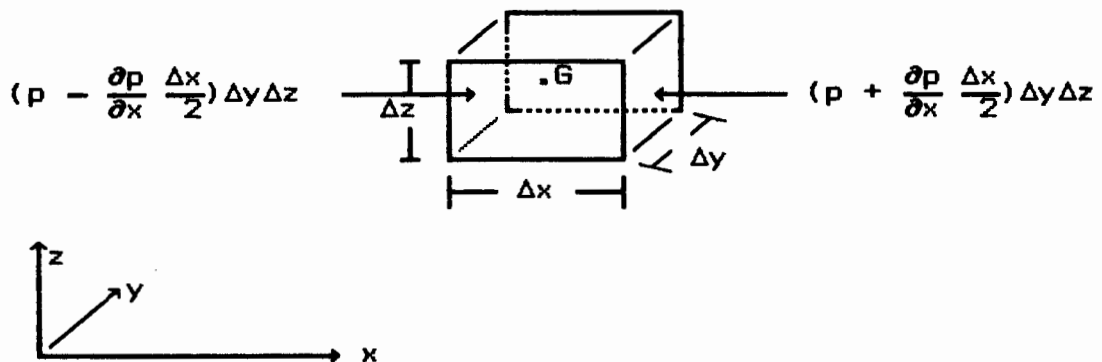


Figura A.1: Volume de controle e forças atuantes na direção x

Assim, a equação de escoamento é derivada da 2ª Lei de Newton [48] a qual estabelece que o produto da massa pela aceleração de um corpo é igual à soma das forças atuantes nesse corpo. Em escoamento de fluidos são consideradas as forças de contato (pressão hidrodinâmica e atrito viscoso) e as forças de campo (gravidade).

Sendo "p" a pressão no centro de gravidade (G) do elemento, a resultante hidrodinâmica (H_x) segundo a direção x resulta da diferença das forças atuantes nas faces YZ segundo a figura A.1

$$H_x = (p - \frac{\partial p}{\partial x} \frac{\Delta x}{2}) \Delta y \Delta z - (p + \frac{\partial p}{\partial x} \frac{\Delta x}{2}) \Delta y \Delta z = - \frac{\partial p}{\partial x} \Delta V \quad (A.1)$$

onde $\Delta V = \Delta x \Delta y \Delta z$ é o volume elementar.

A oposição ao movimento por unidade de massa devido às forças viscosas é dada por:

$$F_x = \omega \rho_v \Delta V R_x \quad (A.2)$$

sendo ω - porosidade do meio

ρ_v - densidade do fluido

R_x - resistência ao fluxo na direção x (esforços normal e de cisalhamento devido à viscosidade).

Portanto, para a direção x , a 2ª Lei de Newton é expressa por

$$m_v a_x = H_x + F_x \quad (A.3)$$

$$\text{ou} \quad \omega \rho_v \Delta V \frac{\partial v_x}{\partial t} = - \frac{\partial p}{\partial x} \Delta V + \omega \rho_v \Delta V R_x \quad (A.4)$$

em que a_x - aceleração do fluido na direção x

v_x - velocidade do fluido na direção x

A equação (A.4) pode ser reescrita como

$$\frac{\partial q_x}{\partial t} = - \frac{1}{\rho_v} \frac{\partial p}{\partial x} + \omega R_x \quad (A.5)$$

Para a direção y , o raciocínio é análogo. No

entanto, na direção z atuam também a força da gravidade (g)

$$- \omega \rho_v \Delta V g \quad (A.6)$$

e a reação da fase sólida ao empuxo hidrostático

$$- (1 - \omega) \rho_v \Delta V g \quad (A.7)$$

sendo a resultante das forças de campo (C_z) atuantes no fluido dada por

$$C_z = - \omega \rho_v \Delta V g - (1 - \omega) \rho_v \Delta V g = - \rho_v \Delta V g \quad (A.8)$$

