

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
FACULDADE DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL
E AMBIENTAL

MÉTODO DISCRETO IOTA-DELTA:
UMA NOVA ABORDAGEM NUMÉRICA PARA O
PROBLEMA DE FLUXO NÃO SATURADO EM MEIOS
POROSOS E FRATURADOS.

ALUNO: LUCAS PARREIRA DE FARIA BORGES

ORIENTADOR: PROF. ANDRÉ LUÍS BRASIL
CAVALCANTE, D.Sc.

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO EM GEOTECNIA

PUBLICAÇÃO: G.DM 274/2016
BRASÍLIA / DF: AGOSTO/2016

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
FACULDADE DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL
E AMBIENTAL

MÉTODO DISCRETO IOTA-DELTA:
UMA NOVA ABORDAGEM NUMÉRICA PARA O
PROBLEMA DE FLUXO NÃO SATURADO EM MEIOS
POROSOS E FRATURADOS

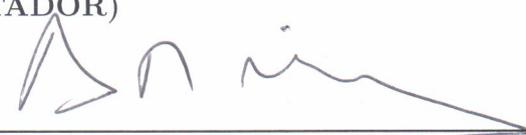
LUCAS PARREIRA DE FARIA BORGES

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO SUBMETIDA AO DEPARTAMENTO DE EN-
GENHARIA CIVIL E AMBIENTAL DA UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA COMO
PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE
MESTRE.

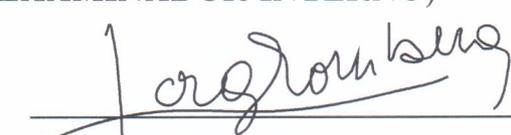
APROVADA POR:



PROF. ANDRÉ LUÍS BRASIL CAVALCANTE, D.Sc. (UnB)
(ORIENTADOR)



PROF. ANDRÉ PACHECO DE ASSIS, Ph.D. (UnB)
(EXAMINADOR INTERNO)



PROF. JORGE GABRIEL ZORNBERG, Ph.D. (UT Austin)
(EXAMINADOR EXTERNO)

DATA: BRASÍLIA/DF, 19 de AGOSTO de 2016.

FICHA CATALOGRÁFICA

BORGES, LUCAS PARREIRA DE FARIA

Método Discreto Iota-delta: uma nova abordagem numérica para o problema de fluxo não saturado em meios porosos e fraturados [Distrito Federal] 2016 xviii, 132 p., 297 mm (ENC/FT/UnB, Mestre, Geotecnia, 2016)

Dissertação de Mestrado - Universidade de Brasília. Faculdade de Tecnologia. Departamento de Engenharia Civil e Ambiental.

1. Fluxo não saturado 2. Método Discreto Iota-delta

3. Fluxo transiente 4. Modelagem Numérica

I. ENC/FT/UnB II. Mestre

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

Borges, L. P. F., (2016). Método Discreto Iota-delta: uma nova abordagem numérica para o problema de fluxo não saturado em meios porosos e fraturados. Dissertação de Mestrado, Publicação G.DM- 274/2016, Departamento de Engenharia Civil e Ambiental, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 132 p.

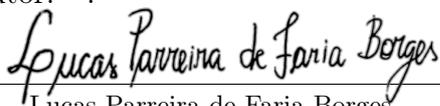
CESSÃO DE DIREITOS

NOME DO AUTOR: Lucas Parreira de Faria Borges

TÍTULO DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO: Método Discreto Iota-delta: uma nova abordagem numérica para o problema de fluxo não saturado em meios porosos e fraturados.

GRAU / ANO: Mestre / 2016

É concedida à Universidade de Brasília a permissão para reproduzir cópias desta dissertação de mestrado e para emprestar ou vender tais cópias somente para propósitos acadêmicos e científicos. O autor reserva outros direitos de publicação e nenhuma parte desta dissertação de mestrado pode ser reproduzida sem a autorização por escrito do autor.



Lucas Parreira de Faria Borges
Shin Qi 5 conjunto 7 casa 11
CEP 71505770 - Brasília - DF

DEDICATÓRIA

Àquele que faz sair o seu exército de estrelas, todas bem contadas, as quais ele chama pelo nome; por ser ele grande em força e forte em poder, nem uma só vem a faltar. Àquele cuja glória todos homens carecem. Ao Eu Sou, que é, que era e que há de vir, o Todo-Poderoso. Ao dono da salvação, rocha minha e redentor meu. Ao que, em sua soberania, elege a todos quanto quer salvar.

Àquele cujo domínio foi-lhe dado, e glória, e o reino, para que os povos, nações e homens de todas as línguas o servissem; cujo domínio é domínio eterno, que não passará, e cujo reino jamais será destruído. Àquele que possui o governo em seus ombros, cujo nome é Maravilhoso, Deus Forte, Pai da Eternidade e Príncipe da Paz. Àquele que foi morto e com seu sangue comprou para Deus os que procedem de toda tribo língua, povo e nação. Ao que paga o justo preço da eleição.

Ao Consolador, que sempre está conosco. Ao qual foi enviado pelo Pai e nos ensina todas as coisas que Cristo nos transmitiu por meio de sua palavra. Àquele que convence o mundo do pecado, da justiça e do juízo, que nos guia em toda a verdade e que glorifica a Deus. Àquele que é o penhor da salvação - selo da redenção nos eleitos.

Meus eternos agradecimentos.

