

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Fluxo de água horizontal em meios porosos insaturados usando o método da integral fracionária e passo de tempo adaptativo

Amauri A. Freitas¹

PPGI, CCMN/NCE, UFRJ, Rio de Janeiro, RJ

Marcello G. Teixeira²

Instituto de Matemática, UFRJ, Rio de Janeiro, RJ

Daniel G. A. Vigo³

Instituto de Matemática, UFRJ, Rio de Janeiro, RJ

Carlos A. B. Vasconcellos⁴

Instituto Militar de Engenharia, IME, Rio de Janeiro, RJ

Resumo. No subsolo ocorrem inúmeros fenômenos físicos, como a recarga de aquíferos que servem como um reservatório de água e nutrientes para os ecossistemas terrestres. Prever o fluxo de água horizontal em meios insaturados tem sido um desafio para muitos ramos da ciência e da engenharia. A equação de governo associada a este fenômeno resulta de uma combinação da lei de Darcy e o princípio de conservação da massa, que assumindo algumas simplificações, resulta em uma equação diferencial parcial não-linear conhecido como Equação de Richards. Neste estudo, adotou-se a formulação da Equação de Richards baseada no teor de umidade. Geralmente, as soluções numéricas da equação representam corretamente o fluxo vertical, no entanto, o fluxo horizontal é negligenciado. Este artigo propõe um esquema numérico alternativo usando a integração fracionária com passo de tempo adaptativo e o método de diferenças finitas para a discretização espacial, combinado com iterações de Picard para a solução das equações não-lineares correspondentes. Um código computacional de aplicação do sistema proposto foi desenvolvido utilizando a linguagem de programação Scilab. O código computacional foi validado por comparação com uma solução semi-analítica de Philip. Foram realizadas simulações numéricas da difusão anômala em um tijolo de sílcio branco. Os resultados apresentam uma boa concordância com os dados experimentais disponíveis.

Palavras-chave. Meios porosos insaturados, Fluxo de água horizontal, Integral fracionária, Passo de tempo adaptativo, Técnica de Picard, Método de diferenças finitas.

¹amauri.freitas [at] ppgi.ufrj.br

²marcellogt [at] dcc.ufrj.br

³dgalfaro [at] dcc.ufrj.br

⁴vasconcellos [at] ime.eb.br

1 Introdução

A Equação de Richards é o modelo mais utilizado para prever o fenômeno do fluxo de água em meios porosos isotrópicos e homogêneos. Ela é baseada no balanço de massa e no fluxo dada pela lei de Darcy [1]. Existem diversas soluções numéricas e analíticas para esta equação em sua forma unidimensional tanto horizontal quanto vertical.

Philip [8] propôs uma solução clássica para esta equação, apresentando uma solução analítica em série de potências, amplamente utilizada nos meios computacionais. Ela garante bons resultados com uma pequena margem de erro usando um truncamento. Nielsen [6], Ferguson e Gardner [4], Pachepsky [7], El Abd [3] e outros, mostraram que para diversos meios porosos os resultados experimentais são consideravelmente diferentes da solução clássica, particularmente para grandes tempos de infiltração. Recentemente, Gerolymatou [5] mostrou que o mesmo fenômeno de difusão anômala ocorre em materiais de construção, tais como tijolos de silício branco.

Modelos baseados em cálculo fracionário têm mostrado bons resultados para problemas com difusividade anômala. Esses consideram que toda a infiltração ocorrida na simulação influencia em tempos posteriores. Pachepsky [7] apresentou um modelo generalizado usando derivada fracionária, obtendo bons resultados em diferentes tipos de solos, porém não demonstrou em seu trabalho. Gerolymatou [5] contestou a validade matemática do modelo de Pachepsky, propondo uma abordagem baseada em cálculo integral fracionário que chamou de modelo de difusão fracionária. No entanto, para simulações muito longas, ambos os modelos ainda são lentos e podem levar alguns dias para simular a infiltração em alguns tipos de meios porosos.

Neste trabalho apresenta-se um esquema numérico alternativo para a simulação de difusão anômala, inspirado no modelo de Gerolymatou [5], chamado aqui de Equação de Richards Integral Fracionária Modificada (ERIFM), que considera o uso de um esquema com passo de tempo adaptativo, garantindo resultados precisos, com baixo custo computacional e rápida convergência.