Considerando a ação da gravidade, a lei de Newton na direção z resulta em

$$\frac{\partial q_z}{\partial t} = - \frac{1}{\rho_v} \frac{\partial p}{\partial x} + \omega R_z - g \quad (A.9)$$

Portanto a equação geral do escoamento na forma vetorial é dada por

$$\frac{\partial \bar{q}}{\partial t} = - \frac{1}{\rho_v} \nabla p + \omega \bar{R} - \bar{g} \quad (A.10)$$

Contudo, conforme apresentado na seção 2.1.2, o potencial hidráulico é dado por $\theta = \frac{p}{\gamma_v} + z$ (eq. 2.2). Assim,

$$\nabla \theta = \nabla \left(\frac{p}{\gamma_v} \right) + 1 \quad (A.11)$$

e a equação (A.10) pode ser reescrita como

$$\frac{1}{g} \frac{\partial \bar{q}}{\partial t} = - \nabla \theta + \frac{\omega \cdot \bar{R}}{g} \quad (A.12)$$

Considerando as condições naturais de escoamento no solo (regime laminar e lento com $Re < 1$), pode-se admitir duas hipóteses [17] :

1. a velocidade de escoamento é suficientemente baixa para que a variação da vazão específica ao longo do tempo possa ser desprezada

$$\frac{\partial \bar{q}}{\partial t} \approx 0 \quad (\text{A.13})$$

2. a resistência viscosa por unidade de peso é proporcional à velocidade média de escoamento

$$\frac{\bar{v}}{K} = - \frac{R}{g} \quad (\text{A.14})$$

o fator de proporcionalidade é a resistividade hidráulica (inverso da condutividade).

Substituindo as simplificações físicas (A.13) e (A.14) na equação do escoamento (A.12) resulta a lei experimental de Darcy

$$\nabla \theta = \omega \left(- \frac{\bar{v}}{K} \right) \quad (\text{A.15})$$

ou

$$\bar{q} = - K \nabla \theta \quad (\text{A.16})$$

Essa simplificação é comprovada matematicamente por HARR [21]. De forma aproximada, a lei de Darcy representa a equivalência macroscópica estatística das equações do movimento de Navier-Stokes para o escoamento viscoso de água no solo em regime lento.

Apêndice B

CONSERVAÇÃO DA MASSA
Equação da Continuidade

O princípio da conservação da massa pode ser desenvolvido a partir do balanço de massa em um volume de controle.

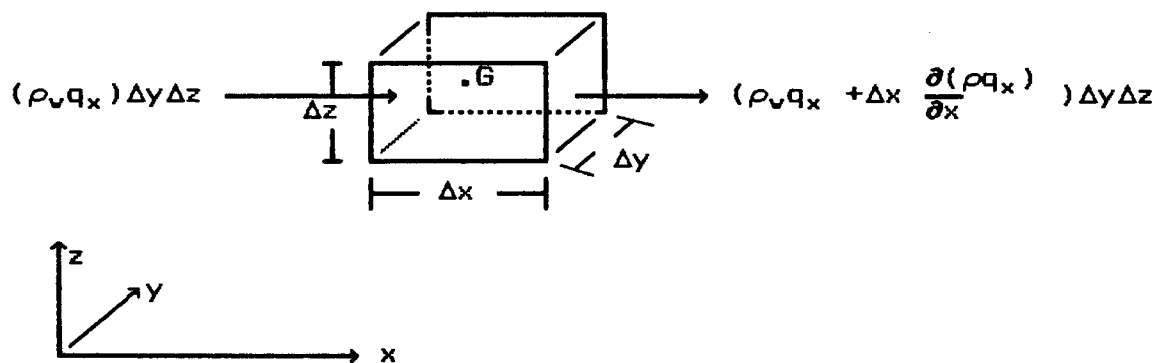


Figura B.1 : Fluxo em um volume de controle na direção x.