Agradeço também à minha família, sempre presente. Que me educaram com carinho e amor, me sustentando em todos os aspectos, sendo sempre meus amigos e meu lar e, juntamente comigo, ansiando pelo eterno lar. Agradeço a mamãe por ter sido sempre presente, com notável disposição, sempre me educando, rindo comigo e sendo uma grande companheira, partilhando das alegrias e em suporte mútuo nas dificuldades. Agradeço ao papai por sempre me ajudar com tudo que precisei, dando todo o suporte necessário, e me motivando a ser um melhor filho, estudante e futuro profissional, dedicado e com metas, e por seu exemplo de empenho e trabalho. Agradeço também a minha irmã Lara, que desde pequena ajudou a cuidar de mim, me carregando quando pequeno e hoje sendo carregada por mim, compartilhando grande amizade que desde sempre vem crescendo, exemplo de dedicação aos estudos e trabalho, sempre fazendo tudo com maior esforço possível. Agradeço também ao meu irmão Felipe, grande companheiro em tudo, compartilhando desde cedo todas as minhas alegrias, a estudar matemática e debates teológicos, sendo um grande conhecedor da Bíblia, também pelo seu exemplo de grande esforço em tudo que faz. Agradeço também aos meus avós Nestor e Celina, que são um exemplo de casal, sempre humildes e com bom ânimo, alegres e dispostos, temperados ao falar e no agir, sempre trabalhando e dispostos e que ajudaram também a cuidar de mim. Agradeço também aos meus outros familiares, tios, primos, que me abençoaram até então, e que sou grato por isso.

Meus sinceros agradecimentos ao professor André Brasil, cuja disposição e ânimo com as pesquisas sempre foram um grande incentivo. Que desde o período de graduação

acreditou no meu potencial, me ensinou tal como nenhum outro mestre, nas ciências. Que compreende que toda boa dádiva, inclusive no conhecimento e na ciência, vem do alto e que demonstra, claramente, que sem fé é impossível agradar a Deus.

Agradeço também a todos que contribuíram com amizade e ciência. Agradeço aos professores Yuri Dumaresq e Celius Magalhães que auxiliaram no entendimento matemático das equações. Agradeço também ao grupo de pesquisa pelo crescimento, oportunidades e trocas de ideias e por todos meus colegas de graduação, mestrado e pós-graduação em geral, que foram companheiros, tais como Luan Ozelim, Bernardo Cascão, Bianca Orsini, Vinícius Domingues, Mariana dos Santos, Ricardo Moraes, Flávio Ornelas, Mateus Bezerra, Laoana Mendes, Jordana Saba, Bruna Mota, Tomás Joviano, Henry Castillo, Michael Andrey, Renato Paulinelli, Yawar Hussein, Pedro Mascarenhas.

RESUMO

Borges, L. P. F., (2016). **Método Discreto Iota-delta: uma nova abordagem numérica para o problema de fluxo não saturado em meios porosos e fraturados.** Dissertação de Mestrado, Publicação G.DM- 274/2016, Departamento de Engenharia Civil e Ambiental, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 132 p.

Um dos principais objetivos da Engenharia Geotécnica é compreender como as partículas sólidas e os fluidos presentes em um solo comportam-se quando submetidos a diferentes tipos de solicitações. No caso em que o solo apresenta em sua composição mais de um fluido (ou fase), diz-se que o meio encontra-se não saturado. Esta situação é observada em diversos casos da engenharia geotécnica, sendo presentes em quase todas as situações, tais como encostas, estradas e rodovias, barragens, túneis. Portanto, é de extrema importância compreender as equações que regem o fluxo em um meio não saturado e como o teor de umidade volumétrica do solo é alterado espacial e temporalmente. A equação que governa o fluxo não saturado é a Equação de Richards. A forma usual dessa equação, por ser não-linear, apresenta dificuldades para ser solucionada analiticamente. O presente estudo mostra como linearizar tal equação, o que possibilita a obtenção de soluções analíticas. Todavia, como o fluxo não saturado pode ocorrer em meios cuja geometria de domínio é complexa, faz-se necessário modelar numericamente o fenômeno. Assim, propõe-se uma nova abordagem numérica, denominada Método Iota-delta Discreto. Esse método é capaz de lidar com domínios que tenham geometrias rebuscadas em diferentes escalas, tais como, as obtidas por micro-tomografias ou registros fotográficos, ou aquelas referentes aos domínios usuais da engenharia ou de ensaios geotécnicos. Tal método é validado por meio de soluções analíticas, comprovando sua consistência, ao representar um fenômeno físico, e sua convergência, ao demonstrar sua precisão matemática. Por mais, o método numérico é proposto não apenas considerando aspectos matemáticos, mas também considerando o processamento computacional. Com isso, visa-se eficiência computacional aliada à precisão físico-matemática. Por fim, simula-se o fluxo transiente não saturado numericamente e analiticamente, em condições uni e bidimensionais. Tais simulações abrangem casos reais que vão desde domínios euclidianos até domínios representados por micro-tomografia de solo e fraturas em rocha. Em todos os casos analisados, o método numérico mostrou-se eficiente para amplamente descrever o fluxo não saturado para os casos presentes na engenharia geotécnica.

ABSTRACT

Borges, L. P. F., (2016). **Iota-delta Discrete Method: a novel numerical approach for the unsaturated flow problem in porous and fractured media.** Master Degree Dissertation, Publication G.DM - 274/2016, Civil and Environmental Engineering Department, University of Brasilia, Brasilia, DF, 132 p.