Dois exemplos de aplicação do ERIFM são apresentados, ambos considerando como meio poroso o tijolo de silício branco de El Abd [3], que apresenta o fenômeno de difusão anômala. No primeiro, é feita uma comparação entre o esquema de Gerolymatou [5], aqui chamado Equação de Richards Integral Fracionária (ERIF) e o esquema ERIFM, usando a mesma expressão para difusividade usado por [5]. No segundo é considerada a expressão para a difusividade dada por Sun [9] e é apresentada uma nova comparação entre ERIFM e modelo ERIF.

2 Equação de Richards

O fenômeno físico em discussão é o movimento da água na direção horizontal em um meio poroso homogêneo, negligenciando o efeito da gravidade [5]. Neste caso, a equação de governo é a equação diferencial parcial clássica conhecida como Equação de Richards, que descreve o fenômeno considerando o conteúdo volumétrico de água $\theta(x, t)$ como variável dependente do tempo t e a distância da frente de molhamento x . Assumindo que a porosidade do meio é constante e não se deforma no processo e que a transferência de

massa entre as fases gasosa e aquosa é negligenciada, a equação de equilíbrio de massa é dada por

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial x} \right), \quad (1)$$

onde $\theta(x, t)$ é definido no semi-eixo não negativo $x \geq 0$, $t \geq 0$ e D é a difusividade (2), dada em função do teor volumétrico de água no meio

$$D(\theta) = K(\theta) \frac{d\psi}{d\theta}, \quad (2)$$

sendo $K(\theta)$ a condutividade hidráulica do solo não saturado e ψ a carga devido à pressão.

A equação (1) é conhecida como a Equação de Richards com base no teor de umidade na direção horizontal e é frequentemente utilizada para descrever o processo de infiltração.

A condição inicial e as condições de contorno empregadas são, respectivamente,

$$\theta(x, 0) = \begin{cases} \theta_i, & \text{se } x = 0 \\ \theta_0, & \text{se } x > 0 \end{cases} \quad (3)$$

e

$$\theta(0, t) = \theta_i \quad \text{para } t > 0, \quad x = 0, \quad (4)$$

$$\theta(x, t) < \infty \quad \text{para } t > 0, \quad x \rightarrow \infty, \quad (5)$$

onde θ_0 e θ_i são constantes.

3 Solução numérica usando integral fracionária modificada

O esquema ERIFM desenvolvido neste trabalho é baseado no trabalho de Gerolymatou [5], porém modificado para permitir o uso de uma malha temporal não igualmente espaçada. Esta característica permite uma grande redução no tempo computacional gasto na aproximação da solução, especialmente em longas simulações.

Neste modelo a equação clássica de Richards (1) é reescrita na forma integral, porém substituindo a integral clássica por uma integral fracionária de ordem γ

$$\theta(t, x) = \theta(0, x) + \frac{1}{\Gamma(\gamma)} \int_0^t (t - u)^{\gamma-1} \frac{\partial}{\partial x} \left(D_\gamma(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) du, \quad (6)$$

onde $\theta(0, x)$ é a condição inicial, $0 < \gamma \leq 1$ é a ordem da integral fracionada, $D_\gamma(\theta)$ é a difusividade fracionária dependente de $\theta(t, x)$ e Γ é a função Gama.

Considerando uma malha não necessariamente equidistante no tempo, com os nós $t_j (j = 0, 1, \dots, n + 1)$ e $h_j = t_j - t_{j-1}$, a solução numérica da equação (6) é dada por

$$\theta_{n+1}(x) = \theta_0(x) + \frac{1}{\Gamma(\gamma)} \left(\sum_{j=0}^n a_{j,n+1} F(t_j, x, \theta_j(x)) + a_{n+1,n+1} F(t_{n+1}, x, \theta_{n+1}(x)) \right), \quad (7)$$

onde a função $F(t, x, \theta)$ representa a discretização em diferenças finitas da parte espacial da equação (1). Para se considerar uma malha não igualmente espaçada no tempo, determinou-se as expressões para os pesos a considerando o tamanho do espaçamento como $t_n - t_{n-1}$ em cada passo de tempo ao invés de h como no trabalho de referência [5], obtendo-se as expressões:

