

UFRRJ

**INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO
EM MODELAGEM MATEMÁTICA E
COMPUTACIONAL**

DISSERTAÇÃO

**ESTUDO DE SOLUÇÕES NUMÉRICAS DA
EQUAÇÃO DE RICHARDS ATRAVÉS DO
MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS E
DIFERENÇAS FINITAS PARA SIMULAÇÃO
DE FLUXO UNIDIMENSIONAL EM SOLO
NÃO-SATURADO**

Bruno Freitas de Queiróz

2017



UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DO RIO DE JANEIRO
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM
MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL

**ESTUDO DE SOLUÇÕES NUMÉRICAS DA EQUAÇÃO DE
RICHARDS ATRAVÉS DO MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS
E DIFERENÇAS FINITAS PARA SIMULAÇÃO DE FLUXO
UNIDIMENSIONAL EM SOLO NÃO-SATURADO**

Bruno Freitas de Queiróz

Sob a Orientação da Professora
Rosane Ferreira de Oliveira

e Co-orientação do Professor
Marcos Bacis Ceddia

Dissertação submetida como
requisito parcial para obtenção do
grau de **Mestre em Ciências**, no
Curso de Pós-Graduação em
Modelagem Matemática e
Computacional, Área de
Concentração em Modelagem
Matemática e Computacional

Seropédica, RJ
Agosto, 2017

Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro
Biblioteca Central / Seção de Processamento Técnico

Ficha catalográfica elaborada
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

Q4e Queiróz, Bruno Freitas de, 1988-
ESTUDO DE SOLUÇÕES NUMÉRICAS DA EQUAÇÃO DE RICHARDS
ATRAVÉS DO MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS E DIFERENÇAS
FINITAS PARA SIMULAÇÃO DE FLUXO UNIDIMENSIONAL EM
SOLO NÃO-SATURADO / Bruno Freitas de Queiróz. - 2017.
85 f.: il.

Orientadora: Rosane Ferreira de Oliveira.
Coorientador: Marcos Bacis Ceddia.
Dissertação(Mestrado). -- Universidade Federal
Rural do Rio de Janeiro, Programa de Pós-Graduação em
Modelagem Matemática e Computacional, 2017.

1. Fluxo de água. 2. Solo não Saturado. 3.
Simulação Numérica. I. Oliveira, Rosane Ferreira de,
1963-, orient. II. Ceddia, Marcos Bacis, -, coorient.
III Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro.
Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e
Computacional. IV. Título.

UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DO RIO DE JANEIRO
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM
MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL

BRUNO FREITAS DE QUEIRÓZ

Dissertação submetida como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Ciências, no Curso de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional, área de Concentração em Modelagem Matemática e Computacional.

DISSERTAÇÃO APROVADA EM 24/08/2017

Prof^a. Rosane Ferreira de Oliveira (D.Sc.) – PPGMMC – UFRRJ
(Orientadora)

Prof^a. Claudia Mazza Dias (D.Sc.) – PPGMMC – UFRRJ

Prof. João Frederico C. A. Meyer (D.Sc.) – UNICAMP

Este trabalho é dedicado à toda a minha família.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a minha família pelo apoio e compreensão.

A meus professores de toda a vida por dar-me a base de conhecimento que precisei para este trabalho.

Aos meus orientadores, Rosane F. Oliveira e Marcos Bacis, pelo apoio, discussão e orientação muitas vezes calorosa. Em especial a minha orientadora Rosane F. Oliveira por muitos conselhos para a pesquisa e além disso, para a vida.

Obrigado a todos os professores do Programa. Em especial para a Cláudia Mazza pelo ótimo trabalho que vem realizando a frente da coordenação e diversas dicas, além do apoio que me ofereceu ao longo desses anos do mestrado.

Mais agradecimentos especiais para Nathalia e Igor que se dispuseram a me auxiliar na realização do experimento aqui contido. E ao Martin, laboratorista, por sua imensa ajuda com o aparato experimental.

A todos do SIPA (Sistema Integrado de Produção Agroecológica) pela disposição e ajuda quando precisei.

RESUMO

QUEIRÓZ, Bruno Freitas de. **Estudo De Soluções Numéricas Da Equação De Richards Através Do Método De Elementos Finitos E Diferenças Finitas Para Simulação De Fluxo Unidimensional Em Solo Não-Saturado**. 2017. 85p. Dissertação (Mestrado em Modelagem Matemática e Computacional). Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Seropédica, RJ, 2017.

Este trabalho apresenta um estudo dos modelos numéricos baseados no método de elementos finitos e no método das diferenças finitas, para fluxo e escoamento vertical de água em solo não saturado. O modelo implementado tem fundamento na clássica equação de Richards, com condições de fronteira de Dirichlet. Os modelos foram verificados com dados obtidos em artigos. Após a verificação foi aplicado a experimento de campo em um planossolo háplico. O modelo baseado no método de elementos finitos se mostrou defasado com relação a resposta esperada, já aquele baseado no método de diferenças finitas obteve resultado satisfatório e foi portanto utilizado nas simulações de campo. Além do trabalho de estudo e compreensão das ferramentas necessárias apresentadas aqui, pôde-se alcançar um resultado preliminar que nos permite tomar decisões sobre modificações ao modelo para alguns dos diversos parâmetros do modelo do problema de infiltração de água no solo não saturado em função das camadas do solo.

Palavras-chave: Fluxo da água em solo não-saturado. Simulação numérica e computacional. Equação de Richards. Método de Diferenças Finitas. Método de Elementos Finitos.

ABSTRACT

QUEIRÓZ, Bruno Freitas de. **Study of Numerical Solutions of the Richards Equation through the Finite Element Method and Finite Differences for One-Dimensional Flow Simulation in Unsaturated Soil**. 2017. 85 p. Dissertation (Master in Mathematical and Computational Modeling). Institute of Exact Sciences, Federal Rural University of Rio de Janeiro, Seropédica, RJ, 2017.

This work presents a study of the numerical models based on the finite element and the finite difference methods for flow and vertical flow of water in unsaturated soil. The implemented model is based on the classical Richards equation, with Dirichlet boundary conditions. The models were verified with data obtained in papers. After this verification was applied to the field experiment in a haphazard planosol. The model based on finite element method proved to be less efficient in relation to the expected response, since the one based on the finite difference method obtained a satisfactory result and was therefore used in the field simulations. In addition to the studying and understanding of the necessary tools presented here, it was possible to reach a preliminary result that allows us to make decisions about modifications to the model for some of the different parameters of the model of the problem of infiltration of water in the unsaturated soil as a function of the layers from soil.

Keywords: Water Flow in Unsaturated Soils. Numerical and computational simulation. Richards' Equation. Finite Difference Methods. Finite Element Methods.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1	– Perfis de solo, evidenciando as diferentes camadas existentes. (A) CAMBIS-SOLO HÁPLICO Tb Distrófico gleissólico; (B) PLANOSSOLO HÁPLICO Distrófico arênico; (C) ARGISSOLO VERMELHO Distrófico nitossólico.	19
Figura 2	– Ilustração do esquema experimental realizado por Darcy	23
Figura 3	– Perfil de umedecimento do solo em certo instante do processo de infiltração	25
Figura 4	– Esquema do balanço de massa para o problema deste texto	26
Figura 5	– Elemento de Volume atravessado por um fluxo de água	27
Figura 6	– Representação das funções base localmente para o i -ésimo elemento e e globalmente	38
Figura 7	– Típico gráfico da aproximação linear de uma função de z para um t fixo	38
Figura 8	– Esquema dos pontos intermediários em cada subintervalo da partição	44
Figura 9	– Fluxograma simplificado do método iterativo de Picard	46
Figura 10	– Resultados das quatro simulações para o solo 1 com base nas equações de van Genuchten e van Genuchten-Mualem - DIFERENÇAS FINITAS	51
Figura 11	– Resultados das quatro simulações para o solo 2 com base nas equações de Haverkamp <i>et al.</i> - DIFERENÇAS FINITAS	51
Figura 12	– Comparação para o solo 1, entre os resultados simulados e de Celia <i>et al.</i> nos tempos de 1440 minutos - DIFERENÇAS FINITAS	52
Figura 13	– Comparação para o solo 2, entre os resultados simulados e de Philip nos tempos de 6 minutos e 12 minutos - DIFERENÇAS FINITAS	53
Figura 14	– Comparação para o solo 3, entre os resultados simulados e de Miranda <i>et al.</i> no tempo de 105 minutos - DIFERENÇAS FINITAS	53
Figura 15	– Comparação entre os resultados simulados por DIFERENÇAS FINITAS nas formas mista e h e ELEMENTOS FINITOS para o solo 1	54
Figura 16	– Comparação entre os resultados simulados por ELEMENTOS FINITOS e a solução semi analítica de Philip para o solo 2	55
Figura 17	– Curva de Retenção ajustada em escala logarítmica no eixo das ordenadas	59
Figura 18	– Condição inicial medido e interpolado da Parcela 1	61
Figura 19	– Condição inicial medido e interpolado da Parcela 2	61
Figura 20	– Condição inicial medido e interpolado da Parcela 3	62
Figura 21	– Variação da Umidade com o tempo na Parcela 1	63
Figura 22	– Variação da Umidade com o tempo na Parcela 2	63
Figura 23	– Variação da Umidade com o tempo na Parcela 3	64
Figura 24	– Resultados da simulação para Parcela 1 - a	64
Figura 25	– Resultados da simulação para Parcela 1 - b (continuação)	65
Figura 26	– Resultados da simulação para Parcela 2 - a	65
Figura 27	– Resultados da simulação para Parcela 2 - b (continuação)	66
Figura 28	– Resultados da simulação para Parcela 3 - a	67
Figura 29	– Resultados da simulação para Parcela 3 - b (continuação)	67
Figura 30	– Perfil do solo experimental - PLANOSSOLO HÁPLICO Distrófico arênico	75
Figura 31	– Vista de cima das áreas demarcadas para o experimento	78
Figura 32	– Parcela experimental	78
Figura 33	– Preparação para o fornecimento de água	79
Figura 34	– Manutenção da Carga hidráulica	79

Figura 35 – Introdução do TDR	80
Figura 36 – Registro dos dados em computador de mão	80
Figura 37 – a) Coroa de umidade; b) Visão detalhada da Coroa de umidade	81
Figura 38 – a) Menor tamanho da coroa de umidade; b) Maior tamanho da coroa de umidade	82
Figura 39 – a) Menor tamanho da coroa de umidade; b) Maior tamanho da coroa de umidade	83
Figura 40 – a) Menor tamanho da coroa de umidade; b) Maior tamanho da coroa de umidade	84
Figura 41 – As três parcelas experimentais cobertas	85

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	–	Dados do solo 1	50
Tabela 2	–	Dados do solo 2	50
Tabela 3	–	Dados do solo 3	52
Tabela 4	–	Relação entre a carga hidráulica h (cm) e a umidade volumétrica θ ($\text{cm}^3 \cdot \text{cm}^{-3}$) de solo com características próximas ao solo experimental para ajuste na curva de retenção	57
Tabela 5	–	Média Aritimética entre as duas camadas 0-10 cm e 10-20 cm nos 7 pontos amostrais	58
Tabela 6	–	Dados do solo para aplicação experimental: $r^2 = 0.99117$	58
Tabela 7	–	Condutividade hidráulica saturada para simulação em cada parcela experimental	62
Tabela 8	–	Análise Física do solo	76
Tabela 9	–	Análise Física do solo: ...continuação	76

LISTA DE SÍMBOLOS

θ	Umidade volumétrica
θ_s	Umidade de saturação do solo
θ_r	Umidade residual do solo
S	Saturação efetiva
ψ	Potencial hidráulico
h	Carga hidráulica
ψ_m	Potencial hidráulico matricial
ψ_{os}	Potencial hidráulico osmótico
ψ_P	Potencial hidráulico piezométrico
ψ_g	Potencial hidráulico gravitacional
ψ_T	Potencial hidráulico térmico
Re	Número de Reynolds
v	Velocidade de percolação
K	Condutividade Hidráulica
K_{sat}	Condutividade Hidráulica do solo saturado
$\mathbf{n}$	Vetor normal
m	Massa
t	Tempo
Q	Vazão
q	Densidade de fluxo
q_m	Densidade de fluxo de massa
z	Componente vertical do espaço
C	Capacidade hídrica específica
τ	Tensão cisalhante
η	Coefficiente de viscosidade ou viscosidade dinâmica
∂	Fronteira de uma região
$R^{j+1,m}$	Resíduo do método iterativo de Picard

ϕ	Porosidade
ρ	Densidade
ρ_s	Densidade do solo
ρ_p	Densidade da partícula

SUMÁRIO

	Introdução	16
1	DEFINIÇÕES BÁSICAS	18
1.1	Introdução de conceitos da Ciência dos solos	18
1.1.1	A água no solo	18
1.1.2	Teor de Umidade Volumétrica	19
1.1.3	Porosidade do solo	19
2	O FENÔMENO: ÁGUA NO SOLO	21
2.1	Energia Potencial Total da Água	21
2.2	Carga Hidráulica	21
2.3	Equações de Darcy e Darcy-Buckingham	22
2.4	Infiltração da Água no Solo	24
2.4.1	Perfil de umedecimento do Solo	24
2.5	Curva de Retenção	24
2.6	Condutividade Hidráulica do Solo	25
3	MODELO MATEMÁTICO	26
3.1	Equação de Richards	26
3.1.1	Equação da Continuidade	26
3.1.2	Determinando a Equação de Richards	28
3.2	Modelos para a Curva de Retenção e Condutividade Hidráulica	28
3.2.1	O modelo de van Genuchten para a Curva de Retenção e van Genuchten-Mualem para a Condutividade Hidráulica	29
3.2.2	O modelo de Haverkamp <i>et al.</i> para a Curva de Retenção e Condutividade Hidráulica	30
3.2.3	Condições de Fronteira	30
4	MODELO NUMÉRICO	32
4.1	O que é preciso saber de matemática	32
4.1.1	Espaços Normados Completos	32
4.1.2	Matrizes	34
4.2	Formulação Numérica	35
4.3	Formulação do Problema por Elementos Finitos	35
4.3.1	A formulação variacional	36
4.3.2	Discretizando	37
4.4	Formulação do Problema por Diferenças Finitas	42
4.4.1	Discretização temporal	43
4.4.2	Discretização Espacial	43
4.4.3	Aplicando o Método iterativo de Picard Modificado	45
4.4.4	Formulação final	47
4.5	Um Critério de Avaliação do Desempenho do Método Numérico	48

5	MATERIAIS E MÉTODO	49
5.1	Experimento Computacional	49
5.1.1	Implementação e Verificação	49
5.1.2	Implementação baseada nas Diferenças Finitas	50
5.1.3	Implementação baseada nos Elementos Finitos	54
5.2	Experimento de Campo	55
5.2.1	Procedimentos experimentais	55
5.2.2	Relações constitutivas e obtenção dos parâmetros de ajuste para a aplicação de campo	56
5.2.3	Condição Inicial e de Fronteira para a aplicação em campo	58
5.2.4	Resultados da Aplicação	61
6	CONCLUSÕES	68
	REFERÊNCIAS	69
	ANEXOS	73
	ANEXO A – DESCRIÇÕES MORFOLÓGICAS DO PLANOSSOLO HÁPLICO DISTRÓFICO ARÊNICO - SXD.	74
	ANEXO B – RELATÓRIO DAS ATIVIDADES EXPERIMENTAIS DE CAMPO	77
B.1	INTRODUÇÃO	77
B.2	O DIA TESTE	79
B.3	O PRIMEIRO DIA	81
B.4	O SEGUNDO DIA	82
B.5	O TERCEIRO DIA	83
B.6	OBSERVAÇÕES FINAIS	85

INTRODUÇÃO

Trabalhos relacionados ao estudo do fluxo de água em zonas não saturadas do solo são de grande importância em pesquisas de disponibilidade hídrica para o desenvolvimento das plantas (WENDLAND; PIZARRO et al., 2010). De fato, a zona não saturada do solo tem papel fundamental na engenharia e agricultura já que boa parte das culturas agrícolas se desenvolvem nesta zona (REICHARDT; TIMM, 2004).

Certamente, a dinâmica da água no solo se tornou um importante objeto de pesquisa desde os primeiros experimentos de Darcy (1856) ainda sob condições de solo saturado. O desenvolvimento teórico para tentar descrever a dinâmica da água em solo não saturado teve início com Buckingham (1907). Alguns anos depois Richards (1931) apresenta a base teórica que descreve o escoamento da água em solo não saturado através da conhecida equação que leva seu nome. Avanços nesta área também vieram com os trabalhos de Gardner (1964), Mualem (1976) e já nas décadas mais recentes, van Genuchten (1980), Celia e Zarba (1988), Celia (1990), Hueng (1996), Yuanyuan Zha (2017).

Do ponto de vista agrônomo, é de fundamental importância conhecer a quantidade de água armazenada em um perfil de solo em dado instante e os processos físicos envolvidos na dinâmica da água no solo (REICHARDT; TIMM, 2004). Portanto, a água no sistema solo-planta firmou-se como um tema substancial para a agricultura, obtendo grande contribuição de pesquisadores como Taylor e Ashcroft, Reichardt e Timm, Libardi, Osny Bachi, entre outros. Angelotti Netto (2007) afirma que a busca por modelos capazes de descrever o transporte de água e até mesmo de solutos no solo, tem se tornado de grande importância prática na atualidade, sobretudo para se obter um melhor manejo ambiental e otimização das práticas agrícolas.

De fato, os processos físicos que governam o fluxo da água influenciam na manipulação do solo e da própria água, porém tais processos são, em geral, muito complexos matematicamente, acarretando na realização de simplificações em sua modelagem e implementação. As soluções analíticas para fluxo de água no solo são apenas obtidos para casos especiais e condições restritas como as de Philip (PHILIP, 1969), se mostrando de pouca aplicabilidade prática (LIBARDI, 2005). Seguramente, a não linearidade da equação de Richards torna esse problema de difícil resolução. Métodos numéricos e computacionais são geralmente utilizados a fim de tornar menos complicada e possível essa tarefa.

Além disso, deve-se também observar que devido ao alto custo, ao tempo demandado e ao esforço humano nas investigações de campo, os modelos matemáticos, aliados às técnicas numéricas e avanços computacionais, constituem-se em uma ferramenta importante na previsão dos estudos relacionados a dinâmica da água no solo (WENDLAND; PIZARRO et al., 2010).

Todo esse desenvolvimento tecnológico permitiu a criação de diversas ferramentas para auxiliar o entendimento e predição de fenômenos relacionados aos processos de infiltração e redistribuição de água no solo, como o HYDRUS®, *software* desenvolvido por Simunek, van Genuchten e Sejna. O HYDRUS® é um pacote de programas para simular a água, o calor e o movimento do soluto em meios porosos saturados em variáveis bi e tri dimensionais. Este pacote consiste em resolver numericamente a equação de Richards para o fluxo de água em meio saturado e insaturado e a equação de convecção-dispersão para transporte de calor e soluto, (SIMUNEK; GENUCHTEN; SEJNA, 2008).

Entretanto, buscando a independência de pacotes de *softwares* fechados como o

HYDRUS entre outros, a presente dissertação, situada no grupo de pesquisa coordenado pelos professores Rosane F. de Oliveira e Marcos B. Ceddia, que vem desenvolvendo o projeto de pesquisa “A água no sistema solo-planta: modelagem matemática e simulação computacional”, tem por objetivo estudar os processos físicos e matemáticos principais que modelam a dinâmica da água no solo, aprofundando, no âmbito do grupo de pesquisa, a modelagem de fluxo de água em sentido vertical através da equação de Richards.

Pode-se citar como trabalhos mais recentes do grupo de pesquisa as iniciações científicas de Belleza (2004), Couto (2006) e Santos (2008), que se basearam em modelagem compartimental, gerando sistemas de equações diferenciais ordinárias. Santos Jr. (2013), introduziu a equação de Richards no grupo. Belleza (2014) e Tércio (2015) realizaram modelagem baseada em teoria *fuzzy* para estimativa de parâmetros imprescindíveis na modelagem da dinâmica da água no solo. A abordagem por equações diferenciais parciais só foi retomada e aprofundada no presente trabalho, e que visa complementar os ramos de estudo já adotados até aqui pelos demais pesquisadores do grupo anteriormente citados.

Num contexto mais amplo, o primeiro modelo numérico para solucionar a equação de Richards foi proposta por Frezze (1971) pelo método de LSOR, contudo o modelo possuía grande instabilidade numérica e dificuldades de convergência (FREEZE, 1971). A partir de então outros métodos foram aplicados para solucionar numericamente a equação de Richards como os métodos de diferença finitas e dos elementos finitos. Dos trabalhos mais recentes tem-se o de Libardi (2005) que utiliza o modelo MIDI (MIRANDA; DUARTE, 2002), um modelo unidimensional que consiste na resolução de equações diferenciais parciais de segunda ordem. Shahraiyini e Ashtiani (2008) realizou uma comparação entre três esquemas de diferenças finitas para fluxo de água em solo não saturado. Pizarro (2009) apresentou um trabalho de fluxo de água em meio não saturado através do método de elementos finitos utilizando o ambiente de programação PZ.

Neste trabalho foi implementado em ambiente MATLAB® (colaboração da professora Dra. Cláudia Mazza, coordenadora do PPGMMC/UFRRJ) o esquema numérico para a equação de Richards. Na verificação do código computacional, foram utilizados dados obtidos em (CELIA; BOULOUTAS; ZARBA, 1990) e (WENDLAND; PIZARRO et al., 2010). Além disso, foi realizado experimento em campo para aplicação do código implementado. É importante observar que este estudo tem caráter introdutório no grupo ao abordar aspectos computacionais relativos à simulação numérica do modelo matemático, já que os modelos baseados na equação de Richards, foram pouco abordados por seus pesquisadores até então.

Para a realização das simulações e determinação da umidade em solos não saturados, outra importante ferramenta a ser utilizada é a curva de retenção de umidade, fundamental na caracterização das propriedades hidráulicas do solo (CICHOTA; LIER, 2004). Para obter as curvas de retenção deste texto, utilizou-se do *software* livre SWRC (online na página <<http://purl.org/net/swrc/>>). Este *software* realiza o ajuste não linear das curvas de retenção de água do solo em 5 modelos pelo método de Levenberg-Marquardt. Dentre eles está o modelo de van Genuchten. Este programa determina automaticamente todas as condições necessárias para a montagem não linear, como a estimativa inicial dos parâmetros e, portanto, os usuários podem simplesmente inserir os dados de retenção de água do solo para obter os parâmetros necessários (SEKI, 2007).

Como num programa de modelagem matemática e computacional, este trabalho envolve algumas das diversas etapas de uma pesquisa em terreno multidisciplinar. Compreendendo em sua essência elementos de matemática, simulação numérica e computacional, agromatemática, ciência dos solos e aspectos experimentais de campo.

Todas as fotos contidas neste texto são do acervo particular do autor.

1 DEFINIÇÕES BÁSICAS

Este primeiro capítulo apresenta brevemente os conceitos básicos de física do solo necessários para um bom entendimento do restante do texto. Busca-se introduzir aos poucos a linguagem comumente usada nesta área para leitores multidisciplinares, porém com pouco ou nenhum conhecimento relacionado a física do solo.

1.1 Introdução de conceitos da Ciência dos solos

O conceito de solo pode variar muito em diferentes áreas de estudo. Rigorosamente, a definição de solo mais aceita na pedologia¹ está de acordo com o *Soil Taxonomy* e o *Soil survey manual* (EMBRAPA-SOLOS, 1995), do qual se define **solo** como “a coletividade de indivíduos naturais, na superfície da terra, eventualmente modificado ou mesmo construído pelo homem, contendo matéria orgânica e servindo ou sendo capaz de servir à sustentação de plantas ao ar livre. Em sua parte superior, limita-se com a atmosfera. Lateralmente, limita-se gradualmente com rocha consolidada ou parcialmente desintegrada, água e gelo. O limite inferior é talvez o mais difícil de definir. Mas, o que é reconhecido como solo deve excluir o material que mostre pouco efeito das interações de clima, organismos, material originário e relevo, através do tempo” (USDA, 1975)(USDA, 1984).

É possível notar por esta definição a grande complexidade que é o solo. Tais dificuldades se refletem em seu estudo, assim sendo, uma das formas de estudar o solo é avaliar o perfil de solo.

Um **perfil de solo** é definido como uma seção vertical do terreno desde a superfície até o material de origem. O perfil de solo é formado por seções aproximadamente paralelas à sua superfície, que diferem das seções adjacentes em propriedades morfológicas, físicas, químicas, mineralógicas e biológicas (SBCS, 2012). Essas seções, quando são interrelacionadas e resultantes da ação de processos pedogenéticos, são denominados **horizontes**. Quando não guardam nenhuma relação pedogenética entre si, são consideradas como **camadas** e resultam de simples processo de deposição de materiais de natureza diferente (SBCS, 2012).

Todos esses processos geram uma grande variação de suas características nos horizontes e camadas do solo. Essas variações podem ser observadas na figura 1, que mostra três diferentes perfis de solo na vertical.

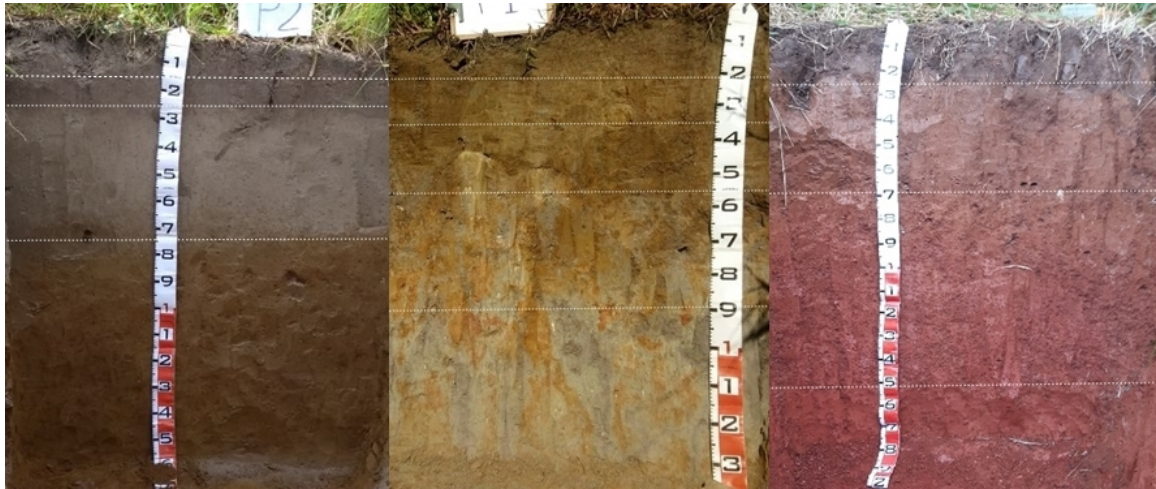
1.1.1 A água no solo

A água no solo pode ou não ocupar completamente todos os poros. No caso em que todos os poros estão preenchidos por água, diz-se que o solo está saturado. Em contrapartida, quando apenas parte dos poros estão preenchidos por água e o restante dos espaços vazios ocupados por ar, diz-se que o solo não está saturado.

Após infiltração, parte da água escoar verticalmente pelo solo, devido a forças gravitacionais, porém parte fica retida na chamada *matriz do solo*. São dois os processos que explicam, basicamente, como ocorre a retenção da água pelo solo.