One of the main purposes of Geotechnical Engineering is to understand how solid and fluid particles of a soil behave. When the flow is characterized by the transportation of more than one fluid (or phase), such as air and water, it is denominated as an unsaturated flow. This type of flow is found in many cases of Geotechnical Engineering, and is present in almost every situation such as slopes, highways, dams, tunnels, and others. Therefore, it is extremely important to understand the equation that rules the unsaturated flow and how the volumetric water content changes over space and time. The equation that rules the unsaturated flow is the Richards' Equation. The usual form of this equation, due to its non-linearity, is difficult to be analytically solved. Thus, the current study shows how to linearize the equation, which enables one to find analytical solutions. However, once the unsaturated flow can occur in complex geometric domains, it is necessary to numerically model the phenomenon. Hence, it is proposed a new numerical approach denominated as Iota-delta Discrete Method. This method is capable to deal with complex geometry domains in different scales, such as the ones obtained through micro-tomography or photography captures, and standard domains for engineering and laboratory tests. Such method, is validated through analytical solutions, having its consistency ratified, representing the physical phenomenon, and its convergence affirmed, showing its mathematical precision. Moreover, the numerical method does not only consider the mathematical formulation on its scope, but also the computational processing. Thus, it is intended to combine both computational efficiency and physical-mathematical precision. Accordingly, it is simulated the unsaturated flow both numerically and analytically, in 1D and 2D. These simulations correspond to real physical situations, including euclidean domains, soil micro-tomography and rock fractures. In all cases, the numerical method demonstrated to be efficient and capable to describe the unsaturated flow for the current problems in Geotechnical Engineering.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	Motivação	1
1.2	Objetivos	3
1.3	Estrutura da Dissertação	3
2	EQUAÇÃO DE RICHARDS	5
2.1	Carga Hidráulica	5
2.2	Formulação da EDP	7
2.2.1	Linearização da EDP	11
2.3	Interpretação gráfica das variáveis	14
3	MÉTODO DAS DIFERENÇAS FINITAS	16
3.1	Discretização de 1ª ordem da Equação de Richards em 1D	16
3.2	Condições de Contorno em 1D	18
3.2.1	Condição de Neumann 1D	18
3.2.2	Condição de Dirichlet 1D	19
3.2.3	Condição de Robin 1D	20
3.3	Discretização de 1ª ordem da Equação de Richards em 2D	22
3.4	Condições de Contorno em 2D	24
3.4.1	Condição de Neumann 2D	25
3.4.2	Condição de Dirichlet 2D	25
3.4.3	Condição de Robin 2D	26
4	MATERIAIS E MÉTODOS	29
4.1	Materiais	29
4.1.1	Microtomografia	29
4.1.2	Registro fotográfico	31
4.2	Métodos	31
4.2.1	Processamento de imagens	31
4.2.2	Etapas de processamento das simulações	32
4.2.3	Funções Analíticas	33
4.2.4	Dedução do Método Discreto Iota-delta	34
4.2.5	Fluxograma dos Método e Materiais	34
5	DEDUÇÃO DO MÉTODO DISCRETO IOTA-DELTA	35
5.1	Intenção do Método	35
5.2	Formulação do MDI 1D para a Equação de Richards	35
5.2.1	Discretização do Domínio	35
5.2.2	Camadas de Condição de Contorno e Inicial	36

5.2.3	Formulação Algébrica	37
5.3	Formulação do MDI 2D para a Equação de Richards	45
5.3.1	Discretização do Domínio	45
5.3.2	Camadas de Condição de Contorno e Inicial	46
5.3.3	Formulação Algébrica	48
5.3.4	Aplicações	61
6	VALIDAÇÃO DO MÉTODO DISCRETO IOTA-DELTA	62
6.1	Validação do MDI para a Eq. de Richards 1D	62
6.1.1	Descrição qualitativa da validação	62
6.1.2	Descrição matemática da validação	62
6.1.3	Características Físicas dos Solos	64
6.1.4	Simulação	66
6.2	Validação do MDI para a Eq. de Richards 2D	73
6.2.1	Descrição qualitativa da validação	73
6.2.2	Descrição matemática da validação	74
6.2.3	Características Físicas dos Solos	76
6.2.4	Simulação	77
7	APLICAÇÃO DO MDI A MEIOS POROSOS E FRATURADOS	83
7.1	Simulação em meio poroso	83
7.1.1	Descrição qualitativa	83
7.1.2	Domínio da simulação	83
7.1.3	Descrição matemática	85
7.1.4	Características Físicas dos Solos	86
7.1.5	Simulação	87
7.1.6	Caso anisotrópico da micro-tomografia	95
7.2	Simulação em meio fraturado	99
7.2.1	Descrição qualitativa	99
7.2.2	Domínio da simulação	99
7.2.3	Descrição matemática	101
7.2.4	Características Físicas do Solo	101
7.2.5	Simulação	103
7.2.6	Caso anisotrópico para a fratura	111
8	CONCLUSÃO	115
8.1	Presentes conclusões	115
8.2	Sugestões para pesquisas futuras	117

A	SOLUÇÃO ANALÍTICA	122
A.1	Definição do Problema	122
A.2	Problema e solução permanente	123
A.3	Problema homogêneo	123
A.4	Divisão do problema homogêneo	124
A.4.1	Definição da $f(x, t)$	125
A.4.2	Resolução de $f(x, t)$	126
A.4.3	Definição de $g(z, t)$	128
A.4.4	Resolução de $g(z, t)$	128
A.4.5	Resolução de $u(z)$	129
A.4.6	Resolução de $h(t)$	130
A.4.7	Combinando $u(z)$ e $h(t)$	131
A.5	Expressão final da θ_h	131
A.6	Expressão final da θ	132

Lista de Figuras

1.1	Solo composto por grãos, ar e água.	1
1.2	Escorregamento de encosta.	1
1.3	Recalque pelo colapso do solo	2
1.4	Patologias causadas por solo expansivo.	2
2.1	Solo em sistema de coordenadas com eixo vertical para cima.	6
2.2	Solo em sistema de coordenadas com eixo vertical para baixo.	7
2.3	Fluxo de água: (a) Volume de controle (b) Fluxo de água entrando e saindo em meio volume de controle infinitesimal	8
2.4	Teor de umidade volumétrica a partir do módulo da sucção.	14
2.5	Condutividade hidráulica a partir da sucção.	15
2.6	Interpretação física do coeficiente de advecção não saturado a_s	15
4.1	Tomógrafo SkyScan 1172 (Zubeldia, 2013).	30
4.2	Perspectiva tridimensional da microtomografia	30
4.3	Captura da fissura em rocha com escala, recortada.	31
4.4	Fluxograma da metodologia do trabalho	34
5.1	Discretização do domínio em 1D.	35
5.2	Malha do domínio discretizado.	36
5.3	Descrição qualitativa dos vetores necessários para MDI 1D.	37
5.4	Cálculo do passo de tempo posterior a partir do domínio.	37
5.5	Nó de fronteira à esquerda com condição de Robin.	38
5.6	Nó de fronteira à direita com condição de Robin.	40
5.7	Nó de fronteira central com condição de Robin.	42
5.8	Vetores necessários para o MDI 1D com maior eficiência computacional	44
5.9	Discretização em um domínio bidimensional.	45
5.10	Malha do domínio discretizado bidimensional para dois passos de tempo.	46
5.11	Exposição qualitativa das matrizes necessárias para o MDI 2D.	48
5.12	Malha do domínio discretizado bidimensional.	49
5.13	Nós do domínio que influenciam o nó central no passo de tempo posterior.	49
5.14	Malha com o nó $(i-1, j)$ pertencente à fronteira de Robin.	50
5.15	Malha com o nó $(i+1, j)$ pertencente à fronteira de Robin.	52
5.16	Malha com o nó $(i, j-1)$ pertencente à fronteira de Robin.	54
5.17	Malha com o nó $(i, j+1)$ pertencente à fronteira de Robin.	56
5.18	Malha com o nó (i, j) pertencente à fronteira de Robin.	58
5.19	Composição de Matrizes para o MDI 2D.	60
6.1	Caso representado pela simulação 1D (a) antes do início do fenômeno e (b) no momento inicial do fenômeno.	62
6.2	Validação 1D - curva de condutividade hidráulica não saturada do Solo 1.	64

