

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

O método DFSANE aplicado em uma simulação numérica da infiltração da água em zona subsaturada

Adriana da Rocha Silva¹

Instituto Politécnico, IPRJ, UERJ, Nova Friburgo, RJ

Breno Tiago de Souza Mota²

Instituto Politécnico, IPRJ, UERJ, Nova Friburgo, RJ

Luiz Nélio H. Guedes de Oliveira³

Instituto Politécnico, IPRJ, UERJ, Nova Friburgo, RJ

Stella Oggioni da Fonseca⁴

Instituto Politécnico, IPRJ, UERJ, Nova Friburgo, RJ

Gilza Santos Simão Ferreira⁵

Instituto Politécnico, IPRJ, UERJ, Nova Friburgo, RJ

Fábio Silva de Souza⁶

Instituto Politécnico, IPRJ, UERJ, Nova Friburgo, RJ

Resumo A simulação numérica do escoamento de água no solo é de grande importância para entender e melhorar muitos processos de drenagem e infiltração. Neste trabalho, a abordagem numérica para a simulação do escoamento água-ar em uma zona subsaturada foi focada na resolução numérica da equação de Richards. Para resolver o sistema não linear decorrente da discretização da equação que modela o problema, foi utilizado um método numérico de busca direta que não utiliza derivadas, denominado DFSANE.

Palavras-chave. Equação de Richards, Meios Porosos, DFSANE, Zona Subsaturada.

1 Introdução

O escoamento de fluidos em meios porosos é um complexo fenômeno que vem sendo analisado há anos [3], sendo de grande importância para diversas áreas da engenharia e ciência, por exemplo, hidrologia de águas subterrâneas, engenharia de reservatórios, ciência dos solos, mecânica dos solos e engenharia química [1].

¹arsilva@iprj.uerj.br

²brenotsm1@gmail.com

³neliohenderson@gmail.com

⁴sfonseca@iprj.uerj.br

⁵gilzasimao@hotmail.com

⁶fsilvadesouza@gmail.com

Em uma formação subterrânea, a água, ao infiltrar-se através da superfície do solo, move-se para baixo preenchendo os interstícios das formações rochosas que se encontram acima do rochedo impermeável, presentes nas zonas saturadas e subsaturadas.

Localizada na zona subsaturada, a zona vadosa abriga diversos fenômenos físicos, tais como infiltração e evaporação. Diante deste contexto, a simulação numérica do escoamento de água em zona subsaturada permite compreender e melhorar processos de drenagem e infiltração, sendo possível, por exemplo, evitar futuras erosões causadas por danificação e enfraquecimento do solo.

Neste trabalho, um simulador computacional foi desenvolvido para possibilitar uma descrição acurada do fluxo de água em zonas subsaturadas. Foi efetuada uma modelagem para a simulação do escoamento de água em uma região inicialmente subsaturada, que, com o passar do tempo, pode apresentar trechos saturados como consequência da infiltração de água. Em particular, é de interesse obter simulações de infiltrações de frentes molhantes (agudas) na zona vadosa.

2 Modelagem do Escoamento

A equação de Richards [7] é uma equação diferencial parcial (EDP) não linear baseada na equação de conservação de massa da fase água e na velocidade de Darcy [6] para fluidos imiscíveis:

$$\frac{\partial(\phi S_w \rho_w)}{\partial t} - \nabla \cdot \left(\frac{k k_{r_w} \rho_w}{\mu_w} (\nabla p_w + \gamma_w z) \right) = 0 \quad (1)$$

em que k é a permeabilidade, ρ_w , ϕ , S_w , p_w , k_{r_w} , μ_w denotam, respectivamente, a densidade, porosidade, saturação, pressão, permeabilidade relativa e viscosidade da água. A aceleração da gravidade local é dada por g , $\gamma_w = \rho g$, t expressa o tempo e z é a direção vertical (de um sistema de eixos Cartesianos ortogonais) apontando de baixo para cima.

Considerando um escoamento bifásico, em que o ar compartilha o mesmo espaço poroso que a água, as pressões das fases são manométricas, definidas como a diferença entre a pressão absoluta do fluido e a pressão atmosférica (p_{atm}). Assim, $p_w = [p_w]_{abs} - p_{atm}$ e $p_{nw} = [p_{nw}]_{abs} - p_{atm}$, em que p_{nw} é a pressão do ar, $[p_w]_{abs}$ e $[p_{nw}]_{abs}$ são, respectivamente, as pressões absolutas da água e do ar.