¹ Ramo da Ciência do Solo que trata de estudos relacionados com a identificação, formação, classificação e mapeamento dos solos (SBCS, 2012).

Figura 1 – Perfis de solo, evidenciando as diferentes camadas existentes. (A) CAMBISSOLO HÁPLICO Tb Distrófico gleissólico; (B) PLANOSSOLO HÁPLICO Distrófico arênico; (C) ARGISSOLO VERMELHO Distrófico nitossólico.



No primeiro deles, a retenção ocorre nos microporos do solo, preenchendo parcialmente os poros através de forças capilares. Quanto menores forem os diâmetros dos poros mais intensa é a força capilar, resultado da **tensão superficial**².

O segundo processo de retenção da água ocorre nas superfícies dos sólidos do solo como filmes presos a ela, pelo chamado processo de adsorção, devido às forças moleculares de adesão.

Essas forças **capilares** e de **adsorção** juntas, que operam na matriz do solo para a retenção da água, são chamadas de **forças mátricas** e dão origem ao **potencial matricial** (LIBARDI, 2005).

1.1.2 Teor de Umidade Volumétrica

A presença de água no solo é medida através da **umidade volumétrica do solo**, θ . Define-se a umidade volumétrica do solo como a função $\theta : \mathbb{R}^3 \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ tal que $\theta = \theta(\vec{x}, t)$, razão entre o volume ocupado pela água e o volume total da amostra, portanto adimensional [$\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-3}$], é

$$\theta = \frac{V_a(\vec{x}, t)}{V_T(\vec{x})} . \quad (1.1)$$

Em termos práticos a umidade pode variar de θ_r a θ_s , sendo θ_r o conteúdo de água retido numa amostra de solo muito seca e θ_s o conteúdo de água de saturação (LIBARDI, 2005).

1.1.3 Porosidade do solo

Para definir porosidade, suponha um volume elementar, Ω , do meio poroso, grande o suficiente para conter um considerável número de partículas sólidas e poros, de forma

² Fenômeno típico da uma interface líquido-gás que faz com que a superfície do líquido venha a se comportar como se estivesse coberto por uma membrana elástica, sob tensão, com tendência permanente de se contrair (REICHARDT; TIMM, 2004).

que valores médios de certas propriedades físicas possam ser obtidos sobre o domínio e pequeno o suficiente em comparação com todo o domínio. Então, **porosidade**, ϕ , é a razão entre o volume total dos poros, V_ϕ , em Ω e o volume total do meio, V_T , neste mesmo volume elementar Ω (BEAR; CHENG, 2009)

$$\phi(\vec{x}, t) = \frac{V_\phi(\vec{x}, t)}{V_T(\vec{x})} . \quad (1.2)$$

Na prática a porosidade pode ser tomada como constante, $\phi(\vec{x}, t) = \phi$. Se $V_\phi = V_T - V_s$, sendo V_s o volume ocupado pelas partículas sólidas do solo, então, outra maneira equivalente de se obter a porosidade é através da equação (1.3) abaixo

$$\phi = 1 - \frac{\rho_s}{\rho_p} , \quad (1.3)$$

sendo ρ_s a **densidade do solo** (densidade aparente), calculada pela expressão $\rho_s = m_s/V_T$ com m_s a massa dos sólidos do solo e ρ_p a **densidade das partículas** (densidade real), calculada pela expressão $\rho_p = m_s/V_s$ (REICHARDT; TIMM, 2004).

2 O FENÔMENO: ÁGUA NO SOLO

2.1 Energia Potencial Total da Água

Para o estudo do movimento da água é necessário conhecer seu estado de energia, de fato, a energia potencial. Normalmente em estudos de movimento da água, sua **energia potencial total** é representada por ψ .

O potencial total da água, de unidade $[Nm]$, é função de várias variáveis, sintetizada na soma de cinco parcelas principais. São estas o potencial térmico, $\psi_T = \psi(T)$; o potencial piezométrico (de pressão), $\psi_P = \psi(P)$; o potencial osmótico, $\psi_{os} = \psi(n_a)$, função do número de mols de água, n_a , no sistema; o potencial gravitacional, $\psi_g = \psi(z)$, função da altura z e o potencial matricial, $\psi_m = \psi(\theta)$, função da umidade, θ .

Deste modo,

$$\psi(T, P, z, n_a, \theta) = \psi_T + \psi_P + \psi_g + \psi_{os} + \psi_m . \quad (2.1)$$

Para maioria das aplicações práticas o *potencial térmico* é em geral desprezível. O *potencial osmótico* é também desconsiderado devido à baixa concentração de solução no solo e da ausência de membranas semipermeáveis que permitiriam a ação osmótica entre elas, por diferença da concentração. Efetivamente, o *potencial total da água* pode ser considerado, de acordo com (REICHARDT; TIMM, 2004), como

$$\psi = \psi_P + \psi_g + \psi_m . \quad (2.2)$$

Mais especificamente, o **potencial piezométrico** corresponde à diferença entre a pressão da água atuante em um ponto e a pressão do potencial de referência, cuja pressão é a atmosférica. O potencial piezométrico não é levado em conta em solos não saturados, já que não há coluna d'água exercendo pressão sobre o ponto avaliado (LIBARDI, 2005).

O **potencial gravitacional** é a própria energia potencial do campo gravitacional, igual ao produto mgz , sendo m a massa, g a aceleração da gravidade e z a cota em relação a um referencial arbitrário.

O **potencial matricial** diz respeito às interações entre a matriz do solo e a água retida neste. Consequentemente, para remover a água retida no solo devido as forças capilares e de adsorção e então torná-la livre da influência da matriz do solo, é necessário despende energia. E, tanto maior é a energia despendida quanto menor for o conteúdo de água no solo (LIBARDI, 2005).

Como neste trabalho considera-se apenas solos não saturados, tem-se que o potencial piezométrico é nulo, $\psi_P = 0$, como visto acima. De onde, o potencial total da água será tomado como

$$\psi = \psi_g + \psi_m . \quad (2.3)$$

2.2 Carga Hidráulica

A energia potencial, definida na seção anterior, pode ser expressa como energia por unidade de peso, denominada **carga** .

Dessa maneira, a razão ψ/mg é a definição de h , isto é, a **carga hidráulica da**

água¹, com unidade $[Nm \cdot N^{-1}] = [m]$ (LIBARDI, 2005). O potencial total da água (no caso, a energia mecânica total) pode ser expresso como **carga hidráulica total da água**

$$h = \frac{\psi}{mg} = \frac{\psi_g}{mg} + \frac{\psi_m}{mg} = h_g + h_m . \quad (2.4)$$

O movimento de água se dá do estado de energia potencial maior para o de menor e pode ser compreendido como a resultante dessa diferença de potencial (LIBARDI, 2005). Então, para o fluxo ocorrer de um ponto z_1 a um ponto z_o o potencial h_1 , em z_1 tem que ser maior do que o potencial h_o , em z_o . Deste modo, se $h_1 > h_o$ então $h_1 = h_o + \Delta h$, onde Δh é a perda de carga hidráulica (BEAR; CHENG, 2009). A taxa pelo qual a carga total se dissipa em função da distância que o fluido percorre após se infiltrar pelo solo é denominado **Gradiente Hidráulico**, $(\partial h / \partial z)$.

2.3 Equações de Darcy e Darcy-Buckingham

Uma das relações matemáticas fundamentais no estudo e simulação numérica do movimento da água no solo é a equação de Darcy. Esta equação descreve o fluxo de água em solo saturado em regime estacionário.

Ao percolar água através de uma amostra de solo de comprimento $L = \Delta z$ e área A em condições de saturação, tomando dois reservatórios de nível constante (LIBARDI, 2005), (BEAR; CHENG, 2009), além disso, considerando a carga hidráulica total

$$h = h_g + h_P , \quad (2.5)$$

então, $\Delta h = h_2 - h_1$, mede a diferença de carga entre os dois manômetros, (tubos laterais curvos da figura 2), quando o fluido incompressível percorre a amostra. Sendo a carga gravitacional, h_g , sobre os reservatórios e a carga de pressão, h_P , acima dos reservatórios individualmente. Veja a figura 2. Quando o valor da vazão não variar mais com o tempo (LIBARDI, 2005), obtém-se a seguinte expressão para o fluxo Q :

$$Q = -K_{sat} A \frac{\Delta h}{L} , \quad (2.6)$$

conhecida como Lei de Darcy que, no limite quando $L = \Delta z \rightarrow 0$, nos fornece

$$Q = -K_{sat} A \frac{\partial h}{\partial z} , \quad (2.7)$$

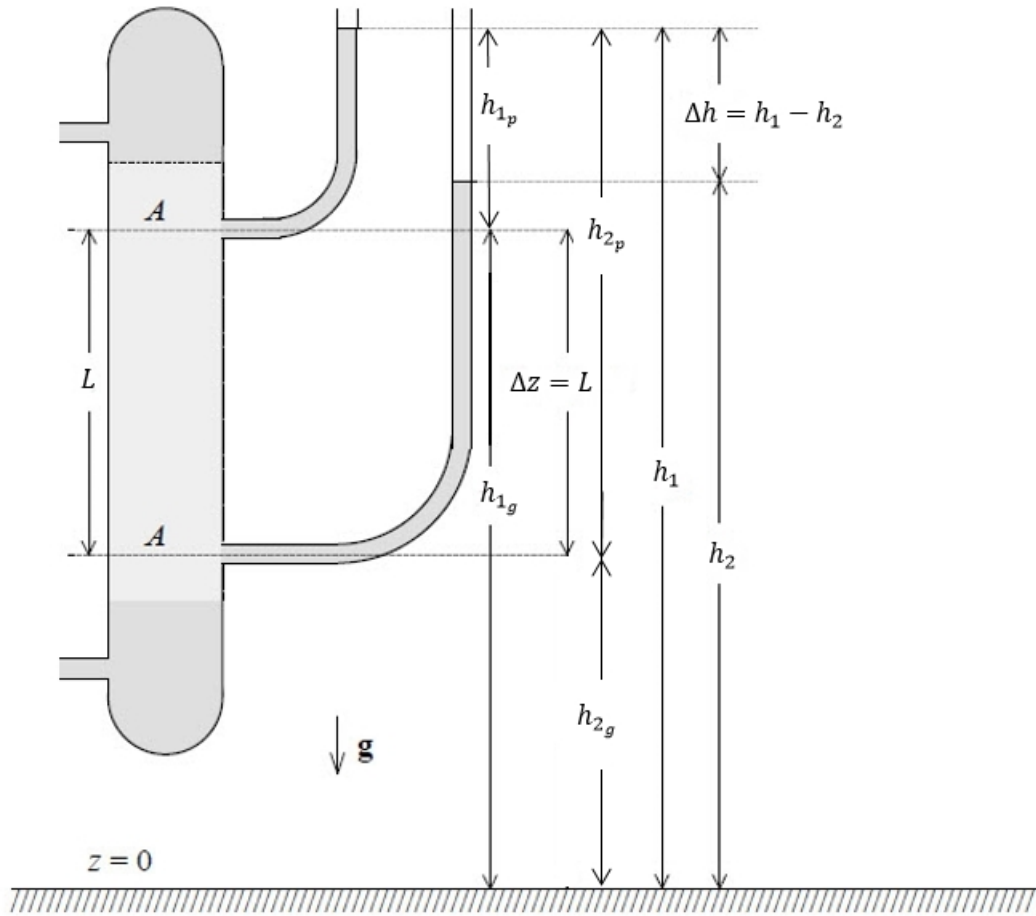
sendo K_{sat} constante, chamada de **condutividade hidráulica do meio saturado** de unidade $[m \cdot s^{-1}]$.

A equação de Darcy foi desenvolvida para modelar o movimento de um líquido em meio poroso saturado, já para solos não saturados a equação de Darcy não é suficiente. De fato, a situação de maior interesse prático para a agricultura (REICHARDT; TIMM, 2004), é aquela onde o solo se encontra não saturado, do qual a implementação computacional será desenvolvida neste texto.

A equação de Darcy-Buckingham a seguir, é uma versão da equação de Darcy, em que se considera o movimento de um líquido em condições de solo não saturado (LIBARDI,

¹ O símbolo h vem do inglês *head*. Não confundir com altura que também possui unidade de comprimento.

Figura 2 – Ilustração do esquema experimental realizado por Darcy



Fonte: Desconhecida

2005), mostrando que a condutividade hidráulica e o potencial matricial são funções do teor de umidade do solo, θ , ou seja, $K = K(\theta)$ e $\psi_m = \psi_m(\theta)$. Em termos da densidade de fluxo, q , isto é, Q/A

$$q = -K(\theta) \frac{\partial \psi}{\partial z} = -K(\theta) \frac{\partial}{\partial z} (\psi_m + \psi_g) . \quad (2.8)$$

A lei de Darcy é um caso particular da equação 2.8 quando $\theta = \theta_s$, isto é, $K_{sat} = K(\theta_s)$.

Como ψ_m é função de $\theta(z, t)$, pela regra da cadeia aplicada em $\partial \psi_m / \partial z$

$$q = - \left(K(\theta) \frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial z} + K(\theta) \frac{\partial \psi_g}{\partial z} \right) = - \left(D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial z} + K(\theta) \frac{\partial \psi_g}{\partial z} \right) , \quad (2.9)$$

sendo $D(\theta) = K(\theta) \partial \psi_m / \partial \theta$ a **difusividade da água no solo** (REICHARDT; TIMM, 2004).

2.4 Infiltração da Água no Solo

As simulações de fluxo de água em solo não saturado, baseadas na equação de Richards, descrevem o movimento da água no solo que ocorre a partir do processo de infiltração. Portanto, para uma boa compreensão do presente trabalho, serão introduzidos, brevemente, alguns conceitos envolvidos no fenômeno de infiltração.

Deste modo, define-se **infiltração** como o processo pelo qual a água entra no solo, que perdura enquanto houver disponibilidade de água em sua superfície (REICHARDT; TIMM, 2004), ou seja, é um processo superficial, que ocorre na interface solo-atmosfera.

2.4.1 Perfil de umedecimento do Solo

As curvas geradas a partir das simulações do modelo implementado neste texto, são curvas que mostram o perfil de umedecimento do solo em função da profundidade, como esquematizada na figura 3. Cada região (zona) desta curva será analisada sucintamente a seguir.

Num perfil de solo uniforme, quando se mantém uma pequena carga hidráulica na superfície, a distribuição da água com a profundidade se dá como na figura 3.

Nesta figura a **zona de saturação** é a região logo abaixo da superfície do solo onde este se encontra saturado. A **zona de transição**, é uma região de decréscimo acentuado do conteúdo de água. A **zona de transmissão** é uma porção do perfil através da qual a água é transmitida com variações muito pequenas no conteúdo de água. Enquanto todas as outras zonas permanecem com espessura praticamente constante, esta é aumentada continuamente com a aplicação de água. A **zona de umedecimento**, é uma região de variação relativamente rápida de conteúdo de água. Por fim, a **frente de molhamento** compreende uma pequena região na qual o gradiente de conteúdo de água sofre uma variação bastante abrupta que representa o limite visível da penetração da água (LIBARDI, 2005).

A quantidade de água que irá entrar em um dado solo em um dado tempo depende tanto da quantidade de água que o solo pode armazenar quanto da taxa de transmissão da água através do solo úmido para a frente de molhamento em contato com o solo seco abaixo (TAYLOR; ASHCROFT, 1972).

Se toda superfície estiver molhada, a remoção do ar que está nos poros do solo pode de certo modo apresentar um problema e portanto influenciar na infiltração.

2.5 Curva de Retenção

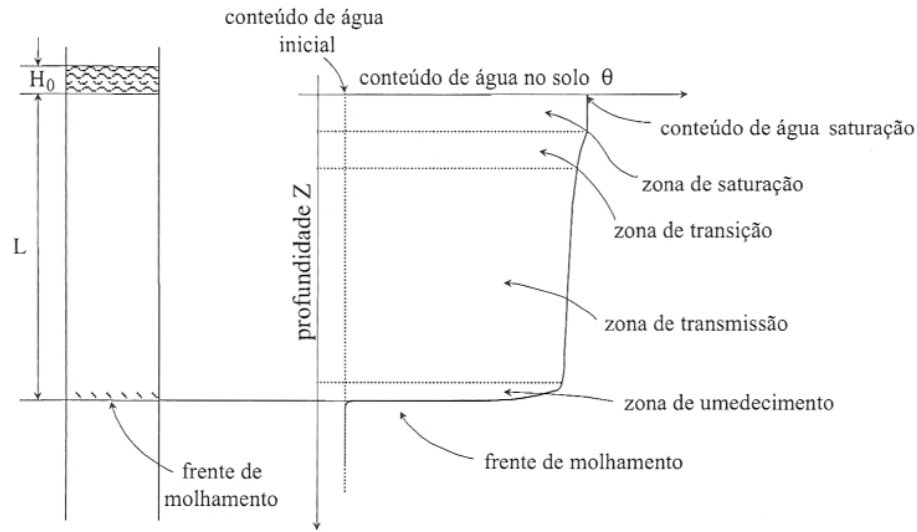
As **curvas de retenção da água no solo**, fornecem informações muito importantes para um modelo matemático de fluxo em solo não saturado. Essas curvas representam a relação entre o potencial matricial e o teor de umidade da água no solo (BACCHI, 1988).

Tradicionalmente, tais curvas são obtidas por métodos experimentais ou ajustando-se os resultados a uma função previamente estabelecida (LIBARDI, 2005) empiricamente, já que uma relação matemática entre o potencial matricial e a umidade ainda é desconhecida. Entretanto, alguns modelos matemáticos tentam descrever essa relação entre θ e ψ .

Um desses modelos é o modelo de van Genuchten (GENUCHTEN, 1980). Há também o modelo de Harverkamp *et al.*, (HAVERKAMP *et al.*, 1977), além de outros, como o modelo de Brooks e Corey (BROOKS; COREY, 1964), o modelo de Srivastava e Yeh (SRIVASTAVA; YEH, 1991), etc.

Para a simulação numérica da equação de Richards é preciso conhecer um parâme-

Figura 3 – Perfil de umedecimento do solo em certo instante do processo de infiltração



Fonte: (LIBARDI, 2005)

tro chamado capacidade hídrica específica $C(\psi_m)$. A partir dos modelos citados acima é possível obter uma expressão para esse parâmetro dada por

$$C(\psi_m) = \frac{\partial \theta}{\partial \psi_m} > 0, \quad (2.10)$$

com unidade $[m^{-1}]$. A capacidade hídrica específica descreve fisicamente a habilidade do solo de acumular umidade com a mudança no potencial matricial (RUMYNIN, 2011).

A forma da curva de retenção depende do tipo de solo, distribuição de tamanhos de vazios e, conseqüentemente, da distribuição das frações granulométricas.

2.6 Condutividade Hidráulica do Solo

A condutividade hidráulica do solo, K , de unidade $[m \cdot s^{-1}]$, é um parâmetro que expressa a facilidade com que um fluido é transportado através dos espaços vazios do meio (LIBARDI, 2005).

Como observado por Buckingham, a condutividade hidráulica é função da umidade θ , mais especificamente, função direta da umidade. Assim, quando $\theta = \theta_s$ tem-se o fluxo em condição saturada e K é máximo. À medida que θ diminui, K diminui, normalmente de forma exponencial (LIBARDI, 2005).

É possível agrupar os métodos de determinação da condutividade hidráulica do solo saturado de acordo com suas bases teóricas em três categorias: Os métodos que se baseiam na solução da equação de Richards, os que se baseiam na distribuição do tamanho de poros do solo e os métodos empíricos que procuram relacionar a condutividade hidráulica estimada por um dado método com outras propriedades do solo (BACCHI, 1988).

3 MODELO MATEMÁTICO

3.1 Equação de Richards

A equação de Richards é uma equação diferencial parcial que governa o fluxo de água em solo não saturado, válida também para regime de **fluxo não estacionário** (BACCHI, 1988).

É de fato, uma equação de conservação de massa e, portanto, antes de estudá-la propriamente, é importante compreender os princípios da equação da continuidade, que origina a equação de Richards, (RICHARDS, 1931). A subseção a seguir objetiva introduzir rapidamente os conceitos físicos e matemáticos mais essenciais para um bom entendimento da dedução da equação de Richards.

3.1.1 Equação da Continuidade

A equação da continuidade obedece a lei da conservação de massa baseada no fato de que matéria não pode ser criada nem perdida em um sistema fechado. Pelo esquema da figura 4.

Seja um volume elementar $dV = dxdydz$ como na figura 5 e q_x a densidade de

Figura 4 – Esquema do balanço de massa para o problema deste texto

Taxa de variação de água pelo tempo no elemento de volume	+	Taxa de fluxo de água resultante através da superfície do elemento de volume	=	0
---	---	--	---	---

fluxo de água que entra neste volume na direção x . Se $dQ_{a,x}^E$ é a vazão elementar de água que **entra** no volume dV pela superfície $dydz$, (LIBARDI, 2005), então

$$dQ_{a,x}^E = q_x dydz . \quad (3.1)$$

Considerando que ao longo da direção x pode haver uma variação na densidade de fluxo q_x igual a $\partial q_x / \partial x$, a densidade de fluxo que sai pela face oposta do elemento de volume na direção x , será:

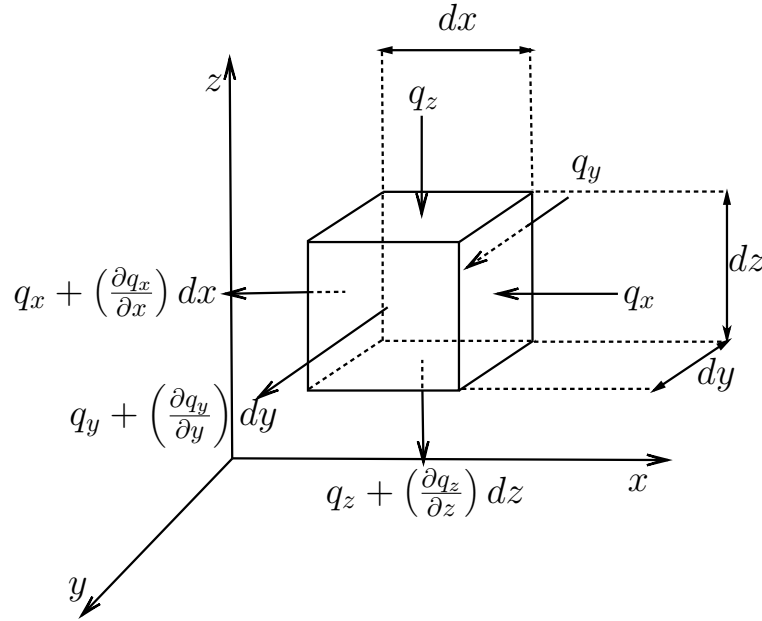
$$q_x + \left(\frac{\partial q_x}{\partial x} \right) dx . \quad (3.2)$$

Daí, a vazão elementar de água que **sai** pela superfície oposta a $dydz$, representada por $dQ_{a,x}^S$, é

$$dQ_{a,x}^S = \left[q_x + \left(\frac{\partial q_x}{\partial x} \right) dx \right] dydz . \quad (3.3)$$

A variação da quantidade de água no elemento de volume por unidade de tempo na direção x é dada pelo balanço de massa, isto é, a diferença da quantidade que entra e a quantidade que sai, $dQ_{a,x} = dQ_{a,x}^E - dQ_{a,x}^S$, (LIBARDI, 2005). Sendo $dQ_{a,x}$ a vazão elementar total do vetor densidade de fluxo na direção x que atravessa o elemento de

Figura 5 – Elemento de Volume atravessado por um fluxo de água



Fonte: (REICHARDT; TIMM, 2004)

volume, então $dQ_{a,x}$ representa a taxa de acumulação ou perda de água neste elemento, isto é,

$$dQ_{a,x} = \frac{\partial(dV_{a,x})}{\partial t} , \quad (3.4)$$

sendo $dV_{a,x}$ o elemento de volume de água proveniente da densidade de fluxo na direção x e, portanto, pelo balanço de massa $dQ_{a,x} = dQ_{a,x}^E - dQ_{a,x}^S$

$$\frac{\partial(dV_{a,x})}{\partial t} = q_x dy dz - \left[q_x + \left(\frac{\partial q_x}{\partial x} \right) dx \right] dy dz = - \frac{\partial q_x}{\partial x} dV \quad (3.5)$$

e de maneira análoga, para as direções y e z têm-se

$$\frac{\partial(dV_{a,y})}{\partial t} = - \frac{\partial q_y}{\partial y} dV , \quad (3.6)$$

$$\frac{\partial(dV_{a,z})}{\partial t} = - \frac{\partial q_z}{\partial z} dV . \quad (3.7)$$

A variação total $(\partial V_a)(\partial t)$ no elemento dV será a soma das variações nas três direções, isto é

$$\frac{\partial(dV_a)}{\partial t} = - \left(\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z} \right) dV . \quad (3.8)$$

Como $\theta = dV_a/dV$ então, $dV_a = \theta dV$, com isso e dividindo a equação 3.8 por dV obtém-se

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = - \left(\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z} \right) . \quad (3.9)$$

A equação 3.9, acima, é chamada **equação da continuidade** (REICHARDT; TIMM, 2004).

Supondo fluxo unidimensional, como o abordado neste trabalho, tem-se

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\frac{\partial \vec{q}}{\partial z} . \quad (3.10)$$

3.1.2 Determinando a Equação de Richards

Esta subseção deduz a equação de Richards a partir da equação da continuidade e a apresenta de três formas matematicamente equivalentes.

Seja o eixo z orientado positivamente para cima. Então, se o fluxo na equação 3.10 for dado pela equação de Darcy-Buckingham, equação 2.8, em função da carga hidráulica total, tem-se

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K(\theta) \left(\frac{\partial h_m}{\partial z} + 1 \right) \right] , \quad (3.11)$$

chamada de **Equação de Richards para fluxo unidimensional**. Considera-se a carga hidráulica ao invés do potencial hidráulico por questões de conveniência nas unidades. Esta equação na forma como apresentada em 3.11, é também referida como a forma **mista** da equação de Richards.

Como θ é função de $h_m(z, t)$, então $\partial \theta / \partial t = (\partial \theta / \partial h_m)(\partial h_m / \partial t)$. Contudo, pela expressão 2.10, obtém-se $\partial \theta / \partial t = C(h_m) \partial h_m / \partial t$. Portanto, escrevendo K em função de h_m obtém-se a seguinte expressão

$$C(h_m) \frac{\partial h_m}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K(h_m) \left(\frac{\partial h_m}{\partial z} + 1 \right) \right] , \quad (3.12)$$

conhecida como a **forma h** da equação de Richards.

Já em termos da difusividade da água no solo, a equação de Richards se escreve como

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[D(\theta) \left(\frac{\partial \theta}{\partial z} + K(\theta) \right) \right] , \quad (3.13)$$

conhecida como a **forma θ** .

Neste trabalho, é investigada a equação de Richards na forma h e na forma mista.

3.2 Modelos para a Curva de Retenção e Condutividade Hidráulica

Para solucionar a equação de Richards é necessário conhecer as relações constitutivas do problema. Isto é, deve-se conhecer uma expressão que relacione o potencial matricial e a umidade, ainda que empírica, de onde se obtém a capacidade hídrica específica $C(\psi)$ e uma expressão para condutividade hidráulica $K(\theta)$. Esta seção apresenta e discute dois modelos que serão utilizados na implementação e simulação da equação de Richards neste trabalho.