6.3	Validação 1D - curva de condutividade hidráulica não saturada do Solo 2. . .	65
6.4	Validação 1D - curvas de condutividade hidráulica não saturada dos Solos 1 e 2.	65
6.5	Validação 1D - curvas características dos colos 1 e 2.	66
6.6	Solo 1 - teor de umidade volumétrica por profundidade, para vários tempos.	67
6.7	Solo 2 - teor de umidade volumétrica por profundidade, para vários tempos.	67
6.8	Solo 1 - teor de umidade volumétrica por tempo, para várias profundidades.	68
6.9	Solo 2 - teor de umidade volumétrica por tempo, para várias profundidades.	68
6.10	Solo 1 e 2 - teor de umidade volumétrica por tempo, para $z = 0,5m$	69
6.11	Solo 1 - sucção por profundidade, para vários tempos.	69
6.12	Solo 2 - sucção por profundidade, para vários tempos.	70
6.13	Solo 1 - sucção por tempo, para várias profundidades.	70
6.14	Solo 2 - sucção por tempo, para várias profundidades.	71
6.15	Solo 1 - condutividade hidráulica não saturada por profundidade, para vários tempos.	71
6.16	Solo 2 - condutividade hidráulica não saturada por profundidade, para vários tempos.	72
6.17	Solo 1 - condutividade hidráulica não saturada por tempo, para várias profundidades.	72
6.18	Solo 2 - condutividade hidráulica não saturada por tempo, para várias profundidades.	73
6.19	Caso representado pela simulação 2D (a) antes e (b) depois.	74
6.20	Validação 2D - Curva característica	76
6.21	Validação 2D - Curva de condutividade hidráulica não saturada	77
6.22	Validação 2D - condição inicial	77
6.23	Validação 2D - teor de umidade volumétrica no tempo 1000 s.	78
6.24	Validação 2D - teor de umidade volumétrica no tempo 4000 s.	79
6.25	Validação 2D - teor de umidade volumétrica no tempo 10 000 s.	79
6.26	Validação 2D - teor de umidade volumétrica no tempo 20 000 s.	80
6.27	Validação 2D - teor de umidade volumétrica no tempo 40 000 s.	81
6.28	Validação 2D - teor de umidade volumétrica no tempo 50 000 s.	81
6.29	Validação 2D - teor de umidade volumétrica no tempo 60 000 s.	82
7.1	Micro-tomografia cedida por Zubeldia (2013)	84
7.2	Binarização da micro-tomografia	84
7.3	Binarização da micro-tomografia com círculo e cores invertidas	85
7.4	Curva característica do solo	86
7.5	Curva de condutividade hidráulica não saturada - dimensão y	87
7.6	Curva de condutividade hidráulica não saturada - dimensão x	87
7.7	Teor de umidade volumétrica no tempo 0 s.	88

7.8	Teor de umidade volumétrica no tempo 1 s.	89
7.9	Teor de umidade volumétrica no tempo 2 s.	89
7.10	Teor de umidade volumétrica no tempo 5 s.	90
7.11	Teor de umidade volumétrica no tempo 10 s.	90
7.12	Teor de umidade volumétrica no tempo 15 s.	91
7.13	Teor de umidade volumétrica no tempo 20 s.	91
7.14	Teor de umidade volumétrica no tempo 30 s.	92
7.15	Teor de umidade volumétrica no tempo 50 s.	92
7.16	Teor de umidade volumétrica no tempo 30s.	93
7.17	Teor de umidade volumétrica no tempo 200 s.	94
7.18	Teor de umidade volumétrica no tempo 800 s.	94
7.19	Condutividade hidráulica não saturada em x - caso anisotrópico.	95
7.20	Condutividade hidráulica não saturada em y - caso anisotrópico.	96
7.21	Simulação em 1 s para (a) caso anisotrópico e (b) caso isotrópico.	97
7.22	Simulação em 5 s para (a) caso anisotrópico e (b) caso isotrópico.	97
7.23	Simulação em 20 s para (a) caso anisotrópico e (b) caso isotrópico.	98
7.24	Simulação em 800 s para (a) caso anisotrópico e (b) caso isotrópico.	98
7.25	Fratura em rocha utilizada para a simulação.	99
7.26	Fratura binarizada.	100
7.27	Fratura binarizada sem pequenas partes.	100
7.28	Fratura com fechamento geodésico.	100
7.29	Curva característica da fratura.	102
7.30	Curva de condutividade hidráulica não saturada na direção x	102
7.31	Curva de condutividade hidráulica não saturada na direção z	103
7.32	Teor de umidade volumétrica na fratura no tempo 0 s.	104
7.33	Teor de umidade volumétrica na fratura no tempo 1 s.	104
7.34	Teor de umidade volumétrica na fratura no tempo 10 s.	105
7.35	teor de umidade volumétrica na fratura no tempo 40 s.	105
7.36	Teor de umidade volumétrica na fratura no tempo 70 s.	106
7.37	Teor de umidade volumétrica na fratura no tempo 100 s.	106
7.38	Teor de umidade volumétrica na fratura no tempo 150 s.	107
7.39	Teor de umidade volumétrica na fratura no tempo 200 s.	108
7.40	Teor de umidade volumétrica na fratura no tempo 250 s.	108
7.41	Teor de umidade volumétrica na fratura no tempo 300 s.	109
7.42	Teor de umidade volumétrica na fratura no tempo 400 s.	109
7.43	Teor de umidade volumétrica na fratura no tempo 1000 s.	110
7.44	Caso anisotrópico da fissura, condutividade hidráulica não saturada em x .	111
7.45	Caso anisotrópico da fissura, condutividade hidráulica não saturada em z .	111
7.46	Tempo 70 s para (a) caso anisotrópico e (b) isotrópico.	112

