3 Fluxo Saturado e não Saturado

Parte do objetivo do presente trabalho é o desenvolvimento de um programa computacional para análise de fluxo de água através de meios porosos saturados e não saturados em domínios bidimensionais.

Neste capitulo é desenvolvido e validado um modelo computacional bidimensional para simulação de fluxo saturado e não saturado do solo. Na etapa saturada do solo, o fluxo é governado pela Lei de Darcy e as equações diferenciais de continuidade. Na etapa não saturada o fluxo é governado pela equação de Richards, esta ultima é uma combinação de da Lei de Darcy – Buckingham e as eqquações diferenciais de continuidade. A equação de Richards é resolvida numericamente pelo Método de Elementos Finitos, na aproximação espacial é empregada uma malha de elementos finitos do tipo quadrilateral com quatro nós.

Huyakorn e Pinder (1983) apresentam os métodos numéricos utilizados em problemas de fluxo dentre deles o Método de Elementos Finitos. Nielsen et al. (1986) conclui que a utilização do Método de Elementos Finitos para descrever geometrias não regulares e a facilidade da inclusão de propriedades em meios não homogêneos.

O presente trabalho utiliza uma solução numérica da equação diferencial parcial não linear de Richards. Para a solução de não linearidade são empregados os métodos de Picard e Picard modificado utilizando para este último a formulação mista, isto é, que a equação de Richards estará em função da carga de pressão e do teor de umidade volumétrico, diminuindo desta forma erros por balanço de massa como apontado antes por Celia et al., (1991).

O código numérico é desenvolvido na plataforma de programação computacional Matlab. Para a geração das malhas de elementos finitos trabalhouse com o pre-processador de programa GID v.11.0, desenvolvido pelo centro internacional de Métodos Numéricos em Engenharia (CIMNE) com sede em Barcelona – Espanha, para a visualização dos resultados utiliza-se o Matlab.

3.1. Potencial da Água no Solo

O potencial de água presente no solo define o estado de energia em que a água se encontra em relação a um potencial padrão. O potencial padrão é água pura isenta de sais, submetida a condições normais de pressão (pressão relativa igual à zero) e sobre a superfície do solo.

A água do solo está sujeita a um certo número de forças que fazem com que seu potencial difira do potencial padrão. Essas forças somadas que alteram o valor do potencial total da água (ψ), são representadas pela equação:

$$\psi = \psi_p + \psi_g + \psi_o + \psi_m \tag{3.1}$$

em que ψ_p é o potencial de pressão, ψ_g é o potencial gravitacional, ψ_o é o potencial osmótico e ψ_m é o potencial matricial que diz respeito às interações entre a matriz do solo e a solução no solo, incluindo forças associadas com a adsorção e a capilaridade, responsáveis pela retenção da solução no solo (Libardi, 2005).

A parcela osmótica é desprezada. O potencial de pressão e mátrico podem ser agrupados numa só componente; expressando-se essa componente em termos de potencial por unidade de peso, pode-se chamá-la de carga de pressão (*h*).

O potencial total (ψ) e potencial gravitacional (ψ_g) também expressos em potencial por unidade de peso passam a ser chamados de carga hidráulica total (H_t) e de carga de elevação (z_e). Assim a carga hidráulica total é expressa por:

$$H_t = h + z_e \tag{3.2}$$

3.2. Equação Governante

Quando o espaço dos poros do solo está completamente cheio de água, o solo é definido como saturado, assim, o fluxo saturado pode ser definido como o fluxo de água através dos solos saturados. A teoria que governa o fluxo de água em solos saturados foi formulada pela primeira vez por Darcy (1856). Esta equação escreve-se como:

$$\{q\} = -[K]\{\nabla H_t\} \tag{3.3}$$

onde $\{q\}$ é a vazão específica nas direções x e z, [K] é o tensor de condutividade hidráulica ou de permeabilidade e $\{\nabla H_t\}$ é o gradiente da carga hidráulica total.

O fluxo de água em meios não saturados é determinado por dois fatores: as forças mobilizantes (principalmente a gravidade e os gradientes de pressão) e as propriedades do meio (Nimmo, 2005).

Richads (1931) propõe a equação (3.4) que quantifica o fluxo em meios não saturados em termos da carga de pressão total.

$$\{q\} = -[K(\theta)]\{\nabla H_t(\theta)\}$$
(3.4)

onde θ é a umidade volumétrica do solo, $K(\theta)$ é a condutividade hidráulica não saturada em função da umidade volumétrica e { $\nabla H_t(\theta)$ } é o vetor gradiente da carga de pressão total, também função da umidade volumétrica.

