

3

Metodologia de solução

No presente capítulo é demonstrada a metodologia utilizada na solução numérica das equações de fluxo de umidade e calor em meios porosos não-saturados. Inicialmente é feita uma breve introdução ao método de solução numérica utilizado pelo programa, o Método dos Elementos Finitos (MEF) e como foi sua aplicação no programa. São demonstrados também os pontos essenciais do programa de análise de fluxo acoplado de umidade e calor bidimensional utilizado, UNSATCHEM-2D (*Simunek e Suarez, 1993*), com destaque para como são realizadas as iterações numéricas do fluxo de umidade e calor e as aplicações das condições de contorno de umidade e temperatura. Ainda neste capítulo, são explanadas as equações governantes do modelo adotado, seguido das implementações realizadas e quais eventuais modificações foram realizadas no código do programa.

3.1

Método dos elementos finitos

O método dos elementos finitos é uma ferramenta de análise numérica, onde é possível estabelecer e resolver as equações governantes de problemas matemáticos que envolvem sistemas complexos de uma maneira bastante eficaz. O método é baseado na discretização de um domínio em elementos e nós, e na construção de funções de interpolação (ou funções base) que interpolam uma solução ou uma aproximação no interior do domínio.

A Figura 2 mostra um objeto contínuo de contorno irregular discretizado em uma típica malha de elementos finitos formada por elementos triangulares especificados por seus nós.

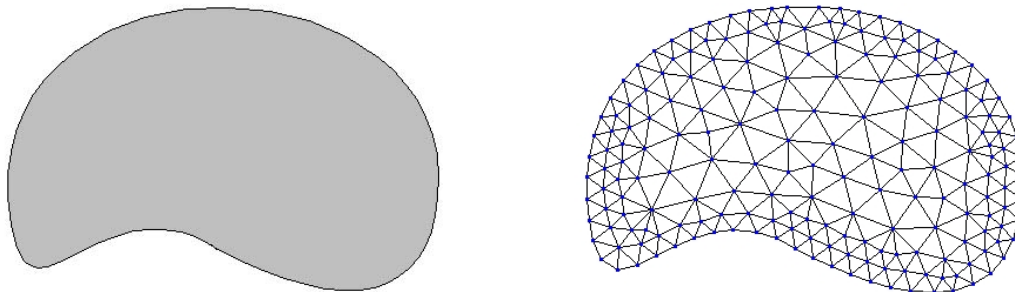


Figura 2 - (a) objeto contínuo, (b) malha típica de elementos finitos com elementos triangulares.

3.1.1

Método dos Resíduos Ponderados

Trata-se de um método variacional que permite obter soluções aproximadas da solução de um certo problema de valor de contorno. Para se aplicar o método dos resíduos ponderados necessita-se primeiramente saber a equação diferencial que rege o problema físico em questão.

Seja a equação diferencial abaixo, que governa um determinado problema físico, com condições especificadas no contorno (problema de valor no contorno):

$$\begin{aligned} Du - f &= 0 && \text{no domínio } \Omega \\ Bu - g &= 0 && \text{no contorno } \Gamma \end{aligned} \quad (3.1)$$

onde u é a variável dependente, x é a variável independente, f e g são funções de x , constantes ou zero, dependendo do problema e, D e B são operadores diferenciais.

Considerando o caso unidimensional, em geral desconhece-se a solução $u(x)$ do problema em questão, e procura-se uma solução aproximada $\tilde{u}(x)$. Tipicamente $\tilde{u}(x)$ é um polinômio que satisfaz as condições de contorno

essenciais, e contém coeficientes $a_1, a_2, a_3, \dots, a_n$. Assim, para se obter a solução aproximada $\tilde{u}(x)$ deve-se determinar os coeficientes a_i tal que $u(x)$ e $\tilde{u}(x)$ sejam suficientemente próximas, segundo um determinado critério estabelecido. Ou seja, $\tilde{u} = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots$, sendo os coeficientes a_i determinados segundo critérios que serão vistos.

Substituindo \tilde{u} no lugar de u nas equações diferenciais (3.1), tem-se dois tipos de erros, ou resíduos

$$\begin{aligned} R_D &= R_D(a_i, x) = D\tilde{u} - f && \text{(resíduo no domínio)} \\ R_C &= R_C(a_i, x) = B\tilde{u} - g && \text{(resíduo no contorno)} \end{aligned} \quad (3.2)$$

Os resíduos podem se anular para alguns valores de x , mas só serão nulos para todos os valores de x se a solução aproximada \tilde{u} for a solução exata, isto é, se $\tilde{u}(x) \equiv u(x)$. Presume-se que \tilde{u} é uma boa aproximação de u e os resíduos sejam pequenos. Resíduos pequenos podem ser alcançados de várias maneiras, cada uma delas resultando num sistema de equações algébricas de ordem n a ser resolvido, onde as incógnitas são os coeficientes a_i .

3.1.2

Método de Galerkin

O método de Galerkin é um caso particular do método dos resíduos ponderados. Neste método selecionam-se funções peso $W_i = W_i(x)$ e impõe-se que a média ponderada do resíduo R_D com relação às funções peso é igual a zero. Em termos matemáticos, R_D é feito ortogonal às funções peso (o produto interno entre W_i e R_D é nulo – ver Figura 3):

$$R_i = \int_{\Omega} W_i(x) R_D(a_i, x) d\Omega = 0 \quad \text{para } i = 1, 2, 3, \dots, n \quad (3.3)$$

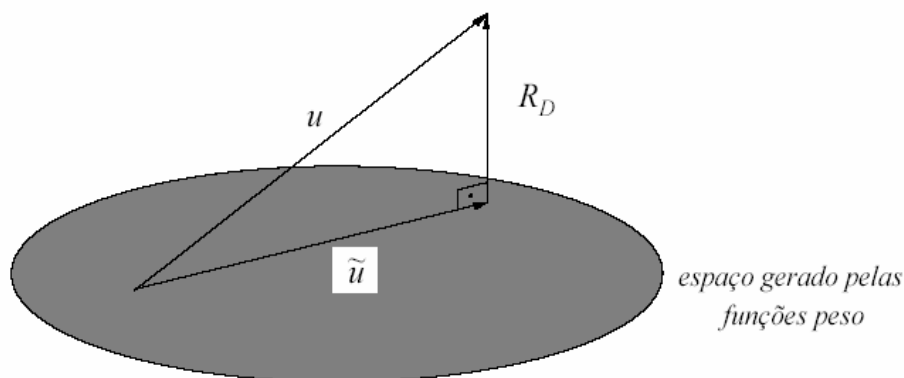


Figura 3 - O resíduo R_D é ortogonal ao espaço gerado pelas funções peso W_i (Luersen, 2000).