7.47	Tempo 100 s para (a) caso anisotrópico e (b) isotrópico.	113
7.48	Tempo 250 s para (a) caso anisotrópico e (b) isotrópico.	113
7.49	Tempo 1000 s para (a) caso anisotrópico e (b) isotrópico.	114

Lista de Tabelas

4.1	Especificações técnicas do tomógrafo SkyScan 1172 (Zubeldia, 2013)	29
6.1	Parâmetros numéricos da simulação de validação 2D.	63
6.2	Parâmetros físicos da simulação de validação 1D.	64
6.3	Parâmetros físicos da simulação de validação 2D.	75
6.4	Parâmetros numéricos da simulação de validação 2D.	76
7.1	Parâmetros físicos da simulação com a micro-tomografia	85
7.2	Parâmetros numéricos da simulação com a micro-tomografia	86
7.3	Parâmetros numéricos da simulação anisotrópica com a micro-tomografia .	96
7.4	Parâmetros físicos da simulação em meio fraturado.	101
7.5	Parâmetros numéricos da simulação em meio fraturado.	101
7.6	Parâmetros numéricos da simulação em meio fraturado - caso anisotrópico.	112

LISTA DE ABREVIACÕES E SÍMBOLOS

Abreviação	Significado
EDP	Equação Diferencial Parcial
EMBRAPA	Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária
EUA	Estados Unidos da América
MDF	Método das Diferenças Finitas
MDI	Método Discreto Iota-delta
sgn	função sinal
SP	São Paulo

	Significado	Dimensão
a_s	coeficiente de advecção não-saturada na direção z	$[L T^{-1}]$
A^n	vetor dos parâmetros α avaliada em n	
A_x^n	matriz dos parâmetros α_x avaliada em n	
A_z^n	matriz dos parâmetros α_z avaliada em n	
B^n	vetor dos parâmetros β avaliada em n	
B_x^n	matriz dos parâmetros β_x avaliada em n	
B_z^n	matriz dos parâmetros β_z avaliada em n	
C^n	vetor dos parâmetros γ avaliada em n	
C_x^n	matriz dos parâmetros γ_x avaliada em n	
C_z^n	matriz dos parâmetros γ_z avaliada em n	
dx	diferencial de espaço na direção x	$[L]$
dy	diferencial de espaço na direção y	$[L]$
dz	diferencial de espaço na direção z	$[L]$
D_x	coeficiente de difusividade não-saturada na direção x	$[L^2 T^{-1}]$
D_y	coeficiente de difusividade não-saturada na direção y	$[L^2 T^{-1}]$
D_h	coeficiente de dispersão hidrodinâmico longitudinal	$[L^2 T^{-1}]$
D_z	coeficiente de difusividade não-saturada na direção z	$[L^2 T^{-1}]$
F	força	$[M L T^{-2}]$
g	aceleração da gravidade	$[L T^{-2}]$
h	carga hidráulica total	$[L]$
h_a	altura do ponto a	$[L]$
h_b	altura do ponto b	$[L]$
i	passo de espaço	$[L]$
\mathbf{I}	vetor/matriz de condição inicial	
j	passo de espaço	$[L]$
k_x	condutividade hidráulica não saturada do solo na direção x	$[L T^{-1}]$
k_y	condutividade hidráulica não saturada do solo na direção y	$[L T^{-1}]$
k_s	condutividade hidráulica não saturada do solo	$[L T^{-1}]$
k_{s_x}	condutividade hidráulica saturada do solo na direção x	$[L T^{-1}]$
k_{s_y}	condutividade hidráulica saturada do solo na direção y	$[L T^{-1}]$
k_{s_z}	condutividade hidráulica saturada do solo na direção z	$[L T^{-1}]$
k_z	condutividade hidráulica não saturada do solo na direção z	$[L T^{-1}]$
\dot{m}_{arm}	taxa temporal de massa armazenada no volume de controle	$[M T^{-1}]$
\dot{m}_{entra}	taxa temporal de massa que entra no volume de controle	$[M T^{-1}]$
\dot{m}_{sai}	taxa temporal de massa que sai do volume de controle	$[M T^{-1}]$
n	passo de tempo	$[T]$
t	tempo	$[T]$
U	energia potencial	$[M L^2 T^{-2}]$
U_v	energia potencial da água por volume	$[M L^{-1} T^{-2}]$
v_s	velocidade de percolação do contaminante no solo	$[L T^{-1}]$
v_x	velocidade do fluido na direção x	$[L T^{-1}]$
v_y	velocidade do fluido na direção y	$[L T^{-1}]$
v_z	velocidade do fluido na direção z	$[L T^{-1}]$
z	carga altimétrica	$[L]$