É importante salientar que quanto mais seco o solo maior a sucção, isto é, maior é o potencial matricial, ψ_m e, portanto, um potencial matricial muito elevado faz com que uma umidade residual θ_r permaneça no solo. A curva de retenção da água no solo nos fornece esse valor além de outras informações, como θ_s definida como o ponto tal que $\psi_m = 0$ na curva de retenção (LIBARDI, 2005). Já θ_r , através da curva de retenção, é obtido por extrapolação de dados de retenção da água no solo para baixo teor de umidade.

3.2.1 O modelo de van Genuchten para a Curva de Retenção e van Genuchten-Mualem para a Condutividade Hidráulica

Dos diversos modelos desenvolvidos para se obter uma relação entre o potencial matricial do solo e sua umidade, o método apresentado por van Genuchten em 1980 é um dos que tem mais destaque (REICHARDT; TIMM, 2004) sendo citado em publicações como (CELIA; BOULOUTAS; ZARBA, 1990), (SHAHRAIYNI; ASHTIANI, 2009), (WANKO; TAPIA; MOSÉ, 2015) e utilizado em *softwares* como HYDRUS® (SIMUNEK et al., 1998) e SWRC (SEKI, 2007).

A equação de van Genuchten é uma expressão obtida empiricamente e dada como segue

$$\theta(\psi_m) = \frac{\theta_s - \theta_r}{[1 + (\alpha|\psi_m|)^n]^\beta} + \theta_r , \quad (3.14)$$

no qual os parâmetros α e $n \geq 1$ são obtidos por ajuste, $\beta = 1 - 1/n$ (GENUCHTEN, 1980).

Analisando esta equação mais de perto, reescrevendo-a na forma

$$\theta(\psi_m) - \theta_r = \frac{1}{[1 + (\alpha|\psi_m|)^n]^\beta} (\theta_s - \theta_r) , \quad (3.15)$$

como $\beta = 1 - 1/n$, tem-se que β é sempre positivo, logo

$$\lim_{\psi_m \rightarrow \infty} \frac{1}{[1 + (\alpha|\psi_m|)^n]^\beta} = 0 , \quad (3.16)$$

descrevendo bem o comportamento real da água no solo quando a carga hidráulica é muito grande. Deste modo, a sucção (potencial matricial) mesmo muito elevada não é capaz de eliminar toda a umidade do solo, restando somente a umidade residual. É claro que, para um modelo hipotético, à medida que a carga hidráulica cresce a umidade deveria ir a zero, isto é, $\theta_r = 0$, porém como é sabido, isto não ocorre na prática, fato este incluso no modelo de van Genuchten.

Se o solo estiver saturado então $\psi_m = 0$, logo

$$\frac{1}{[1 + (\alpha|\psi_m|)^n]^\beta} = 1 , \quad (3.17)$$

daí

$$0 < \frac{1}{[1 + (\alpha|\psi_m|)^n]^\beta} \leq 1 , \quad (3.18)$$

portanto

$$\theta(\psi_m) - \theta_r \leq (\theta_s - \theta_r) . \quad (3.19)$$

A fim de determinar uma expressão para a condutividade hidráulica, alguns modelos foram elaborados por métodos estatísticos, que se apresentam mais eficientes pela sua menor exigência experimental.

Um dos modelos estatísticos mais utilizados na predição da condutividade hidráulica de um solo foi proposto por Mualem (MUALEM, 1976) baseado na distribuição de poros em um volume elementar de solo (BACCHI, 1988). A partir desse modelo, van Genuchten utilizou de sua equação que relaciona a umidade com o potencial matricial (GENUCHTEN, 1980), e obteve a seguinte expressão para $K(\theta)$

$$K(\theta) = K_{sat} S^{1/2} \left[1 - \left(1 - S^{1/\beta} \right)^\beta \right]^2 , \quad (3.20)$$

em que $S(\theta)$ é a **saturação efetiva**, dada por

$$S(\theta) = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} . \quad (3.21)$$

Esta equação, conhecida como van Genuchten-Mualem, parece se ajustar melhor aos solos de textura média a arenosa (LIBARDI, 2005).

3.2.2 O modelo de Haverkamp *et al.* para a Curva de Retenção e Condutividade Hidráulica

O modelo de Haverkamp *et al.* para a obtenção da curva de retenção do solo é um dos modelos utilizados no trabalho de (CELIA; BOULOUTAS; ZARBA, 1990) e, consequentemente, também será utilizado nas implementações apresentadas neste texto. O modelo é dado a seguir

$$\theta(\psi_m) = \frac{\alpha(\theta_s - \theta_r)}{\alpha + |\psi_m|^\beta} + \theta_r , \quad (3.22)$$

sendo $\beta \geq 0$. Assim como no modelo de van Genuchten, observa-se para este modelo que $\theta \rightarrow \theta_r$ quando $\psi_m \rightarrow \infty$, (HAVERKAMP *et al.*, 1977).

Para a predição da condutividade hidráulica do solo Haverkamp *et al.* sugerem o modelo da equação 3.23 abaixo

$$K(\psi_m) = K_{sat} \frac{A}{A + |\psi_m|^\gamma} , \quad (3.23)$$

Sendo α , β , A e γ parâmetros de ajuste nas equações 3.22 e 3.23.

3.2.3 Condições de Fronteira

Para a unicidade da solução de uma equação diferencial são necessárias informações adicionais ao problema. Essas informações são obtidas através das condições iniciais e das condições de fronteira.

Se for conhecida a distribuição da umidade ou potencial matricial por todo o domínio Ω em dado instante de tempo, chamado **tempo zero**, então dá-se o nome a essa distribuição de condição inicial do problema (RUMYNIN, 2011).

Por outro lado, quando são conhecidos os valores da umidade ou do potencial matricial no bordo, $\partial\Omega$, do domínio do problema ao longo do tempo, então as condições de fronteira, ou também ditas de contorno, são conhecidas.

Em muitas aplicações é preciso lidar com fenômenos transientes em uma região limitada, o que leva a um problema misto, ou seja, de valor inicial e de fronteira.

De maneira geral, problemas físicos geram muitas vezes condições do tipo

$$\alpha u(x) + \beta \frac{\partial u}{\partial n}(x) = f(x), \quad x \in \partial\Omega ,$$

ditas de Robin, em que $\alpha^2 + \beta^2 \neq 0$, com α e β constantes dadas, f uma função em $\partial\Omega$ e $\partial u / \partial n$ a derivada de u na direção normal a $\partial\Omega$ no sentido para fora de Ω . No caso em que $\beta = 0$ a condição acima é conhecida como condição de Dirichlet, no caso em que $\alpha = 0$, temos uma condição de Neumann (IÓRIO, 2010). Também conhecidos como problema essencial e natural respectivamente (JOHNSON, 2009).

Para o problema unidimensional de fluxo de água em solo não saturado apresentado

neste trabalho, cujo domínio é o intervalo $\Omega = [a, b]$ e $\partial\Omega = a, b$, a condição inicial é uma função, em termos de carga hidráulica, $h(z, 0) = h_o(z)$, distribuição inicial da carga ao longo da direção vertical, onde $z \in \Omega$.

Considerando as condições de fronteira, tem-se a condição de Dirichlet, pela qual se conhecem na fronteira os valores da umidade ou da carga em cada instante do tempo, dados por uma função $h(a, t) = h_a$ constante na extremidade superficial e $h(b, t) = h_b(t)$ na outra extremidade.

Se conhecido o fluxo de água que atravessa pelo menos uma das fronteiras, tem-se a condição de Neumann.

Para validar o modelo implementado, admite-se neste trabalho apenas as condições de Dirichlet nas simulações realizadas assim como em (CELIA; BOULOUTAS; ZARBA, 1990).

4 MODELO NUMÉRICO

No presente trabalho, para a solução numérica da equação Richards, dois métodos foram utilizados, o método das diferenças finitas (MDF) e o método dos elementos finitos (MEF). Na abordagem com o MDF o desenvolvimento foi baseado na publicação de (CELIA; BOULOUTAS; ZARBA, 1990). Já para o MEF foi tomada a média aritmética por elemento nas expressões de C e K avaliadas ao passo de tempo anterior, no tratamento da não linearidade da equação.

Os aspectos desta discretização e os cálculos estão detalhados nas próximas seções.

Neste capítulo, para evitar uma notação muito extensa, o potencial matricial, ψ_m , será simbolizado apenas como ψ , deixando salvo a diferença entre tais símbolos quando não estiver clara a notação. O mesmo para h_m e h .

4.1 O que é preciso saber de matemática

A resolução numérica de qualquer problema de equações diferenciais exige uma discretização que consiste em particionar o domínio do problema. Para isso, define-se abaixo o que vem a ser uma *partição*.

Definição 4.1 *Seja um intervalo $I = [a, b]$, uma **partição** de I é uma divisão deste domínio em subintervalos dada da seguinte forma $[a, b] = \cup_{i=1}^N [z_{i-1}, z_i]$, sendo $z_0 = a$, $z_N = b$ e $a < z_{i-1} < z_i < b$ para $i = 2, \dots, N-1$. As constantes z_i são chamadas de vértices da partição (GALVIS; VERSIEUX, 2011).*

Também é fundamental para este trabalho, quando na abordagem do elementos finitos, definir o que vem a ser um espaço vetorial finito de funções. Assim

Definição 4.2 *Diz-se que um espaço vetorial $\mathcal{W}$ de funções definidas em $[a, b]$ é **finito**, ou seja, tem dimensão finita, se existe $n \in \mathbb{N}$, e um conjunto de funções $\phi_i : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$, $i \in \{1, \dots, n\}$, tal que qualquer função $\varphi \in \mathcal{W}$ pode ser escrita como uma combinação linear das funções ϕ_i . Isto é, existem n constantes α_i tal que, $\varphi = \sum_{i=1}^n \alpha_i \phi_i$.*

4.1.1 Espaços Normados Completos

Dado um espaço vetorial real $\mathcal{S}$, uma função $\|\cdot\| : \mathcal{S} \rightarrow \mathbb{R}^+ \cup \{0\}$ define uma norma se as seguintes propriedades são satisfeitas:

1. Dado $v \in \mathcal{S}$, $\|v\| = 0$ se e somente se $v = 0$
2. $\forall \alpha \in \mathbb{R}$ e $v \in \mathcal{S}$ vale $\|\alpha v\| = |\alpha| \|v\|$
3. Dados quaisquer $u, v \in \mathcal{S}$, vale a **desigualdade triangular**, isto é,

$$\|u + v\| \leq \|u\| + \|v\| .$$

Diremos que o par $(\mathcal{S}, \|\cdot\|)$ forma um espaço vetorial normado (CHRISTENSEN, 2010). Assim a norma $\|\cdot\|$ induz uma métrica¹ em $\mathcal{S}$ dada por $d(u, v) = \|u - v\|$. O espaço vetorial normado $\mathcal{S}$ é também um espaço métrico denotado por $(\mathcal{S}, d)$.

Diz-se que um espaço vetorial $\mathcal{S}$ tem produto interno quando é possível definir uma função que leva cada par de vetores (u, v) em $\mathcal{S} \times \mathcal{S}$ a um número real indicado por $\langle u, v \rangle$, que será chamada de **produto interno** de u por v se valerem as seguintes propriedades, sendo $u, v, w \in \mathcal{S}$ e $\alpha \in \mathbb{R}$:

1. $\langle u, v \rangle = \langle v, u \rangle$
2. $\langle \alpha u, v \rangle = \alpha \langle u, v \rangle$
3. $\langle u + w, v \rangle = \langle u, v \rangle + \langle w, v \rangle$
4. $\langle u, u \rangle \geq 0$ e $\langle u, u \rangle = 0 \Leftrightarrow u = 0$

Um espaço vetorial $\mathcal{S}$ com produto interno possui uma norma definida a partir do produto interno, a saber, $\|u\| = \sqrt{\langle u, u \rangle}$. Tal norma é referida como norma induzida pelo produto interno.

Para o problema unidimensional, em um intervalo $I = [a, b]$, define-se o espaço de funções de quadrado integráveis em I como

$$L^2([a, b]) := \left\{ f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R} \mid \int_a^b |f(z)|^2 dz < \infty \right\}. \quad (4.1)$$

O espaço $L^2([a, b])$ é um espaço com o produto interno

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b f(z)g(z)dz, \quad (4.2)$$

e a norma correspondente

$$\|f\|_{L^2} = \left[\int_a^b |f(z)|^2 dz \right]^{1/2} = \langle f, f \rangle^{1/2}. \quad (4.3)$$

Finalmente, para introduzir a noção de **espaços normados completos**, primeiro define-se o conceito de *sequência de Cauchy*.

Definição 4.3 Uma sequência de pontos (x_k) em um espaço métrico $(\mathcal{S}, d)$ chama-se uma **sequência de Cauchy** quando, para todo $\epsilon > 0$ dado, existe $k_o \in \mathbb{N}$ tal que $k, r > k_o \Rightarrow d(x_k, x_r) < \epsilon$. (LIMA, 1977).

Definição 4.4 Um espaço vetorial normado $\mathcal{S}$ é completo se para qualquer sequência de Cauchy (v_n) em $\mathcal{S}$, existe $v \in \mathcal{S}$ tal que v é limite da sequência (v_n) (KREYSZIG, 2007).

Espaços vetoriais normados completos recebem o nome de **espaços de Banach**, Espaços vetoriais com produto interno serão chamados **espaços de Hilbert** se forem

¹ Pode-se entender métrica como uma generalização da idéia geométrica de distância

completos com a norma (e métrica) induzida pelo produto interno.

Um espaço de Hilbert como

$$H^1([a, b]) := \left\{ f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R} \mid f \text{ e } \frac{\partial f}{\partial z} \in L^2([a, b]) \right\}, \quad (4.4)$$

é equipado com o produto interno

$$\langle f, g \rangle_{H^1([a, b])} := \int_a^b |f(z)|^2 + \left| \frac{\partial f}{\partial z} \right|^2 dz. \quad (4.5)$$

A norma induzida pelo produto interno será, portanto, $\|\cdot\|_{H^1([a, b])}$ definida abaixo

$$\|f\|_{H^1([a, b])} := \left(\int_a^b |f(z)|^2 + \left| \frac{\partial f}{\partial z} \right|^2 dz \right)^{1/2}. \quad (4.6)$$

O espaço $H^1([a, b])$ assim consiste das funções f definidas em I que juntas com as suas primeiras derivadas são quadrado integráveis, isto é, pertencem a $L^2([a, b])$ (JOHNSON, 2009).

4.1.2 Matrizes

Na solução numérica de equações diferenciais, a matriz associada à discretização é **esparsa**, isto é, a quantidade de elementos não nulos é pequena comparada com o número total de elementos da matriz (CUNHA, 2000).

A utilização dos métodos de diferenças finitas e de elementos finitos em problemas de valor de fronteira leva a um sistema de equações cujos elementos não nulos estão localizados na diagonal principal e em algumas diagonais adjacentes. Matrizes deste tipo recebem o nome de **matriz de banda**. Fora da banda, todos os elementos são zero (PATEL, 1994).

Formalizando, $\mathbf{A} = [a_{ij}]$ é uma matriz de banda se

$$a_{ij} = 0 \text{ para } i - j > q \text{ e } j - i < p,$$

onde q e p são inteiros não negativos. Quando $q = p = 0$, tem-se uma **matriz diagonal**, quando $q = p = 1$, tem-se uma **matriz tridiagonal** (CUNHA, 2000) (PATEL, 1994).

Considere o sistema na forma matricial $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, onde $\mathbf{A}_{N \times N}$ é uma matriz tridiagonal

$$\begin{bmatrix} d_1 & c_1 & 0 & \cdots & 0 \\ a_2 & d_2 & c_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & a_{N-1} & d_{N-1} & c_{N-1} \\ 0 & \cdots & 0 & a_N & d_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{N-1} \\ x_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_{N-1} \\ b_N \end{bmatrix}. \quad (4.7)$$

Sistemas tridiagonais podem ser armazenados em apenas quatro vetores, três para as diagonais e um para o termo independente. Deste modo, matrizes de banda possuem grandes vantagens computacionais tanto no armazenamento de dados quanto no processamento na resolução de sistemas (CUNHA, 2000).

4.2 Formulação Numérica

O problema a ser resolvido computacionalmente neste texto é um problema transiente e de valor de fronteira, cujo domínio espacial é o intervalo $[a, b]$ para $a, b \in \mathbb{R}$ e o temporal, o intervalo $[0, T]$.

Na discretização da variável espacial z (direção vertical) considera-se um espaçamento constante Δz e uma **malha** de $[a, b]$ dada pelos pontos $z_i = a + i\Delta z$ com $i = 0, 1, \dots, N$, sendo $N \in \mathbb{N}$ e $\Delta z = (b - a)/N$, ou seja, o intervalo $[a, b]$ foi discretizado em uma malha de $N + 1$ pontos, chamados de **nós** da malha espacial.

Um tratamento análogo é realizado na discretização do intervalo de tempo $[0, T]$. Isto é, para $M \in \mathbb{N}$ e $\Delta t = T/M$, obtém-se a malha temporal com os nós $t_j = j\Delta t$, com $j = 0, 1, \dots, M$.

Para distinguir tempo e espaço será denotado por h_i^j o valor da função $h(z, t)$ no nível de tempo t_j e na posição z_i , isto é

$$h_i^j = h(z_i, t_j) ,$$

o índice superior se refere à malha usada no tempo, e o subíndice se refere à malha usada na variável espacial.

Para as simulações do modelo implementado neste estudo, são empregadas como relações constitutivas de $\theta(h)$ e $K(h)$, as equações 3.14 e 3.20, propostas por van Genuchten e Mualem respectivamente, e as equações 3.22 e 3.23 propostas por Haverkamp *et al.* nesta ordem.

A partir dessas relações empíricas citadas, pode-se obter expressões para a capacidade hídrica específica $C(h)$ que, pelo modelo de van Genuchten e Mualem, é dada por

$$C(h) = \frac{(\theta_r - \theta_s)\beta n \alpha^n |h|^{n-1}}{[1 + (\alpha|h|)^n]^{\beta+1}} , \quad (4.8)$$

e pelo modelo de Haverkamp *et al.*

$$C(h) = \frac{\alpha(\theta_r - \theta_s)\beta|h|^{\beta-1}}{(\alpha + |h|^\beta)^2} . \quad (4.9)$$

4.3 Formulação do Problema por Elementos Finitos

O método de elementos finitos (MEF) é um método numérico de resolução de equações diferenciais de valor de fronteira com início na engenharia estrutural, o que deu origem a muito de sua linguagem. O MEF não é aplicado diretamente sobre uma equação diferencial parcial, mas sim sobre um problema em sua forma integral, isto é, na forma variacional equivalente (JOHNSON, 2009).

Porém, como qualquer outro método numérico para equações diferenciais, inicia-se a partir da discretização do problema contínuo em um número finito dos chamados **elementos** (JOHNSON, 2009).

Partindo dessa divisão do domínio em um número finito de subdomínios, constrói-se uma aproximação da solução sobre cada elemento e conseqüentemente sobre todo o domínio.

A abordagem por elementos finitos do problema de fluxo em solo não saturado que será tomada nesta seção, tem por objetivo iniciar um estudo do método em problemas

desse tipo dentro do grupo de pesquisa onde este trabalho está inserido.

No tratamento da não linearidade da equação de Richards foi tomada a média por elemento nos parâmetros K e C , com valores no passo de tempo antecedente, porém os resultados não estiveram em conformidade com o esperado.

Esta seção apresenta o desenvolvimento do método do elementos finitos com o método de Galerkin, para solução numérica do problema de valor de fronteira

$$\begin{aligned} C(h) \frac{\partial h}{\partial t} &= \frac{\partial h}{\partial z} \frac{\partial K}{\partial z}(h) + K(h) \frac{\partial^2 h}{\partial z^2} + \frac{\partial K}{\partial z}(h); \\ h(z, 0) &= h_o(z); \\ h(a, t) &= h_a; \\ h(b, t) &= h_b(t); \end{aligned} \quad (4.10)$$

com a equação de Richards na forma h , e condições de fronteira de Dirichlet. Como será visto no próximo capítulo, os resultados obtidos através da implementação realizada através da formulação MEF com a equação de Richards na forma h não foram satisfatórios e portanto foi realizada nova formulação porém como método de diferenças finitas como em (CELIA; BOULOUTAS; ZARBA, 1990) com a equação de Richards na forma mista.

As funções base tomadas no desenvolvimento apresentado do método de elementos finitos são funções de grau 1.

4.3.1 A formulação variacional

Para a formulação variacional do problema 4.10, o espaço de funções $\mathcal{V}$ a ser construído será

$$\mathcal{V} := \left\{ v : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \mid v(z) \in H^1 \text{ e } v(a) = v(b) = 0 \right\}, \quad (4.11)$$

sendo $\Omega = [a, b]$ e H^1 como definido em 4.4.

Seja $w \in \mathcal{V}$, multiplicando ambos os lados da equação de Richards do problema 4.10 por w e integrando no intervalo $[a, b]$ obtém-se

$$\int_a^b w C(h) \frac{\partial h}{\partial t} dz = \int_a^b w \frac{\partial K(h)}{\partial z} \frac{\partial h}{\partial z} dz + \int_a^b w K(h) \frac{\partial^2 h}{\partial z^2} dz + \int_a^b w \frac{\partial K(h)}{\partial z} dz. \quad (4.12)$$

Integrando por partes o termo de segunda ordem, chega-se a

$$\int_a^b w K(h) \frac{\partial^2 h}{\partial z^2} dz = \underbrace{K w \frac{\partial h}{\partial z}}_0 \Big|_a^b - \int_a^b \frac{\partial h}{\partial z} \left[\frac{\partial K(h)}{\partial z} w + \frac{\partial w}{\partial z} K(h) \right] dz. \quad (4.13)$$

Portanto, a equação 4.12 pode ser escrita como

$$\int_a^b w C(h) \frac{\partial h}{\partial t} dz = - \int_a^b K(h) \frac{\partial w}{\partial z} \frac{\partial h}{\partial z} dz + \int_a^b w \frac{\partial K(h)}{\partial z} dz, \quad \forall w \in \mathcal{V}. \quad (4.14)$$

A equação 4.14 finaliza a formulação integral da equação de Richards do problema 4.10.

Para uma solução aproximada será utilizado o MEF com o Método de Galerkin que é um método de aproximação que, a grosso modo, propõe a resolução do problema variacional em subespaços de $\mathcal{V}$, de dimensão finita, (FERREIRA, 2003).

4.3.2 Discretizando

A discretização da equação de Richards começa através do método de Euler implícito no índice n , como será introduzido à frente, sendo o método de Euler implícito incondicionalmente estável.

Assim sendo, tomando $h \in C^2((0, T) \times (a, b))$, expandindo h na variável t em série de Taylor

$$h(z, t - \Delta t) = h(z, t) - \Delta t \frac{\partial h}{\partial t}(z, t) + \Delta t^2 r(z, t) , \quad (4.15)$$

sendo $r(z, t)$ a função resto (GALVIS; VERSIEUX, 2011). Para encurtar notação, representa-se Δt por τ , assim a equação 4.15 pode ser reescrita por

$$\frac{h(z, t - \tau) - h(z, t)}{\tau} = -\frac{\partial h}{\partial t}(z, t) + \tau r(z, t) , \quad (4.16)$$

indicando $h(z, t)$ por h^n e $h(z, t - \tau)$ por h^{n-1} , obtém-se da equação 4.16 acima, a aproximação

$$\frac{\partial h}{\partial t}(z, t) \approx \frac{h(z, t) - h(z, t - \tau)}{\tau} = \frac{h^n - h^{n-1}}{\tau} , \quad (4.17)$$

com o erro desta aproximação de ordem τ (GALVIS; VERSIEUX, 2011).

Assim, $h^n \in \mathcal{V}$ é a solução da equação de Richards com condições de Dirichlet homogêneas no instante $t = n\Delta t$. Ao substituir 4.17 na equação de Richards em sua forma integral 4.14 tem-se

$$\int_a^b w C^{n-1} \frac{h^n - h^{n-1}}{\tau} dz = - \int_a^b K^{n-1} \frac{\partial w}{\partial z} \frac{\partial h^n}{\partial z} dz + \int_a^b w \frac{\partial K^{n-1}}{\partial z} dz . \quad (4.18)$$

Deve se destacar que as relações constitutivas $C(h)$ e $K(h)$ serão avaliadas no passo de tempo anterior $n - 1$, de modo a tornar o problema linearizado.

Lembrando que na formulação variacional do problema proposto considerou-se $w \in \mathcal{V} \subset H^1$ sendo $\mathcal{V}$ definido em 4.11 fixa-se uma malha de $[a, b]$ cujos os elementos sejam $[z_i, z_{i+1}]$, intervalos de mesmo comprimento Δz .

Considere o subespaço de dimensão finita de $\mathcal{V}$, denominado $\hat{\mathcal{V}}$ e gerado por $\{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N\}$, sendo N o número total de nós da malha, tal que ϕ_i restrita ao elemento $[z_i, z_{i+1}]$ é um polinômio de grau no máximo 1, qualquer que seja $i = 1, \dots, N$ e

$$\phi_i(z_j) = \begin{cases} 0, & \text{se } i \neq j; \\ 1, & \text{se } i = j. \end{cases} \quad (4.19)$$

Tais funções base são dadas como

$$\phi_i(z) = \begin{cases} \frac{z - z_{i-1}}{z_i - z_{i-1}}, & \text{se } z_{i-1} \leq z \leq z_i, \\ \frac{z_{i+1} - z}{z_{i+1} - z_i}, & \text{se } z_i \leq z \leq z_{i+1}, \\ 0 & \text{se caso contrário.} \end{cases} \quad (4.20)$$

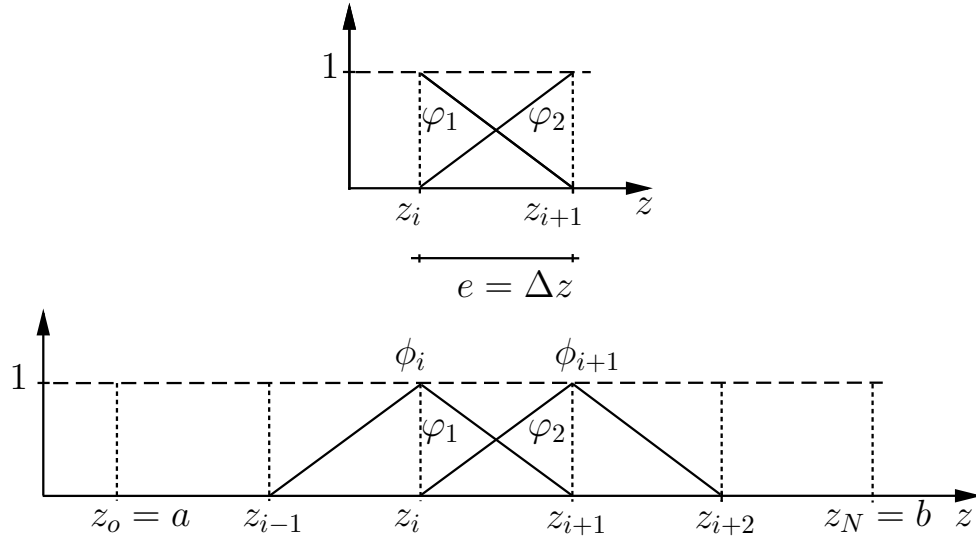
ver a figura 6.