O modelo de Richards utiliza as seguintes hipótese básicas: a água é um fluido incompressível, isto é, ρ_w é constante; a porosidade não depende das pressões das fases; a saturação e a permeabilidade relativa são funções (no máximo) da pressão; e, para todo tempo, a pressão manométrica do ar é sempre zero, ou seja, $[p_{nw}]_{abs} = p_{atm}$.

A permeabilidade é dada pela equação de Kozeny-Carman Generalizada a Três Parâmetros (KCGTP) [4]. Os valores dos três parâmetros, $\xi^2 = 2$ darcy, $\zeta = 1,5$ e $\eta = 0,02$, são baseados em valores típicos para meios porosos arenosos, previamente considerados na referência [4].

Segundo Bear [1], a pressão capilar (p_c) é a diferença entre as pressões das fases, assim, $p_c = p_{nw} - p_w$. Sob a hipótese de Richards, a pressão capilar é dada por $p_c = -p_w$, como $p_w > 0$, em uma região subsaturada a pressão manométrica da água assume valores

negativos. Na prática, a equação de Richards é também empregada para descrever o escoamento de água em uma região saturada.

Considerando as hipóteses do modelo de Richards, a Equação (1) torna-se:

$$\phi \frac{\partial S_w(p_w)}{\partial t} - \nabla \cdot \left(\frac{k k_{r_w}(p_w)}{\mu_w} (\nabla p_w + \gamma \nabla z) \right) = 0 \quad (2)$$

As condições de contorno para a Equação (2) são: a pressão da água é prescrita na fronteira do domínio poroso que atende a condição de contorno de Dirichlet, denotada por $\partial\Omega^D$, e é conhecida a velocidade da água ortogonal a fronteira que atende a condição de contorno de Neumann, nomeada por $\partial\Omega^N$. Além disso, a pressão da água está efetivamente definida e é conhecida no tempo inicial, sendo esta a condição inicial do problema analisado. A pressão da água de entrada é dada por: $P_E(z) = -(b + z/a) \times 10^{-4}$ atm. Os valores de $a = 1$ cm/atm e $b = 99$ atm, foram escolhidos com o objetivo de proporcionar uma distribuição de pressão apropriada no contexto do problema teste elaborado neste trabalho. Na saída da zona vadosa, a pressão da água é constante igual a $P_s(z) = -0,06$ atm.

Desconsiderando os fenômenos de histereses, foram usados os modelos clássicos propostos por Brooks e Corey [2]. Se $p_c \geq p_b$, em que a pressão de borbulhamento (p_b) é aproximadamente o menor valor de $p_c > 0$, a saturação da água é dada por: $S_w(p_w) = S_{w0} + \left(\frac{p_b}{p_c}\right)^\lambda (1 - S_{w0})$ e a permeabilidade relativa do fluido molhante é $k_{r_w}(p_w) = \left(\frac{p_b}{p_c}\right)^{2+3\lambda}$. O parâmetro λ é o chamado índice de distribuição do tamanho dos poros, uma propriedade do meio poroso.

Se $p_c < p_b$, a saturação e a permeabilidade relativa da água são, respectivamente, $S_w(p_w) = 1 - S_{nw0}$ e $k_{r_w}(p_w) = k_{r_{sat}}$. S_{nw0} é a saturação irreduzível da fase ar e $0 < k_{r_{sat}} \leq 1$ é o maior valor que pode ser alcançado pela permeabilidade relativa da água, típico de um meio poroso saturado.

Os valores relativos ao modelo de Brooks e Corey, $p_b = -0,009$ atm, $\lambda = 1,0$ e $S_{w0} = 0,2$, são valores tipicamente usados na literatura, que são semelhantes aqueles considerados pelos próprios autores (Brooks e Corey) [2].

3 Metodologia

A Equação (2) foi discretizada usando diferenças finitas [8] em cada nível de tempo $t_n = n\Delta_t$, com $\Delta_t = 50$ s. Para cada nó, com coordenada (x_i, z_i) , tem-se uma EDP dada por:

$$\phi_{i,j} \frac{\partial S(p)}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{k k_r(p)}{\mu} \frac{\partial P}{\partial x} \right]_{i,j} - \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{k k_r(p)}{\mu} \left(\frac{\partial P}{\partial z} + \gamma \right) \right]_{i,j} = 0, \quad (3)$$

em que i, j representam a face do bloco $\Omega_{i,j}$.