	Significado	Dimensão
α_j^n	parâmetro da fronteira de Robin, avaliada em n e j	
$\alpha_{x^{i,j}}^n$	parâmetro da fronteira de Robin em x , avaliada em n , i e j	
$\alpha_{z^{i,j}}^n$	parâmetro da fronteira de Robin em z , avaliada em n , i e j	
$\alpha(z, t)$	função escalar da fronteira de Robin	
β_j^n	parâmetro da fronteira de Robin, avaliada em n e j	$[L^{-1}]$
$\beta_{x^{i,j}}^n$	parâmetro da fronteira de Robin em x , avaliada em n , i e j	
$\beta_{z^{i,j}}^n$	parâmetro da fronteira de Robin em z , avaliada em n , i e j	
$\beta(z, t)$	função escalar da fronteira de Robin	$[L^{-1}]$
γ_j^n	parâmetro da fronteira de Robin, avaliada em n e j	
$\gamma_{x^{i,j}}^n$	parâmetro da fronteira de Robin em x , avaliada em n , i e j	
$\gamma_{z^{i,j}}^n$	parâmetro da fronteira de Robin em z , avaliada em n , i e j	
$\gamma(z, t)$	função escalar da fronteira de Robin	
δ	parâmetro hidráulico de ajuste	$[M^{-1} L T^{-1}]$
$\delta(z, t)$	função escalar da fronteira de Dirichlet	$[L^{-1}]$
Δ	diferencial	
$\partial\Omega$	região de contorno	
θ	teor de umidade volumétrica	
θ_r	teor de umidade volumétrica residual	
θ_s	teor de umidade volumétrica saturado	
$\iota_{i,j}^n$	condição inicial, avaliada em 0 , i e j	
ι_j^0	condição inicial, avaliada em j e 0	$[L^{-1}]$
κ_{-1}	coeficiente numérico ponderador do nó anterior	
κ_0	coeficiente numérico ponderador do nó central	
κ_1	coeficiente numérico ponderador do nó posterior	
$\kappa_{0,0}$	coeficiente numérico ponderador do nó central	
$\kappa_{0,-1}$	coeficiente numérico ponderador do nó central-inferior	
$\kappa_{1,0}$	coeficiente numérico ponderador do nó posterior-central	
$\kappa_{0,1}$	coeficiente numérico ponderador do nó central-superior	
$\kappa_{-1,0}$	coeficiente numérico ponderador do nó anterior-central	
$\nu(z, t)$	função escalar da fronteira de Neumann	$[L^{-1}]$
ρ_w	densidade da água	$[M L^{-3}]$
Φ	energia por massa do fluido	$[L^2 T^{-2}]$
ψ	sucção	$[M L^{-1} T^{-2}]$
Ω	região de domínio	
∇	operador gradiente	

1 INTRODUÇÃO

1.1 Motivação

O solo, como componente presente na engenharia civil e ambiental, deve ser compreendido quanto a sua natureza física. Uma vez que o solo é composto por partículas sólidas, líquidas e gasosas, deve-se atentar em descrever todas as fases. A disposição dos grãos delinea a estrutura do solo e faz a separação entre sólidos e vazios. Nos vazios, encontram-se os fluidos, dentre os quais pode-se destacar o ar, a água, os contaminantes, dentre outros (Figura 1.1).

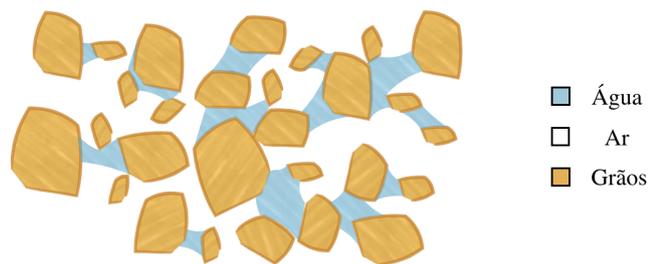


Figura 1.1: Solo composto por grãos, ar e água.

Para descrever o comportamento dos fluidos, faz-se necessário compreender como ocorre sua movimentação nos vazios. Essa movimentação dos fluidos nos vazios é denominada fluxo. Usualmente, os vazios encontram-se com mais de uma fase (e.g. ar e água), ou seja, não saturados. O fluxo em meios não saturados, que é o fluxo de fluidos que não ocupam completamente os vazios do solo, é de grande importância e deve ser compreendido física e matematicamente.

O fluxo de água em meios não saturados é responsável por diversos fenômenos. Por exemplo, nas épocas chuvosas, os taludes podem ficar instáveis pelo fluxo de água proveniente da precipitação (Gerscovich et al., 2006), como visto na Figura 1.2.

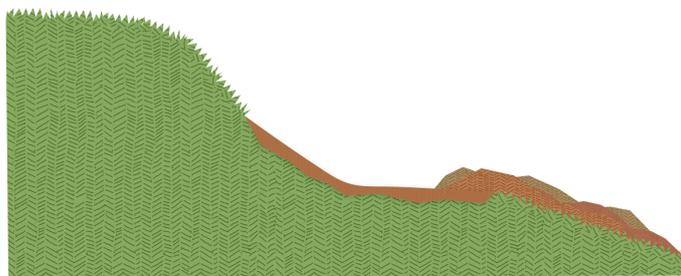


Figura 1.2: Escorregamento de encosta.

Além disso, solos colapsíveis, como o do Distrito Federal, sofrem com grande perda

volumétrica (Ortigao et al., 1996, Araujo et al. 2009). Essas perdas podem ocorrer devida à variação do teor de umidade, que diretamente modifica a sucção. A mudança de sucção, por sua vez, altera as tensões atuantes no solo, gerando uma reestruturação de suas partículas. Isso causa tanto recalque em fundações de estruturas (Figura 1.3), quanto fissurações na pavimentação (Figura 1.4).