Assim as funções testes em $\hat{\mathcal{V}}$ são do tipo $\bar{w}(t, z) = \sum_{i=1}^N w_i(t) \phi_i(z)$ com $w(z_i) = w_i$.

A solução aproximada de $h(z, t)$ em $\hat{\mathcal{V}}$ e denotada por $\bar{h}(z, t)$ é obtida da seguinte forma, para t fixo e arbitrário,

$$\bar{h}(z, t) = \sum_{i=1}^N \alpha_i(t) \phi_i(z) , \quad (4.21)$$

Figura 6 – Representação das funções base localmente para o i -ésimo elemento e e globalmente



Fonte: Autor

sendo $\alpha_i(t)$ incógnitas e N o número de nós em (a, b) . Pela construção das funções ϕ_i , vale que $\bar{h}(z_i, t) = \alpha_i(t) = h_i$, que são as incógnitas do problema numérico. O gráfico de $\bar{h}(\cdot, t)$ será uma poligonal.

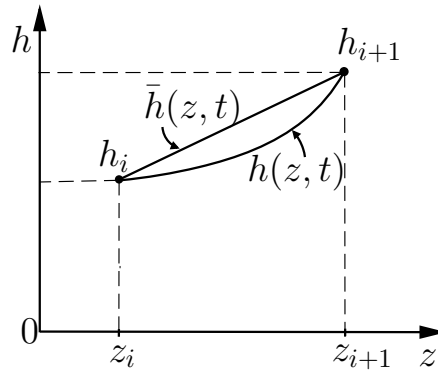
De fato, considerando o elemento $[z_i, z_{i+1}]$, a expressão de $\bar{h}(\cdot, t)$ restrita a este elemento é

$$\bar{h}(z, t) = \frac{z_{i+1} - z}{\Delta z} \bar{h}(z_i, t) + \frac{z - z_i}{\Delta z} \bar{h}(z_{i+1}, t) , \quad (4.22)$$

cujo gráfico, como função de z , é o segmento de reta que une o ponto $(z_i, \bar{h}(z_i, t))$ ao ponto $(z_{i+1}, \bar{h}(z_{i+1}, t))$. Ver a figura 7.

No que segue utiliza-se a notação:

Figura 7 – Típico gráfico da aproximação linear de uma função de z para um t fixo



Fonte: Autor

$$\varphi_1(z) = \frac{z_{i+1} - z}{\Delta z}, \varphi_2(z) = \frac{z - z_i}{\Delta z}, h_i = \bar{h}(z_i, t) \text{ e } h_{i+1} = \bar{h}(z_{i+1}, t) .$$

Assim, nesta notação, reescreve-se a equação 4.22 no elemento $[z_i, z_{i+1}]$ e t fixo como

$$\bar{h}(z) = \varphi_1(z)h_i + \varphi_2(z)h_{i+1} . \quad (4.23)$$

Portanto, uma vez estabelecida uma base para $\hat{\mathcal{V}}$, a formulação variacional do problema 4.18 pode ser escrita, para as funções ϕ_i , substituindo w por ϕ_i e fazendo $h^n = \bar{h}(n\Delta t, z) = \sum_{j=1}^N \alpha_j(n\Delta t)\phi_j(z)$, isto é

$$\begin{aligned} \int_a^b C^{n-1} \phi_i \left(\sum_{j=1}^N h_j^n \phi_j(z) - \sum_{j=1}^N h_j^{n-1} \phi_j(z) \right) dz = \\ - \tau \int_a^b K^{n-1} \phi_i' \left[\sum_{j=1}^N h_j^n \phi_j(z) \right]' dz + \tau \int_a^b \phi_i K'^{n-1} dz , \end{aligned} \quad (4.24)$$

o que leva a

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^N \int_a^b C^{n-1} h_j^n \phi_i \phi_j dz - \sum_{j=1}^N \int_a^b C^{n-1} h_j^{n-1} \phi_i \phi_j dz = \\ - \tau \sum_{j=1}^N \int_a^b K^{n-1} h_j^n \phi_i' \phi_j' dz + \tau \int_a^b \phi_j K'^{n-1} dz , \end{aligned} \quad (4.25)$$

ou ainda,

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^N h_j^n \int_a^b C^{n-1} \phi_i \phi_j dz + \tau \sum_{j=1}^N h_j^n \int_a^b K^{n-1} \phi_i' \phi_j' dz = \\ \sum_{j=1}^N h_j^{n-1} \int_a^b C^{n-1} \phi_i \phi_j dz + \tau \int_a^b \phi_j K'^{n-1} dz . \end{aligned} \quad (4.26)$$

Globalmente, as equações 4.26 podem ser organizadas em matrizes, sendo $\bar{\mathbf{M}}$, $\bar{\mathbf{A}} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ e o vetor $\bar{\mathbf{S}} \in \mathbb{R}^{N \times 1}$ com as seguintes entradas

$$\bar{m}_{ij} = \int_a^b C^{n-1} \phi_i(z) \phi_j(z) dz , \quad (4.27)$$

$$\bar{a}_{ij} = \int_a^b K^{n-1} \frac{d\phi_i}{dz} \frac{d\phi_j}{dz} dz , \quad (4.28)$$

$$\bar{s}_{ij} = \int_a^b \phi_i(z) \frac{\partial K^{n-1}}{\partial z} dz , \quad (4.29)$$

logo, obtém-se na forma matricial o sistema de equações

$$(\bar{\mathbf{M}} + \tau \bar{\mathbf{A}}) \mathbf{h}^n = \bar{\mathbf{M}} \mathbf{h}^{n-1} + \tau \bar{\mathbf{S}} , \quad (4.30)$$

pelo qual $\mathbf{h}^n$ é um vetor desconhecido, isto é, a incógnita do problema. Para tornar o entendimento mais compreensível, irá se denotar por $\mathbf{R}$ a matriz $(\bar{\mathbf{M}} + \tau \bar{\mathbf{A}})$ e por $\mathbf{B}$ o vetor $(\bar{\mathbf{M}} \mathbf{h}^{n-1} + \tau \bar{\mathbf{S}})$, de modo que

$$\mathbf{R} \mathbf{h}^n = \mathbf{B} . \quad (4.31)$$

Os cálculos das integrais em 4.27 são organizados em cada elemento, levando em consideração que no i -ésimo elemento $e = [z_i, z_{i+1}]$ apenas as funções ϕ_i e ϕ_{i+1} são não nulas. Assim, fixada a equação i tem-se

$$\begin{aligned} h_i^n \int_{z_i}^{z_{i+1}} C^{m-1} \phi_i \phi_i dz + h_{i+1}^n \int_{z_i}^{z_{i+1}} C^{m-1} \phi_i \phi_{i+1} dz + \\ \tau h_i^n \int_{z_i}^{z_{i+1}} K^{n-1} \phi_i' \phi_i' dz + \tau h_{i+1}^n \int_{z_i}^{z_{i+1}} K^{n-1} \phi_i' \phi_{i+1}' dz = \\ h_i^{n-1} \int_{z_i}^{z_{i+1}} C^{m-1} \phi_i \phi_i dz + h_{i+1}^{n-1} \int_{z_i}^{z_{i+1}} C^{m-1} \phi_i \phi_{i+1} dz + \\ \tau \int_{z_i}^{z_{i+1}} \phi_i K'^{n-1} dz . \end{aligned} \quad (4.32)$$

da mesma forma fixada a equação $i + 1$ tem-se

$$\begin{aligned} h_i^n \int_{z_i}^{z_{i+1}} C^{m-1} \phi_i \phi_{i+1} dz + h_{i+1}^n \int_{z_i}^{z_{i+1}} C^{m-1} \phi_{i+1} \phi_{i+1} dz + \\ \tau h_i^n \int_{z_i}^{z_{i+1}} K^{n-1} \phi_i' \phi_{i+1}' dz + \tau h_{i+1}^n \int_{z_i}^{z_{i+1}} K^{n-1} \phi_{i+1}' \phi_{i+1}' dz = \\ h_{i+1}^{n-1} \int_{z_i}^{z_{i+1}} C^{m-1} \phi_i \phi_{i+1} dz + h_{i+1}^{n-1} \int_{z_i}^{z_{i+1}} C^{m-1} \phi_{i+1} \phi_{i+1} dz + \\ \tau \int_{z_i}^{z_{i+1}} \phi_{i+1} K'^{n-1} dz . \end{aligned} \quad (4.33)$$

Como no i -ésimo elemento a participação de ϕ_i é dada apenas por φ_1 e a participação de ϕ_{i+1} é dada apenas por φ_2 , as equações 4.32 e 4.33, organizadas matricialmente, tornam-se

$$\begin{aligned} \left[\int_{z_i}^{z_{i+1}} C^{m-1} \varphi_1 \varphi_1 dz \quad \int_{z_i}^{z_{i+1}} C^{m-1} \varphi_1 \varphi_2 dz \right] \begin{bmatrix} h_i^n \\ h_{i+1}^n \end{bmatrix} + \\ \tau \left[\int_{z_i}^{z_{i+1}} K^{n-1} \varphi_1' \varphi_1' dz \quad \int_{z_i}^{z_{i+1}} K^{n-1} \varphi_1' \varphi_2' dz \right] \begin{bmatrix} h_i^n \\ h_{i+1}^n \end{bmatrix} = \\ \left[\int_{z_i}^{z_{i+1}} C^{m-1} \varphi_1 \varphi_1 dz \quad \int_{z_i}^{z_{i+1}} C^{m-1} \varphi_1 \varphi_2 dz \right] \begin{bmatrix} h_i^{n-1} \\ h_{i+1}^{n-1} \end{bmatrix} + \tau \int_{z_i}^{z_{i+1}} \varphi_1 K'^{n-1} dz , \end{aligned} \quad (4.34)$$

$$\begin{aligned} \left[\int_{z_i}^{z_{i+1}} C^{m-1} \varphi_2 \varphi_1 dz \quad \int_{z_i}^{z_{i+1}} C^{m-1} \varphi_2 \varphi_2 dz \right] \begin{bmatrix} h_i^n \\ h_{i+1}^n \end{bmatrix} + \\ \tau \left[\int_{z_i}^{z_{i+1}} K^{n-1} \varphi_2' \varphi_1' dz \quad \int_{z_i}^{z_{i+1}} K^{n-1} \varphi_2' \varphi_2' dz \right] \begin{bmatrix} h_i^n \\ h_{i+1}^n \end{bmatrix} = \\ \left[\int_{z_i}^{z_{i+1}} C^{m-1} \varphi_2 \varphi_1 dz \quad \int_{z_i}^{z_{i+1}} C^{m-1} \varphi_2 \varphi_2 dz \right] \begin{bmatrix} h_i^{n-1} \\ h_{i+1}^{n-1} \end{bmatrix} + \tau \int_{z_i}^{z_{i+1}} \varphi_2 K'^{n-1} dz , \end{aligned} \quad (4.35)$$

ou ao reescrever as equações 4.34 e 4.35 de modo mais compacto,

$$\begin{aligned} \int_{z_i}^{z_{i+1}} C^{m-1} \begin{bmatrix} \varphi_1(z) \\ \varphi_2(z) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi_1(z) & \varphi_2(z) \end{bmatrix} dz \begin{bmatrix} h_i^n \\ h_{i+1}^n \end{bmatrix} + \\ \tau \int_{z_i}^{z_{i+1}} K^{n-1} \begin{bmatrix} \varphi_1'(z) \\ \varphi_2'(z) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi_1'(z) & \varphi_2'(z) \end{bmatrix} dz \begin{bmatrix} h_i^n \\ h_{i+1}^n \end{bmatrix} = \\ \int_{z_i}^{z_{i+1}} C^{m-1} \begin{bmatrix} \varphi_1(z) \\ \varphi_2(z) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi_1(z) & \varphi_2(z) \end{bmatrix} dz \begin{bmatrix} h_i^{n-1} \\ h_{i+1}^{n-1} \end{bmatrix} + \tau \int_{z_i}^{z_{i+1}} \begin{bmatrix} \varphi_1(z) \\ \varphi_2(z) \end{bmatrix} \frac{\partial K^{n-1}}{\partial z} dz . \end{aligned} \quad (4.36)$$

Neste momento, como os valores tomados para C e K são tidos no passo de tempo anterior, isto é, no tempo $t_{n-1} = (n-1)\Delta t$, então para cada ponto z_i no tempo $t_n = n\Delta t$ haverá um valor numérico para as funções C e K . Assim em cada elemento assume-se que $C = C_{i+1/2}$ e $K = K_{i+1/2}$, onde $C_{i+1/2}$ e $K_{i+1/2}$ são obtidos através da média aritmética de ambos, calculada em cada nó do i -ésimo elemento. Ao considerar C e K dessa maneira tais parâmetros se tornam constantes em cada elemento e portanto as integrais são tomadas apenas para as funções no índice de tempo $t_n = n\Delta t$.

Para o i -ésimo elemento e , resolvem-se as integrais das entradas das matrizes locais $\bar{\mathbf{M}}^e$ e $\bar{\mathbf{A}}^e$, lembrando que $\varphi'_1 = -1/\Delta z$ e $\varphi'_2 = 1/\Delta z$, chega-se a:

$$\begin{aligned}\bar{m}_{11}^e &= \frac{\Delta z}{3} C_{i+1/2}^{n-1}, \\ \bar{m}_{12}^e &= \frac{\Delta z}{6} C_{i+1/2}^{n-1} = \bar{m}_{21}^e, \\ \bar{m}_{22}^e &= \frac{\Delta z}{3} C_{i+1/2}^{n-1},\end{aligned}$$

logo,

$$\bar{\mathbf{M}}^e = \frac{\Delta z}{6} C_{i+1/2}^{n-1} \underbrace{\begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}}_{\mathbf{M}^e} = \frac{\Delta z}{6} C_{i+1/2}^{n-1} \mathbf{M}^e. \quad (4.37)$$

Para a matriz $\bar{\mathbf{A}}^e$

$$\begin{aligned}\bar{a}_{11}^e &= \frac{K_{i+1/2}^{n-1}}{\Delta z}, \\ \bar{a}_{12}^e &= -\frac{K_{i+1/2}^{n-1}}{\Delta z} = \bar{a}_{21}^e, \\ \bar{a}_{22}^e &= \frac{K_{i+1/2}^{n-1}}{\Delta z},\end{aligned}$$

logo,

$$\bar{\mathbf{A}}^e = \frac{K_{i+1/2}^{n-1}}{\Delta z} \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}}_{\mathbf{A}^e} = \frac{K_{i+1/2}^{n-1}}{\Delta z} \mathbf{A}^e. \quad (4.38)$$

Discretizando $\bar{\mathbf{S}}^e$ a fim de não haver qualquer termo não linear no problema, toma-se a forma de diferença centrada para aproximar $\partial K^{n-1}/\partial z$

$$\frac{\partial K^{n-1}}{\partial z} \approx \frac{K_{i+1}^{n-1} - K_i^{n-1}}{2\Delta z}, \quad (4.39)$$

chamando $\kappa = K_{i+1}^{n-1} - K_i^{n-1}$, isto leva a:

$$\bar{\mathbf{S}}^e = \frac{1}{2\Delta z} \int_{z_i}^{z_{i+1}} \begin{bmatrix} \varphi_1(z) \\ \varphi_2(z) \end{bmatrix} \kappa dz, \quad (4.40)$$

e resolvendo as integrais em 4.40 obtém-se

$$\bar{\mathbf{S}}^e = \frac{\kappa}{4} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (4.41)$$

Apesar de conhecida a forma da Matriz global $\mathbf{R}$ e do vetor global $\mathbf{B}$ (equações 4.30 e 4.31), computacionalmente a montagem desse sistema global não é direta. Portanto, de maneira global é preciso alocar cada matriz elemento $\mathbf{R}^e$ em uma matriz maior $\mathbf{R}$ assim como para o vetor elemento $\mathbf{B}^e$ em um vetor maior $\mathbf{B}$. Isso é feito pelo algoritmo *Assembly*, descrito a seguir.

As informações a respeito da localização de $\mathbf{R}^e$ e $\mathbf{B}^e$ no sistema global são armazenadas em um vetor, aqui chamado de **index** com dimensão do número total de elementos pelo números de nós do elemento, neste caso $2 \times N$ (HUGHES, 2000) (KWON; BANG, 2000), como em 4.42.

$$\text{index}(a, e) = \begin{cases} e, & a=1; \\ e + 1, & a=2. \end{cases} \quad (4.42)$$

onde a é o número de nós do elemento (graus de liberdade). O algoritmo de *Assembly* adaptado de (CECKA; LEW; DARVE, 2011) para o problema apresentado, segue os seguintes passos :

Algoritmo 1: Algoritmo simplificado para *Assembly* das Matrizes e vetores elemento

Entrada: Dados do solo; condições iniciais e de fronteira

início

 Inicializar $\mathbf{R} = 0$ e $\mathbf{B} = 0$;

para e de 1 até N **faça**

 Calcule $\mathbf{R}^e$ e $\mathbf{B}^e$;

para grau de liberdade $a = a1$ de e **faça**

$\mathbf{B}(\text{index}(e; a1)) = \mathbf{B}(\text{index}(e; a1)) + \mathbf{B}^e(a1)$;

para grau de liberdade $a = a2$ de e **faça**

$\mathbf{R}(\text{index}(e; a1); \text{index}(e; a2)) = \mathbf{R}(\text{index}(e; a1); \text{index}(e; a2))$
 $+ \mathbf{R}^e(a1; a2)$

fim

fim

fim

fim

4.4 Formulação do Problema por Diferenças Finitas

Segundo (CELIA; BOULOUTAS; ZARBA, 1990), a formulação numérica da equação de Richards em sua forma h leva a resultados ruins caracterizados por grandes erros no balanço de massa. Uma expressão para o cálculo do balanço de massa será visto mais adiante neste texto. Entretanto, soluções numéricas baseadas na forma mista da equação de Richards apresentam perfeita conservação de massa, o que fornece significante melhorias no desempenho das soluções numéricas aliados a pouco esforço computacional.

O modelo estudado e implementado através do método das diferenças finitas apresentado neste texto é dado em 4.43 baseado na equação de Richards em sua forma mista e

sujeitas as condições iniciais e de fronteira de Dirichlet

$$\begin{aligned}\frac{\partial \theta}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial z} \left[K(h) \left(\frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right) \right]; \\ h(z, 0) &= h_o(z); \\ h(a, t) &= h_a; \\ h(b, t) &= h_b(t) .\end{aligned}\tag{4.43}$$

Esta seção apresenta o desenvolvimento matemático do método de diferenças finitas para o problema 4.43, baseados na abordagem de Celia *et al.*, citada em (SIMUNEK; GENUCHTEN; SEJNA, 2006), (SIMUNEK; GENUCHTEN; SEJNA, 2008), (SHAHRAIYNI; ASHTIANI, 2009), (WANKO; TAPIA; MOSÉ, 2015) e (ZHA et al., 2017).

A partir da discretização e em função da não linearidade da equação de Richards, obtém-se um sistema de equações algébricas não linear. O método de Newton clássico não foi utilizado devido a delicada etapa da construção da matriz Jacobiana (CUNHA, 2000). Na formulação numérica para encontrar a solução aproximada deste sistema não linear foi utilizado o método iterativo de Picard modificado². Já na discretização temporal, o método de Euler implícito é utilizado. Todas essas metodologias serão detalhadas nessa seção.

4.4.1 Discretização temporal

A discretização da equação de Richards dada nesta seção segue a mesma abordagem no tratamento da derivada temporal que foi tomado no método de Elementos finitos, isto é, através do método de Euler implícito. Entretanto, para o método das diferenças finitas, a derivada temporal a ser tomada será para a variável θ e não h como naquela subseção.

Aqui, o índice de tempo será representado por j . Daí toma-se a seguinte aproximação para a derivada de θ com relação ao tempo t ,

$$\frac{\partial \theta}{\partial t}(z, t) \approx \frac{\theta^{j+1} - \theta^j}{\tau} ,\tag{4.44}$$

A partir da discretização implícita do tempo, a equação 4.43 se torna

$$\frac{\theta^{j+1} - \theta^j}{\tau} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K^{j+1} \left(\frac{\partial h^{j+1}}{\partial z} + 1 \right) \right] .\tag{4.45}$$

sendo $K^{j+1} = K(h^{j+1})$.

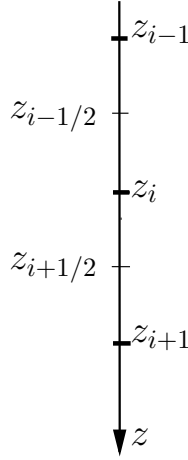
4.4.2 Discretização Espacial

Nos primeiros passos da discretização espacial serão omitidos os índices superiores para não carregar a notação. A discretização espacial é iniciada a partir da equação 4.45 pelo seu lado direito com auxílio de um ponto intermediário, em cada intervalo subsequente $Z_i = [z_i, z_{i-1}]$ da partição do domínio. O primeiro, $z_{i-1/2}$, ponto médio entre os pontos z_{i-1} e z_i , o segundo, $z_{i+1/2}$, o ponto médio entre os pontos z_i e z_{i+1} . Como na figura 8.

Sabendo que $q = K(h) (\partial h / \partial z + 1)$, obtém-se $\partial q / \partial z$ por *diferenças centradas* em

² Designação do método atribuída em (ZARBA, 1988).

Figura 8 – Esquema dos pontos intermediários em cada subintervalo da partição



Fonte: Autor

z_i , fazendo uso de $z_{i-1/2}$ e $z_{i+1/2}$. Logo, chega-se à seguinte aproximação de segunda ordem

$$\left. \frac{\partial q}{\partial z} \right|_i = \frac{q_{i+1/2} - q_{i-1/2}}{2(\Delta z/2)} + O(\Delta z^2), \quad (4.46)$$

onde $q_{i+1/2} = q(h(z_{i+1/2}, t))$ e $q_{i-1/2} = q(h(z_{i-1/2}, t))$.

Truncando o erro $O(\Delta z^2)$, é possível reescrever 4.46 como

$$\left. \frac{\partial q}{\partial z} \right|_i \approx \frac{K(h) \left(\frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right) \Big|_{i+1/2} - K(h) \left(\frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right) \Big|_{i-1/2}}{\Delta z}. \quad (4.47)$$

Por fim, discretizando $K(h) (\partial h / \partial z + 1)$ em cada ponto intermediário da partição, (FORTUNA, 2000), obtêm-se

$$K(h) \left(\frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right) \Big|_{i-1/2} \approx K_{i-1/2} \frac{h_i - h_{i-1}}{2(\Delta z/2)} + K_{i-1/2}, \quad (4.48)$$

$$K(h) \left(\frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right) \Big|_{i+1/2} \approx K_{i+1/2} \frac{h_{i+1} - h_i}{2(\Delta z/2)} + K_{i+1/2}. \quad (4.49)$$

Para contornar a aparição do índice $i \pm 1/2$ causada pelo operador diferenças finitas para derivada segunda em K é possível aproximar $K_{i-1/2}$ e $K_{i+1/2}$ pelas médias aritméticas da seguinte forma, com erro $O(\Delta z^2)$

$$K_{i+1/2} = \frac{K(h_i) + K(h_{i+1})}{2} \quad (4.50)$$

$$K_{i-1/2} = \frac{K(h_{i-1}) + K(h_i)}{2} \quad (4.51)$$

que, segundo (ZARBA, 1988), fornece melhores resultados.

Substituindo as equações 4.48 e 4.49 em 4.47 obtém-se a aproximação para o

problema 4.45.

$$\left. \frac{\partial}{\partial z} \left[K(h) \left(\frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right) \right] \right|_i \approx \frac{K_{i+1/2} (h_{i+1} - h_i) - K_{i-1/2} (h_i - h_{i-1})}{(\Delta z)^2} + \frac{(K_{i+1/2} - K_{i-1/2})}{\Delta z}. \quad (4.52)$$

4.4.3 Aplicando o Método iterativo de Picard Modificado

O método de Picard envolve estimativas sucessivas da incógnita h^{j+1} utilizando da última estimativa de C^{j+1} e K^{j+1} (CELIA; BOULOUTAS; ZARBA, 1990), para $C^{j+1} = C(h^{j+1})$ e $K^{j+1} = K(h^{j+1})$. Desta maneira a equação se torna linearizada. Será tomado como passo inicial o mesmo vetor da condição inicial, isto é, $\theta^{j,o} = \theta^j$ (ZHA et al., 2017).

Na abordagem apresentada, desenvolve-se uma sucessão de iterações a cada nível de tempo. Portanto, o índice j do tempo se mantém na notação, e será incluído m indicando o índice das iterações sucessivas, onde $h^{j,m}$ significa a iteração m no nível de tempo j .

De fato, C e K tornam-se conhecidos em $m = 0$, a partir de um passe inicial, $h^{j,o}$, para a solução (LANGTANGEN, 1999). Daí obtém-se em sequência $h^{j,1}$, para um j fixo, do qual alimenta-se outra vez C e K , de modo a obter uma nova equação linearizada, e portanto, nova aproximação para h^j . Repete-se esse processo sucessivamente, até um critério de parada. Em que se incrementa j e o processo se reinicia em $m = 0$.

Um critério de parada pode ser tomado quando a diferença δ^m na solução da iteração m para a iteração $m + 1$ for menor que uma tolerância ϵ .

$$\|h^{m+1} - h^m\| = \delta^m \leq \epsilon,$$

ou quando o máximo do resíduo da formulação de Picard for suficientemente pequeno (LANGTANGEN, 1999), como será visto ao final da formulação.

Quando $\delta^m \leq \epsilon$, o critério de parada é satisfeito, daí atualiza-se o valor de h^{j+1} fazendo $h^{j+1} = h^{j,m}$. Para contornar os casos em que a convergência não é garantida um número máximo, ite_{max} , de iterações é tomado como segundo critério de parada (LANGTANGEN, 1999).

O fluxograma da figura 9 mostra de maneira simplificada como o método iterativo de Picard se aplica no problema apresentado.