Sendo a entrada total de fluido através da face YZ_1 próxima à origem (fig. B.1) dada por

$$\rho_v q_x \Delta y \Delta z \quad (B.1)$$

e a saída através da face oposta dada por

$$\left[\rho_v q_x + \frac{\partial(\rho q_x)}{\partial x} \Delta x \right] \Delta y \Delta z, \quad (B.2)$$

o ganho de fluido ao longo do tempo na direção x resulta em

$$\rho_v q_x \Delta y \Delta z \Delta t - \left[\rho_v q_x + \frac{\partial(\rho_v q_x)}{\partial x} \Delta x \right] \Delta y \Delta z \Delta t = - \frac{\partial(\rho_v q_x)}{\partial x} \Delta V \Delta t \quad (B.3)$$

Da mesma forma, os ganhos nas direções y e z são expressos por

$$- \frac{\partial(\rho_v q_y)}{\partial y} \Delta x \Delta y \Delta z \Delta t \quad (\text{B.4})$$

$$- \frac{\partial(\rho_v q_z)}{\partial z} \Delta x \Delta y \Delta z \Delta t \quad (\text{B.5})$$

Pela equação da continuidade, o ganho através das faces determina uma variação da quantidade (massa) de fluido no interior do volume de controle. Assim,

$$\frac{\partial(m_v)}{\partial t} \Delta t = - \nabla \cdot (\rho_v \bar{q}) \Delta V \Delta t \quad (\text{B.6})$$

Porém, a massa de fluido em solo não-saturado é dada por

$$m_v = \rho_v \theta \Delta V \quad (\text{B.7})$$

onde θ é o fator de unidade volumétrico. Logo, a equação (B.6) pode ser reescrita

$$\frac{\partial(\rho_v \theta \Delta V)}{\partial t} = - \nabla \cdot (\rho \bar{q}) \Delta V \quad (\text{B.8})$$

Tratando-se de escoamento de fluido não-compressível ($\rho_v = \text{cte.}$) em meio não-expansivo ($\Delta V = \text{cte.}$), a equação da continuidade resulta em

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = - \nabla \cdot (\bar{q}) \quad (\text{B.9})$$

Apêndice C

TERMO CONVECTIVO
Esquemas de Discretização

O termo convectivo correspondente ao operador ξ introduzido na equação (3.1) foi aproximado pelos seguintes esquemas de diferença finita :

1. Esquema de Lees: $\xi(K(\psi_i^j)) = \frac{K^+ - K^-}{\Delta z}$ (C.1)

2. Diferença ascendente: $\xi(K(\psi_i^j)) = \frac{K(\psi_{i+1}^j) - K(\psi_i^j)}{\Delta z}$ (C.2)

3. Diferença central: $\xi(K(\psi_i^j)) = \frac{K(\psi_{i+1}^j) - K(\psi_{i-1}^j)}{2\Delta z}$ (C.3)

4. Derivação implícita: $\xi(K(\psi_i^j)) = \frac{dK(\psi_i^j)}{dh} \frac{\psi_{i+1}^j - \psi_{i-1}^j}{2\Delta z}$ (C.4)

Na simulação através dos esquemas acima citados, a fronteira foi discretizada pelo esquema (I) da seção 3.3.

Apêndice D

DOIS NÍVEIS

Esquema de Discretização

O esquema de dois níveis considerado para avaliação computacional do método de três níveis proposto é apresentado como h-implícito por HAVERKAMP et al. [22].