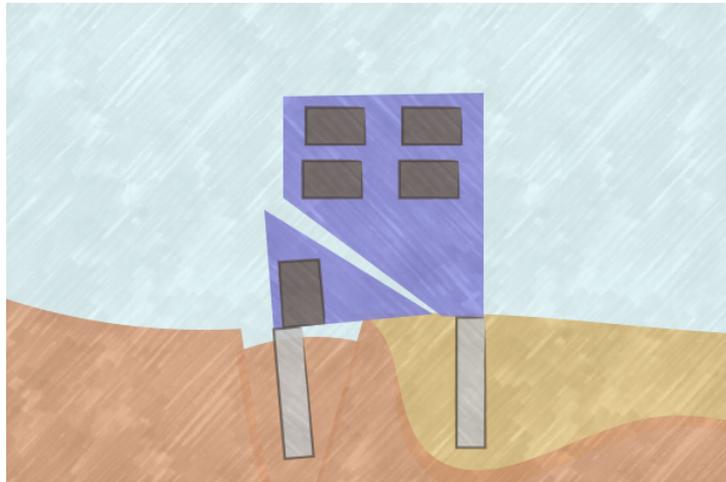


Figura 1.3: Recalque pelo colapso do solo

Pode-se ainda citar que o fluxo não saturado é responsável pela movimentação de solos expansivos. Isso, no sul dos EUA e no Reino Unido, é a causa de grandes perdas materiais (Jones & Jefferson, 2012), gerando patologias nas estruturas. Pode-se destacar que a área mais afetada são os pavimentos. Geralmente, os solos expansivos geram fissuras nas estradas e rodovias (Figura 1.4).

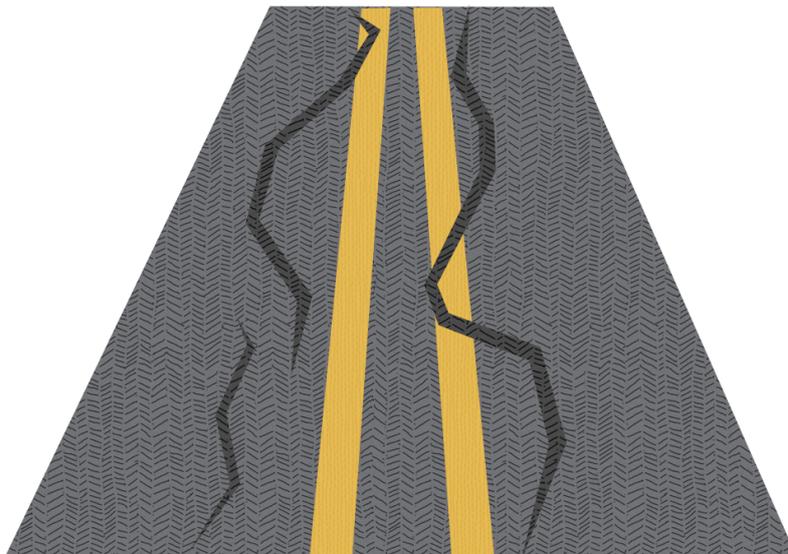


Figura 1.4: Patologias causadas por solo expansivo.

Como pode-se perceber, a umidade e sua variação podem influenciar o solo em diversos

aspectos, desde mudanças de resistência até variações volumétricas positivas e negativas. As mudanças de volume e resistência interferem nas obras de engenharia civil e ambiental, podendo ocasionar danos e riscos relevantes. Logo, pode-se perceber a grande importância de estudar e compreender como a umidade e a sucção do solo. Por isso, o presente estudo foca em compreender o fluxo em meios não saturados na engenharia geotécnica.

1.2 Objetivos

O objetivo geral da pesquisa é propor um novo método numérico (Método Discreto Iota-delta - MDI) e simular o fluxo de água em meio não saturado. Para isso, os seguintes objetivos específicos são necessários:

- Descrever a equação diferencial parcial (EDP) que rege o fluxo de fluidos incompressíveis em regime não saturado no solo. De forma que a equação diferencial, fundamentada em modelos constitutivos fisicamente consistentes, seja linearizada e possível de ser resolvida analiticamente.
- Deduzir e descrever a nova abordagem numérica proposta em uma dimensão (MDI - 1D). O método tem o propósito de ser matematicamente preciso na descrição do fenômeno físico e capaz de descrever precisamente os domínios e condições de contorno, com precisão maior ou igual ao dos métodos já existentes.
- Deduzir e descrever a nova abordagem numérica proposta em duas dimensões (MDI - 2D).
- Realizar simulação em 1D, fazendo uso de solução analítica da EDP de fluxo não saturado e comparar com a simulação numérica.
- Realizar simulações em 2D, tanto fazendo uso de soluções analíticas e comparando com as respectivas simulações numéricas, quanto extrapolando para os casos em que não há solução analítica.

1.3 Estrutura da Dissertação

A dissertação é dividida em oito capítulos, a fim de cumprir os objetivos propostos. No primeiro capítulo introduz-se a relevância do tema de fluxo em meios não saturados, os objetivos e a estrutura da dissertação.

No Capítulo 2 deduz-se a Equação de Richards, que é a equação que descreve o fluxo em meios não saturados. Para isso, faz-se uso de modelos constitutivos que, juntamente com a equação da conservação, resultam em uma EDP linear, resolvível analiticamente. Faz-se a dedução tanto para uma quanto para duas dimensões, que mais adiante serão utilizadas no método numérico.

No Capítulo 3 demonstra-se o Método das Diferenças Finitas (MDF), para a Equação de Richards anteriormente deduzida. Faz-se a dedução do MDF tanto para o caso unidimensional quanto para o caso bidimensional, sendo apresentada a condição de estabilidade

para cada dimensão.

No Capítulo 4 apresenta-se a metodologia da pesquisa. Mostra-se como que o presente trabalho é desenvolvido, descrevendo os materiais e métodos utilizados para alcançar os resultados.

No Capítulo 5 deduz-se o MDI, que é a nova abordagem numérica apresentada, para uma e duas dimensões.

No Capítulo 6 valida-se as formulações numéricas do MDI. Para isso, compara-se as soluções analíticas aos resultados numéricos. Descreve-se dois casos, um unidimensional, para validar o MDI 1D, e outro bidimensional, para validar o MDI 2D.

No Capítulo 7 aplica-se o MDI para problemas onde não há solução analítica. Para isso, utiliza-se o MDI 2D para descrever o fluxo não saturado em dois casos. O primeiro, onde mostra-se o fenômeno por meio poroso, composto por grãos de areia e vazios, e o segundo, onde simula-se o fenômeno em um meio fraturado.