O balanço de massa de uma seção elementar (figura 3.1) para a fase liquida do meio não saturado é dada pela equação (3.5).

$$\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_z}{\partial z} = -\xi \frac{\partial S}{\partial t} - S_s S \frac{\partial \xi}{\partial t}$$
(3.5)

onde $\xi = V_V/V$ é a porosidade do meio (V_V e V são, respectivamente, o volume de vazios e volume total do elemento), $S = V_w/V$ é o grau de saturação (V_W é o volume da água), $S_s = \rho_w g(C_s + nC_w)$ é o coeficiente de armazenamento específico (C_s e C_w são respectivamente a compressibilidade do esqueleto de solo e a compressibilidade do fluido) e ρ_w é a massa específica da água.



Figura 3.1- Área elementar de solo.

Como $\theta = \xi S$, e admitindo-se que não ocorrem variações volumétricas durante o processo de fluxo $\left(\frac{\partial \xi}{\partial t} = 0\right)$, tem-se:

$$\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_z}{\partial z} = -\frac{\partial \theta}{\partial t} - S_s S \frac{\partial h}{\partial t}$$
(3.6)

substituindo a equação (3.4) na equação (3.6) chega-se a:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left[K_{ij}(\theta) \frac{\partial H(\theta)}{\partial x_j} \right] = \frac{\partial \theta}{\partial t} + S_s S \frac{\partial h}{\partial t}$$
(3.7)

Para i, j variando de 1 a 2 no espaço bidimensional, onde x_i representa as coordenadas espaciais.

A equação (3.7) é a chamada equação de Richards (Libardi, 2005, Reichardt e Timm, 2004), que pode ser escrita em termos de carga de pressão (h), da umidade volumétrica (θ), ou numa forma mista, utilizando as duas grandezas. Neste trabalho utiliza-se a equação de Richards formulada em termos da carga de pressão (h).

Como em meios não saturados a umidade volumétrica e a carga de pressão estão relacionadas entre si, pela regra da cadeia:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial \theta}{\partial h} \frac{\partial h}{\partial t} = C(h) \frac{\partial h}{\partial t} + S_s S \frac{\partial h}{\partial t}$$
(3.8)

onde C(h) é chamado capacidade de retenção especifica, representando a variação da umidade volumétrica em um volume unitário de solo para uma variação unitária na carga de pressão no tempo.

O tensor de condutividade hidráulica poder ser encarado tanto como função de θ , como de *h*. separando-se a carga hidráulica total em suas componentes de pressão e de elevação tem-se:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left[K_{ij}(h) \frac{\partial h}{\partial x_j} + K_{i2}(h) \right] = C(h) \frac{\partial h}{\partial t} + S_s S \frac{\partial h}{\partial t}$$
(3.9)

O termo $K_{i2}(h)$, dentro dos colchetes, aparece pela separação da carga hidráulica total (*H*), nos seus termos: carga de pressão (*h*) e carga de elevação (z_e) .

Na formulação apresentada, o efeito da fase ar no movimento da água é desconsiderado, simplificando o problema. O caso mais geral seria o de fluxo bifásico água-ar, onde o movimento de ambas as fases e consequentemente sua interação, devem ser considerados simultaneamente (Nielsen at. al. 1986).

Para a resolução das equações acima, é necessário fornecer as condições inicias da carga de pressão em todo o domínio e também as condições de contorno, no presente trabalho considerou-se as seguintes condições de contorno:

1° Tipo – Condição de Dirichlet (carga constante ou umidade volumétrica) neste caso utiliza-se a carga de pressão:

$$h(x_i, t) = \overline{h} \operatorname{em} \Gamma_D \tag{3.10}$$

2° Condição de Neumman (fluxo constante) onde o fluxo normal a um determinado segmento do contorno e imposto:

$$\left[K_{ij}(h)\frac{\partial h}{\partial x_j} + K_{i2}(h)\right]n_i = \overline{Q}(x_i, t) \text{ em } \Gamma_N$$
(3.11)

sendo Γ_D e Γ_N os domínios dos contornos dos tipos Dirichlet e Neumman, respectivamente, \overline{Q} é a vazão no contorno, n_i são componentes do vetor normal do contorno Γ_N .

3.3. Propriedades Hidráulicas de Solos Não Saturados

Segundo Lambe e Whitman (1969), um solo não saturado é considerado como um sistema trifásico, isto é, é constituído de três fases: líquida (água), gasosa (ar) e sólida (partículas de minerais). Fredlund e Morgenstern (1977), com base na definição de fase, postulam que se deve considerar uma quarta fase independente, a interface ar-água, conhecida também como membrana contrátil. A Figura (3.2) mostra um modelo idealizado de solo não saturado.