Após discretização e simplificações, obtém-se:

$$\phi_{i,j} \frac{\partial S(p)}{\partial t} - \frac{1}{\Delta^2 x} \left[\lambda_{i+\frac{1}{2},j} (P_{i+1,j} - P_{i,j}) - \lambda_{i-\frac{1}{2},j} (P_{i,j} - P_{i-1,j}) \right] - \frac{1}{\Delta z} \left[\lambda_{(i,j+\frac{1}{2})} \left(\frac{P_{i,j+1} - P_{i,j}}{\Delta z} + \gamma_{i,j-\frac{1}{2}} \right) - \lambda_{i,j+\frac{1}{2}} \left(\frac{P_{i,j} - P_{i,j-i}}{\Delta z} + \gamma_{i,j-\frac{1}{2}} \right) \right] = 0 \quad (4)$$

O valor de λ em um ponto médio $i+1/2$, por exemplo, é calculado pela média harmônica dos valores λ nos pontos vizinhos $i+1$ e $i-1$. Na Equação (4), o primeiro termo é discretizado no tempo por um esquema semi-implícito. Calcula-se as diferenças de pressões, a mobilidade da água (λ) e $\gamma = \rho g$ no tempo $n+1$. A Equação (4) toma a forma não linear na pressão mostrada na Equação (5).

$$\phi_{i,j} \frac{S_{i,j}^{n+1} - S_{i,j}^n}{\Delta t} - \frac{1}{\Delta^2 x} \left[\lambda_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} (P_{i+1,j}^{n+1} - P_{i,j}^{n+1}) - \lambda_{i-\frac{1}{2},j}^{n+1} (P_{i,j}^{n+1} - P_{i-1,j}^{n+1}) \right] - \frac{1}{\Delta z} \left[\lambda_{(i,j+\frac{1}{2})}^{n+1} \left(\frac{P_{i,j+1}^{n+1} - P_{i,j}^{n+1}}{\Delta z} + \gamma_{i,j-\frac{1}{2}} \right) - \lambda_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} \left(\frac{P_{i,j}^{n+1} - P_{i,j-i}^{n+1}}{\Delta z} + \gamma_{i,j-\frac{1}{2}} \right) \right] = 0 \quad (5)$$

para todo $i = 1, \dots, N_x$ e $j = 1, \dots, N_z$, onde N_x e N_z são as quantidades de nós em cada direção.

O meio poroso considerado possui domínio retangular tridimensional. O escoamento bifásico ocorre essencialmente no plano xz . Mais precisamente, o escoamento imiscível será tratado como bidimensional e estará associado as direções x e z apenas, de modo que: $S_w = S_w(x, z, t)$ e $p = P(x, z, t)$. No exemplo simulado no presente trabalho, considerou-se que o domínio se encontra na escala laboratorial, com lados de comprimento $L_x = L_z = 60 \text{ cm}$ e espessura desprezada. Supõe-se que a zona vadosa é estratificada, apresentando três camadas horizontais de diferentes porosidades (ϕ) que variam de forma aleatória e uniforme. Na camada superior ($40 \leq z < 60$), $\phi \in [0, 4, 0, 5]$. Na camada intermediária ($20 \leq z < 40$), $\phi \in [0, 3, 0, 4]$. Finalmente, na camada inferior ($0 < z < 20$), $\phi \in [0, 2, 0, 3]$.

Os resultados são obtidos a partir da resolução de um sistema não linear de grande porte para cada passo de tempo. O sistema resultante da discretização em diferenças finitas centradas da forma mista da equação de Richards, é resolvido usando o método DFSANE proposto por La Cruz, Martínez e Raydan [5], o qual é um método espectral totalmente livre de derivadas. Neste método, não há necessidade de calcular a matriz jacobiana associada ao sistema não linear, sendo esta uma grande vantagem desta metodologia. É importante mencionar, ainda, que este método espectral requer, principalmente, o armazenamento de dois vetores de tamanho $N = 2 \times N_x \times N_z$, o vetor das variáveis e o vetor de busca $F(x)$. O DFSANE foi implementado utilizando um código computacional feito em linguagem de programação FORTRAN 77.

4 Resultados

No problema teste deste trabalho, considera-se o escoamento de água em uma zona vadosa heterogênea bidimensional que no princípio estava saturada com ar. O topo e a base do meio poroso são considerados impermeáveis.