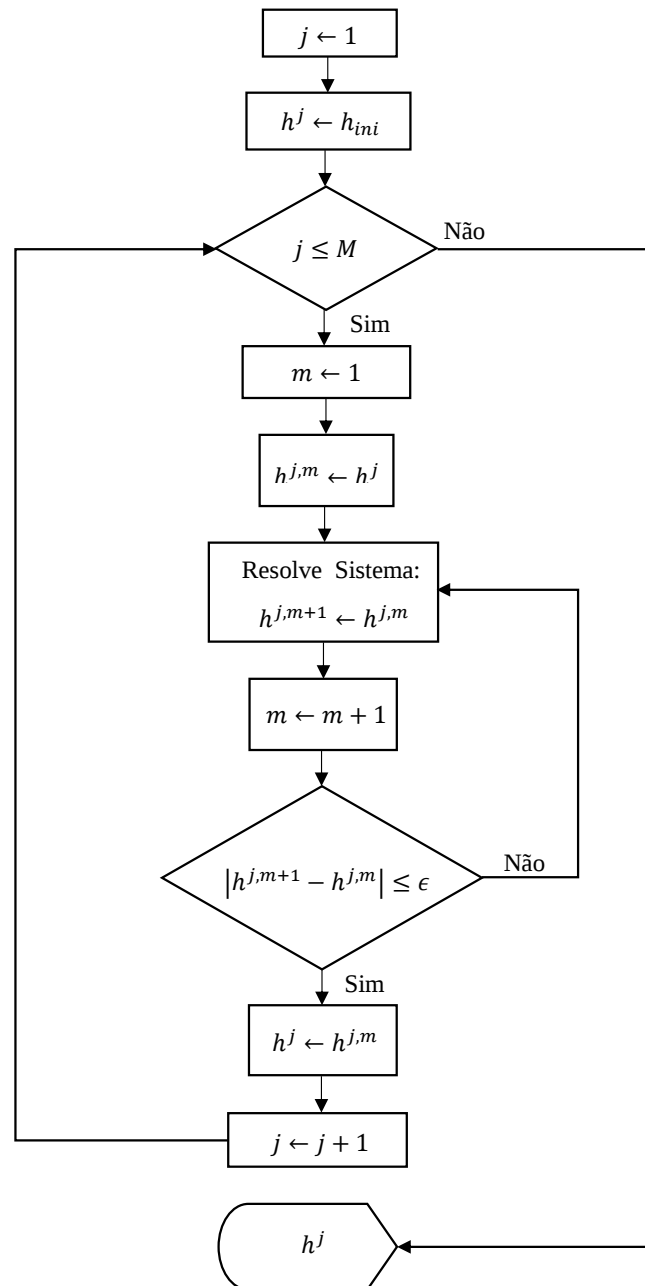
Trazendo novamente os índices superiores para a notação e adicionando o índice m das iterações de Picard, pode-se reescrever a equação 4.45 a partir da equação 4.52 como abaixo:

$$\frac{\theta^{j+1,m+1} - \theta^j}{\tau} = \frac{\left[K_{i+1/2}^{j+1,m} (h_{i+1}^{j+1,m+1} - h_i^{j+1,m+1}) - K_{i-1/2}^{j+1,m} (h_i^{j+1,m+1} - h_{i-1}^{j+1,m+1}) \right]}{(\Delta z)^2} + \frac{(K_{i+1/2}^{j+1,m} - K_{i-1/2}^{j+1,m})}{\Delta z}. \quad (4.53)$$

Agora note que, de acordo com (CELIA; BOULOUTAS; ZARBA, 1990), ao expandir $\theta_i^{j+1,m+1}$ em série de Taylor com respeito a h em torno do ponto $h_i^{j+1,m}$ obtém-se

$$\theta^{j+1,m+1} = \theta^{j+1,m} + \left. \frac{\partial \theta}{\partial h} \right|^{j+1,m} (h^{j+1,m+1} - h^{j+1,m}) + O(\delta^2). \quad (4.54)$$

Figura 9 – Fluxograma simplificado do método iterativo de Picard



Fonte: Autor

Como $C(h) = \partial\theta/\partial h$, substituindo 4.54 em 4.54, ignorando o termo $O(\delta^2)$, obtém-se

a expressão para o problema 4.43

$$\begin{aligned} \frac{C^{j+1,m}}{\tau} (h^{j+1,m+1} - h^{j+1,m}) + \frac{\theta^{j+1,m} - \theta^j}{\tau} = \\ \frac{\left[K_{i+1/2}^{j+1,m} (h_{i+1}^{j+1,m+1} - h_i^{j+1,m+1}) - K_{i-1/2}^{j+1,m} (h_i^{j+1,m+1} - h_{i-1}^{j+1,m+1}) \right]}{(\Delta z)^2} \\ + \frac{(K_{i+1/2}^{j+1,m} - K_{i-1/2}^{j+1,m})}{\Delta z} . \end{aligned} \quad (4.55)$$

4.4.4 Formulação final

Pode-se somar a equação 4.55 à seguinte expressão abaixo que não irá modificar a equação em seu resultado

$$\begin{aligned} \frac{\left[K_{i+1/2}^{j+1,m} (h_{i+1}^{j+1,m} - h_i^{j+1,m}) - K_{i-1/2}^{j+1,m} (h_i^{j+1,m} - h_{i-1}^{j+1,m}) \right]}{(\Delta z)^2} \\ - \frac{\left[K_{i+1/2}^{j+1,m} (h_{i+1}^{j+1,m} - h_i^{j+1,m}) - K_{i-1/2}^{j+1,m} (h_i^{j+1,m} - h_{i-1}^{j+1,m}) \right]}{(\Delta z)^2} = 0 . \end{aligned} \quad (4.56)$$

Portanto, a equação 4.55 se torna

$$\begin{aligned} \frac{C^{j+1,m}}{\tau} (h^{j+1,m+1} - h^{j+1,m}) + \frac{\theta^{j+1,m} - \theta^j}{\tau} \\ - \frac{\left[K_{i+1/2}^{j+1,m} (h_{i+1}^{j+1,m+1} - h_i^{j+1,m+1}) - K_{i-1/2}^{j+1,m} (h_i^{j+1,m+1} - h_{i-1}^{j+1,m+1}) \right]}{(\Delta z)^2} \\ + \frac{\left[K_{i+1/2}^{j+1,m} (h_{i+1}^{j+1,m} - h_i^{j+1,m}) - K_{i-1/2}^{j+1,m} (h_i^{j+1,m} - h_{i-1}^{j+1,m}) \right]}{(\Delta z)^2} \\ = \frac{(K_{i+1/2}^{j+1,m} - K_{i-1/2}^{j+1,m})}{\Delta z} \\ + \frac{\left[K_{i+1/2}^{j+1,m} (h_{i+1}^{j+1,m} - h_i^{j+1,m}) - K_{i-1/2}^{j+1,m} (h_i^{j+1,m} - h_{i-1}^{j+1,m}) \right]}{(\Delta z)^2} . \end{aligned} \quad (4.57)$$

Fazendo $\delta_n^m = h_n^{j+1,m+1} - h_n^{j+1,m}$ para $n = i - 1, i$ ou $i + 1$, obtém-se a equação de Richards discretizada em sua forma h como segue,

$$\frac{C^{j+1,m}}{\tau} \delta_i^m - \frac{\left[K_{i-1/2}^{j+1,m} \delta_{i-1}^m - (K_{i-1/2}^{j+1,m} + K_{i+1/2}^{j+1,m}) \delta_i^m - K_{i+1/2}^{j+1,m} \delta_{i+1}^m \right]}{(\Delta z)^2} = R_i^{j+1,m} , \quad (4.58)$$

sendo

$$\begin{aligned} R_i^{j+1,m} = \frac{\left[K_{i+1/2}^{j+1,m} (h_{i+1}^{j+1,m} - h_i^{j+1,m}) - K_{i-1/2}^{j+1,m} (h_i^{j+1,m} - h_{i-1}^{j+1,m}) \right]}{(\Delta z)^2} \\ + \frac{(K_{i+1/2}^{j+1,m} - K_{i-1/2}^{j+1,m})}{\Delta z} - \frac{\theta^{j+1,m} - \theta^j}{\tau} . \end{aligned} \quad (4.59)$$

Pode-se sintetizar a formulação 4.58 fazendo:

$$\begin{aligned} p_i &= -\frac{1}{(\Delta z)^2} \left[K_{i-1/2}^{j+1,m} \right], \\ q_i &= \frac{C^{j+1,m}}{\tau} + \frac{1}{(\Delta z)^2} \left[K_{i-1/2}^{j+1,m} + K_{i+1/2}^{j+1,m} \right], \\ r_i &= -\frac{1}{(\Delta z)^2} \left[K_{i+1/2}^{j+1,m} \right], \end{aligned}$$

e assim escrever um sistema linear com as seguintes equações para cada índice $i = 1, \dots, N$ e $j = 1, \dots, N$

$$p_i \delta_{i-1}^m + q_i \delta_i^m + r_i \delta_{i+1}^m = R_i^{j+1,m}. \quad (4.60)$$

O que forma uma sistema tridiagonal $\mathbf{A}(h^{j+1,m})\mathbf{d}^m = \mathbf{R}^{j+1,m}$ do seguinte modo

$$\underbrace{\begin{bmatrix} q_1 & r_1 & 0 & \cdots & 0 \\ p_2 & q_2 & r_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & p_{N-1} & q_{N-1} & r_{N-1} \\ 0 & \cdots & 0 & p_N & q_N \end{bmatrix}}_{\mathbf{A}_{N \times N}} \underbrace{\begin{bmatrix} \delta_1^m \\ \delta_2^m \\ \vdots \\ \delta_{N-1}^m \\ \delta_N^m \end{bmatrix}}_{\mathbf{d}_{N \times 1}^m} = \underbrace{\begin{bmatrix} R_1^{j+1,m} \\ R_2^{j+1,m} \\ \vdots \\ R_{N-1}^{j+1,m} \\ R_N^{j+1,m} \end{bmatrix}}_{\mathbf{R}_{N \times 1}^{j+1,m}}, \quad (4.61)$$

onde $\mathbf{d}^m$ é um vetor coluna com entradas δ_i^m e $\mathbf{R}^{j+1,m}$ é, também, um vetor coluna com entradas $R_i^{j+1,m}$.

4.5 Um Critério de Avaliação do Desempenho do Método Numérico

Existem diversos meios de avaliar o desempenho de um método numérico e computacional. Desses, os quatros principais são: o erro quadrático médio, o tempo de execução, número de iterações e por fim a capacidade de conservação de massa (SHAHRAIYNI; ASHTIANI, 2009).

Neste trabalho foi implementada uma função para a medição da conservação de massa. A conservação de massa total só é uma condição necessária mas não suficiente para a aceitabilidade de um simulador numérico (CELIA; BOULOUTAS; ZARBA, 1990). Para quantificar a habilidade de um simulador em conservar a massa do sistema Celia *et al.* sugerem a seguinte definição para o balanço de massa **MB** onde a massa adicionada é medida com respeito a massa inicial do sistema. Para o método de diferenças finitas

$$\mathbf{MB}_{DF}(t^{j+1}) = \frac{\sum_{i=1}^{E-1} (\theta_i^{j+1} - \theta_i^o) \Delta z}{\sum_{j=1}^{n+1} \left\{ K_{N-1/2}^j \left[\frac{h_N^j - h_{N-1}^j}{\Delta z} + 1 \right] - K_{1/2}^j \left[\frac{h_1^j - h_o^j}{\Delta z} + 1 \right] \right\} \Delta t}, \quad (4.62)$$

onde têm-se $N = E + 1$ nós $\{z_o, z_1, \dots, z_E\}$.

Celia *et al.* também sugerem uma formulação do balanço de massa para o método de elementos finitos

$$\mathbf{MB}_{EF}(t^{n+1}) = \frac{\sum_{i=1}^{E-1} (\theta_i^{n+1} - \theta_i^o) \Delta z + (\theta_o^{n+1} - \theta_o^o) \frac{\Delta z}{2} + (\theta_E^{n+1} - \theta_E^o) \frac{\Delta z}{2}}{\sum_{j=1}^{n+1} q_o^j - q_N^j \Delta t}, \quad (4.63)$$

onde q_o e q_N são os fluxos nas fronteiras calculados das equações de elementos finitos associados com os nós z_o e z_N .

5 MATERIAIS E MÉTODO

Será descrito neste capítulo, mais detalhes da implementação computacional baseada no método de elementos finitos como o método numérico de resolução de equações diferenciais abordados neste trabalho e a motivação de se adotar o segundo método numérico abordado neste texto, o método de diferenças finitas. Para o experimento de campo será utilizado apenas o segundo método na realização das simulações.

De fato, a fim de avaliar o modelo computacional implementado para quantificar a umidade no sentido vertical após infiltração em um perfil de solo completo, foi preparado um experimento de campo.

Em face disso, este capítulo será dividido em duas seções principais. Na primeira será descrita a metodologia da implementação computacional e sua verificação para três diferentes solos. Esses solos são assumidos homogêneos ao longo de todo o perfil.

Na segunda seção será descrita a metodologia empregada no experimento de campo realizado para este trabalho e a aplicação do modelo computacional para os dados obtidos experimentalmente. A grande diferença entre a verificação do código implementado e a aplicação aqui proposta se encontra na suposição da homogeneidade dos perfis de solo, no caso da verificação, e da não homogeneidade dos perfis no caso experimental.

Os códigos foram implementados em ambiente MATLAB®, de modo que os sistemas algébricos foram resolvidos através do comando “barra invertida” ($\backslash$). Este comando, em função da matriz de entrada, direciona o problema ao *solver* mais apropriado contido em seu algoritmo. Detalhes sobre este comando podem ser encontrados nas documentações do MATLAB ou em <https://www.mathworks.com/help/matlab/ref/mldivide.html>. Todas as simulações foram realizadas em um computador pessoal do tipo laptop, com 8 GB de memória RAM, processador intel core i5 e sistema operacional windows 10.

5.1 Experimento Computacional

A partir dos modelos numéricos descritos neste trabalho, um código de computador foi implementado tanto para o modelo numérico baseado no método de elementos finitos quanto para o método das diferenças finitas.

Para ambos os métodos, a tolerância ϵ utilizada como critério de parada foi $\epsilon = 0.01$.

5.1.1 Implementação e Verificação

Para verificação computacional foram realizadas simulações para três tipos de solos diferentes, aqui denominados solo 1, solo 2 e solo 3. Desses, os dados de entrada dos solos 1 e 2 foram obtidos de (CELIA; BOULOUTAS; ZARBA, 1990) e (ZARBA, 1988) onde o primeiro solo é areia, do qual os dados ali contidos foram medidos experimentalmente em laboratório. Para o segundo solo não foi obtida informação sobre classificação ou seu tipo textural nos textos de referência, apenas que é um solo de campo do Novo México (ZARBA, 1988). Para o terceiro solo da verificação, os dados foram obtidos de (WENDLAND; PIZARRO et al., 2010) e (MIRANDA et al., 2005) também originados experimentalmente em laboratório. Solo classificado como Latossolo-vermelho.

Ao final, fez-se uma comparação com os resultados de saída obtidos nas simulações

realizados para este trabalho e aqueles contidos nessas respectivas publicações. Todos os três solos são assumidos homogêneos ao longo de todo o perfil e inicialmente secos, de acordo com cada artigo citado acima.

5.1.2 Implementação baseada nas Diferenças Finitas

Para simulações no solo 1 foram utilizados os modelos de van Genuchten para expressar $\theta(h)$ e van Genuchten-Mualem para expressar $K(h)$, em que as constantes para esses modelos tomam os valores da tabela 1.

As condições iniciais e de fronteira são dadas em 5.1

Tabela 1 – Dados do solo 1

α	n	θ_r	θ_s	$K_{sat} \text{ [cm}\cdot\text{s}^{-1}]$
0.0335	2	0.102	0.368	0.00922

$$\begin{aligned} h(z, 0) &= -1000 \text{ cm;} \\ h(0, t) &= -75 \text{ cm;} \\ h(100, t) &= -1000 \text{ cm;} \end{aligned} \quad (5.1)$$

Para as condições de 5.1, acima, foram feitas quatro simulações com três malhas do tempo de espaçamento diferentes. Para a primeira malha, $\Delta t = 20 \text{ s}$, para a segunda $\Delta t = 12 \text{ min}$ e para a terceira $\Delta t = 60 \text{ min}$ até um tempo $T = 1440 \text{ min}$, totalizando a simulação de um dia de infiltração e redistribuição de água no solo. A malha vertical foi tomada com espaçamento $\Delta z = 2.5 \text{ cm}$ nas três primeiras simulações.

Para a última simulação neste primeiro solo, foi tomado uma malha mais densa, de espaçamento $\Delta z = 0.25 \text{ cm}$, com passo de tempo $\Delta t = 20 \text{ s}$.

Os resultados obtidos nessas quatro simulações podem ser vistas na figura 10.

De maneira semelhante à abordagem anterior, novas quatro simulações foram realizadas para o solo 2. Entretanto, tomou-se relações constitutivas diferentes das consideradas nas simulações no primeiro solo. Assim como em (CELIA; BOULOUTAS; ZARBA, 1990), utilizou-se das relações constitutivas de Haverkamp *et al.* e sendo os dados deste solo, para estas relações, contidos na tabela 2.

Tabela 2 – Dados do solo 2

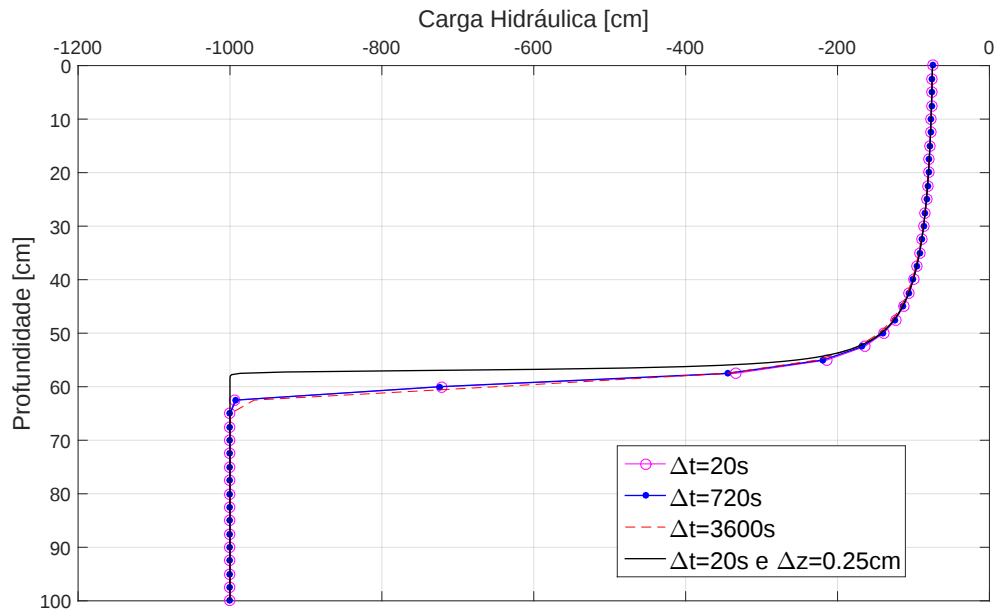
α	β	θ_r	θ_s	A	γ	$K_{sat} \text{ [cm}\cdot\text{s}^{-1}]$
1.611×10^6	3.96	0.075	0.287	1.175×10^6	4.74	0.00944

Para as condições iniciais e de fronteira foram tomados os valores descritos em 5.2

$$\begin{aligned} h(z, 0) &= -61.5 \text{ cm;} \\ h(0, t) &= -20.7 \text{ cm;} \\ h(40, t) &= -61.5 \text{ cm.} \end{aligned} \quad (5.2)$$

Desse modo, permitiu-se a comparação entre as respostas obtidas na simulação e as fornecidas em (CELIA; BOULOUTAS; ZARBA, 1990). A primeira simulação neste segundo solo foi realizada com espaçamento da malha de tempo de $\Delta t = 10 \text{ s}$, para a segunda $\Delta t = 30 \text{ s}$ e para a terceira $\Delta t = 120 \text{ s}$ até um tempo $T = 360 \text{ s}$, portanto, uma

Figura 10 – Resultados das quatro simulações para o solo 1 com base nas equações de van Genuchten e van Genuchten-Mualem - DIFERENÇAS FINITAS



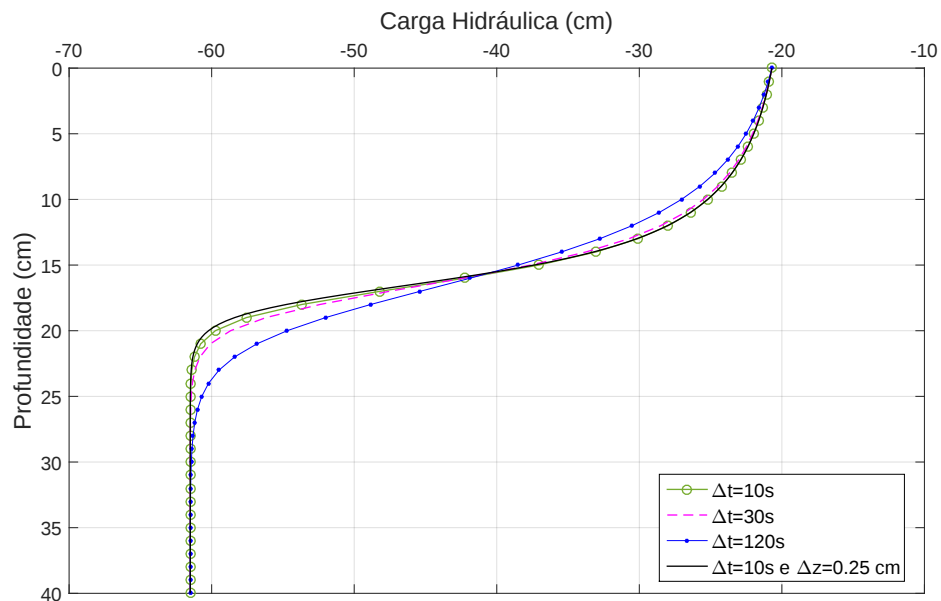
simulação de seis minutos após a infiltração. A malha vertical foi tomada com espaçamento de $\Delta z = 1$ cm nas três primeiras simulações.

Em uma última simulação foi tomado novamente uma malha mais densa, de espaçamento $\Delta z = 0.25$ cm, e passo de tempo $\Delta t = 10$ s.

Os resultados obtidos nessas quatro simulações podem ser vistos na figura 11.

Em todas as oito simulações, para os dois solos diferentes, o balanço de massa

Figura 11 – Resultados das quatro simulações para o solo 2 com base nas equações de Haverkamp *et al.* - DIFERENÇAS FINITAS

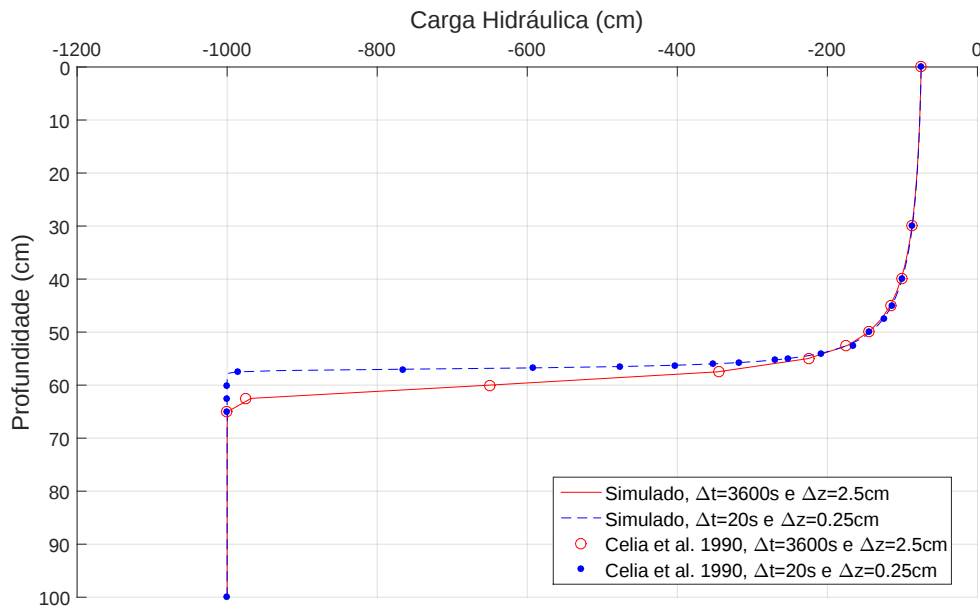


ficou em torno de 99.999 %.

Os dados obtidos no modelo implementado neste trabalho para o primeiro solo e a solução de Celia *et al.* de acordo com os dados da tabela 1 e as condições iniciais e de fronteira 5.1 podem ser comparados ao analisar a figura 12.

Também compararam-se os dados obtidos pelo modelo implementado para o

Figura 12 – Comparação para o solo 1, entre os resultados simulados e de Celia *et al.* nos tempos de 1440 minutos - DIFERENÇAS FINITAS



segundo solo seguindo os parâmetros da tabela 2 e as condições iniciais e de fronteira 5.2 com a solução semi-analítica de Philip utilizados por Celia *et al.* (PHILIP, 1969). Neste caso, os dados relacionam a umidade volumétrica e a profundidade do solo (KUMAR, 1998), como se vê na figura 13.

As simulações no terceiro e último solo foram feitas com base nos dados disponíveis em (WENDLAND; PIZARRO *et al.*, 2010) e (MIRANDA *et al.*, 2005), donde se obteve os parâmetros da tabela 3 através das equações de van Genuchten.

Para a condutividade hidráulica foi utilizada a equação de van Genuchten-Mualem.

Tabela 3 – Dados do solo 3

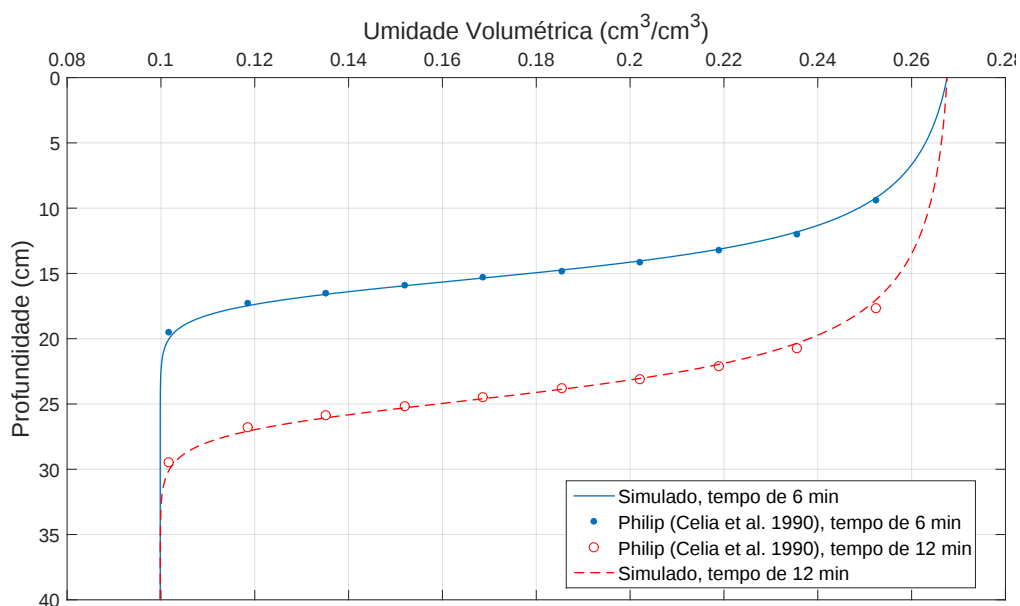
α	n	θ_r	θ_s	$K_{sat} [\text{cm} \cdot \text{s}^{-1}]$
0.0449	3.6732	0.0	0.443	0.001515

As condições iniciais e de fronteira tomadas para as simulações desse solo estão em 5.3, a seguir

$$\begin{aligned}
 h(z, 0) &= -68.6524 \text{ cm;} \\
 h(0, t) &= -6.2476 \text{ cm;} \\
 h(70, t) &= -68.6524 \text{ cm.}
 \end{aligned} \tag{5.3}$$

A malha de tempo para essas simulações teve espaçamento de $\Delta t = 100$ s até o tempo máximo simulado $T = 105$ min. A malha no sentido vertical do solo foi tomada

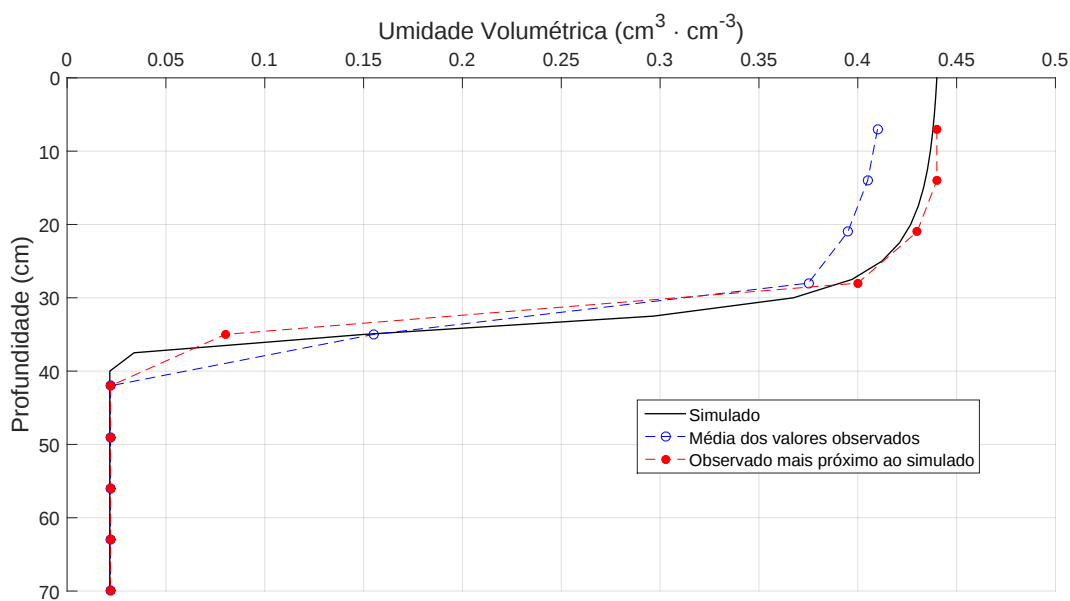
Figura 13 – Comparação para o solo 2, entre os resultados simulados e de Philip nos tempos de 6 minutos e 12 minutos - DIFERENÇAS FINITAS



com espaçamento de $\Delta z = 2.5$ cm. Os resultados obtidos nas simulações e aqueles obtidos experimentalmente por (MIRANDA et al., 2005) podem ser vistos na figura 14.