No método de Bubnov-Galerkin, ou comumente chamado simplesmente de Galerkin, as funções peso são os coeficientes das coordenadas generalizadas a_i . Assim,

$$W_i = \frac{\partial \tilde{u}}{\partial a_i} \quad (3.4)$$

ou seja, a base de funções para aproximar \tilde{u} e para aproximar W_i são as mesmas.

No método chamado de Petrov-Galerkin outras formas de W_i são utilizadas, ou seja, o conjunto de funções peso é diferente do conjunto de funções utilizadas para a aproximação.

No método de Galerkin, o resíduo no contorno R_D é usado em combinação com integração por partes, para a imposição das condições de contorno naturais. Se existir um princípio variacional associado à equação diferencial, Galerkin e Rayleigh-Ritz darão soluções idênticas quando utiliza-se a mesma função aproximada \tilde{u} .

Para um melhor entendimento do método de Galerkin será demonstrado o desenvolvimento da equação de fluxo em meios não-saturados que o programa UNSATCHEM-2D (Simunek e Suarez, 1993) adota em seu código. A equação diferencial parcial que descreve o fenômeno é a eq. (3.5):

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[K \left(K_{ij}^A \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial x_j} + K_{iz}^A \right) \right] + S = 0 \quad (3.5)$$

onde \mathbf{q} é o teor de umidade volumétrico, \mathbf{y} é a carga de pressão, x_i ($i = 1, 2$) são as coordenadas espaciais, t é o tempo, K_{ij}^A são componentes do vetor de anisotropia K^A , e K é a condutividade hidráulica não-saturada. A variável dependente, função carga de pressão $\mathbf{y}(x, z, t)$, é aproximada pela função $\hat{\mathbf{y}}(x, z, t)$:

$$\hat{\mathbf{y}}(\Omega) = \sum_{n=1}^N \mathbf{y}_n w_n(\Omega) \quad (3.6)$$

onde N é o número de nós e w_n são funções de ponderação que podem ser substituídas por funções de interpolação \mathbf{f}_n , como visto a seguir:

$$\hat{\mathbf{y}}(x, z, t) = \sum_{n=1}^N \mathbf{y}_n(t) \mathbf{f}_n(x, z) \quad (3.7)$$

Fazendo a substituição da variável \mathbf{y} por uma função de aproximação $\hat{\mathbf{y}}$, obtém-se a solução aproximada:

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[K \left(K_{ij}^A \frac{\partial \hat{\mathbf{y}}}{\partial x_j} + K_{iz}^A \right) \right] + S = R_D \neq 0 \quad (3.8)$$

De acordo com o postulado de Galerkin, o resíduo é minimizado de acordo com a eq. (3.3):

$$\int_{\Omega} \left\{ \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[K \left(K_{ij}^A \frac{\partial \hat{\mathbf{y}}}{\partial x_j} + K_{iz}^A \right) \right] + S \right\} \mathbf{f}_n d\Omega = 0 \quad (3.9)$$

Aplicando o teorema de Green a eq. (3.9), a fim de reduzir os termos de derivada de segunda ordem para termos de primeira ordem, temos:

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} \mathbf{f}_n + KK_{ij}^A \frac{\partial \hat{\mathbf{y}}}{\partial x_j} \frac{\partial \mathbf{f}_n}{\partial x_i} \right) d\Omega - \int_{\Gamma} K \left(K_{ij}^A \frac{\partial \hat{\mathbf{y}}}{\partial x_j} + K_{iz}^A \right) n_i \mathbf{f}_n d\Gamma - \int_{\Omega} \left(-KK_{iz}^A \frac{\partial \mathbf{f}_n}{\partial x_i} - S \mathbf{f}_n \right) d\Omega = 0 \quad (3.10)$$

Reduzindo-se a integral ao nível dos elementos e substituindo a solução trivial pela aproximada, obtemos a seguinte equação:

$$\begin{aligned} & \sum_e \int_{\Omega_e} \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} \mathbf{f}_n d\Omega + \sum_e \int_{\Omega_e} KK_{ij}^A \frac{\partial \mathbf{f}_n}{\partial x_i} \frac{\partial \mathbf{f}_m}{\partial x_j} \mathbf{y}_n d\Omega \\ & = \sum_e \int_{\Gamma_e} K \left(K_{ij}^A \frac{\partial \hat{\mathbf{y}}}{\partial x_j} + K_{iz}^A \right) n_i \mathbf{f}_n d\Gamma + \sum_e \int_{\Omega_e} \left(-KK_{iz}^A \frac{\partial \mathbf{f}_n}{\partial x_i} - S \mathbf{f}_n \right) d\Omega \end{aligned} \quad (3.11)$$

onde Ω_e representa o domínio ocupado pelo elemento e e Γ_e é o segmento de contorno do elemento e .

Para montar as matrizes que representam um sistema de equações algébricas na eq. (3.11) pode-se fazer a integração de forma analítica ou pela integração numérica através da quadratura de Gauss. Integrando-se a eq. (3.11) obtém-se, na forma matricial, a seguinte equação:

$$[F] \frac{d\{\mathbf{q}\}}{dt} + [A]\{\mathbf{y}\} = \{Q\} - \{B\} - \{D\} \quad (3.12)$$

onde

$$\begin{aligned} A_{mm} &= \sum_e K_l K_{ij}^A \int_{\Omega_e} \mathbf{f}_l \frac{\partial \mathbf{f}_n}{\partial x_i} \frac{\partial \mathbf{f}_m}{\partial x_j} d\Omega \\ &= \sum_e \frac{k}{4A_e} \bar{K} \left[K_{xx}^A b_m b_n + K_{xz}^A (c_m b_n + b_m c_n) + K_{zz}^A c_n c_m \right] \end{aligned} \quad (3.13)$$

$$B_n = \sum_e K_l K_{iz}^A \int_{\Omega_e} \mathbf{f}_l \frac{\partial \mathbf{f}_n}{\partial x_i} d\Omega = \sum_e \frac{k}{2} \bar{K} (K_{xz}^A b_n + K_{zz}^A c_n) \quad (3.14)$$

$$D_n = \sum_e S_l \int_{\Omega_e} \mathbf{f}_l \mathbf{f}_n d\Omega = \sum_e \frac{k}{12} A_e (3\bar{S} + S_n) \quad (3.15)$$

$$F_{nm} = \mathbf{d}_{nm} \sum_e \int_{\Omega_e} \mathbf{f}_n d\Omega = \mathbf{d}_{nm} \sum_e \frac{k}{3} A_e \quad (3.16)$$

$$Q_n = -\sum_e \mathbf{s}_{l_n} \int_{\Gamma_e} \mathbf{f}_l \mathbf{f}_n d\Gamma = -\sum_e \mathbf{s}_{l_n} I_n \quad (3.17)$$