A fase sólida é constituída por partículas minerais e matéria orgânica, variando de forma e tamanho, a fase líquida é composta por água, a fase gasosa é constituída pelo ar livre e está presente no espaço poroso não ocupado pela água. A película contrátil comporta-se como uma membrana elástica sobre tensão (tração) misturada por toda a estrutura do solo.

Neste trabalho considerou-se o solo como um sistema trifásico, supondo que o volume da película contrátil é pequeno, esta pode ser considerada como parte da fase água.



Figura 3.2- Elemento de solo não saturado (adaptado Fredlund e Rahardjo, 1993).

3.3.1. Curva Característica

A curva característica representa a variação da sucção (quantidade de água que um solo pode ganhar ou perder) com respeito à umidade ou grau de saturação. A sucção é dada pela diferença entre a pressão do ar e a pressão da água no poro.

A Figura (3.3) apresenta uma curva característica típica, onde alguns valores merecem destaque como: o teor de umidade volumétrica saturada (θ_s), que teoricamente representa a porosidade do solo, mas na prática tende a ser 10-25% menor (Rassam et al, 2004); o teor de umidade volumétrica residual (θ_r) que é valor do teor de umidade volumétrica além do qual um aumento adicional na carga de pressão resultará somente em mudanças pequenas no teor de umidade volumétrica; o valor de pressão de entrada de ar que é o valor da carga de pressão no qual ocorre à entrada de ar nos poros do solo em um processo de secagem.



Figura 3.3- Curva Característica.

A relação entre o valor da carga de pressão (h) e o teor de umidade volumétrico (θ), em geral não é unívoca, e essa relação pode ser obtida de duas maneiras distintas: por "secagem" ou por "molhamento", (Figura 3.4). Cada uma fornece uma curva contínua, mas as duas, na maioria dos casos são distintas. Esse fenômeno é denominado histerese, e é atribuída a não uniformidade dos poros individuais com relação a fenômenos capilares, bolhas de ar que permanecem fixas nos macroporos e as mudanças estruturais (Reichardt e Timm, 2004; Lu e Likos, 2004).



Figura 3.4- Histerese (adaptado, Reichardt e Timm, 2004).

A curva característica tem sido exaustivamente analisada seja quanto às técnicas de ensaios, seja para avaliar a validade dos diversos modelos já existentes, para o ajuste da relação entre teor de umidade volumétrica (θ) e a carga de pressão (h) (Mateus, 2007).

Diversas expressões para modelagem da curva característica são propostas por vários autores, tais como: Gardner (1958), Brooks e Corey (1964), Visser (1966), Farrel e Larson (1972), Roger e Hornberger (1978), van Genuchten (1980), William (1983) e Fredlund e Xing (1994). O modelo proposto por van Genuchten (1980) vem sendo frequentemente utilizado em vários trabalhos, pois propicia um bom ajuste para uma grande variedade de solos. Esta equação é expressa da seguinte forma:

$$\theta(h) = \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{\left(1 + |\alpha h|^n\right)^m}$$
(3.12)

onde θ_r é o teor de umidade volumétrica residual, θ_s é o teor de umidade volumétrica saturada, α e *n* são parâmetros empíricos e *m* é dado por:

$$m = 1 - \frac{1}{n} \tag{3.13}$$

Segundo van Genuchten (1980) o valor de α está aproximadamente relacionado com a inversa do valor de pressão de entrada de ar.

3.3.2. Curva de Condutividade Hidráulica

A condutividade hidráulica é definida como a capacidade de um meio poroso transmitir determinado fluido. Em um meio saturado, a condutividade hidráulica é função das propriedades do fluido e do meio poroso, mas no meio não saturado ele depende ainda do grau de saturação (Freeze e Cherry, 1979). Quando o solo é saturado, todos os poros estão preenchidos e são condutores, então a condutividade hidráulica é máxima. Quando o solo se torna não saturado, alguns poros são preenchidos de ar e a porção condutora da área transversal do solo decresce proporcionalmente. O valor da condutividade hidráulica decresce rapidamente com o decréscimo do teor de umidade volumétrica (θ) ou da carga de pressão (h), devido à diminuição da área útil para a condução da água, (Reichardt e Timm, 2004).

A Figura (3.5) ilustra a função de condutividade hidráulica não saturada. O formato da curva de condutividade hidráulica é similar ao formato da curva característica, inclusive apresentando a histerese para etapas de drenagem e secagem.