$$a_{0,n+1} = \frac{1}{h_1} \left\{ \frac{(t_{n+1} - t_1)^{\gamma+1} - (t_{n+1} - t_0)^\gamma [(t_{n+1} - t_1) - \gamma h_1]}{\gamma(\gamma + 1)} \right\}, \quad (8)$$

$$a_{n+1,n+1} = \frac{(h_{n+1})^\gamma}{\gamma(\gamma + 1)}, \quad (9)$$

e para $j = 1, 2, \dots, n$

$$a_{j,n+1} = \frac{1}{h_{j+1}} \left\{ \frac{(t_{n+1} - t_{j+1})^{\gamma+1} - (t_{n+1} - t_j)^\gamma [(t_{n+1} - t_{j+1}) - \gamma h_{j+1}]}{\gamma(\gamma + 1)} \right\} + \frac{1}{h_j} \left\{ \frac{(t_{n+1} - t_{j-1})^{\gamma+1} - (t_{n+1} - t_j)^\gamma [(t_{n+1} - t_{j-1}) + \gamma h_j]}{\gamma(\gamma + 1)} \right\}. \quad (10)$$

No primeiro passo utiliza-se como aproximação inicial a própria condição inicial do problema, sendo $\theta_i = 1$ e $\theta_0 = 0$; em todos os outros passos usa-se como aproximação inicial a solução obtida no passo anterior.

Para a solução do sistema não-linear utiliza-se a técnica de Picard [8]. Neste trabalho considerou-se uma tolerância de $e \leq 0,0001$.

Os passos de tempo utilizados no método adaptativo no início da simulação é de 30 s, sendo acrescido seu valor em 5 s, sempre que o número de iterações para cada solução for menor que 5, chegando a usar um passos de tempo de tamanho 2000 s no fim da simulação.

4 Resultados e discussões

A fim de determinar o valor apropriado de γ para cada meio poroso foi efetuada, uma regressão linear para diferentes dados experimentais que consistem no tempo de infiltração t e a respectiva distância da frente de molhamento x no mesmo meio poroso.

Usou-se a constante de Boltzmann reescrita na forma da equação reduzida da reta como indicado por Pachepsky [7]:

$$\xi = \frac{x}{t^{\frac{\gamma}{2}}} \Leftrightarrow x = \xi \times t^{\frac{\gamma}{2}} \Leftrightarrow \ln(x) = \ln(\xi) + \frac{\gamma}{2} \ln(t). \quad (11)$$

Nas subseções seguintes são apresentados os resultados numéricos obtidos ao se utilizar os algoritmos ERIF e ERIFM (7). Para a difusividade fracionária D_γ são utilizadas as expressões (12) e (13). Os resultados numéricos são comparados com os dados experimentais do tijolo de silício branco de El Abd [3].

Em todas as simulações é considerado um tijolo submetido a molhamento na horizontal, a gravidade foi negligenciada, as paredes superiores e inferiores foram isoladas, o canto esquerdo foi submetido à molhagem e o canto direito estava livre. O hardware utilizado possui processador AMD FX-6100, 8GB de memória ram, o software para simulação utilizado foi o SCILAB 5.4.1.

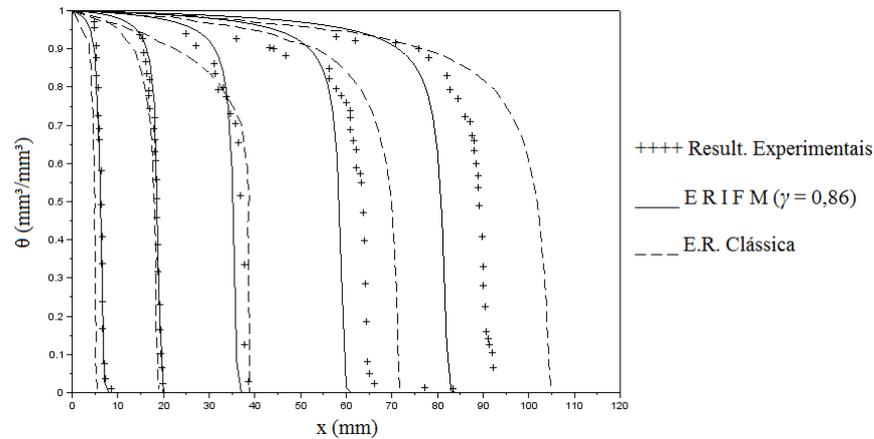


Figura 1: Soluções da equação (6) para os tempos 450 s, 5370 s, 24210 s, 797704 s, 170430 s e a difusividade $D_\gamma(\theta)$ dada pela equação (12).