As variáveis \bar{K} e \bar{S} representam os valores médios de condutividade hidráulica e do termo de armazenamento de água pelas plantas em um elemento e , os subscritos i e j são os índices das direções no espaço ($i, j = 1, 2$), e

$$l = 1, 2, \dots, N \quad m = 1, 2, \dots, N \quad n = 1, 2, \dots, N$$

$$\begin{aligned} b_i &= z_j - z_k & c_i &= x_k - x_j \\ b_j &= z_k - z_i & c_j &= x_i - x_k \\ b_k &= z_i - z_j & c_k &= x_j - x_i \end{aligned} \quad (3.18)$$

$$A_e = \frac{c_k b_j - c_j b_k}{2} \quad \bar{K} = \frac{K_i + K_j + K_k}{3} \quad \bar{S} = \frac{S_i + S_j + S_k}{3}$$

As equações (3.13) a (3.17) são válidas para fluxo em um domínio bidimensional (x, z) , assim como para fluxo em um sistema axisimétrico (x, z) no qual x é usado como coordenada radial. No caso de fluxo plano tem-se:

$$k = 1 \quad I_n = \frac{L_n}{2} \quad (3.19)$$

enquanto que para casos de fluxo axisimétrico:

$$k = 2p \frac{x_i + x_j + x_k}{3} \quad \mathbf{I}_n = L_n \frac{x'_n + 2x_n}{3} \quad (3.20)$$

Os índices i, j e k nas equações (3.18) e (3.20) representam os nós presentes nos vértices de um elemento triangular e . A_e é a área do elemento e , L_n é o comprimento do segmento de contorno conectado ao nó n , e x'_n é a coordenada em x do nó de contorno adjacente ao nó n . O símbolo s_n na equação (3.16) representa o fluxo através da fronteira na vizinhança do nó do contorno n . O fluxo no contorno é considerado uniforme em cada segmento deste contorno.

3.2

Programa UNSATCHEM-2D

O programa de computação UNSATCHEM-2D foi desenvolvido por *Simunek e Suarez* (1993), com o objetivo de simular numericamente o fluxo bidimensional de água, o transporte de calor, produção e transporte de dióxido de carbono e transporte de solutos multicompostos com equilíbrios iônicos e cinéticas químicas considerados mais importantes em meios porosos não-saturados, parcialmente ou totalmente saturados.

O programa permite a simulação de regiões delineadas por contornos irregulares, compostas por solos não uniformes que possuem um grau arbitrário de anisotropia local. O fluxo e o transporte podem ocorrer em um plano vertical, plano horizontal, ou em uma região tridimensional exibindo uma simetria radial sobre o eixo vertical. As condições de contorno utilizadas no fluxo podem ser de carga prescrita, fluxo prescrito ou gradiente específico, assim como, condições de contorno atmosféricas.

A malha de elementos finitos que o programa utiliza pode ser formada por elementos triangulares e quadrilaterais cujas formas são definidas pelas coordenadas dos nós que formam os elementos. No caso de elementos quadrilaterais, o programa subdivide automaticamente os quadriláteros em triângulos, tratando-os como sub-elementos.

3.2.1

Fluxo de umidade

No programa, o fluxo de água, como foi dito, é considerado isotérmico, em um meio poroso rígido de saturação variável e a fase gasosa possui uma importância insignificante no processo de fluxo. A eq. (3.5), uma forma modificada da equação de Richards com a incorporação de um termo que reproduz o armazenamento de água pelas raízes das plantas S , é adotada pelo programa para representar o fluxo.

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[K \left(K_{ij}^A \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial x_j} + K_{iz}^A \right) \right] - S \quad (3.5)$$

onde \mathbf{q} é o teor de umidade volumétrico, \mathbf{y} é a carga de pressão, x_i ($i = 1, 2$) são as coordenadas espaciais, t é o tempo, K_{ij}^A são componentes do vetor de anisotropia K^A , e K é a condutividade hidráulica não-saturada, dada pela eq. (3.2):

$$K(\mathbf{y}, x, z) = K_s(x, z)K_r(\mathbf{y}, x, z) \quad (3.21)$$

onde K_r representa a condutividade hidráulica relativa e K_s a condutividade hidráulica saturada. O termo S na eq. (3.1) representa o volume de água removido por unidade de tempo de uma unidade de solo devido ao armazenamento de água das plantas.

As propriedades hidráulicas do solo no programa UNSATCHEM-2D (Simunek e Suarez, 1993) são descritas por uma série de equações de forma aproximada, semelhantes às de *van Genuchten* (1980), que utilizam o modelo de *Mualem* (1976) para permitir uma flexibilidade extra à descrição de propriedades hidráulicas próximas à saturação.

A solução da eq. (3.5) requer o conhecimento da distribuição inicial de carga de pressão no domínio de fluxo, Ω :

$$\mathbf{y}(x, z, t) = \mathbf{y}_0(x, z) \quad \text{para } t = 0 \quad (3.22)$$

onde \mathbf{y}_0 é uma função prescrita de x e z .

São implementados no programa três tipos de condições de contorno que podem ser condição de contorno de carga de pressão prescrita (Dirichlet):

$$\mathbf{y}(x, z, t) = \bar{\mathbf{y}}(x, z, t) \quad \text{para } (x, z) \in \Gamma_D \quad (3.23)$$

condição de contorno de fluxo prescrita (Neumann):

$$-\left[K \left(K_{ij}^A \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial x_j} + K_{iz}^A \right) \right] n_i = \mathbf{s}_1(x, z, t) \quad \text{para } (x, z) \in \Gamma_N \quad (3.24)$$

e condição de contorno de gradiente prescrita:

$$\left(K_{ij}^A \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial x_j} + K_{iz}^A \right) n_i = \mathbf{s}_2(x, z, t) \quad \text{para } (x, z) \in \Gamma_G \quad (3.25)$$

onde Γ_D, Γ_N e Γ_G indicam os segmentos de contorno de Dirichlet, de Neumann e gradiente prescrita, respectivamente; $\bar{\mathbf{y}}$, \mathbf{s}_1 e \mathbf{s}_2 são funções prescritas de x, z e t ; n_i são componentes do vetor normal aos contornos Γ_N e Γ_G .

3.2.2

Transporte de calor

No transporte de calor, o programa negligencia os efeitos da difusão de vapor d'água, sendo descrito por (*Sophocleous, 1979* apud *Simunek e Suarez, 1993*):

$$C(\mathbf{q}) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\mathbf{l}_{ij}(\mathbf{q}) \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) - C_w q_i \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (3.26)$$

onde T é a temperatura, $\mathbf{I}_{ij}(\mathbf{q})$ é a condutividade térmica aparente do solo e, $C(\mathbf{q})$ e C_w (c_l no modelo de *Philip e de Vries*) são capacidades volumétricas de calor do meio poroso e da fase líquida, respectivamente. Na eq. (3.26), o primeiro termo do lado direito representa o fluxo de calor por condução e o segundo termo representa o transporte de calor pelo fluxo de massa (transporte de calor sensível).