Figura 3.5- Função da condutividade hidráulica.

De acordo com Fredlund (1994) existem basicamente dois tipos de abordagem para a determinação da função de condutividade hidráulica, a primeira baseada em estudos empíricos e a segunda em modelos estatísticos. Dentro dos modelos estatísticos encontra-se o modelo de van Genuchten que é apresentado na seguinte equação:

$$k(h) = k_s \theta_e^{0.5} \left[1 - \left(1 - \theta_e^{0.5} \right)^m \right]^2$$
(3.14)

onde k_s é a condutividade hidráulica saturada e θ_e é dado por:

$$\theta_e = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \tag{3.15}$$

3.4. Solução Numérica da Equação de Fluxo

A equação de Richards (equação 3.9) apresenta uma forte não linearidade, tanto na condutividade hidráulica como na capacidade de retenção especifica. Huyakorn e Pinder (1983) apresentam os métodos numéricos mais utilizados em problemas de fluxo. Dentre os métodos descritos, os mais populares são os Métodos das Diferenças finitas (MDF) e o Método dos Elementos Finitos (MEF).

Segundo Nielsen et al. (1986), na modelagem de fluxo em meios não saturado, o MEF apresenta maior flexibilidade em descrever geometrias multidimensionais com contornos irregulares e maiores propriedades em meios não homogêneos.

Dividindo-se o domínio total (Ω) em subdomínios (Ω_e) e considerando-se \hat{h} uma solução aproximada de h no domínio do elemento (Ω_e), admite-se que \hat{h} possa ser aproximada da seguinte forma:

$$\hat{h} = \sum_{l=1}^{n_e} N_l(x, y, z) h_l(t)$$
(3.16)

onde n_e é o número de nós do elemento, h_l são as cargas de pressão nestes nós e N_l são as funções de interpolação. A equação (3.9) pode ser escrita na sua forma residual como:

$$\sum_{n^{e}} \int_{\Omega^{e}} \left\{ \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left[K_{ij}^{e}(h) \frac{\partial \hat{h}}{\partial x_{j}} + K_{i3}^{e}(h) \right] \right\} W_{m} d\Omega^{e} - \sum_{n^{e}} \int_{\Omega^{e}} \left\{ \left[\left(C^{e}(h) + S_{s}^{e} S^{e}(h) \right) \frac{\partial \hat{h}}{\partial t} \frac{\partial \hat{h}}{\partial t} \right] \right\} W_{m} d\Omega^{e} = R(h_{l})$$

$$(3.17)$$

em que $R(h_l)$ representa o resíduo da solução aproximada. Aplicando-se o método dos resíduos ponderados (Huyakorn e Pinder, 1983), a minimização do resíduo $R(h_l)$ é obtida através da introdução de funções de ponderação que, no método de Galerkin, são as próprias funções de interpolação.

$$\sum_{n^{e}} \int_{\Omega^{e}} \left\{ \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left[K_{ij}^{e}(h) \frac{\partial \hat{h}}{\partial x_{j}} + K_{i3}^{e}(h) \right] \right\} W_{m} d\Omega^{e} - \sum_{n^{e}} \int_{\Omega^{e}} \left\{ \left[\left(C^{e}(h) + S_{s}^{e} S^{e}(h) \right) \frac{\partial \hat{h}}{\partial t} \frac{\partial \hat{h}}{\partial t} \right] \right\} W_{m} d\Omega^{e} = 0$$
(3.18)

para *m*=1,2,...,*n*_e

onde W_m são funções de ponderação.

Integrando-se por partes os dois primeiros termos de equação (3.18) vem:

$$\sum_{n^{e}} \int_{\Omega^{e}} \left[\left(\left(C^{e}(h) + S^{e}_{s} S^{e}(h) \right) \frac{\partial \hat{h}}{\partial t} \right) N_{m} + K^{e}_{ij}(h) \frac{\partial \hat{h}}{\partial x_{i}} \frac{\partial N_{m}}{\partial x_{j}} \right] d\Omega^{e} = \sum_{n^{e}} \int_{\Gamma^{e}} \left(K^{e}_{ij}(h) \frac{\partial \hat{h}}{\partial x_{j}} + K^{e}_{i3}(h) \right) \vec{n} N_{m} d\Gamma^{e} + \sum_{n^{e}} \int_{\Omega^{e}} -K^{e}_{i3}(h) \frac{\partial N_{m}}{\partial x_{j}} d\Omega^{e}$$
(3.19)

onde Γ^e representa o contorno do elemento, \vec{n} representa a normal a esse contorno.