4.1 Caso 1

Neste primeiro caso, considera-se um tijolo de silício branco que apresenta um fenômeno de difusão anômala [3]. A expressão usada para a difusividade fracionária é dada por Gerolymatou [5]

$$D_\gamma(\theta) = C_0 \left(1 - A \frac{\theta}{\theta_s}\right)^{2-\frac{4}{\gamma}} \left[\frac{1-A}{A} \log \left(1 - A \frac{\theta}{\theta_s}\right) + \frac{\theta}{\theta_s}\right], \quad (12)$$

onde $C_0 = 5 \times 10^{-4}$ (ver referência [3] citado por Gerolymatou [5]), $A = 0,97$, $\theta_s = 1$ e $\gamma = 0,86$, este último obtido por regressão linear a partir dos dados de infiltração do tijolo.

Na Figura 1, mostra-se a solução numérica usando ERIFM para cinco tempos diferentes de simulação, juntamente com os resultados correspondentes da solução clássica e os dados experimentais de El Abd [3]. É possível observar bons resultados numéricos nos tempos de infiltração iniciais.

4.2 Caso 2

Neste segundo caso considera-se o mesmo tijolo de silício branco [3]. Apresenta-se aqui as soluções clássica, modificada ERIFM e os dados experimentais, utilizando a expressão para a difusividade fracionária dada em Sun [9]

$$D_\gamma(\theta) = C_0 \times \theta^n \quad (13)$$

com $C_0 = 0,93$, $n = 8,2$ e $\gamma = 0,86$, sendo os valores de C_0 e n ajustados considerando os dois resultados experimentais iniciais de 450 s e 5370 s e γ obtido por regressão linear para os dados experimentais do tijolo.

A Figura 2 mostra a solução numérica usando ERIFM para cinco tempos diferentes de simulação e compara com a solução clássica e os dados experimentais de El Abd [3].

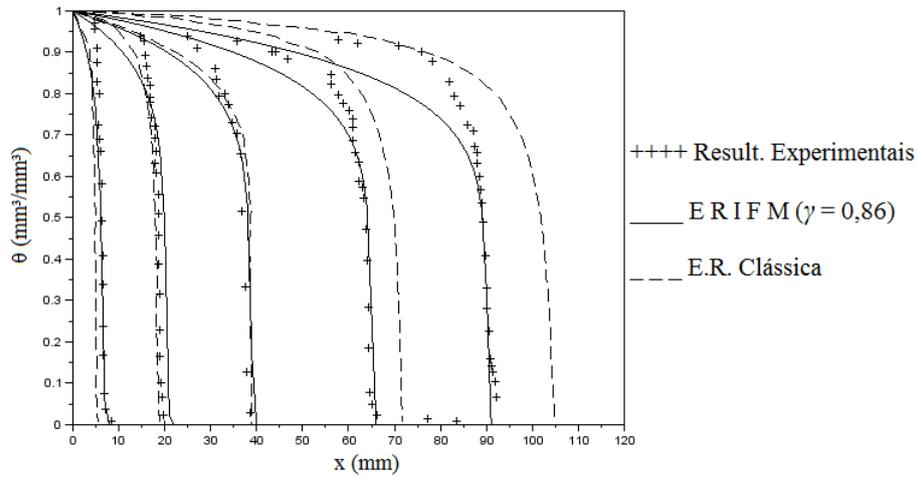


Figura 2: Soluções da equação (6) para os tempos 450 s, 5370 s, 24210 s, 79770 s, 170430 s e $D_\gamma(\theta)$ da equação (13).