É importante comentar que (MIRANDA et al., 2005) obteve resultados para três

Figura 14 – Comparação para o solo 3, entre os resultados simulados e de Miranda *et al.* no tempo de 105 minutos - DIFERENÇAS FINITAS



amostras diferentes, donde a comparação aqui descrita foi realizada com o resultado médio dessas três amostras e com o valor observado em melhor conformidade com aqueles obtidos pelo modelo.

5.1.3 Implementação baseada nos Elementos Finitos

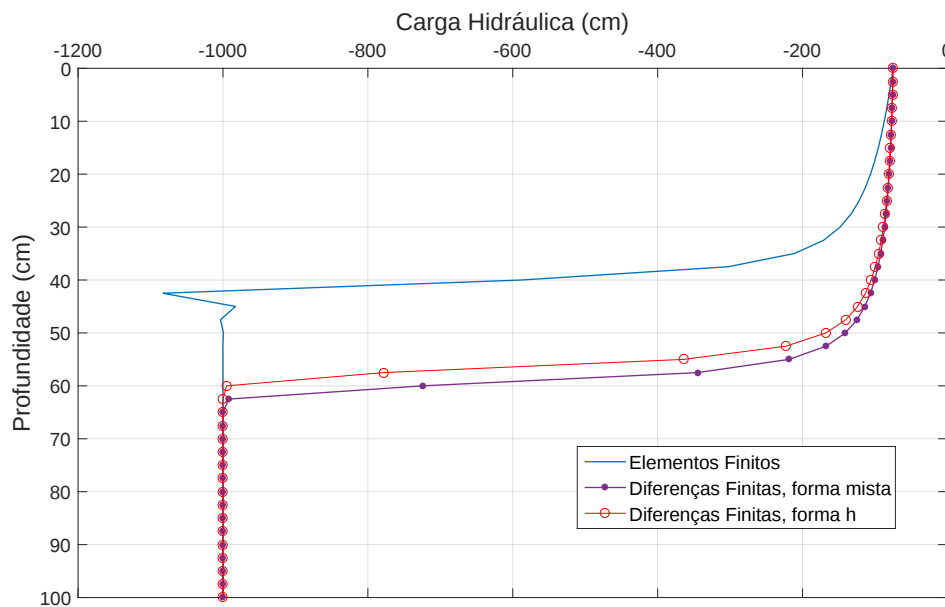
Para o método de elementos finitos foi feita apenas uma simulação com cada conjunto de dados. Entretanto, em face dos resultados preliminares obtidos para os solos 1 e 2 não foi feita simulação com os dados do solo 3 fornecido em Miranda *et al.*. As oscilações no método de elementos finitos na frente de molhamento já eram previstas em (CELIA; BOULOUTAS; ZARBA, 1990) e também observadas em (COX et al., 1994). Um “atraso” da solução em função da resposta esperada também foi obtida, assim como em (WENDLAND; PIZARRO et al., 2010).

Para a primeira simulação no solo 1, utilizou-se das equações de van Genuchten e van Genuchten-Mualem com os dados de ajuste da tabela 1 sujeitas às condições iniciais e de fronteira 5.1. O passo de tempo utilizado foi de $\Delta t = 720 \text{ s}$, com tempo máximo $T = 1440 \text{ min}$ e espaçamento da malha vertical de $\Delta z = 2.5 \text{ cm}$.

A figura 15 mostra as oscilações que ocorrem na frente de molhamento quando foi utilizado o método de elementos finitos em sua forma h para a formulação do problema neste trabalho.

Comparando as respostas de cada um dos dois métodos, pode-se notar que a abordagem aqui tomada para o método de elementos finitos apresenta junto com as oscilações uma defasagem no tempo. Essa defasagem pode ser vista também nas simulações para o

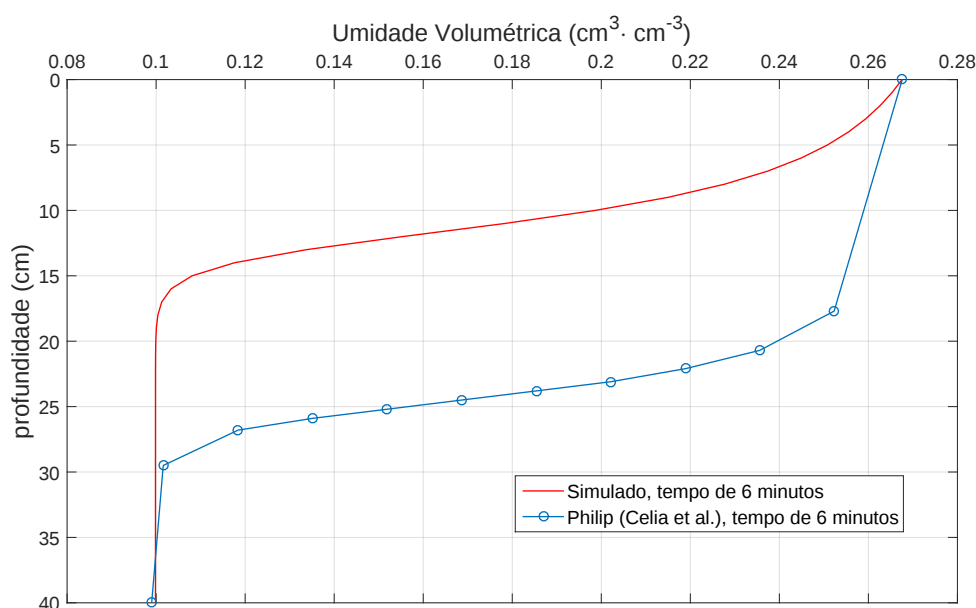
Figura 15 – Comparação entre os resultados simulados por DIFERENÇAS FINITAS nas formas mista e h e ELEMENTOS FINITOS para o solo 1



solo 2 como na figura 16 com os dados de Philip, apesar deste não apresentar oscilações na frente de molhamento como para o primeiro solo. Nessas simulações foram utilizadas as relações constitutivas de Haverkamp *et al.* com passo de tempo $\Delta t = 10 \text{ s}$ até um tempo máximo de $T = 6 \text{ min}$ e espaçamento na malha vertical de $\Delta z = 1 \text{ cm}$ com dados da tabela 2 e as condições iniciais e de fronteira 5.2.

A defasagem no tempo em função do balanço de massa ruim e das oscilações observadas na frente de molhamento para algumas simulações, mesmo estas já sendo esperadas

Figura 16 – Comparação entre os resultados simulados por ELEMENTOS FINITOS e a solução semi analítica de Philip para o solo 2



levou-se a formular, baseados no artigo de (CELIA; BOULOUTAS; ZARBA, 1990) que utiliza o método das diferenças finitas, um outro código de computador implementado para este método e devido a seu bom resultado foi tomado este último para as aplicações do experimento de campo.

5.2 Experimento de Campo

Esta seção se dedica a descrever brevemente os detalhes da realização do experimento em campo e apresenta uma aplicação do modelo aos dados colhidos no solo experimental. Também descreve o tratamento das condições iniciais e de fronteira assim como a obtenção dos parâmetros para as relações constitutivas baseadas nas equações de van Genuchten e van Genuchten-Mualem.

5.2.1 Procedimentos experimentais

O experimento foi montado num planossolo Háplico (SBCS, 2012) localizado em área experimental do SIPA (Sistema Integrado de Produção Agroecológica) da Fazendinha Agroecológica Km 47. O perfil de 0 a 80 cm desse planossolo possui quatro horizontes distintos. Sua descrição morfológica consta nos apêndices deste trabalho.

Foram demarcadas na região do experimento 3 parcelas próximas alinhadas com distância de 2 m uma da outra, de maneira a disponibilizar três pontos de medições diferentes, permitindo assim, ter maior controle de qualquer variação espacial que possa ocorrer.

A partir daí, para que se possa avaliar a taxa de infiltração de água através dos horizontes, foi mantida constante uma lamina d'água de 1.5 cm dentro das áreas demarcadas. As parcelas experimentais foram demarcadas cada uma, por um anel de ferro de 60 cm de diâmetro, 25 cm de altura e 1.5 mm de espessura. Os anéis foram cravados 5

cm no solo a fim de evitar vazamento da lamina d'água na região de contato do anel e a superfície, mantendo sempre uma lâmina constante.

Ao centro foi colocado no solo um tubo guia de acrílico nivelado na superfície onde o TDR, sensor de umidade PICO-BT (IMKO)®, pôde ser introduzido fornecendo a umidade do solo a cada profundidade estabelecida. Também foi colocada uma outra guia para o sensor TDR fora da região do experimento a uma distância de 40 cm da borda nas três diferentes áreas para controle, a fim de detectar qualquer fluxo na direção horizontal. Pormenores a respeito do funcionamento do aparelho podem ser encontrados em [<https://imko.de/>].

As profundidades de medição da umidade foram desenhadas seguindo o arranjo dos quatro horizontes do solo. Na descrição morfológica deste perfil de solo os dois primeiros horizontes se encontram dentro da faixa de 0 cm a 22 cm, o terceiro horizonte de 22 cm a 69 cm e o quarto horizonte 69 cm a 92 cm. Daí as medições foram feitas a cada 20 cm, portanto, a 20 cm, 40 cm, 60 cm e 80 cm de profundidade sendo um total de 4 medições em cada parcela.

As medições ocorreram em três manhãs consecutivas e com um total de 4h e 30 min de medições por dia. Na primeira hora foram obtidos dados a cada 2 minutos, na segunda hora obteve-se dados a cada 5 min, na terceira hora os dados foram obtidos a cada 10 min e a partir da quarta hora medições de 15 min até o final das observações daquele dia.

Na figura 31 do relatório em anexo tem-se a vista de cima das áreas demarcadas para o experimento.

O TDR central, representado em vermelho, medirá o teor de umidade unidimensional no sentido vertical. Portanto, este foi calibrado com a equação universal padrão do aparelho, que mostrou boa conformidade com o solo experimental.

5.2.2 Relações constitutivas e obtenção dos parâmetros de ajuste para a aplicação de campo

Para obter a curva de retenção utilizou-se dados de planossolo com características próximas à do solo experimental. Tais dados pertencem aos arquivos do Departamento de solos da UFRRJ.

É importante observar novamente que o solo experimental é não homogêneo, possuindo 4 horizontes com características distintas. Os dados de umidade com respeito à carga hidráulica para geração da curva de retenção dizem respeito apenas às camadas de 0 cm a 10 cm e de 10 cm a 20 cm em 7 amostras cada. Esses dados estão contidos na tabela 4.

Tabela 4 – Relação entre a carga hidráulica h (cm) e a unidade volumétrica θ ($\text{cm}^3 \cdot \text{cm}^{-3}$) de solo com características próximas ao solo experimental para ajuste na curva de retenção

Pontos	p1		p2		p3		p4		p5		p6		p7	
	0-10	10-20	0-10	10-20	0-10	10-20	0-10	10-20	0-10	10-20	0-10	10-20	0-10	10-20
Cargas (cm)	θ	θ	θ	θ	θ	θ	θ	θ	θ	θ	θ	θ	θ	θ
0.000	0.495	0.420	0.443	0.360	0.445	0.410	0.408	0.422	0.406	0.423	0.434	0.450	0.424	0.403
5.000	0.427	0.361	0.344	0.332	0.362	0.377	0.351	0.326	0.301	0.400	0.379	0.363	0.376	0.349
10.000	0.401	0.341	0.300	0.309	0.344	0.347	0.345	0.315	0.273	0.358	0.371	0.334	0.370	0.348
15.000	0.327	0.304	0.284	0.291	0.310	0.309	0.320	0.302	0.229	0.330	0.357	0.312	0.358	0.337
20.000	0.280	0.289	0.273	0.271	0.285	0.271	0.309	0.283	0.190	0.287	0.300	0.269	0.333	0.297
40.000	0.207	0.216	0.222	0.216	0.200	0.175	0.197	0.176	0.106	0.211	0.188	0.178	0.224	0.199
60.000	0.191	0.172	0.170	0.184	0.158	0.137	0.144	0.119	0.079	0.183	0.143	0.145	0.175	0.167
100.000	0.147	0.116	0.132	0.148	0.103	0.092	0.082	0.082	0.042	0.117	0.097	0.101	0.114	0.117
300.000	0.126	0.101	0.121	0.142	0.092	0.085	0.075	0.063	0.034	0.124	0.090	0.096	0.107	0.107
500.000	0.122	0.096	0.113	0.137	0.085	0.082	0.074	0.061	0.026	0.120	0.085	0.091	0.105	0.104
800.000	0.114	0.090	0.104	0.123	0.076	0.076	0.065	0.056	0.016	0.109	0.078	0.081	0.096	0.097
1000.000	0.106	0.085	0.098	0.119	0.071	0.073	0.060	0.050	0.010	0.104	0.071	0.080	0.093	0.088
3000.000	0.096	0.076	0.090	0.104	0.065	0.066	0.053	0.044	0.008	0.094	0.061	0.061	0.083	0.077
5000.000	0.092	0.061	0.080	0.082	0.055	0.057	0.044	0.038	0.002	0.085	0.056	0.057	0.077	0.072
15000.000	0.070	0.050	0.077	0.071	0.051	0.048	0.040	0.033	0.002	0.081	0.053	0.053	0.072	0.066

Tabela 5 – Média Aritimética entre as duas camadas 0-10 cm e 10-20 cm nos 7 pontos amostrais

-	Média
Carga (cm)	θ
0.000	0.424
5.000	0.361
10.000	0.340
15.000	0.312
20.000	0.281
40.000	0.194
60.000	0.155
100.000	0.106
300.000	0.097
500.000	0.093
800.000	0.084
1000.000	0.079
3000.000	0.070
5000.000	0.061
15000.000	0.055

Portanto, tomou-se a média aritmética entre os valores das umidades observadas para as duas camadas nos sete diferentes pontos amostrais. Em que a tabela 5 foi gerada. A partir desta tabela obteve-se a curva de retenção do solo ajustada, que fornece os parâmetros das relações constitutivas necessárias para a aplicação do modelo numérico e computacional.

Para o ajuste dos dados da tabela 5 em uma curva de retenção utilizou-se das equações de van Genuchten (GENUCHTEN, 1980) com auxílio do *software* SWRC *online* (SEKI, 2007). A figura 17 mostra a curva de retenção obtida para esses valores, a energia em carga hidráulica foi convertida para energia potencial matricial por unidade de volume, portanto, com unidade de pressão $[Nm \cdot m^{-3}] = [Pa]$. Forma mais comumente usada na representação da curva de retenção.

Os parâmetros para as equações de van Genuchten e van Genuchten-Mualem obtidos neste experimento estão contidos na tabela 6.

Tabela 6 – Dados do solo para aplicação experimental: $r^2 = 0.99117$

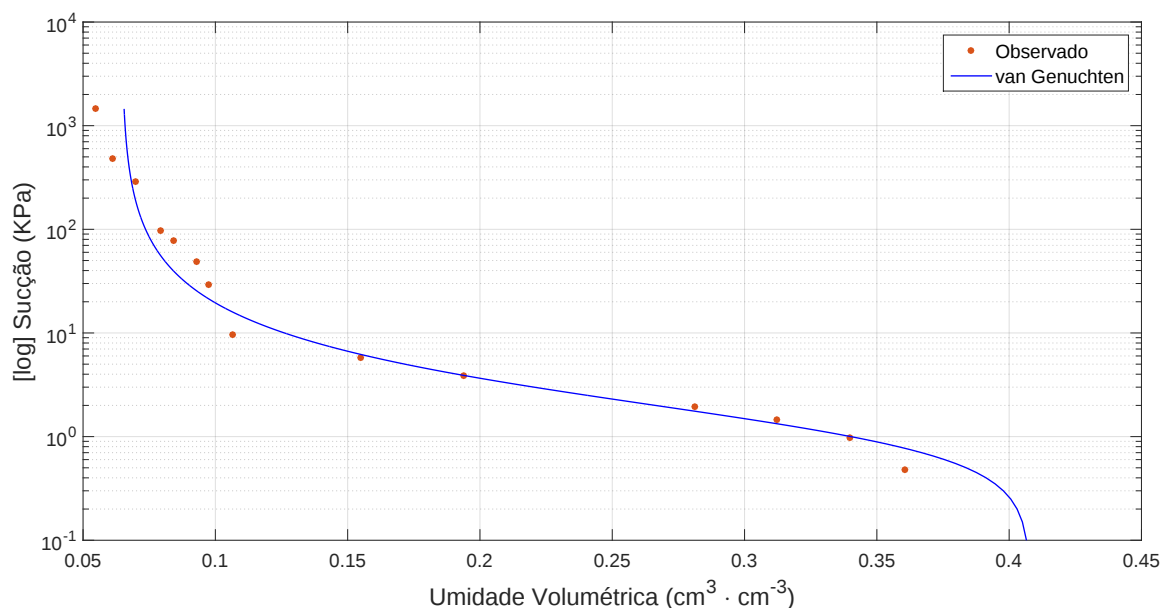
α	n	θ_r	θ_s
0.074638	1.8365	0.064551	0.40794

5.2.3 Condição Inicial e de Fronteira para a aplicação em campo

No presente trabalho, para as simulações de verificação, assumiu-se que as fronteiras possuíam valores constantes e que as condições iniciais eram também constantes. Essas hipóteses foram admitidas tanto para as simulações em que se consideraram as relações constitutivas de van Genuchten e Mualem quanto nas que consideraram as relações constitutivas de Haverkamp *et al.*.

Para a simulação com os dados experimentais, obtidos de acordo com o aparato

Figura 17 – Curva de Retenção ajustada em escala logarítmica no eixo das ordenadas



experimental realizado para este texto, mediu-se no primeiro instante a umidade em cada profundidade. A partir da equação de van Genuchten obteve-se os respectivos potenciais matriciais do solo, no qual por ajuste fornece uma função $h(z, 0) = h_o(z)$, condição inicial do experimento.

Para a fronteira superior, manteve-se constante uma lâmina d'água tornando a superfície do solo saturada. De modo que o valor do potencial matricial, dada pela relação $h(\theta_s)$, nesta fronteira, seja constante ao longo de todo o experimento.

Como o perfil do solo experimental possui quatro horizontes em três camadas principais e que em cada uma delas a curva de retenção da água no solo é diferente, os parâmetros de ajustes para as relações constitutivas se tornam distintos em cada camada. As diferentes camadas de um perfil de solo dificultam a elaboração de uma curva de retenção única para todo o perfil de solo, onde as características particulares de cada camada são ainda levados em conta.

Entretanto, como os dados da curva de retenção foram obtidos em solo diferente daquele experimental, foi utilizados os mesmos parâmetros para todo o perfil de solo. De modo que para as simulações, admitiu-se constante ao longo do perfil todos os parâmetros de ajuste e também aqueles intrínsecos de cada camada do solo.

Esta seção apresenta as simulações aplicada as três parcelas experimentais 1, 2 e 3.

Para os dados observados ajustaram-se equações para as condições iniciais e condições da fronteira inferior, tomando constante a condição de fronteira superior, em função da lâmina d'água constante que manteve a superfície sempre saturada.

De acordo com as especificações técnicas do sensor TDR IMKO®, cada valor de umidade gerado corresponde à umidade em volume de um cilindro de solo de 22 cm de altura e 15 cm de raio. Portanto, admitiu-se que os valores observados se referem a umidade no centro de cada faixa de 20 cm de cada profundidade. Para a fronteira inferior em $z = 80$ cm foi tomado o valor de umidade observado para a faixa de 60 - 80 cm.

Todas as equações obtidas para cada parcela experimental ajustadas para uma simulação de 1 hora e 30 min são dadas a seguir:

- **Parcela 1**

Condição inicial:

$$h(z, 0) = -5.66 \times 10^{-7} z^5 + 9.63 \times 10^{-5} z^4 - 0.00144 z^3 - 0.4546 z^2 + 19.66 z + 12.5 \quad (5.4)$$

com $r^2 = 1.0$

Fronteira inferior:

$$h(80, t) = 10.910 + \frac{16.807}{(1 + (0.067978t)^{25.681})^{0.9611}} \quad (5.5)$$

com $r^2 = 0.9944$

Fronteira superior:

$$h(0, t) = 12.5 \quad (5.6)$$

- **Parcela 2**

Condição inicial:

$$h(z, 0) = 6.052 \times 10^{-6} z^5 - 0.001222 z^4 + 0.0872 z^3 - 2.697 z^2 + 35.66 z + 12.5 \quad (5.7)$$

com $r^2 = 1.0$

Fronteira inferior:

$$h(80, t) = 15.3920 + \frac{35.884}{(1 + (0.0349t)^{52.059})^{0.9808}} \quad (5.8)$$

com $r^2 = 0.9958$

Fronteira superior:

$$h(0, t) = 11.8 \quad (5.9)$$

- **Parcela 3**

Condição inicial:

$$h(z, 0) = -1.48 \times 10^{-6} z^5 + 0.0002919 z^4 - 0.01815 z^3 + 0.2959 z^2 + 3.662 z + 18.5 \quad (5.10)$$

com $r^2 = 1.0$

Fronteira inferior:

$$h(80, t) = 17.542 + \frac{6.528}{(1 + (0.036337t)^{8.4846})^{0.88214}} \quad (5.11)$$

com $r^2 = 0.9722$

Fronteira superior:

$$h(0, t) = 18.5 \quad (5.12)$$

As figuras 18, 19 e 20 mostram os valores observados, junto com o tratamento dos dados aqui abordado para assim tomar uma interpolação polinomial de grau 5 do qual se obtiveram as expressões para as condições iniciais para as parcelas 1, 2 e 3.

Figura 18 – Condição inicial medido e interpolado da Parcela 1

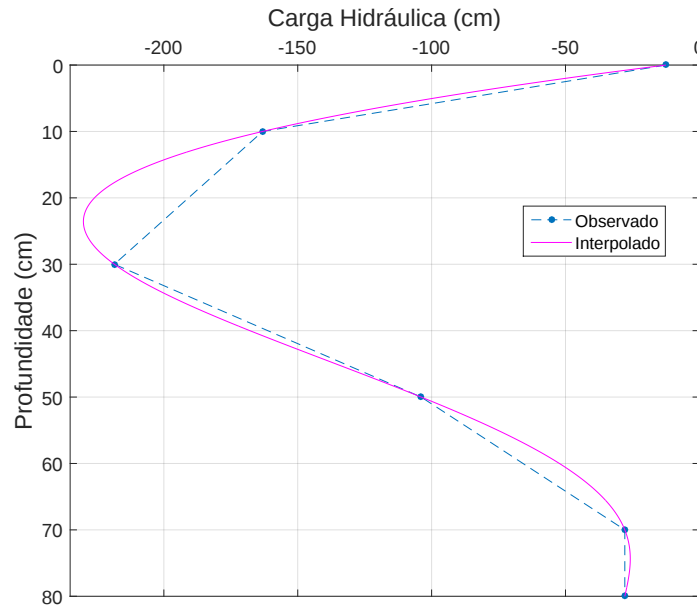
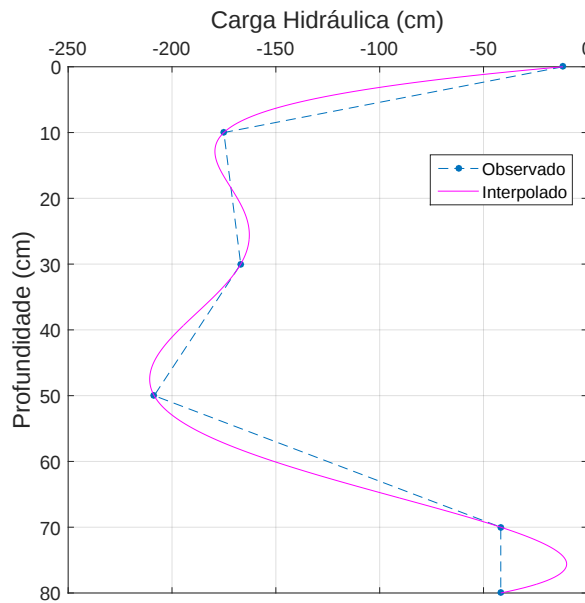


Figura 19 – Condição inicial medido e interpolado da Parcela 2



5.2.4 Resultados da Aplicação

As figuras exibem os resultados obtidos das simulações para cada parcela experimental. As simulações para a Parcela 1 e para a Parcela 3 foram realizadas com malha da profundidade z de espaçamento $\Delta z = 5$ cm, para a Parcela 2 tomou-se um espaçamento mais refinado na variável espacial, com $\Delta z = 0.1$ cm. Esta medida foi necessária já que para os dados ajustados, a aproximação não convergia para Δz maiores, quando da condição inicial e de fronteira do solo desta parcela. A utilização deste espaçamento em Δz gerou pra essas simulações um balanço de massa de 1.2447.

Figura 20 – Condição inicial medido e interpolado da Parcela 3

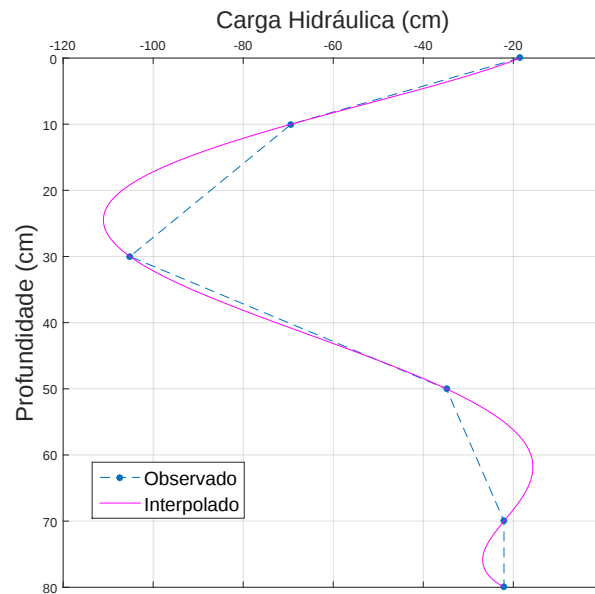


Tabela 7 – Condutividade hidráulica saturada para simulação em cada parcela experimental

Parcela	K_{sat} [cm · min ⁻¹]
1	0.22
2	0.175
3	0.5175

O espaçamento da malha do tempo, $\Delta t = 1$ min, foi o mesmo para todas as simulações.