A equação (3.19) pode ser escrita matricialmente da seguinte forma:

$$[H]{h} + [S]\left\{\frac{dh}{dt}\right\} = \{Q\} - \{G\}$$
(3.20)

$$[H] = \sum_{e} \int_{\Omega^{e}} \left[K_{ij}^{e}(h) \frac{\partial N_{m}}{\partial x_{i}} \frac{\partial N_{l}}{\partial x_{j}} \right] d\Omega^{e}$$
 é a matriz de
condutividade (3.21)

$$[S] = \sum_{e} \int_{\Omega^{e}} \left(C^{e}(h) + S^{e}_{s} S^{e}(h) \right) N_{m} N_{l} d\Omega^{e} \qquad \text{é a matriz de massa}$$
(3.22)

$$\{Q\} = \sum_{e} \int_{\Gamma^e} \left(K_{ij}^e(h) \frac{\partial \hat{h}}{\partial x_j} + K_{i3}^e(h) \right) \vec{n} N_m d\Gamma^e \quad \begin{array}{c} \text{é o vetor de vazões} \\ \text{nodais} \end{array}$$
(3.23)

$$\{G\} = \sum_{e} \int_{\Omega^{e}} -K_{i3}^{e}(h) \frac{\partial N_{m}}{\partial x_{j}} d\Omega^{e}$$
 é o vetor associado
aos gradientes de
carga de elevação (3.24)

A integração das equações acima e a respectiva montagem das matrizes elementares, resulta nas matrizes globais que resolvidas fornecem os valores de carga de pressão nodais.

Celia et al. (1990) observaram que os resultados do MEF apresentam oscilações na previsão de carga de pressão, concluindo que a diagonalização da matriz [*S*] (equação 3.22) é condição necessária e suficiente para a eliminação desse problema.

Fisicamente, a diagonalização representa que a propriedade relativa à acumulação de massa não está mais distribuída nos elementos mas, concentrada nos nós, resultando em uma matriz diagonal (Wendland et al., 2005; Desai e Abel, 1972).

Neste trabalho adotou-se o seguinte esquema de diagonalização da matriz [*S*] proposto por Milly (1985), expresso pela equação:

$$[S]^e = \delta_{ij} C_i(h) \int_{\Omega^e} N_i d\Omega^e$$
(3.25)

onde δ_{ij} é o delta de Kroenecker, $C_i(h)$ é a capacidade especifica e N_i são as funções de interpolação.

3.4.1. Discretização Espacial

A região de fluxo é dividida em uma malha de elementos quadrilaterais de quatro nós; os cantos desses elementos são os chamados pontos nodais. De acordo com a equação (3.16) a função aproximada da carga de pressão está em função das funções de interpolação, que para o elemento isoparamétrico bilinear de quatro nós são:

$$N_{1}(r,s) = \frac{1}{4}(1-r)(1-s)$$

$$N_{2}(r,s) = \frac{1}{4}(1+r)(1-s)$$

$$N_{3}(r,s) = \frac{1}{4}(1+r)(1+s)$$

$$N_{4}(r,s) = \frac{1}{4}(1-r)(1+s)$$
(3.26)

As matrizes $[H] \in [S]$ e o vetores $\{G\}$ podem ser reescritos da seguinte forma:

$$[H] = \sum_{e} \int [\mathfrak{B}]^{t} [K^{e}(h)] [\mathfrak{B}] |J| dr ds$$
(3.27)

$$[S] = \sum_{e} \int \{N\}^{t} [C^{e}(h)] \{N\} dr ds$$
(3.28)

$$\{G\} = \sum_{e} \int [\mathfrak{B}]^t [K_2^e(h)] |J| dr ds$$
(3.29)

onde:

 $\{K_2^e(h)\}$ é a segunda coluna do tensor de permeabilidade;

A matriz [B] nas coordenadas globais x e z pode ser escrita como:

$$[\mathfrak{B}] = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0\\ 0 & \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} N_1 & \cdots & N_4\\ N_1 & \cdots & N_4 \end{bmatrix}$$
(3.30)

Fazendo a transformação para coordenadas locais, com aplicação da regra da cadeia e rearranjando-se os termos, tem-se:

$$[\mathfrak{B}] = \begin{bmatrix} \frac{\partial r}{\partial x} & \frac{\partial s}{\partial x} \\ \frac{\partial r}{\partial y} & \frac{\partial s}{\partial y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1}{\partial r} & \dots & \frac{\partial N_4}{\partial r} \\ \frac{\partial N_1}{\partial s} & \dots & \frac{\partial N_4}{\partial s} \end{bmatrix}$$
(3.31)