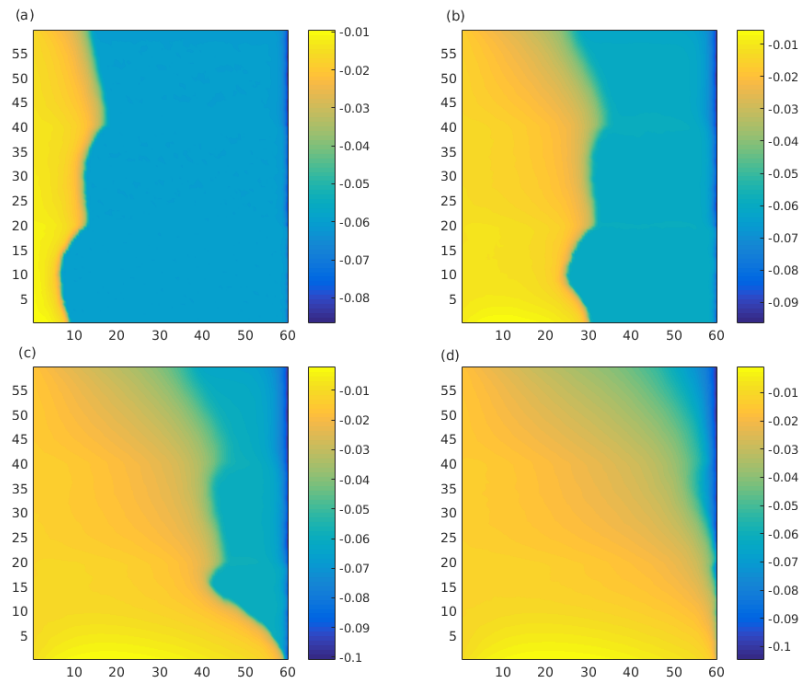


Figura 1: Distribuição de pressão da água no meio poroso com relação ao tempo, após (a) 5, (b) 35, (c) 100 e (d) 300 dias

Apesar dos valores da pressão de entrada (P_E) serem maiores, quando z tende para o nível zero (referente à base do meio poroso), inicialmente, a distribuição de pressão tem seus maiores valores nas camadas superiores, próximo ao lado adjacente ao rio.

A Figura 1 mostra a evolução da distribuição de pressão da água com relação ao tempo. Pode-se notar que, principalmente a partir da Figuras 1-c e 1-d, a pressão da água na base da zona inicialmente subsaturada tende a aumentar com o passar do tempo. Para tempos relativamente grandes, observa-se que a região de menor pressão concentra-se, essencialmente, no canto superior direito do meio poroso.

A Figura 2 mostra etapas da evolução da saturação da água do rio no meio poroso. Nota-se que, com o passar do tempo, a água do rio tende a ocupar em maior quantidade a base da zona antes subsaturada. No entanto, uma fração significativa de água intrusiva escoou em direção ao canto superior direito do domínio poroso, permeando grande parte da zona de aeração adjacente ao lado esquerdo deste meio retangular.

Nos gráficos da Figura 3, são apresentadas as curvas de variação da saturação e pressão da água para x fixado em 10 cm com relação as diferentes alturas (z) do meio poroso.

Nos primeiros dias a água tende a entrar nas camadas superiores, portanto a pressão é maior nessas camadas. Com o passar do tempo, por efeito da gravidade e em razão da condição de contorno na fronteira vertical esquerda do meio poroso, a pressão torna-se maior nas camadas inferiores.

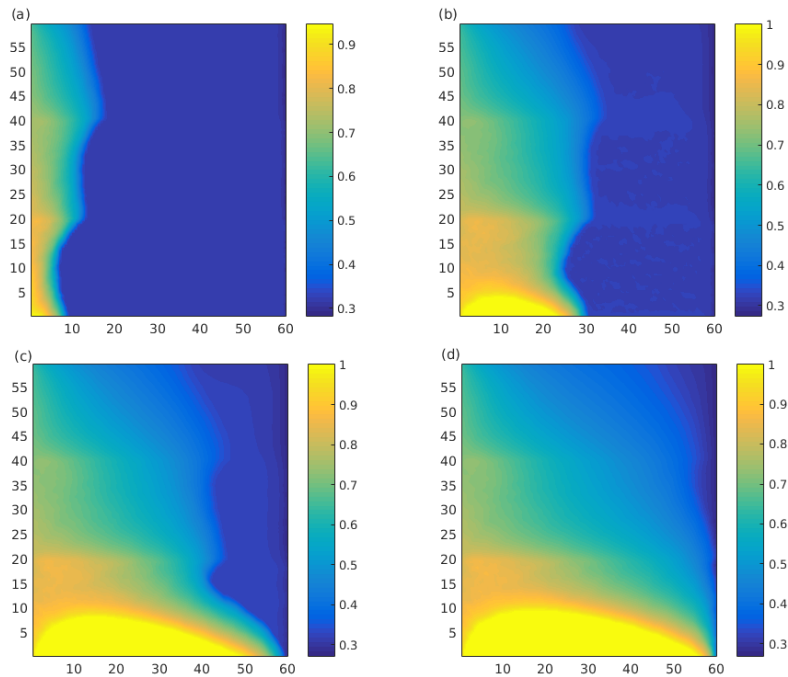


Figura 2: Saturação da água na zona vadosa para os seguintes tempos: (a) 5, (b) 35, (c) 100 e (d) 300 dias