A condutividade térmica aparente, $\mathbf{I}_{ij}(\mathbf{q})$, combina a condutividade térmica $\mathbf{I}_0(\mathbf{q})$ do meio poroso (sólido mais água) na ausência do fluxo e a macrodispersividade, que é uma função linear da velocidade (*de Marsily*, 1986 apud *Simunek e Suarez*, 1993). Por analogia com a dispersão no transporte de soluto, a condutividade térmica aparente é dada por:

$$\mathbf{I}_{ij}(\mathbf{q}) = \mathbf{I}_T C_w |q| \mathbf{d}_{ij} + (\mathbf{I}_L - \mathbf{I}_T) C_w \frac{q_j q_i}{|q|} + \mathbf{I}_0(\mathbf{q}) \mathbf{d}_{ij} \quad (3.27)$$

onde $|q|$ é o valor absoluto do fluxo, \mathbf{d}_{ij} é a função delta de Kronecker ($\mathbf{d}_{ij}=1$ se $i=j$, e $\mathbf{d}_{ij}=0$ se $i \neq j$), e \mathbf{I}_L e \mathbf{I}_T são as dispersividades térmicas longitudinal e transversal, respectivamente.

A solução da eq. (3.26) requer o conhecimento da temperatura inicial na região de fluxo, Ω :

$$T(x, z, t) = T_i(x, z) \quad \text{para } t = 0 \quad (3.28)$$

onde T_i é uma função prescrita de x e z .

Dois tipos de condições de contorno (Dirichlet e Cauchy) pode ser especificados ao longo do contorno Ω . Condição de contorno de temperatura prescrita (Dirichlet) ao longo do contorno Γ_D :

$$T(x, z, t) = T_0(x, z, t) \quad \text{para } (x, z) \in \Gamma_D \quad (3.29)$$

condição de contorno de fluxo de calor prescrito (Cauchy) ao longo do contorno Γ_C :

$$-I_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_j} n_i + TC_w q_i n_i = T_0 C_w q_i n_i \quad \text{para } (x, z) \in \Gamma_C \quad (3.30)$$

onde $q_i n_i$ representa o fluxo normal ao contorno, n_i é o vetor normal ao contorno e T_0 a temperatura do fluido de entrada. Em casos onde, por exemplo, existe contorno impermeável ($q_i n_i = 0$) ou quando o fluxo de água é direcionado para fora da região, a eq. (3.30) reduz-se para uma condição de contorno de Neumann na forma:

$$I_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_j} n_i = 0 \quad \text{para } (x, z) \in \Gamma_N \quad (3.31)$$

A condição de contorno atmosférica para a temperatura do solo é determinada pela função seno seguinte (*Kirkhan e Powers, 1972* apud *Simunek e Suarez, 1993*):

$$T_0 = \bar{T} + A_t \sin\left(\frac{2pt}{p_t} - \frac{7p}{12}\right) \quad (3.32)$$

onde p_t é o período de tempo necessário para a onda seno completar um ciclo (aceito igual a um dia), \bar{T} é a temperatura média na superfície do solo durante o período p_t , e A_t é a amplitude da onda seno. A segunda parte do termo seno é incluída para estabelecer a máxima temperatura no horário de maior insolação.

3.2.3

Solução numérica das equações de fluxo e de calor

A solução numérica da equação de fluxo foi descrita no item 3.2.2, onde a eq. (3.5), desenvolvida através do método dos elementos finitos, é descrita na forma matricial pela eq. (3.12):

$$[F] \frac{d\{\mathbf{q}\}}{dt} + [A]\{\mathbf{y}\} = \{Q\} - \{B\} - \{D\} \quad (3.12)$$

O procedimento numérico incorpora duas importantes hipóteses, além das aproximações relacionadas ao método de Galerkin. A primeira diz respeito às derivadas no tempo dos valores nodais de teor de umidade volumétrico na eq. (3.12). Estas derivadas no tempo são ponderadas de acordo com:

$$\frac{dq_n}{dt} = \frac{\sum_e \int_{\Omega_e} \frac{dq}{dt} f_n d\Omega}{\sum_e \int_{\Omega_e} f_n d\Omega} \quad (3.33)$$

Esta hipótese implementa a formulação de “mass-lumping” ou diagonalização de massa, formulação esta que, segundo *Neuman* (1973), melhora a taxa de convergência do processo iterativo de solução.

Uma segunda hipótese está relacionada ao tensor de anisotropia K^A , que é considerado constante em cada elemento, enquanto que o teor de umidade volumétrico q , a condutividade hidráulica K , a capacidade de retenção específica C e a taxa de extração de água pelas plantas S , são considerados variando linearmente em cada elemento e em um dado ponto no tempo. Por exemplo, o teor de umidade volumétrico é expandido em cada elemento como:

$$\mathbf{q}(x, y) = \sum_{n=1}^3 \mathbf{q}(x_n, z_n) \mathbf{f}(x, z) \quad \text{para } (x, y) \in \Omega_e \quad (3.34)$$

onde n representa os vértices do elemento e . A vantagem da interpolação linear ocorre por não ser necessária a integração numérica no cálculo dos coeficientes da eq. (3.12).

A integração da eq. (3.12) no tempo é realizada através da discretização do domínio do tempo em uma seqüência de intervalos finitos e da substituição das derivadas no tempo por diferenças finitas. Um esquema de diferenças finitas implícito é utilizado tanto em condições saturadas como em condições não-saturadas:

$$[F] \frac{\{\mathbf{q}\}_{j+1} - \{\mathbf{q}\}_j}{\Delta t_j} + [A]_{j+1} \{\mathbf{y}\}_{j+1} = \{Q\}_{j+1} - \{B\}_{j+1} - \{D\}_{j+1} \quad (3.35)$$

onde $j+1$ está relacionado ao nível de tempo atual onde a solução está sendo considerada, j se refere ao nível de tempo anterior, e $\Delta t_j = t_{j+1} - t_j$. A equação (3.12) representa o conjunto final de equações algébricas a serem resolvidas. Uma vez que, os coeficientes \mathbf{q}, A, B, D e Q são funções da variável dependente \mathbf{y} , este conjunto de equações é altamente não-linear.