4.3 Análise Numérica de Erros

Nesta subseção apresenta-se uma análise de convergência e a raiz do quadrado das médias dos erros (RMSE) das simulações em comparação com os dados experimentais do tijolo de silício branco de El Abd [3]. A Tabela 1 mostra os resultados de tempo de convergência e RMSE para os tempos de infiltração 450s, 5370s e 24210s usando os dois modelos numéricos ERIFM e ERIF, e usando a difusividade (13) dada por Sun [9] e a difusividade (12) dada por Gerolymatou [5].

Métodos \ Tempos	Tempos de execução (s)			RMSE (mm)		
	450s	5370s	24210s	450s	5370s	24210s
ERIFM Dif. (13)	0,936	6,701	26,307	0,030	0,034	0,036
ERIFM Dif. (12)	24,264	169,715	608,654	0,031	0,027	0,076
ERIF Dif. (13)	2,715	158,521	3393,248	0,033	0,048	0,058
ERIF Dif. (12)	39,768	2515,876	49458,009	0,025	0,023	0,062

Tabela 1: Resultados de tempo de convergência e RMSE para os tempos 450 s, 5370 s e 24210 s.

É notório na Tabela 1 que o tempo de convergência é menor em todos os casos em que foi utilizado o esquema modificado ERIFM com o passo do tempo adaptativo.

5 Conclusões

A principal contribuição desse trabalho consiste no desenvolvimento de uma técnica numérica que considera o passo de tempo adaptativo na solução do problema de infiltração horizontal com difusividade anômala.

O método aplicado ERIFM apresentou resultados acurados em tempos longos de si-

mulação, com baixo custo computacional, onde os resultados clássicos têm erros mais elevados.

Com o algoritmo modificado ERIFM foi possível reduzir o tempo de processamento a um tempo total de $1,96 \times 10^2 s$ ou $3,27 min$, enquanto que o Algoritmo ERIF de Gerolymatou [5], com passos de tempo constantes e iguais a $30 s$, consumiu mais do que $60 h$.

A técnica do passo de tempo adaptativo é capaz de acelerar o processo de simulação da infiltração horizontal. Comparado com o método ERIF de Gerolymatou [5], o método ERIFM chega a ser até 900% mais rápido, mostrando soluções numéricas em menos de 4 minutos para um mesmo problema onde o ERIF chegou a consumir um tempo computacional de aproximadamente dois dias e meio.

Referências

- [1] H. Darcy, Les Fontaines Publiques de la Ville de Dijon. *Victor Dalmont*, Paris. 647 p, 1856.
- [2] K. Diethelm, A. Freed, *On the Solution of Nonlinear Fractional-Order Differential Equations Used in the Modeling of Viscoplasticity*. Scientific Computing in Chemical Engineering II, Ed. Springer Berlin Heidelberg, pp. 217-224, 1999.
- [3] A. El Abd, J. Milczarek, Neutron radiography study of water absorption in porous building materials: anomalous diffusion analysis, *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 37, pp. 2305-2313, 2004.
- [4] H. Ferguson, W. Gardner, Diffusion theory applied to water flow data obtained using gamma ray absorption, *Soil Science Society of America Journal*, vol. 27, n. 3, pp. 243-246, 1963.
- [5] E. Gerolymatou, I. Vardoulakis, R. Hilfer, Modelling infiltration by means of a non-linear fractional diffusion model. *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 39, pp. 4104-4110, 2006.
- [6] D. Nielsen, J. Biggar, J. Davidson, Experimental consideration of diffusion analysis in unsaturated flow problem. *Soil Science Society of America Proceedings*, vol. 26, n. 2, pp. 107-111, 1962.
- [7] Y. Pachepsky, D. Timlin, W. Rawls, Generalized Richards equation to simulate water transport in unsaturated soils. *Journal of Hydrology*, vol. 272, pp. 3-13, 2003.
- [8] J. Philip, Numerical solution of equations of the diffusion type with diffusivity concentration-dependent, *Transactions of the Faraday Society*, vol. 51, pp. 885-892, 1955.
- [9] H. Sun, M. Meerschaert, Y. Zhang, J. Zhu, W. Chen, A fractal Richards equation to capture the non-Boltzmann scaling of water transport in unsaturated media. *Advances in Water Resources*, vol. 52, pp. 292-295, 2013.