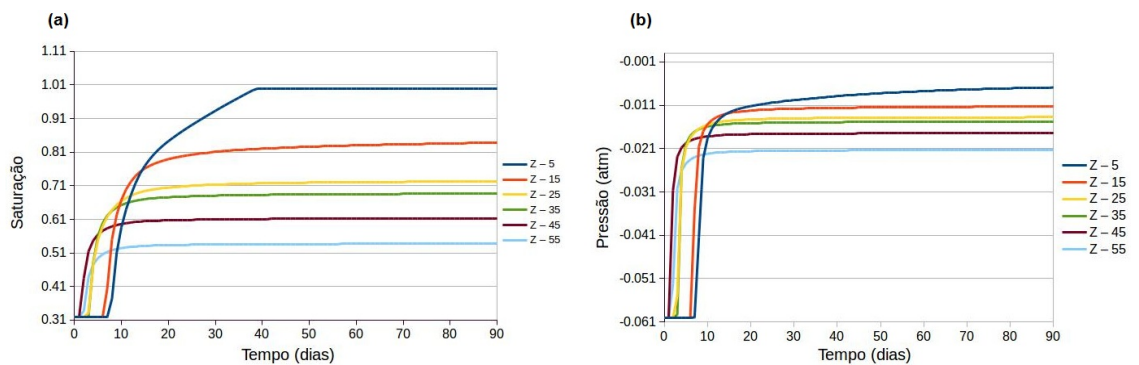


Figura 3: Curvas da variação da (a) saturação e da (b) pressão ao longo do tempo, para $x = 10$ fixado, em relação as diferentes alturas (z) do meio poroso.

5 Conclusões

Neste trabalho foi estudada a modelagem matemática e desenvolveu-se um simulador numérico para o escoamento bifásico em um meio poroso heterogêneo, o qual considerou-se ser uma zona vadosa retangular com fluxo de água, essencialmente, bidimensional.

A abordagem numérica para a simulação do escoamento água-ar foi focada na solução da equação de Richards. O sistema não linear gerado pela discretização da Equação (2)

foi resolvido pela primeira vez empregando-se o chamado método DFSANE. Este método é totalmente livre de derivadas, o que diminui grandemente o esforço computacional, já que não calcula e também não armazena a matriz Jacobiana resultante da discretização da EDP não linear, e nem tão pouco resolve sistemas lineares associados a tal matriz.

Com o uso do código desenvolvido neste trabalho foram realizadas simulações numéricas, cujos resultados permitiram visualizar e analisar as características físicas e geométricas das distribuições de pressão e saturação da água intrusiva de um rio adjacente a uma zona porosa heterogênea, estratificada e inicialmente aerada. Tais simulações foram realizadas levando-se em consideração longos períodos de intrusão de água de um rio em uma zona vadosa bidimensional, chegando-se a simular até dois anos de intrusão de água, o que comprovou a robustez do conjunto da metodologia numérica.

Agradecimentos

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

Referências

- [1] J. Bear. *Dynamics of fluids in porous media, 1a. edição*. American Elsevier Publishing Company, Nova Iorque, 1972.
- [2] R. Brooks e T. Corey. Hydraulic properties of porous media. *Hydrology Papers, Colorado State University*, 1964. DOI: 10.13031/2013.40684.
- [3] H. B. Crichlow. *Modern reservoir engineering: a simulation approach 1a. edição*. Englewood Cliffs: Prentice-Hall; Nova Jersey, 1977.
- [4] N. Henderson, J. C. Brêttas e W. F. Sacco. A three-parameter Kozeny–Carman generalized equation for fractal porous media. *Chemical engineering science*, 2010. DOI: 10.1016/j.ces.2010.04.006.
- [5] W. La Cruz, J. Martínez e M. Raydan. Spectral residual method without gradient information for solving large-scale nonlinear systems of equations. *Mathematics of Computation*, 2006. DOI: 10.1090/S0025-5718-06-01840-0.
- [6] M. Muskat e M. W. Meres. The flow of heterogeneous fluids through porous media. *physics*, 1936. DOI.org/10.1063/1.1710292
- [7] L. A. Richards. Capillary conduction of liquids through porous mediums. *physics*, 1931. DOI:10.1063/1.1745010.
- [8] G. D. Smith. *Numerical solution of partial differential equations: finite difference methods, 3a. edição*. Oxford University Press, U.S.A., 1986.