Devido a esta não-linearidade, um processo iterativo deve ser empregado para se obter a solução da equação matricial global a cada novo nível de tempo. O processo de iteração é baseado no método de Picard. Para cada iteração, um sistema de equações algébricas linearizadas é primeiramente derivado da eq. (3.35) e, após a incorporação das condições de contorno, é resolvido através da eliminação de Gauss. Em seguida, os coeficientes na eq. (3.35) são recalculados utilizando a primeira solução, e as novas equações são resolvidas novamente. O processo iterativo continua até que seja alcançado um grau de convergência satisfatório (tolerância). A primeira estimativa (antes da primeira iteração) dos valores desconhecidos de carga de pressão \mathbf{y} são obtidos pela extrapolação de valores de carga de pressão \mathbf{y} em dois níveis de tempo anteriores.

Para resolver o processo de iteração do termo que representa a variação do teor de umidade volumétrico no tempo, o programa utiliza um método de conservação de massa proposto por *Celia et al.* (1990), onde o termo em questão é separado em duas partes:

$$[F] \frac{\{\mathbf{q}\}_{j+1} - \{\mathbf{q}\}_j}{\Delta t_j} = [F] \frac{\{\mathbf{q}\}_{j+1}^{k+1} - \{\mathbf{q}\}_{j+1}^k}{\Delta t_j} + [F] \frac{\{\mathbf{q}\}_{j+1}^k - \{\mathbf{q}\}_j}{\Delta t_j} \quad (3.36)$$

onde $k+1$ e k representam os níveis de iteração atual e anterior, respectivamente; $j+1$ e j representam os níveis de tempo atual e anterior, respectivamente. Como o segundo termo do lado direito da eq. (3.36) é conhecido previamente à iteração atual e o primeiro termo do lado direito da eq. (3.36) pode ser expresso em termos de carga de pressão, podendo-se escrever a eq. (3.36) da forma:

$$[F] \frac{\{\mathbf{q}\}_{j+1} - \{\mathbf{q}\}_j}{\Delta t_j} = [F][C]_{j+1} \frac{\{\mathbf{y}\}_{j+1}^{k+1} - \{\mathbf{y}\}_{j+1}^k}{\Delta t_j} + [F] \frac{\{\mathbf{q}\}_{j+1}^k - \{\mathbf{q}\}_j}{\Delta t_j} \quad (3.37)$$

onde $C_{nm} = \mathbf{d}_{nm} C_n$ e C_n representam os valores nodais de capacidade de retenção específica. O primeiro termo do lado direito da eq. (3.37) deve desaparecer ao final da iteração se a solução numérica convergir.

No fluxo de calor em meios porosos parcialmente saturados também é utilizado o método de Galerkin para desenvolver numericamente a eq. (3.26):

$$C(\mathbf{q}) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\mathbf{I}_{ij}(\mathbf{q}) \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) - C_w q_i \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (3.26)$$

onde a variável dependente, função carga de pressão $T(x, z, t)$, é aproximada pela função $\hat{T}(x, z, t)$:

$$\hat{T}(\Omega) = \sum_{n=1}^N T_n w_n(\Omega) \quad (3.38)$$

onde N é o número de nós e w_n são funções de ponderação que podem ser substituídas por funções de interpolação \mathbf{f}_n , como visto a seguir:

$$\hat{T}(x, z, t) = \sum_{n=1}^N T_n(t) \mathbf{f}_n(x, z) \quad (3.39)$$

Fazendo a substituição da variável T por uma função de aproximação \hat{T} , obtém-se a solução aproximada:

$$-C(\mathbf{q}) \frac{\partial \hat{T}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\mathbf{I}_{ij} \frac{\partial \hat{T}}{\partial x_j} \right) - C_w q_i \frac{\partial \hat{T}}{\partial x_i} = R_D \neq 0 \quad (3.40)$$

Aplicando o método de Galerkin, o resíduo é minimizado de acordo com a eq. (3.3):

$$\int_{\Omega} \left[-C(\mathbf{q}) \frac{\partial \hat{T}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\mathbf{I}_{ij} \frac{\partial \hat{T}}{\partial x_j} \right) - C_w q_i \frac{\partial \hat{T}}{\partial x_i} \right] \mathbf{f}_n d\Omega = 0 \quad (3.41)$$

Aplicando o teorema de Green a eq. (3.41), a fim de reduzir os termos de derivada de segunda ordem para termos de primeira ordem, temos:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \left(-C(\mathbf{q}) \frac{\partial \hat{T}}{\partial t} - C_w q_i \frac{\partial \hat{T}}{\partial x_i} \right) \mathbf{f}_n d\Omega + \\ & \int_{\Gamma} \mathbf{I}_{ij} \frac{\partial \hat{T}}{\partial x_j} n_i \mathbf{f}_n d\Gamma - \int_{\Omega} \mathbf{I}_{ij} \frac{\partial \hat{T}}{\partial x_j} \frac{\partial \mathbf{f}_n}{\partial x_i} d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (3.42)$$

Reduzindo-se a integral ao nível dos elementos e substituindo a solução trivial pela aproximada, obtemos a seguinte equação:

$$\begin{aligned} & -\sum_e \int_{\Omega_e} C(\mathbf{q}) \frac{\partial T}{\partial t} \mathbf{f}_n \mathbf{f}_m d\Omega - \sum_e \int_{\Omega_e} C_w q_i \frac{\partial \mathbf{f}_m}{\partial x_i} \mathbf{f}_n T_n d\Omega + \\ & \sum_e \int_{\Gamma_e} \mathbf{I}_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_j} n_i \mathbf{f}_n d\Gamma - \sum_e \int_{\Omega_e} \mathbf{I}_{ij} \frac{\partial \mathbf{f}_n}{\partial x_i} \frac{\partial \mathbf{f}_m}{\partial x_j} T_n d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (3.43)$$

onde Ω_e representa o domínio ocupado pelo elemento e e Γ_e ó segmento de contorno do elemento e . Na forma matricial a equação pode ser expressa da seguinte forma:

$$[F^T] \frac{d\{T\}}{dt} + [G^T] \{T\} = -\{Q^T\} \quad (3.44)$$

onde

$$F_{nm}^T = \mathbf{d}_{nm} \sum_e -C(\mathbf{q}) \int_{\Omega_e} \mathbf{f}_l \partial \mathbf{f}_n d\Omega = -\sum_e \frac{kA_e}{12} [3\bar{C}(\mathbf{q}) + C(\mathbf{q})] \mathbf{d}_{nm} \quad (3.45)$$

$$\begin{aligned} G_{mm}^T &= \sum_e \left[(-C_w q_i)_l \int_{\Omega_e} \mathbf{f}_l \partial \mathbf{f}_n \frac{\partial \mathbf{f}_m}{\partial x_i} d\Omega - (\mathbf{I}_{ij})_l \int_{\Omega_e} \mathbf{f}_l \frac{\partial \mathbf{f}_n}{\partial x_i} \frac{\partial \mathbf{f}_m}{\partial x_j} d\Omega \right] \\ &= \sum_e \left\{ -\frac{kb_m}{24} (3C_w \bar{q}_x + C_w q_{xn}) - \frac{kc_m}{24} (3C_w \bar{q}_z + C_w q_{zn}) - \right. \\ &\quad \left. \frac{k}{4A_e} [b_m b_n \bar{I}_{xx} + (b_m c_n + c_m b_n) \bar{I}_{xz} + c_m c_n \bar{I}_{zz}] \right\} \end{aligned} \quad (3.46)$$

onde as variáveis $\bar{C}(\mathbf{q})$ e $\bar{\mathbf{I}}$ representam os valores médios de condutividade hidráulica e condutividade térmica no elemento e .