Aplicando o conceito da matriz Jacobiana que é a responsável pela transformação das derivadas espaciais em relação ao sistema de coordenadas globais para as coordenadas locais (r,s).

|*J*| que pode ser interpretado como um fator de escala entre o sistema global de coordenadas e o sistema local:

$$[J] = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1}{\partial r} & \dots & \frac{\partial N_4}{\partial r} \\ \frac{\partial N_1}{\partial s} & \dots & \frac{\partial N_4}{\partial s} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 & z_1 \\ x_2 & z_2 \\ x_3 & z_3 \\ x_4 & z_4 \end{bmatrix}$$
(3.32)

onde (x_i, z_i) representam as coordenadas globais dos nós do elemento quadrilateral.

A inversa da matriz Jacobiana é dada pela equação:

$$[J]^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{\partial r}{\partial x} & \frac{\partial s}{\partial x} \\ \frac{\partial r}{\partial y} & \frac{\partial s}{\partial y} \end{bmatrix}$$
(3.33)

Desta forma, a matriz [*B*] pode ser definida como:

$$[\mathfrak{B}] = [J]^{-1} \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1}{\partial r} & \dots & \frac{\partial N_n}{\partial r} \\ \frac{\partial N_1}{\partial s} & \dots & \frac{\partial N_n}{\partial s} \end{bmatrix}$$
(3.34)

Para integração das matrizes apresentadas adotou-se a quadratura de Gauss para sua avaliação numérica.

3.4.2. Discretização no Tempo

No presente trabalho o tempo total de análise é subdividido em incrementos de tempo (Δt). Sendo a condição inicial do problema a carga de pressão *h*, conhecida e assumindo que esta varia linearmente dentro do passo de tempo, temse:

$$h^{\varpi} = (1 - \varpi)h^t + \varpi h^{t+1}$$
(3.35)

admitindo-se que:

$$\frac{dh}{dt} = \frac{\Delta h}{\Delta t} = \frac{h^{t+1} - h^t}{\Delta t}$$
(3.36)

onde t representa o passo de tempo anterior (resultados conhecidos) e t + 1o passo de tempo decorrente (variável desconhecida).

Substituindo as equações (3.36) e (3.35) na equação (3.20) e expandindo-se, tem-se:

$$[H]\{\varpi h^{t+1}\} + \frac{1}{\Delta t}[S]\{h^{t+1}\} = \{Q\} - \{G\} + [H]\{(\varpi - 1)h^t\} + \frac{1}{\Delta t}[S]\{h^t\} \quad (3.37)$$

O coeficiente ϖ é aquele que define o tipo de algoritmo no tempo, podendo variar entre os valores 0 a 1. Para $\varpi = 0$ (esquema explicito), para $\varpi = 0.5$ (esquema de Crank-Nicolson) e $\varpi = 1$ (esquema puramente implícito).

3.4.3. Método Picard Modificado

A solução da não linearidade da equação de fluxo não saturado é tratada através de métodos iterativos dentre os quais os mais conhecidos são os métodos de Newton-Rapshson e o de Picard.

As matrizes e vetores da equação (3.37) [S], [H], $\{Q\}$ e $\{G\}$ são funções de *h* e são avaliadas em $h^{\overline{\omega}}$, então a equação (3.37), torna-se:

$$[H]^{t+\varpi}\{\varpi h^{t+1}\} + \frac{1}{\Delta t}[S]^{t+\varpi}\{h^{t+1}\} = \{Q\} - \{G\}^{t+\varpi} + [H]^{t+\varpi}\{(\varpi - 1)h^t\} + \frac{1}{\Delta t}[S]^{t+\varpi}\{h^t\}$$
(3.38)

O método de Picard, também chamado de método de aproximações sucessivas, possui uma formulação simples que pode ser obtida diretamente da equação (3.38).

Segundo Neuman (1973), o esquema puramente implícito ($\varpi = 1$) é o que melhor se aplica à problemas que possuem no seu domínio fluxo em condições não-saturadas e saturada. Adotando esse critério na equação (3.38): Chega-se a seguinte equação:

$$\left[[H]^{t+1,k} + \frac{1}{\Delta t} [S]^{t+1,k} \right] \{h^{t+1,k+1}\} = \{Q\} - \{G\}^{t+1,k} + \frac{1}{\Delta t} [S]^{t+1,k} \{h^t\}$$
(3.39)

onde k denota a iteração anterior e k+1 a iteração corrente.