A aproximação para a equação (2.8) unidimensional é dada como

$$C_i^j \frac{\psi_i^{j+1} - \psi_i^j}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta z} \left[K_{i+1/2}^j \left[\frac{\psi_{i+1}^{j+1} - \psi_i^{j+1}}{\Delta z} - 1 \right] - K_{i-1/2}^j \left[\frac{\psi_i^{j+1} - \psi_{i-1}^{j+1}}{\Delta z} - 1 \right] \right]$$

onde
$$K_{i+1/2}^j = \frac{K(\psi_{i+1}^j) + K(\psi_i^j)}{2}$$

$$K_{i-1/2}^j = \frac{K(\psi_i^j) + K(\psi_{i-1}^j)}{2}$$

$$C_i^j = C(\psi_i^j)$$

Apêndice E

CONVERGÊNCIA E ESTABILIDADE

Convergência

A convergência do esquema de diferença finita de três níveis foi mostrada por Lees [28,29] inicialmente para equações parabólicas do tipo

$$b(w) \frac{\partial w}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[a(w) \frac{\partial w}{\partial x} \right] \quad (E.1)$$

Esse tipo de equação de difusão sem termo convectivo surge em problemas de transmissão de calor por condução.

Para o problema de infiltração em meio poroso considerado, a análise é análoga. O fenômeno é descrito pela equação

$$C(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[K(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial x} \right] + \frac{dK(\psi)}{d\psi} \frac{\partial \psi}{\partial z} \quad (E.2)$$

Assumindo que as funções $C(\psi)$ e $K(\psi)$ são funções com regularidade e satisfazem

$$C(\psi) \geq \mu > 0 \quad \text{e} \quad K(\psi) \geq \nu > 0 \quad (E.3)$$

resulta que a equação (E.2) é uniformemente parabólica e $\psi = \psi(z, t)$ é solução única apresentando regularidade para o problema definido em $R = \{(z, t) : 0 \leq z \leq a, 0 \leq t \leq T\}$.

Discretizando o domínio espacial em intervalos Δz tal que $(N+1)\Delta z=a$ e o domínio temporal em intervalos Δt tal que $J\Delta t=T$, a equação (E.2) pode ser aproximada em cada ponto por

$$C(u^j)(u^{j+1}-u^{j-1}) = 2\Delta t\delta_z [K(u^j)\delta_z \hat{u}^j] - 2\Delta t\xi [K(u^j)] \quad (E.4)$$

onde
$$\hat{u}^j = \frac{1}{3}(u^{j+1} + u^j + u^{j-1}) \quad (E.5)$$

A convergência da solução aproximada u^j para a solução $\psi(z, (j)\Delta t)$ de (E.2) é baseada na demonstração do teorema a seguir.

Teorema: Existe uma constante $A>0$, independente de Δz , Δt e u^j tal que

$$\max_{z, 1 \leq j \leq J} |u^j(z) - \psi(z, j\Delta t)| \leq A.(\Delta z^2 + \Delta t^2) \quad (E.6)$$

para qualquer Δz , Δt suficientemente pequenos satisfazendo a condição

$$\lambda^- \Delta z \leq \Delta t \leq \lambda^+ \Delta z \quad (E.7)$$

onde λ^- e λ^+ são constantes positivas.

A análise matemática para demonstração do teorema é apresentada em detalhes por Lees [29], provando que o esquema é convergente com erro de truncamento de $O(\Delta z^2 + \Delta t^2)$.

Estabilidade

Verificando a condição de estabilidade pelo método de Von Neumann para todos os pontos do domínio, Bonacina e Comini [5] mostraram que o esquema de três níveis de Lees é incondicionalmente estável para a equação (E.1).

No entanto, a presença do termo convectivo na equação (E.2) introduz instabilidade numérica no esquema de aproximação. Conforme citado por Adam [2], a instabilidade deriva da dispersão das diversas ondas numéricas que formam a solução. Essa dispersão se origina do fato de os esquemas numéricos propagarem as ondas elementares com velocidades diferentes, sendo as ondas de menor comprimento as de pior descrição em presença de termo convectivo.

Resulta, portanto, que o esquema de três níveis é condicionalmente estável para a equação (E.2). Tal fato foi constatado durante o desenvolvimento do trabalho e os intervalos de discretização adotados (região de estabilidade) foram determinados numericamente por tentativas.