3.3

Formulação numérica do problema de transporte de umidade e calor no solo

A formulação do fluxo de umidade em meios porosos é realizada através do método de elementos finitos como descrito no item 3.1, onde a eq (2.32) é desenvolvida como a seguir.

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} \frac{1}{\mathbf{r}_l} = \nabla [(K + D_y) \nabla \mathbf{y} + (D_{Ta} + D_{Tv}) \nabla T] + \nabla K \quad (2.32)$$

Rearranjando a eq. (3.5) para incluir os parâmetros de difusividade mássica e térmica presentes na eq. (2.32), temos:

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} \frac{1}{\mathbf{r}_l} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[(KK_{ij}^A + D_y \mathbf{d}_{ij}) \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial x_j} + (D_{Tv} + D_{Ta}) \mathbf{d}_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_j} + KK_{iz}^A \right] - S \quad (3.47)$$

ou de forma simplificada:

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} \frac{1}{\mathbf{r}_l} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(m_{ij}^y \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial x_j} + m_{ij}^T \frac{\partial T}{\partial x_j} + m^s \right) - S \quad (3.48)$$

onde:

$$m_{ij}^y = (KK_{ij}^A + D_y) \quad m_{ij}^T = (D_{Tv} + D_{Ta}) \quad m^s = KK_{iz}^A \quad (3.49)$$

Na eq. (3.48) assumi-se que as difusividades mássica e térmica são tensores isotrópicos atuando no meio poroso.

Aplicando-se o método de Galerkin juntamente ao teorema de Green, onde as variáveis dependentes, função carga de pressão $\mathbf{y}(x, z, t)$, é aproximada pela função $\hat{\mathbf{y}}(x, z, t)$ e função temperatura $T(x, z, t)$, é aproximada pela função $\hat{T}(x, z, t)$, representadas por:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{y}}(x, z, t) &= \sum_{n=1}^N \mathbf{y}_n(t) \mathbf{f}_n(x, z) \\ \hat{T}(x, z, t) &= \sum_{n=1}^N T_n(t) \mathbf{f}_n(x, z) \end{aligned} \quad (3.50)$$

onde N é o número de nós e \mathbf{f}_n são funções de interpolação. Assim, a eq. (3.48) pode ser expressa da seguinte forma:

$$\begin{aligned} & \sum_e \int_{\Omega_e} \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} \mathbf{f}_n d\Omega + \sum_e \int_{\Omega_e} m_{ij}^y \frac{\partial \mathbf{f}_n}{\partial x_i} \frac{\partial \mathbf{f}_m}{\partial x_j} \mathbf{y}_n d\Omega + \sum_e \int_{\Omega_e} m_{ij}^T \frac{\partial \mathbf{f}_n}{\partial x_i} \frac{\partial \mathbf{f}_m}{\partial x_j} T_n d\Omega \\ &= \sum_e \int_{\Gamma_e} \left(m_{ij}^y \frac{\partial \hat{\mathbf{y}}}{\partial x_j} + m_{ij}^T \frac{\partial \hat{T}}{\partial x_j} \right) n_i \mathbf{f}_n d\Gamma + \sum_e \int_{\Omega_e} \left(-m^s \frac{\partial \mathbf{f}_n}{\partial x_i} - S \mathbf{f}_n \right) d\Omega \end{aligned} \quad (3.51)$$

Integrando-se numericamente a eq. (3.51) obtém-se, na forma matricial, a seguinte equação:

$$[F] \frac{d\{\mathbf{q}\}}{dt} + [A]\{\mathbf{y}\} + [G]\{T\} = \{Q\} - \{B\} - \{D\} \quad (3.52)$$

onde:

$$\begin{aligned} A_{nm} &= \sum_e (K_l K_{ij}^A + D_y) \int_{\Omega_e} \mathbf{f}_l \frac{\partial \mathbf{f}_n}{\partial x_i} \frac{\partial \mathbf{f}_m}{\partial x_j} d\Omega \\ &= \sum_e \frac{k}{4A_e} \bar{K} \left[K_{xx}^A b_m b_n + K_{xz}^A (c_m b_n + b_m c_n) + \right. \\ &\quad \left. K_{zz}^A c_n c_m + \frac{D_y}{K} (b_m b_n + c_m c_n) \right] \end{aligned} \quad (3.53)$$

$$\begin{aligned} G_{nm} &= \sum_e (D_{Tv} + D_{Ta}) \int_{\Omega_e} \mathbf{f}_l \frac{\partial \mathbf{f}_n}{\partial x_i} \frac{\partial \mathbf{f}_m}{\partial x_j} d\Omega \\ &= \sum_e \frac{k}{4A_e} (D_{Tv} + D_{Ta}) [(b_m b_n + c_m c_n)] \end{aligned} \quad (3.54)$$

onde os vetores $\{Q\}$, $\{B\}$ e $\{D\}$ permanecem inalterados conforme programa original.

O fluxo de calor em meios porosos parcialmente saturados, descrito pela eq. (2.34), utiliza uma formulação em elementos finitos, semelhante a descritas no fluxo de umidade.

$$\frac{\partial S_h}{\partial t} = \nabla \left[I \nabla T + \mathbf{r}_l (LD_y + \mathbf{b}^{-1} g T D_{Ta}) \nabla \mathbf{y} - c_l (T - T_0) q_m \right] \quad (2.34)$$

Rearranjando a eq. (3.26) para inserir os efeitos dos gradientes de pressão no fluxo de calor, temos:

$$C(\mathbf{q}) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\mathbf{l}_{ij}(\mathbf{q}) \frac{\partial T}{\partial x_j} + \mathbf{r}_l (LD_y + \mathbf{b}^{-1} gTD_{Ta}) \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial x_j} \right] - C_w q_i \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (3.55)$$