Celia et al. (1990) introduziram o método de Picard Modificado, escrito de forma mista (equação de fluxo não saturado escrita em termos de carga de pressão e umidade volumétrica).

O método de Picard modificado é apresentado na equação (3.40), nesta equação é acrescentado um termo dependente do teor de umidade volumétrico no lado direito.

$$\left([H]^{t+1,k} + \frac{1}{\Delta t} [S]^{t+1,k} \right) \{ h^{t+1,k+1} \} = \{Q\} - \{G\}^{t+1,k} + \frac{1}{\Delta t} [S]^{t+1,k} \{ h^t \} + [S_{\theta}] \left(\frac{\{\theta\}^{t+1,k} - \{\theta\}^t}{\Delta t} \right)$$

$$(3.40)$$

A solução numérica baseada na forma da equação (3.40) fornece excelentes resultados, pois minimiza o erro do balanço de massa. Entretanto uma boa conservação de massa não garante uma boa solução numérica (Celia et al., 1990).

Neuman (1973) sugere que o cálculo dos coeficientes [S], [H], $\{Q\}$ e $\{G\}$ seja efetuado no ponto médio do intervalo de tempo, resultado em:

$$\left([H]^{t+\frac{1}{2},k} + \frac{1}{\Delta t} [S]^{t+\frac{1}{2},k} \right) \left\{ h^{t+\frac{1}{2},k+1} \right\} = \{Q\} - \{G\}^{t+\frac{1}{2},k} + \frac{1}{\Delta t} [S]^{t+\frac{1}{2},k} \{h^t\} + [S_{\theta}] \left(\frac{\{\theta\}^{t+\frac{1}{2},m} - \{\theta\}^n}{\Delta t} \right)$$

$$(3.41)$$

Definindo-se:

$$[D]^{t+\frac{1}{2},k} = \left(\frac{[S]^{t+\frac{1}{2},k}}{\Delta t} + [H]^{t+\frac{1}{2},k}\right)$$
(3.42)

$$\{R\}^{t+\frac{1}{2},k} = \frac{[S]^{t+\frac{1}{2},k}}{\Delta t} \{h\}^{t+\frac{1}{2},k} + \{Q\}^{t+\frac{1}{2},k} - \{G\}^{t+\frac{1}{2},k} + [S_{\theta}] \left(\frac{\{\theta\}^{t+\frac{1}{2},k} - \{\theta\}^{t}}{\Delta t}\right)$$
(3.43)

Substituindo as equações (3.42) e (3.43) na equação (3.41), obtêm-se:

$$[D]^{t+\frac{1}{2},k} \{h\}^{t+1,k+1} = \{R\}^{t+\frac{1}{2},k}$$
(3.44)

Que constitui o sistema de equações a ser resolvido em cada iteração até que seja atingido o critério de convergência.

3.4.4. Critério de Convergência

O processo de solução da não linearidade exige um critério de parada. Neste trabalho é adotado como critério de convergência o algoritmo proposto por Gerscovich (1994). Neste algoritmo, uma primeira aproximação para a carga de pressão é calculada a partir da condição inicial ($\{h\}^0$):

$$\{h\}^{t,k} = \{h\}^{t+\frac{1}{2},k} = \{h\}^0$$
(3.45)

Em seguida, uma segunda aproximação de $\{h\}^{t+1,k}$ é calculada através de uma extrapolação linear:

$$\{h\}^{t+1,k} = \{h\}^t \left(\{h\}^{t+\frac{1}{2},k} - \{h\}^t\right)$$
(3.46)

Com o vetor de carga de pressão da equação (3.46) entra-se na equação (3.44) e calcula-se um novo vetor de cargas de pressão representado por $\{h\}^{t+1,k+1}$, que em seguida é verificado pelo critério de convergência definido por:

$$\left\|\frac{\{h\}^{t+1,k+1} - \{h\}^{t+1,k}}{\{h\}^{t+1,k+1}}\right\| \le toler\hat{a}ncia \tag{3.47}$$

na qual:

$$\| = \sqrt{\sum\{h\}^2}$$
(3.48)

e que denota a norma Euclidiana do vetor $\{h\}$.