A suposição de que os parâmetros do solo de cada parcela experimental seriam os mesmos, independentemente das camadas do solo, e até mesmo da própria distância espacial entre as parcelas, provocou nos valores obtidos em cada simulação grande diferença aos valores medido experimentalmente.

Foi observado, por vezes, atrasos na solução ou avanços com relação as respostas obtidas através das medições, de maneira que a velocidade de escoamento da água no solo simulada não correspondeu a velocidade de escoamento da água observada no solo experimental. O que foi corrigido por tentativa e erro na escolha de K_{sat} (parâmetro do solo que “regula” a velocidade de penetração da água no meio poroso).

Portanto, os valores utilizados nas simulações são valores obtidos a partir de tentativas a fim de minimizar a diferença entre os dados medidos e os simulados.

Como as simulações não convergiram com os valores iniciais assumidos para K_{sat} continuou-se a gerar valores por tentativa e erro e por fim, obteve-se os valores da tabela 7 simultaneamente a realização das simulações de cada parcela experimental.

Foram simuladas 1h e 30 min de infiltração e redistribuição de água, contudo boa parte dos resultados interessantes ocorrem nos primeiros 36 minutos de simulação como se

pode ver pelas figuras 21, 22 e 23. Note que a partir de 36 minutos as umidades observadas nas três parcelas atingem o equilíbrio, isto é, todas as camadas do solo se tornam saturadas.

O eixo espacial foi dividido em função das camadas do solo, evidenciando a heterogeneidade espacial do solo trabalhado nas simulações.

Figura 21 – Variação da Umidade com o tempo na Parcela 1

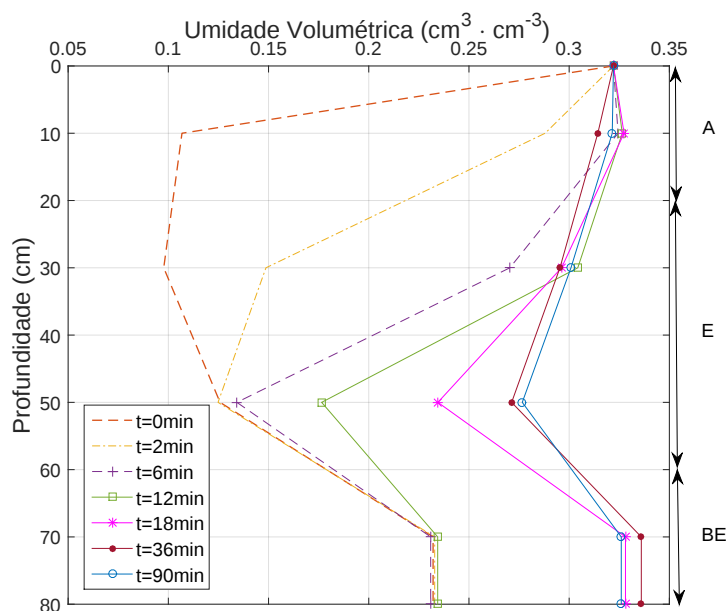
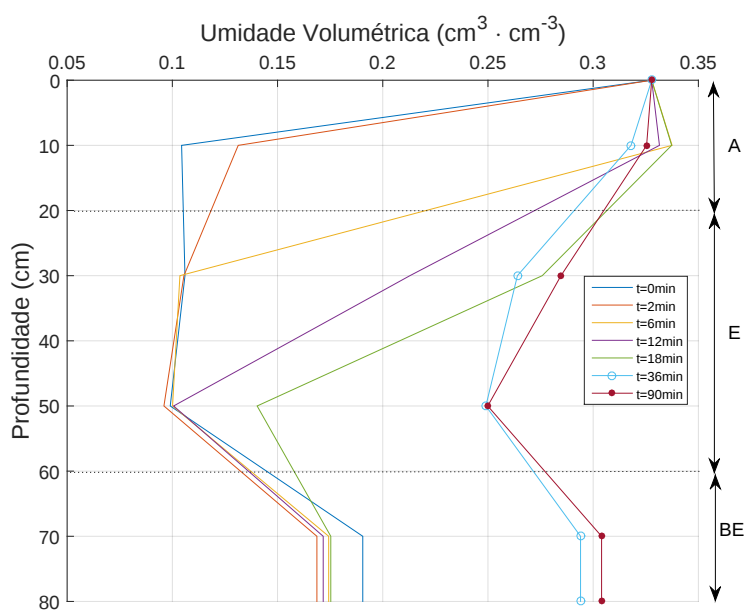


Figura 22 – Variação da Umidade com o tempo na Parcela 2



Em sequência, as figuras exibem os resultados obtidos para alguns valores de tempo determinados.

As simulações para a Parcela 1 tiveram os piores resultados, como se vê nas figuras

Figura 23 – Variação da Umidade com o tempo na Parcela 3

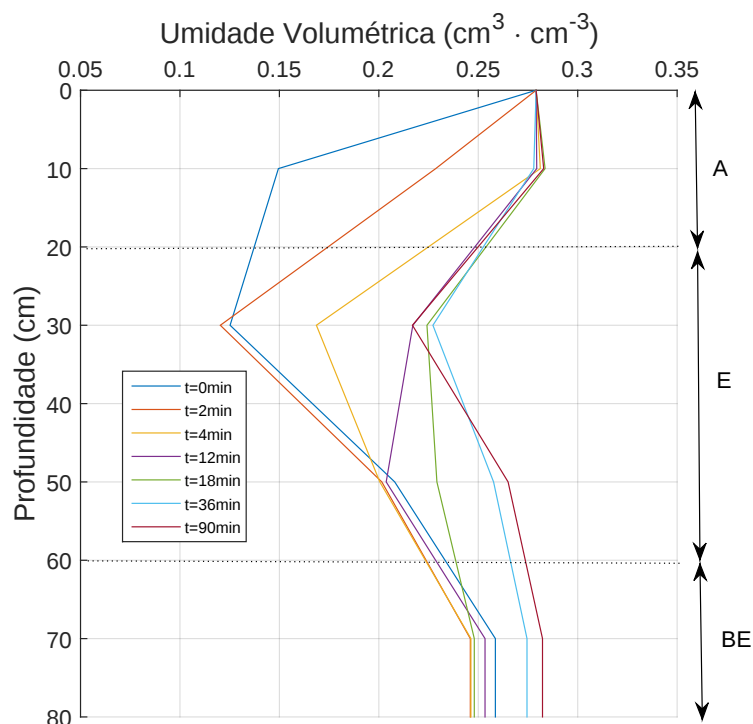
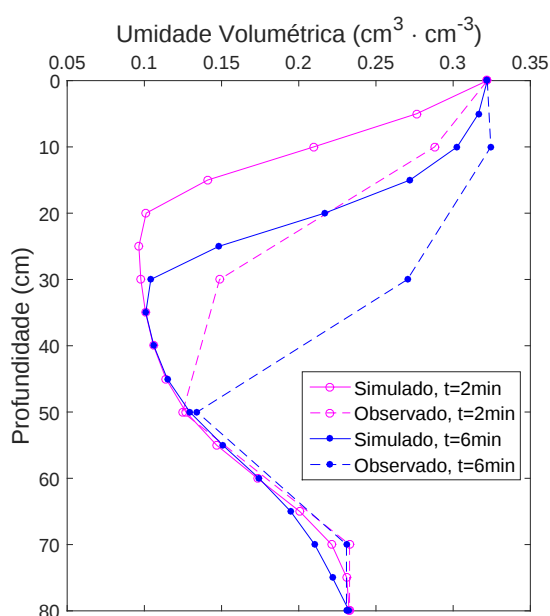


Figura 24 – Resultados da simulação para Parcela 1 - a



24 e 25. Nota-se que a solução está bem “atrasada” nos tempos de $t = 2 \text{ min}$ e $t = 6 \text{ min}$, diminuindo esse atraso, mas não muito, ao longo do tempo como fica mais evidente na simulação em $t = 18 \text{ min}$.

Os resultados das figuras 26 e 27 para a parcela 2, ao contrário da parcela 1, estão adiantados. Nos primeiros 6 minutos na simulação, os valores observados estão ligeiramente

Figura 25 – Resultados da simulação para Parcela 1 - b (continuação)

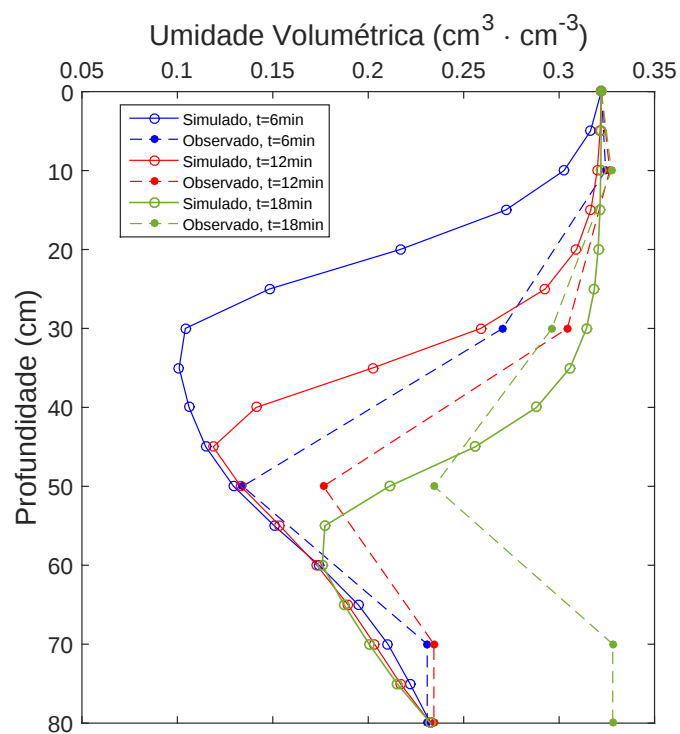


Figura 26 – Resultados da simulação para Parcela 2 - a

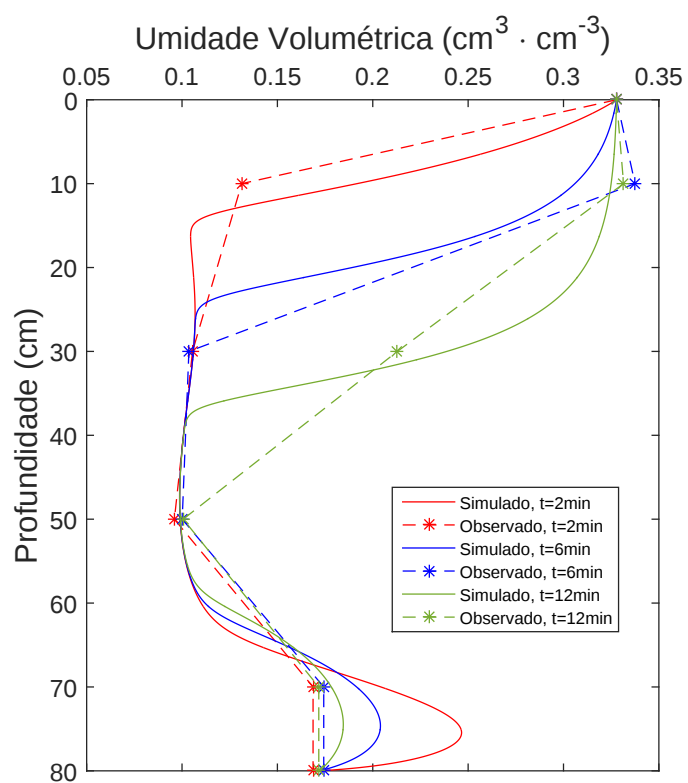
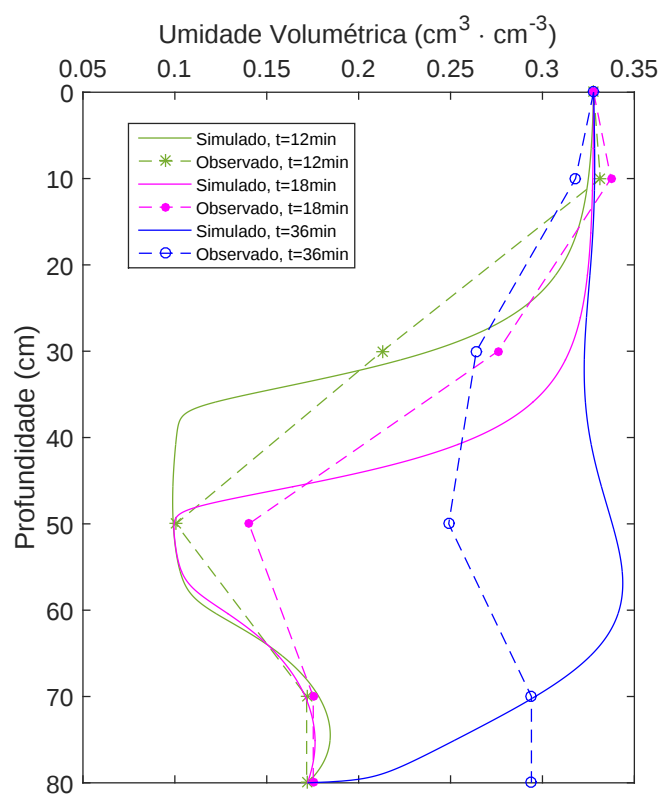


Figura 27 – Resultados da simulação para Parcela 2 - b (continuação)



atrás da curva resultante da simulação. Contudo, nos minutos seguintes, como se vê nos tempos de $t = 6$ min e $t = 12$ min há conformidade entre os resultados simulados e os observados. Nota-se a mesma conformidade para os tempos de $t = 18$ min e $t = 36$ min.

Os resultados observados para a parcela 3, como nas figuras 28 e 29, são os que estão em melhor conformidade ao observado, sem grandes atrasos ou adiantos no tempo.

Figura 28 – Resultados da simulação para Parcela 3 - a

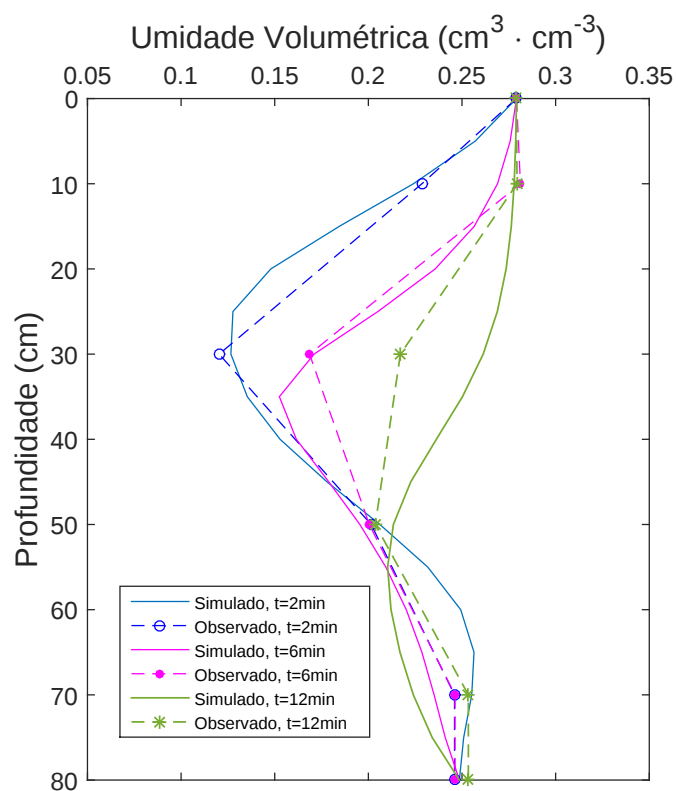
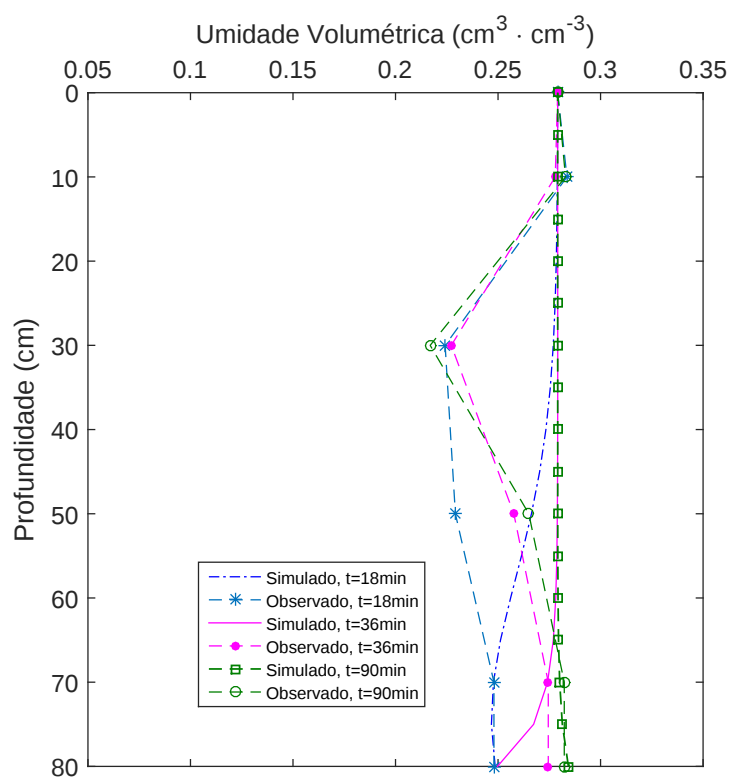


Figura 29 – Resultados da simulação para Parcela 3 - b (continuação)



6 CONCLUSÕES

A partir dos resultados obtidos na implementação do modelo numérico estudado, pode-se perceber que todas as simulações de verificação realizadas para os solos 1 e 2, pelo método de elementos finitos apresentaram “atrasos” quando comparadas aos dados de saída contidos em (CELIA; BOULOUTAS; ZARBA, 1990) e a solução semi-analítica de Philip. O modelo discutido e implementado considera a equação de Richards na forma h , o que origina um balanço de massa ruim. Os atrasos na solução numérica baseados no método de elementos finitos aqui apresentado podem em parte ter sido ocasionados por essa consideração, além do tratamento da discretização do tempo tomada para os parâmetros C e K . As oscilações na frente de molhamento para o primeiro solo utilizado na verificação do modelo, além de oriundos do próprio método, podem também ter aparecido devido a frente de molhamento ser muito abrupta.

Deste modo, a abordagem aqui tomada para o método de elementos finitos ainda precisa ser aprimorada tanto no tratamento temporal quanto na forma da equação de Richards a ser empregada. O que levou a utilização do método de diferenças finitas, de acordo com a abordagem do método de Picard modificado para linearização da equação de Richards, descrita em (ZARBA, 1988).

A implementação do método de diferenças finitas, com tratamento da não linearidade da equação de Richards através do método iterativo de Picard Modificado, obteve resultados esperados quando comparados ao conjunto de dados de verificação. Obtendo os mesmos resultados de (CELIA; BOULOUTAS; ZARBA, 1990) e (WENDLAND; PIZARRO et al., 2010), todos com ótimo balanço de massa, de fato sem qualquer atraso.

Para a aplicação em experimento de campo, as simulações em sua maioria estiveram ou atrasadas ou adiantas no tempo com relação aos dados observados. Concluiu-se que a implementação de um modelo baseado na equação de Richards onde os parâmetros do solo possuem poucas variações ao longo de todo o perfil, isto é, um solo com características homogêneas, obtém resultados favoráveis. Contudo, para os dados utilizados nas simulações, as diferenças observadas no tempo apenas ocorrem no início, isto é, no primeiros 36 minutos, quando o solo ainda não está saturado. Portanto, é possível estimar o tempo para o que solo se torne totalmente saturado nas condições de cada experimento. Ainda assim, uma aplicação a um solo não homogêneo como o estudado, apresentando três diferentes camadas com características distintas, não permite a obtenção de bons resultados. Neste caso, todos os parâmetros de cada camada não podem ser considerados individualmente como na implementação apresentada.

É importante observar que os dados utilizados para ajuste das curvas de retenção da água no solo foram obtidos de solo com características próximas ao estudado e não diretamente do mesmo, além de que os dados foram obtidos somente para a primeira camada do solo.

Modificações futuras para a implementação ou mesmo elaboração do modelo se encontram na consideração de parâmetros do solo por camadas e utilização de dados obtidos a partir do próprio solo experimental.

REFERÊNCIAS

- BACCHI, O. *Teoria dos fatores de escala na análise comparativa de métodos de determinação da condutividade hidráulica de um solo*. Tese (Doutorado) — Escola Superior de Agricultura, USP, Piracicaba, 1988. Orientador: Klaus Reichardt. Citado 4 vezes nas páginas 24, 25, 26 e 29.
- BEAR, J.; CHENG, A. *Modeling Groundwater Flow and Contaminant Transport*. [S.l.]: Springer Netherlands, 2009. (Theory and Applications of Transport in Porous Media). ISBN 9781402066818. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 22.
- BROOKS, R.; COREY, A. *Hydraulic Properties of Porous Media*. [S.l.]: Colorado State University, 1964. (Colorado State University Hydrology Papers). Citado na página 24.
- CECKA, C.; LEW, A. J.; DARVE, E. Assembly of finite element methods on graphics processors. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, John Wiley and Sons, Ltd., v. 85, n. 5, p. 640–669, 2011. ISSN 10970207. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/nme.2989>>. Citado na página 42.
- CELIA, M. A.; BOULOUTAS, E. T.; ZARBA, R. L. A general mass-conservative numerical solution for the unsaturated flow equation. *Water resources research*, v. 26, n. 7, p. 1483–1496, 1990. Citado 14 vezes nas páginas 17, 29, 30, 31, 32, 36, 42, 45, 48, 49, 50, 54, 55 e 68.
- CENTRO NACIONAL DE PESQUISA DE SOLOS - EMBRAPA. *Procedimentos Normativos de Levantamento Pedológicos*. 1. ed. Brasília: Embrapa-SPI, 1995. Citado na página 18.
- CHRISTENSEN, O. *Functions, Spaces, and Expansions: Mathematical Tools in Physics and Engineering*. 1st. ed. [S.l.]: Birkhäuser Basel, 2010. ISBN 0817649794, 9780817649791. Citado na página 33.
- CICHOTA, R.; LIER, Q. d. Jong van. Análise da variabilidade espacial de pontos amostrais da curva de retenção da água no solo. *Revista Brasileira de Ciência do Solo*, sciELO, v. 28, p. 585 – 596, 08 2004. ISSN 0100-0683. Disponível em: <http://www.scielo.br/sciELO.php?script=sci_arttext&pid=S0100-06832004000400001&nrm=iso>. Citado na página 17.
- COX, C. L. et al. One-dimensional infiltration with moving finite elements and improved soil water diffusivity. *Water resources research*, Wiley Online Library, v. 30, n. 5, p. 1431–1438, 1994. Citado na página 54.
- CUNHA, M. C. C. *Métodos Numéricos*. [S.l.]: UNICAMP, 2000. ISBN 9788526808775. Citado 2 vezes nas páginas 34 e 43.
- DEPARTMENT OF AGRICULTURE. SOIL CONSERVATION SERVICE. SOIL SURVEY STAFF. *Soil taxonomy: a basic system of soil classification for making and interpreting soil surveys. (USDA. Agriculture Handbook, 436)*. 1. ed. Washington, 1975. Citado na página 18.

- DEPARTMENT OF AGRICULTURE. SOIL CONSERVATION SERVICE. SOIL SURVEY STAFF. *Soil Survey manual*. (USDA. Agriculture Handbook, 430). 1. ed. Washington, 1984. Citado na página 18.
- FERREIRA, R. O. d. *O Comportamento Evolutivo de Uma Mancha de Óleo na Baía de Ilha Grande, RJ: Modelagem, Análise Numérica e Simulações*. Tese (Doutorado) — Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica, UNICAMP, Campinas, 2003. Orientador: João Frederico da Costa Azevedo Meyer. Citado na página 36.
- FORTUNA, A. de O. *Técnicas computacionais para dinâmica dos fluidos: conceitos básicos e aplicações*. [S.l.]: Edusp, 2000. ISBN 9788531405266. Citado na página 44.
- FREEZE, R. A. Three-dimensional, transient, saturated-unsaturated flow in a groundwater basin. *Water Resources Research*, v. 7, n. 2, p. 347–366, 1971. ISSN 1944-7973. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1029/WR007i002p00347>>. Citado na página 17.
- GALVIS, J.; VERSIEUX, H. *Introdução à aproximação numérica de equações diferenciais parciais via o método de elementos finitos*. [S.l.: s.n.], 2011. (Publicações matemáticas). Citado 2 vezes nas páginas 32 e 37.
- GENUCHTEN, M. T. van. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil science society of America journal*, Soil Science Society of America, v. 44, n. 5, p. 892–898, 1980. Citado 3 vezes nas páginas 24, 29 e 58.
- HAVERKAMP, R. et al. A comparison of numerical simulation models for one-dimensional infiltration1. *Soil Science Society of America Journal*, v. 41, n. 2, p. 285, 1977. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 30.
- HUGHES, T. J. *The Finite Element Method: Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis*. [S.l.]: Dover Publications, 2000. (Dover Civil and Mechanical Engineering). ISBN 9780486411811. Citado na página 42.
- IÓRIO, V. d. M. *EDP um curso de graduação*. 3. ed. Rio de Janeiro: IMPA, 2010. Citado na página 30.
- JOHNSON, C. *Numerical Solution of Partial Differential Equations by the Finite Element Method*. [S.l.]: Dover Publications, 2009. (Dover Books on Mathematics). ISBN 9780486469003. Citado 3 vezes nas páginas 30, 34 e 35.
- KREYSZIG, E. *Introductory Functional Analysis with Applications*. [S.l.]: Wiley India Pvt. Limited, 2007. (Wiley classics library). ISBN 9788126511914. Citado na página 33.
- KUMAR, C. P. M. A numerical simulation model for one-dimensional infiltration. *ISH Journal of Hydraulic Engineering*, v. 4, n. 1, p. 5–15, 1998. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1080/09715010.1998.10514616>>. Citado na página 52.
- KWON, Y.; BANG, H. *The Finite Element Method Using MATLAB, Second Edition*. [S.l.]: CRC Press, 2000. (Mechanical and Aerospace Engineering Series). ISBN 9781420041880. Citado na página 42.
- LANGTANGEN, H. P. *Computational Partial Differential Equations - Numerical Methods and Diffpack Programming*. Springer, 1999. v. 2. (Lecture Notes in Computational Science and Engineering, v. 2). ISBN 978-3-662-01172-0. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/978-3-662-01170-6>>. Citado na página 45.