Aplicando-se o método de Galerkin juntamente ao teorema de Green com funções de aproximação semelhantes às apresentadas no fluxo de umidade, obtemos:

$$\begin{aligned} & -\sum_e \int_{\Omega_e} C(\mathbf{q}) \frac{\partial T}{\partial t} \mathbf{f}_n \mathbf{f}_m d\Omega - \sum_e \int_{\Omega_e} C_w q_i \frac{\partial \mathbf{f}_m}{\partial x_i} \mathbf{f}_n T_n d\Omega + \\ & \sum_e \int_{\Gamma_e} \left[\mathbf{l}_{ij} \frac{\partial \hat{T}}{\partial x_j} + \mathbf{r}_l (LD_y + \mathbf{b}^{-1} gTD_{Ta}) \frac{\partial \hat{\mathbf{y}}}{\partial x_j} \right] n_i \mathbf{f}_n d\Gamma - \\ & \sum_e \int_{\Omega_e} \mathbf{r}_l (LD_y + \mathbf{b}^{-1} gTD_{Ta}) \frac{\partial \mathbf{f}_n}{\partial x_i} \frac{\partial \mathbf{f}_m}{\partial x_j} \mathbf{y}_n d\Omega - \\ & \sum_e \int_{\Omega_e} \mathbf{l}_{ij} \frac{\partial \mathbf{f}_n}{\partial x_i} \frac{\partial \mathbf{f}_m}{\partial x_j} T_n d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (3.56)$$

Integrando-se numericamente a eq. (3.55) obtém-se, na forma matricial, a seguinte equação:

$$[F^T] \frac{d\{T\}}{dt} + [A^T] \{\mathbf{y}\} + [G^T] \{T\} = -\{Q^T\} \quad (3.57)$$

onde:

$$\begin{aligned} A_{nm}^T &= \sum_e \mathbf{r}_l (LD_y + \mathbf{b}^{-1} gTD_{Ta}) \int_{\Omega_e} \mathbf{f}_l \frac{\partial \mathbf{f}_n}{\partial x_i} \frac{\partial \mathbf{f}_m}{\partial x_j} d\Omega \\ &= \sum_e \frac{k}{4A_e} \mathbf{r}_l \left[LD_y (b_m b_n + c_m c_n) + \mathbf{b}^{-1} gTD_{Ta} (b_m b_n + c_m c_n) \right] \end{aligned} \quad (3.58)$$

$$F_{nm}^T = \mathbf{d}_{nm} \sum_e -C(\mathbf{q}) \int_{\Omega_e} \mathbf{f}_l \partial \mathbf{f}_n d\Omega = -\sum_e \frac{kA_e}{12} [3\bar{C}(\mathbf{q}) + C(\mathbf{q})] \mathbf{d}_{nm} \quad (3.59)$$

$$\begin{aligned}
G_{mm}^T &= \sum_e \left[(-C_w q_i)_l \int_{\Omega_e} \mathbf{f}_l \partial \mathbf{f}_n \frac{\partial \mathbf{f}_m}{\partial x_i} d\Omega - (\mathbf{I}_{ij})_l \int_{\Omega_e} \mathbf{f}_l \frac{\partial \mathbf{f}_n}{\partial x_i} \frac{\partial \mathbf{f}_m}{\partial x_i} d\Omega \right] \\
&= \sum_e \left\{ -\frac{k b_m}{24} (3C_w \bar{q}_x + C_w q_{xn}) - \frac{k c_m}{24} (3C_w \bar{q}_z + C_w q_{zn}) - \right. \\
&\quad \left. \frac{k}{4A_e} [b_m b_n \bar{I}_{xx} + (b_m c_n + c_m b_n) \bar{I}_{xz} + c_m c_n \bar{I}_{zz}] \right\} \quad (3.60)
\end{aligned}$$

3.4

Implementações numéricas

Foram realizadas implementações numéricas nas equações (3.5) e (3.26), de fluxo de umidade isotérmico e fluxo de calor que o programa UNSATCHEM-2D (Simunek e Suarez, 1993) utiliza, a fim de inserir as influências dos gradientes de temperatura e pressão, respectivamente, e suas propriedades difusivas de acordo com o modelo adotado, resultando nas equações (3.47) e (3.55). As soluções das equações de fluxo de umidade e fluxo de calor são resolvidas numericamente da mesma maneira que o programa original (UNSATCHEM-2D) resolve suas equações, mudando apenas a quantidade de vetores independentes.

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} \frac{1}{\mathbf{r}_l} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[(KK_{ij}^A + D_y \mathbf{d}_{ij}) \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial x_j} + (D_{Tv} + D_{Ta}) \mathbf{d}_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_j} + KK_{iz}^A \right] - S \quad (3.47)$$

$$C(\mathbf{q}) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\mathbf{l}_{ij}(\mathbf{q}) \frac{\partial T}{\partial x_j} + \mathbf{r}_l (LD_y + \mathbf{b}^{-1} gTD_{Ta}) \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial x_j} \right] - C_w q_i \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (3.55)$$

No caso do fluxo de umidade a eq. (3.52) se resume a um sistema do tipo $[A]\{x\} = \{b\}$, onde $[A]$ é uma matriz quadrada que possui os tensores de condutividade hidráulica e difusividade mássica, $\{b\}$ é um vetor independente e $\{x\}$ é o vetor que contém os parâmetros desconhecidos da solução aproximada,

ou seja, o vetor solução igual a $\{\mathbf{y}\}$. Os valores do vetor de temperatura $\{T\}$, são valores conhecidos pelas condições iniciais e condições de contorno.

$$[F] \frac{d\{\mathbf{q}\}}{dt} + [A]\{\mathbf{y}\} + [G]\{T\} = \{Q\} - \{B\} - \{D\} \quad (3.52)$$

O mesmo acontece no fluxo de calor, onde o vetor solução $\{T\}$ utiliza valores de carga de pressão $\{\mathbf{y}\}$ calculados previamente na iteração. A matriz $[A^T]$ representa os valores de condutividade térmica.

$$[F^T] \frac{d\{T\}}{dt} + [A^T]\{\mathbf{y}\} + [G^T]\{T\} = -\{Q^T\} \quad (3.57)$$

A metodologia de solução do programa modificado é igual à utilizada no programa UNSATCHEM-2D (*Simunek e Suarez, 1993*), com os mesmos métodos para a resolução dos sistemas de equação, assim como para os processos iterativos existentes no fluxo e transporte de calor. Entretanto, por se tratar de um problema que envolve dois parâmetros que interagem e influenciam-se mutuamente, foi utilizado o acoplamento fraco, onde as equações são resolvidas através de uma solução “staggered” que utiliza soluções intermediárias do fluxo de calor como condições de contorno para soluções do fluxo de umidade e vice-versa, então interagindo até convergir. O acoplamento forte consiste na solução simultânea das equações de fluxo de umidade e fluxo de calor usando um método para obrigar restrições entre as variáveis do fluxo de umidade e fluxo de calor na interface (*van der Heide, 2000*).