Se o critério de convergência não for satisfeito, então o valor de $\{h\}^{t+\frac{1}{2}k+1}$ é atualizado através de:

$$\{h\}^{t+\frac{1}{2},k+1} = \frac{\frac{\{h\}^{t+\frac{1}{2},k+1} + \{h\}^t}{2} + \{h\}^{t+\frac{1}{2},k}}{2}$$
(3.49)

Com este valor de $\{h\}^{t+\frac{1}{2}k+1}$ reavaliam-se os coeficientes da equação (3.44), obtem-se uma nova aproximação para $\{h\}^{t+1,k+1}$, e mais uma vez o critério de convergência na equação (3.47) é verificado. Esse processo é repetido até que o criterio de convergência seja satisfeito, quando então o valor de $\{h\}^{t+\frac{1}{2}k+1}$ é finalmente calculado como:

$$\{h\}^{t+\frac{1}{2},k+1} = \{h\}^{t+1,k+1} + \frac{\{h\}^{t+1,k+1} - \{h\}^t}{2}$$
(3.50)

Concluído o ciclo iterativo, atualiza-se o valor de $\{h\}^t$.

$$\{h\}^t = \{h\}^{t+1,k+1} \tag{3.51}$$

Um código numérico é desenvolvido no programa Matlab, utilizando a metodologia descrita no presente capítulo. Este programa é denominado "Matlab Flux2D". A criação da malha de elementos fintos é feita utilizando o programa de pré-processamento GID, onde são inseridas as informações relativas a coordenadas nodais, condutividade dos elementos, propriedades dos materiais e condições de contorno.

3.4.5. Exemplos de Validação

A validação do cálculo de fluxo não saturado é apresentado a seguir.

A discretização da geometria é mostrada na figura (3.6) em elementos quadrilaterais. Foram definidos 1000 elementos e 1100 nós. A condição de contorno foi assumida no topo do modelo como carga de pressão igual a zero, e na base foi considerado fluxo constante igual a zero. A condição inicial no dominio foi de carga de pressão igual a -100 cm.



Figura 3.6- Geometria e discretização para a validação de fluxo não saturado.

As curvas característica e de condutividade hidráulica referente ao solo limoso, e adotando o modelo de van Genuchten (1980) estão apresentadas na figura (3.7). As propriedades hidráulicas consideradas esta apresentadas na sequência:

$$k_{sat} = 7,22.10^{-4} cm/s$$

 $\theta_s = 0,35$
 $\theta_r = 0,02$
 $\alpha = 0,041 cm^{-1}$
 $n = 1,964$

Ì ł



Figura 3.7- Curva caracteristica.

Na simulação do fluxo saturado - não saturado também é avaliado o erro do balanço de massa, que é a diferença entre a quantidade de volume de água que entra e o volume de água que sai do modelo avaliado.

No exemplo o máximo erro no balanço de massa foi de 0.32% quando utilizado o programa HYDRUS 2D/3D e de 4,2% quando utilizado o código implementado Matlab-Flux2D.

Os passos de tempo se mantiveram fixos em 1s em ambos os programas a fim de evitar diferenças advindas da variação do mesmo. O tempo total de simulação foi de 6000s, suficiente para que ocorresse a saturação completa do perfil. O número máximo de iterações, permitido em um mesmo passo de tempo, foi de 100 iterações. O tempo necesario para a simulação foi de 800 segundos, já o programa comercial HYDRUS termino a simulação em 5 segundos.

Na figura (3.8) está apresentada a curva de variação de carga de pressão em função do tempo para as profundidades e sinaladas na figura.



Figura 3.8- Evolução da carga de pressão no tempo.

Em seguida apresenta-se um segundo exemplo que simula o fluxo saturado e não saturado num bloco bidimensional retangular de dimensões de 1,2 m x 1,5 m. Neste caso, a condição de contorno é de carga de pressão constante em alguns nós no topo do modelo, ver figura (3.9) enquanto todos os outros nós do perímetro



Figura 3.9- Geometria do exemplo de validação, malha de elementos finitos e condições iniciais.

As propriedades hidráulicas são as mesmas apresentadas no primeiro exemplo e na figura (3.7).

Como no caso anterior os passos de tempo se mantiveram fixos em 1s em ambos os programas a fim de evitar diferenças advindas da variação do mesmo. O tempo total de simulação foi de 30 horas, para que ocorresse a saturação completa do perfil. O tempo total da análise foi de 6 horas, o programa numerico HYDRUS 2D/3D realizou a análise em 9 minutos.

A figura (3.10) apresenta a evolução da carga de pressão no tempo para os três nós mostrados na figura (3.8).



Figura 3.10 – Evolução da carga de pressão no tempo para os nós 1, 2 e 3.

A partir dos resultados anteriores conclui-se que o programa desenvolvido calcula de maneira satisfatória o fluxo transiente com saturação variável para problemas unidimensionais e bidimensionais.