- LIBARDI, P. L. *Dinâmica Da Água No Solo*. 1. ed. São Paulo: Edusp, 2005. Citado 10 vezes nas páginas 16, 19, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 28 e 30.
- LIMA, E. *Espaços métricos*. [S.l.]: Instituto de Matemática Pura e Aplicada, CNPq, 1977. (Projeto Euclides). Citado na página 33.
- MIRANDA, J. H. d.; DUARTE, S. N. Modelo para simulação da dinâmica de nitrato em colunas verticais de solo não saturado. *Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental*, scielo, v. 6, p. 235 – 241, 00 2002. ISSN 1415-4366. Disponível em: <http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1415-43662002000200009&nrm=iso>. Citado na página 17.
- MIRANDA, J. H. d. et al. Simulação do deslocamento de potássio em colunas verticais de solo não-saturado. *Engenharia Agrícola*, Associação Brasileira de Engenharia Agrícola, v. 25, n. 3, p. 677–685, 2005. Citado 3 vezes nas páginas 49, 52 e 53.
- MUALEM, Y. A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media. *Water resources research*, Wiley Online Library, v. 12, n. 3, p. 513–522, 1976. Citado na página 29.
- PATEL, V. *Numerical Analysis*. [S.l.]: Saunders College Pub., 1994. ISBN 9780030983306. Citado na página 34.
- PHILIP, J.-R. Theory of infiltration. *Adv Hydrosci*, v. 5, p. 215–305, 1969. Citado 2 vezes nas páginas 16 e 52.
- REICHARDT, K.; TIMM, L. C. *Solo, Planta E Atmosfera – Conceitos, Processos E Aplicações*. 1. ed. São Paulo: Manole, 2004. Citado 9 vezes nas páginas 16, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 27 e 29.
- RICHARDS, L. A. Capillary conduction of liquids through porous mediums. *Physics*, v. 1, n. 5, p. 318–333, 1931. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1063/1.1745010>>. Citado na página 26.
- RUMYNIN, V. G. *Subsurface Solute Transport Models and Case Histories: With Applications to Radionuclide Migration*. 1. ed. [S.l.]: Springer Netherlands, 2011. (Theory and Applications of Transport in Porous Media 25). ISBN 978-94-007-1305-5, 978-94-007-1306-2. Citado 2 vezes nas páginas 25 e 30.
- SEKI, K. Swrc fit - a nonlinear fitting program with a water retention curve for soils having unimodal and bimodal pore structure. *Hydrology and Earth System Sciences Discussions Discussions*, v. 4, n. 1, p. 407–437, 2007. Disponível em: <<https://www.hydrol-earth-syst-sci-discuss.net/4/407/2007/>>. Citado 3 vezes nas páginas 17, 29 e 58.
- SHAHRAIYNI, H. T.; ASHTIANI, B. A. Comparison of finite difference schemes for water flow in unsaturated soils. *Intl. J. Aerospace and Mech. Eng*, v. 3, n. 1, p. 1–5, 2009. Citado 3 vezes nas páginas 29, 43 e 48.
- SIMUNEK, J.; GENUCHTEN, M. T. van; SEJNA, M. *The HYDRUS software package for simulating two-and three-dimensional movement of water, heat, and multiple solutes in variably-saturated media*. [S.l.], 2006. v. 1, 241 p. Citado na página 43.

- SIMUNEK, J.; GENUCHTEN, M. T. van; SEJNA, M. Development and applications of the hydrus and stanmod software packages and related codes. *Vadose Zone Journal*, Soil Science Society, v. 7, n. 2, p. 587–600, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 16 e 43.
- SIMUNEK, J. et al. Hydrus-1d. *Simulating the one-dimensional movement of water, heat, and multiple solutes in variably-saturated media, version*, v. 2, 1998. Citado na página 29.
- SOCIEDADE BRASILEIRA DE CIÊNCIA DO SOLO. *Pedologia: Fundamentos*. 1. ed. Rio de Janeiro, 2012. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 55.
- SRIVASTAVA, R.; YEH, T.-C. J. Analytical solutions for one-dimensional, transient infiltration toward the water table in homogeneous and layered soils. *Water Resources Research*, v. 27, n. 5, p. 753–762, 1991. ISSN 1944-7973. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1029/90WR02772>>. Citado na página 24.
- TAYLOR, S. A.; ASHCROFT, G. L. *Physical edaphology. The physics of irrigated and nonirrigated soils*. San Francisco, USA, and Reading, W.H. Freeman and Company., UK: Gaylen L. Ashcroft, 1972. Citado na página 24.
- WANKO, A.; TAPIA, G.; MOSÉ, R. Contribution to numerical modeling of water flow in variably saturated, heterogeneous porous media. *Journal of Water Science*, v. 28, n. 3, p. 179–197, 2015. Citado 2 vezes nas páginas 29 e 43.
- WENDLAND, E.; PIZARRO, M. d. L. et al. Modelagem computacional do fluxo unidimensional de água em meio não saturado do solo. *Engenharia Agrícola*, Associação Brasileira de Engenharia Agrícola, v. 30, n. 3, p. 424–434, 2010. Citado 6 vezes nas páginas 16, 17, 49, 52, 54 e 68.
- ZARBA, R. *A Numerical Investigation of Unsaturated Flow*. Dissertação (Mestrado) — Massachusetts Institute of Technology, Department of Civil Engineering, 1988. Citado 4 vezes nas páginas 43, 44, 49 e 68.
- ZHA, Y. et al. A modified picard iteration scheme for overcoming numerical difficulties of simulating infiltration into dry soil. *Journal of Hydrology*, v. 551, p. 56 – 69, 2017. ISSN 0022-1694. Investigation of Coastal Aquifers. Citado 2 vezes nas páginas 43 e 45.

Anexos

ANEXO A – DESCRIÇÕES MORFOLÓGICAS DO PLANOSSOLO HÁPLICO DISTRÓFICO ARÊNICO - SXD.

SITUAÇÃO, DECLIVIDADE - Trincheira aberta no terço médio da encosta.

LOCALIZAÇÃO - Área de pasto da Fazendinha Agroecológica do Km 47, Município de Seropédica, Baixada Fluminense – RJ.

VEGETAÇÃO E USO ATUAL - Floresta tropical subperenifólia/Pastagem.

DRENAGEM - Imperfeito a moderadamente drenado.

PEDREGOSIDADE - Não pedregoso.

ROCHOSIDADE - Não Rochosa.

EROSÃO - Laminar não aparente.

RELEVO REGIONAL - Plano à ondulado

RELEVO LOCAL - Suave ondulado.

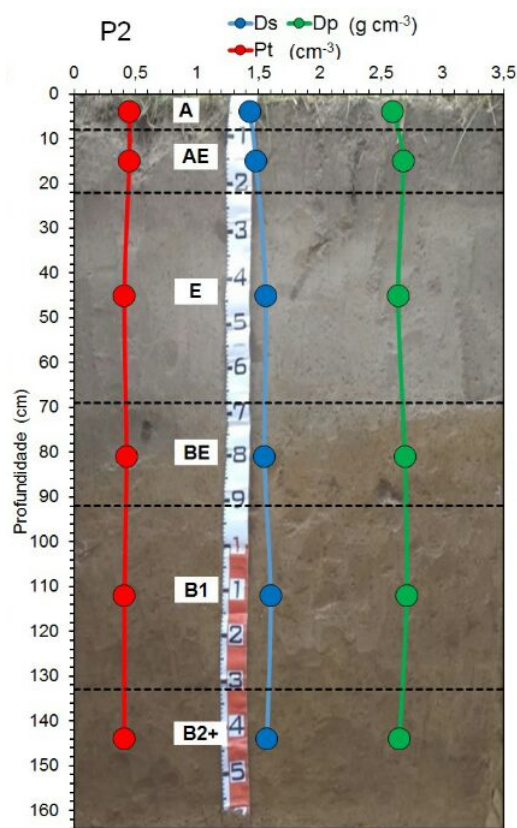
CLIMA - Aw pela classificação de Köppen.

DESCRITO E COLETADO POR - Carlos Roberto Pinheiro Junior, Carlos Wagner Rodrigues do Nascimento, João Antonio Montibeller Furtado e Silva, João Henrique Gaia Gomes, Jorge Luiz Heraclito de Mattos, Leonardo Durval Duarte Guimarães, Marcela Lopes Lazaro, Mateus Marques Bueno, Pedro Armentano Mudado Xavier e Wadson Menezes

DESCRIÇÃO MORFOLÓGICA

- A : 0-8 cm, cinzento-escuro (5YR 4/1, úmida) e cinzento (5YR 5/1, seca); arenosa, fraca, pequeno a médio, granular; não plástica e não pegajosa; macia, muito friável, não plástica e não pegajosa; transição plana e clara.
- AE : 8-22 cm, cinzento-escuro (7,5YR 4/1, úmida) e cinzento (7,5YR 5/1, seca); arenosa; fraca, pequeno a médio, granular; macia, muito friável, não plástica e não pegajosa; transição plana e abrupta.
- E : 22-69 cm, bruno-acinzentado (10 YR 5/2); arenosa; grão simples; solta, solta, não plástica e não pegajosa; transição ondulada e abrupta.
- BE : 69-92 cm, bruno-amarelado-escuro (10YR 4/6); argilo-arenosa; moderado, muito pequeno a pequeno, blocos subangulares; ligeiramente dura, friável; ligeiramente plástica e não pegajosa; transição plana e gradual.

Figura 30 – Perfil do solo experimental - PLANOSSOLO HÁPLICO Distrófico arênico



Distribuição da densidade do Solo (Ds), densidade ponderada das partículas (Dp) e porosidade total (Pt) ao longo do perfil

Tabela 8 – Análise Física do solo

Horizonte		Composição granulométrica da terra g/kg			Relação Silte / Argila
Símbolo	Profundidade (cm)	Areia Total 2-0,05 mm(g/kg)	Silte 0,05-0,002 mm (g/kg)	Argila <0,002 mm (g/kg)	
A	0-8	809	92	99	0.93
AE	8-22	876	81	43	1.88
E	22-69	831	77	92	0.84
BE	69-92	564	48	388	0.12

Tabela 9 – Análise Física do solo: ...continuação

Horizonte Símbolo	Densidade Mg/m ³		Porosidade cm ³ /100cm ³
	Solo	Partículas	
A	1.43	2.6	0.45
AE	1.48	2.68	0.45
E	1.56	2.64	0.41
BE	1.55	2.69	0.42

ANEXO B – RELATÓRIO DAS ATIVIDADES EXPERIMENTAIS DE CAMPO

B.1 INTRODUÇÃO

Este relatório tem por objetivo descrever as atividades experimentais para a dissertação de mestrado do discente, Bruno Freitas de Queiróz. Aluno do programa de pós-graduação em modelagem matemática e computacional –PPGMMC UFRRJ.

Tais atividades foram realizadas na área da Fazendinha Agroecológica Km 47 (Sistema Integrado de Produção Agroecológica - SIPA) localizada no município de Seropédica, RJ (latitude 22° 45' S. longitude 43° 41'N).

A área amostrada encontra-se ocupada por pastagem e caracteriza-se por apresentar: relevo suave-ondulado, altitude aproximada de 40 metros (relevo variando entre 30 e 70 metros) sobre o nível do mar, e ausência de rochosidade e pedregosidade.

Foi escolhido no local do experimento, uma região de altitude média, de solo o mais plano possível para montagem do experimento. O solo da área selecionada é classificado como Planossolo Háptico, de acordo com os critérios do Sistema Brasileiro de Classificação de Solos – SiBCS.

Demarcou-se três parcelas experimentais próximas e alinhadas com distância de aproximadamente 2m uma da outra, de maneira a disponibilizar três repetições, permitindo assim, posterior tratamento de qualquer variação espacial que possa ocorrer.

As parcelas foram demarcadas cada uma, por um anel de ferro de 60 cm de diâmetro, 25 cm de altura e 1,5 mm de espessura. Os anéis foram cravados 5 cm no solo a fim de manter e evitar vazamento da lamina d'água na região de contato do anel e a superfície.

Cada experimento ocorreu em um dia diferente, totalizando quatro dias, três dias de medições válidas e um dia de teste. O dia teste ocorreu em 06/07/2017. As medições válidas foram realizadas todas pela manhã e em dias consecutivos: Sendo os dias 12/07/2017, 13/07/2017 e 14/07/2017. Na área experimental foi colocada uma caixa d'água com capacidade de 1000 litros. Durante os dias de medições a caixa d'água foi abastecida, pela manhã, com água do lago artificial do SIPA.

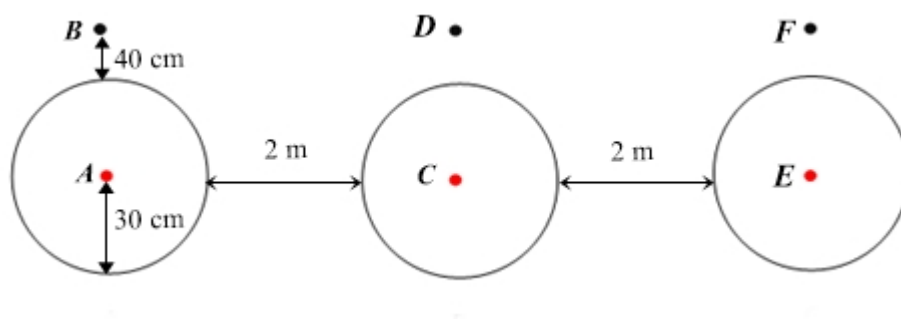
No centro de cada parcela experimental foi colocado ao solo um tubo guia de acrílico nivelado na superfície onde o sensor de umidade TDR modelo TRIME-PICO IPH e um receptor bluetooth, Trime-PICO BT ambos da empresa IMKO®, pôde ser introduzido. Via bluetooth o sensor fornecia a umidade do solo a cada profundidade estabelecida a partir de um emissor ligado a este sensor. Um computador de mão modelo RPDA da empresa Fujitsu-Siemens® com sistema operacional Windows mobile da Microsoft® recebia e armazenava os dados enviados através do software PICO-TALK desenvolvido pela IMKO® e calibrado com a equação de umidade universal padrão do software.

Também foi colocado um outro guia para o sensor TDR fora da região do experimento à uma distância de aproximadamente 40 cm da borda nas três diferentes áreas para controle, a fim de detectar qualquer fluxo na direção horizontal.

Cada tubo de acrílico foi nomeado de A à F, onde os tubos centrais foram chamados de A, C e E e os tubos externos ao anel de B, D e F respectivamente. De acordo com o esquema da figura 31.

A figura 32 mostra uma foto de uma das parcelas e o ponto externo.

Figura 31 – Vista de cima das áreas demarcadas para o experimento



As profundidades de medição da umidade foram desenhadas seguindo o arranjo

Figura 32 – Parcela experimental



observado das camadas do solo, dentro das faixas de: 0 cm a 20 cm, 20 cm a 70 cm e 70 cm a 100 cm.

Foi decidido previamente que as medições seriam realizadas a cada 20 cm, portanto, na profundidade de 20 cm, 40 cm, 60 cm e 80 cm. Gerando um total de 4 medições por vez em cada ponto.

Para que se possa avaliar a taxa de infiltração de água através dos horizontes, foi definido previamente que seria mantido constante uma lamina d'água de 1,5 cm dentro das áreas demarcadas. Para tal, utilizou-se de uma mangueira ligada a uma caixa d'água, que por diferença de potencial gerou uma descarga de água. Figura 33.

Não houve chuva em qualquer um dos três dias de experimento, de fato a temperatura estava em torno dos 35° C.

Uma primeira medição foi realizada antes de iniciada a inundação da parcela a ser medida a cada dia, a fim de registrar a umidade inicial do solo.

Figura 33 – Preparação para o fornecimento de água



B.2 O DIA TESTE

Neste dia, fomos a campo, eu, Bruno, o técnico laboratorista Doutor Martin e meu co-orientador prof. Doutor Marcos Ceddia. Chegamos ao local do experimento e iniciamos os preparativos por volta das 10 horas e 14 minutos da manhã. Neste dia a rotina do experimento foi interrompida cerca de 40 minutos após o início das medições testes e só retomada 1 hora e 5 minutos mais tarde.

Foi designada para o teste, a parcela que possui os tubos E e F. Precisamente iniciamos as medições nesta parcela as 11 horas e 13 minutos.

No primeiro dia teste do experimento notou-se que o número mínimo de pessoas para a realização correta do experimento seria três: Uma pessoa para o controle da vazão de água e manutenção da carga hidráulica constante na superfície do solo no interior do anel. Figura 34.

É importante observar que a água da mangueira era direcionada para a parede do

Figura 34 – Manutenção da Carga hidráulica



anel a fim de evitar que água entrasse pelo tubo ou que espirrasse deformando a superfície do solo ou mesmo vaziar.

Uma segunda pessoa para a introdução do sensor TDR no solo. Figura 35.

e uma terceira para manipular o computador de mão, onde as medições eram

Figura 35 – Introdução do TDR



processadas e guardadas. Figura 36.

Foram feitas inicialmente três medições a cada profundidade de modo a controlar

Figura 36 – Registro dos dados em computador de mão



a existência de qualquer variação na medição do sensor. Daí, verificou-se que as variações da medição do TDR eram completamente aceitáveis, girando em torno de 0,07% a 0,16%. Portanto decidiu-se por não fazer três medições a cada profundidade mas sim apenas uma medição a cada profundidade.

A partir de então, iniciamos as primeiras medições teste. Esses testes nos serviram para ajudar a estabelecer um programa de medições, em vista que uma sequência de 4 medições levou em torno de 1 minuto para cada profundidade.

Após o início dos testes, notou-se que para o planossolo em estudo a umidade em todas as camadas atingia um valor estável em torno de uma hora. Porém, uma umidade ainda longe do esperado para a saturação. O que fez inicialmente decidir levar o experimento por 6 horas. Entretanto, no primeiro dia de experimento válido, tiramos 1 hora e 30 deste teste, caindo para um total de 4 horas e 30 minutos.

Portanto o tempo de medição foi estabelecido respeitando o seguinte programa, desconsiderando o minuto necessário para cada medição:

- **No tubo central:** Na primeira hora, medições com intervalo de tempo de 1 minuto. Na segunda hora repetições com intervalo de tempo de 5 minutos. Na terceira hora repetições com intervalo de tempo de 10 minutos. A partir da quarta hora repetições com intervalo de tempo de 15 minutos até o término das 4 horas e meia de medições.
- **No tubo externo:** Na primeira hora, medições com intervalo de tempo de 1 hora. Na segunda hora repetições com intervalo de tempo de 30 minutos. Na terceira hora repetições com intervalo de tempo de 10 minutos. A partir da quarta hora repetições com intervalo de tempo de 15 minutos até o término das 4 horas e meia de medições.

Rotina pela qual, se repetiu pelos 3 dias de medições válidas, onde cada dia foi realizada em uma diferente parcela demarcada.

Todas as medições foram minuciosamente cronometradas.

Gradualmente uma coroa de solo úmido começou a se formar em torno do anel, fato que se repetiu nos outros dois dias que se sucederam. Figura 37.

Figura 37 – a) Coroa de umidade; b) Visão detalhada da Coroa de umidade



B.3 O PRIMEIRO DIA

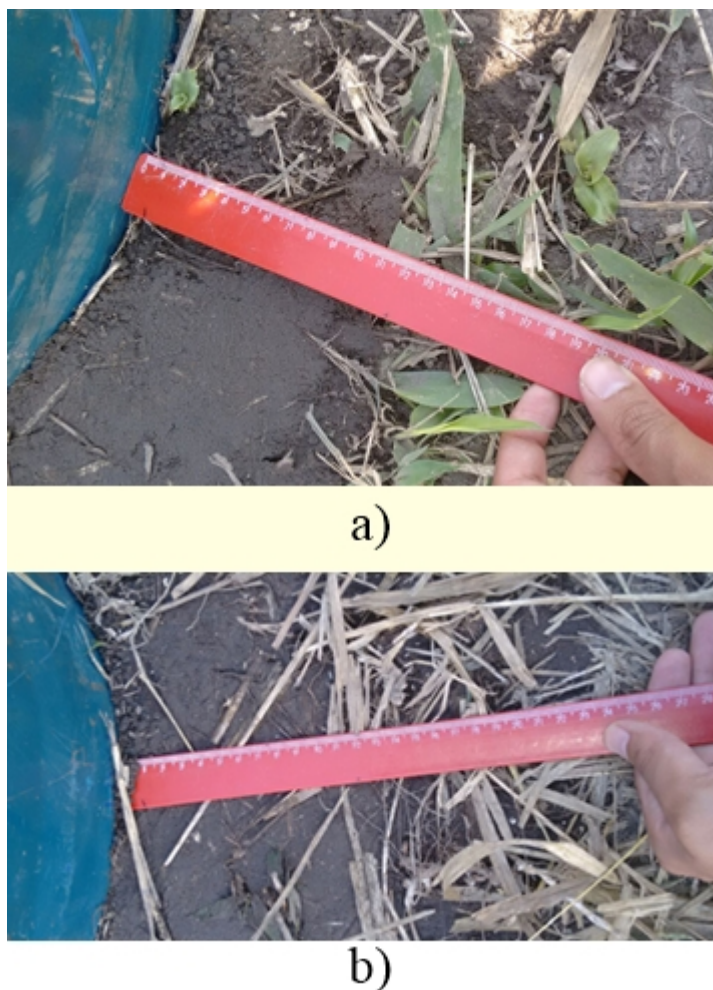
Neste dia, fomos a campo eu, Bruno, o técnico laboratorista Doutor Martin e a voluntária Nathalia Correa Marques. As medições ocorreram nos pontos C e D.

Iniciamos as 08 horas e 19 minutos. Fizemos as medições das condições iniciais em cada profundidade e em seguida inicializamos o fornecimento e manutenção constante da lâmina d'água.

As medições seguiram o cronograma sem intervalo até o seu término as 12 horas e 55 minutos.

Ao final, foi medido a espessura da coroa de umidade, variando dentro da faixa de 15cm a 25cm. Figura 38

Figura 38 – a) Menor tamanho da coroa de umidade; b) Maior tamanho da coroa de umidade



B.4 O SEGUNDO DIA

Neste dia, fomos a campo eu, Bruno, a voluntária Nathalia Correa Marques e o voluntário Igor Freitas Bittencourt. As medições ocorreram nos pontos A e B.

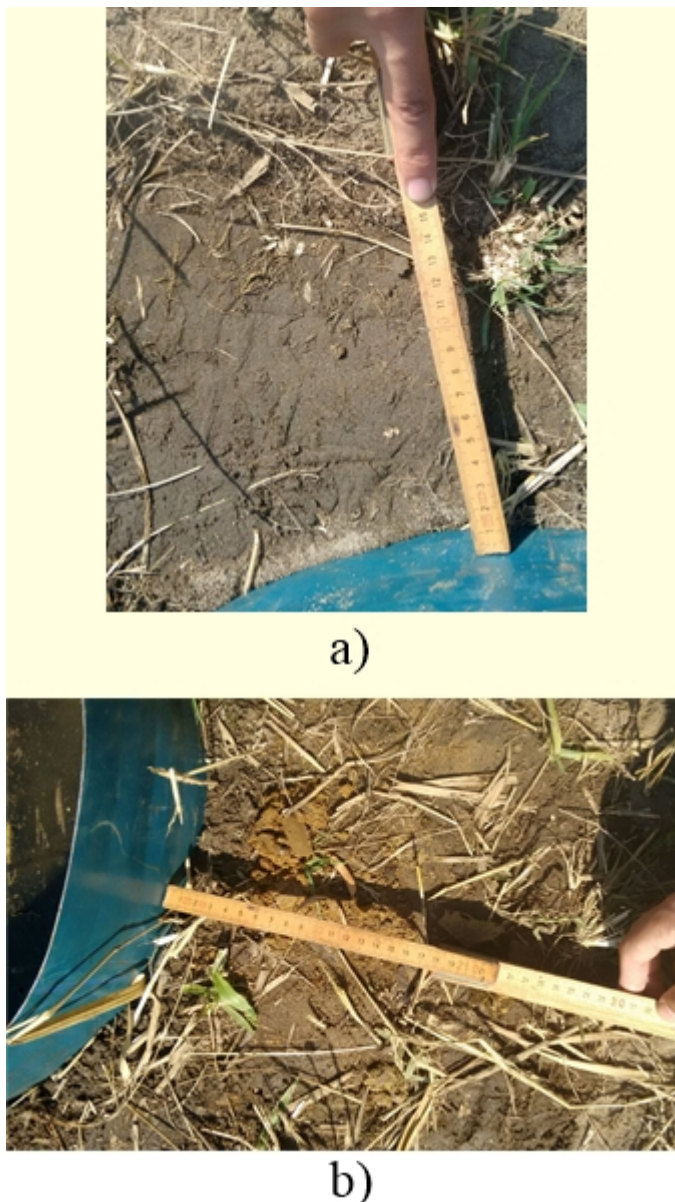
Iniciamos as 08 horas e 34 minutos. Fizemos as medições das condições iniciais em cada profundidade e em seguida inicializamos o fornecimento de manutenção constante da lâmina d'água.

As medições seguiram o cronograma sem intervalo até o seu término as 13 horas e 22 minutos.

Ao final, foi medido a espessura da coroa de umidade, variando dentro da faixa de 15 cm a 30 cm. Figura 39.

Observou-se neste dia que o solo desta parcela teve uma maior drenagem, já que

Figura 39 – a) Menor tamanho da coroa de umidade; b) Maior tamanho da coroa de umidade



no ponto fora da região de carga d'água a umidade atingiu o equilíbrio em 2 horas e 13 minutos na camada de 60cm a 80cm e 1 hora e 43 minutos na camada de 40cm a 60 cm. Tempo razoavelmente curto, como consta nos dados do experimento.

Este fato, nos levou a fazer no terceiro dia, medições extras as programadas.

B.5 O TERCEIRO DIA

Neste dia, fomos a campo eu, Bruno, a voluntária Nathalia Correa Marques e o voluntário Igor Freitas Bittencourt. As medições ocorreram nos pontos E e F.

Iniciamos as 08 horas e 12 minutos. Fizemos as medições das condições iniciais em

cada profundidade e em seguida inicializamos o fornecimento de manutenção constante de água.

As medições seguiram sem intervalo o cronograma até o seu término as 12 horas e 51 minutos.

A partir de 2 horas do início das medições programadas, foram feitas medições extras a cada 20 minutos no tubo externo com uma medição com 2 horas e 30 minutos a fim de capturar o tempo em que a umidade atinge o equilíbrio fora da região do anel.

Ao final, foi medido a espessura da coroa de umidade, variando dentro da faixa de 16 cm a 20 cm. Figura 40.

Figura 40 – a) Menor tamanho da coroa de umidade; b) Maior tamanho da coroa de umidade



a)



b)

B.6 OBSERVAÇÕES FINAIS

- O tubo F para introdução do TDR foi colocado mais distante do centro que das outras duas regiões. Cerca de 64 cm de distância do centro em função do nivelamento necessário para instalação do aparato experimental.
- No último dia a água que restou no caixa foi cerca de 50
- As parcelas foram cobertas por uma capa plástica preta e retiradas apenas para as medições. Figura 41.

Figura 41 – As três parcelas experimentais cobertas



- O solo apesar de bem plano ainda é ligeiramente inclinado tornando o nível da água não regular. Porém o raio de medição do sensor é de 15 cm o que apesar desse desnível não afetar a medição no centro, já que o raio do anel é de 30.
- A umidade no tubo externo nos três casos aumenta no sentido de baixo para cima, porém numa velocidade mais baixa que no centro das regiões. Que tem a umidade se elevando no sentido de cima para baixo.