O esquema da Figura 4 visa facilitar o entendimento do acoplamento entre os fluxos de umidade e calor feitos no programa.

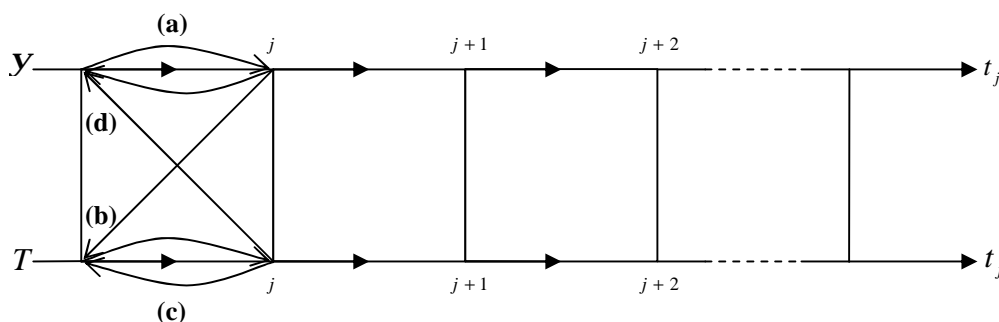


Figura 4 – Solução “staggered” utilizada para resolver o problema de acoplamento entre fluxo de umidade e fluxo de calor.

Na Figura 4, y e T são as variáveis carga de pressão e temperatura variando com o tempo t_j . O acoplamento se inicia com a iteração do fluxo de umidade (carga de pressão) no passo de tempo até a solução convergir (a). Em seguida, os valores de carga de pressão são utilizados na solução do fluxo de calor (b), que resolve sua equação até a solução igualmente convergir (c). A solução da equação do fluxo de calor é novamente utilizada para recalcular novos valores de carga de pressão (d). O processo iterativo continua até que, tanto os novos valores de carga de pressão e temperatura alcancem um grau de convergência satisfatório, ou seja, uma tolerância pré-estabelecida.

A Figura 5 mostra o fluxograma do programa modificado, apresentando o acoplamento entre o fluxo de umidade e fluxo de calor. No fluxograma $hNew$ é a variável que representa a carga de pressão e $Temp$ é a variável que representa a temperatura.

Como pré- e pós-processador do programa modificado foi utilizado o aplicativo MTool (Tecgraf/PUC-Rio), onde foram realizadas alterações em arquivos do tipo lua, a fim de permitir a inclusão de condições iniciais e condições de contorno do parâmetro temperatura. Uma vez realizadas tais alterações, podem-se utilizar as condições de contorno de temperatura independente das condições de fluxo existentes.

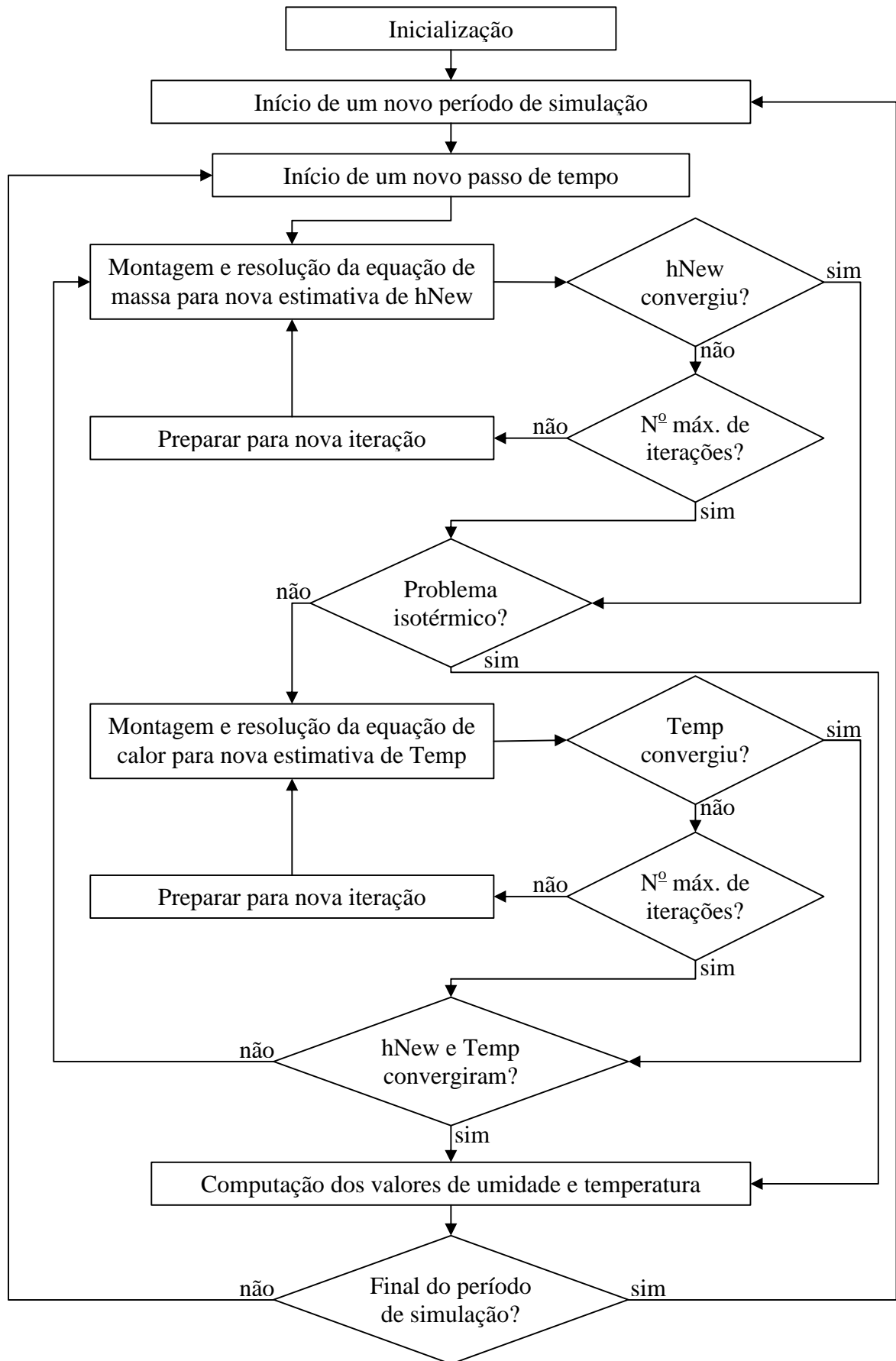


Figura 5 – Fluxograma do programa modificado.