No Capítulo 8 conclui-se o que foi descrito na pesquisa, recapitulando a Equação de Richards, os modelos constitutivos, e a eficácia do método numérico, tal como demonstrada por meio das simulações. Além disso, propõe-se futuras áreas a serem exploradas, dando continuidade à pesquisa.

2 EQUAÇÃO DE RICHARDS

2.1 Carga Hidráulica

O fluxo de água em um meio não saturado se dá por meio da força de percolação atuante. Logo, para descrever o fluxo deve-se definir matematicamente as forças de percolação.

Quaisquer forças que se conservam são originadas de um campo de energia potencial. Todo campo de energia potencial, por sua vez, possui a seguinte relação com as forças atuantes (Arfken & Weber, 2005) :

$$-\nabla U = F \quad (2.1)$$

onde U é a energia potencial, em um sistemas de coordenadas $[J]$, ∇ é o operador gradiente e F é força resultante do campo $[MLT^{-2}]$.

Para descrever as forças de percolação que definem o fluxo não saturado, é necessário encontrar a energia potencial da água por volume U_v , $[MT^{-2}L^{-1}]$. No estudo proposto considera-se apenas três componentes de energia (Fredlund & Rahardjo, 1993; Halliday et al., 2012). A primeira é a componente altimétrica, associada à energia potencial gravitacional do fluido. A segunda componente é a sucção, associada à interação com a superfície das partículas de solo e ao potencial osmótico da água. A sucção, por tratar-se de tensões de tração, sempre apresenta sinais negativos (ou nulo). A terceira componente, por fim, é a componente de velocidade, associada à energia cinética do fluido. Esta função é dada por:

$$U_v = \rho_w g z + \psi + \frac{\rho_w v^2}{2} \quad (2.2)$$

onde z é a carga altimétrica $[L]$, ψ é a sucção $[ML^{-1}T^{-2}]$, ρ_w é a densidade $[ML^{-3}]$ e g é a aceleração da gravidade $[ML^{-2}]$.

A última componente, por apresentar ordem de grandeza muito inferior às outras componentes, é desprezada (Shelton, 2009). Assim, a Eq. 2.2 é reescrita como:

$$U_v = \rho_w g z + \psi \quad (2.3)$$

Dividindo-se a energia potencial da água por volume (Eq. 2.3) pelo peso específico ($\rho_w g$), encontra-se a carga hidráulica total ϕ , $[L]$, que é a energia por massa da água.

$$\phi = z - \frac{\psi}{\rho_w g} \quad (2.4)$$

Nota-se que a formulação da Eq. 2.4 adota o eixo vertical do sistema de coordenadas com sua direção apontando para cima e, desta forma, a aceleração da gravidade assume o valor de $-9,81 m/s^2$. Calculando-se a energia dos pontos A e B da Figura 2.1 pode-se

compreender o sentido físico da Eq. 2.4.

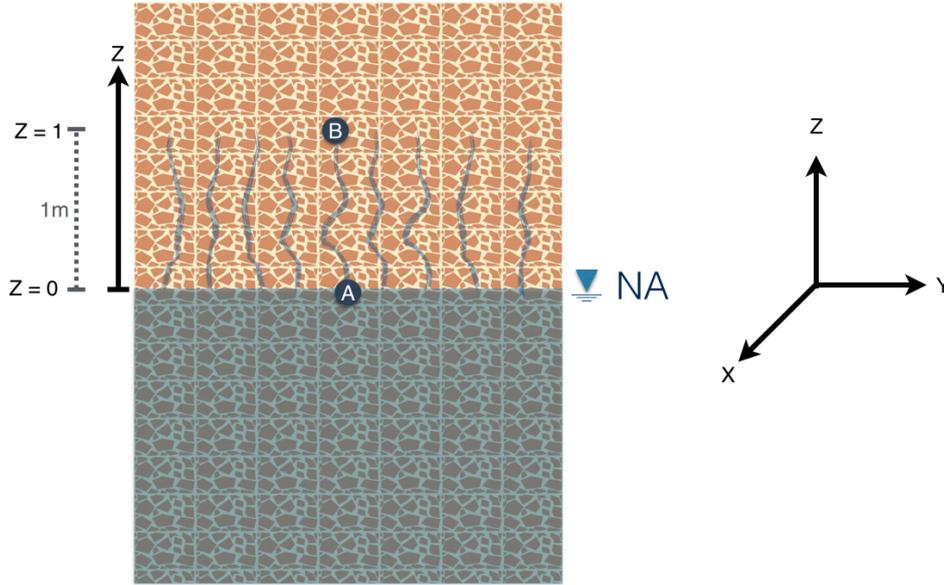


Figura 2.1: Solo em sistema de coordenadas com eixo vertical para cima.

Considerando que no nível d'água (ponto A) não há sucção, que a sucção no ponto B é igual a $\psi = -9,81 \text{ kPa}$, que a massa específica é $\rho_w = 1000 \text{ kN/m}^3$ e que não há fluxo de A para B , a carga hidráulica total de cada ponto pode ser definida como:

$$\phi_a = 0 - \frac{0}{1 \cdot (-9,81)} = 0$$

$$\phi_b = 1 - \frac{-9,81}{1 \cdot (-9,81)} = 0$$

Mostra-se, portanto, que não há diferença de energia entre os pontos A e B , uma vez que $\phi_a = \phi_b$. Isso reafirma a proposição inicial, de que não haveria fluxo. Todavia, o sistema de eixos mais favorável à solução das equações tratadas neste estudo é aquele que adota o eixo vertical no mesmo sentido da aceleração gravidade. Com isso, invertendo o sentido do eixo vertical, tem-se a seguinte formulação matemática para a carga hidráulica:

$$\phi = -z + \frac{\psi}{\rho_w g} \quad (2.5)$$

A Figura 2.2 mostra o mesmo sistema da Figura 2.1, só que com o eixo vertical invertido. Com isso, o valor da gravidade passa a ser $g = 9,8 \text{ m/s}^2$, uma vez que apresenta o mesmo sentido do eixo.

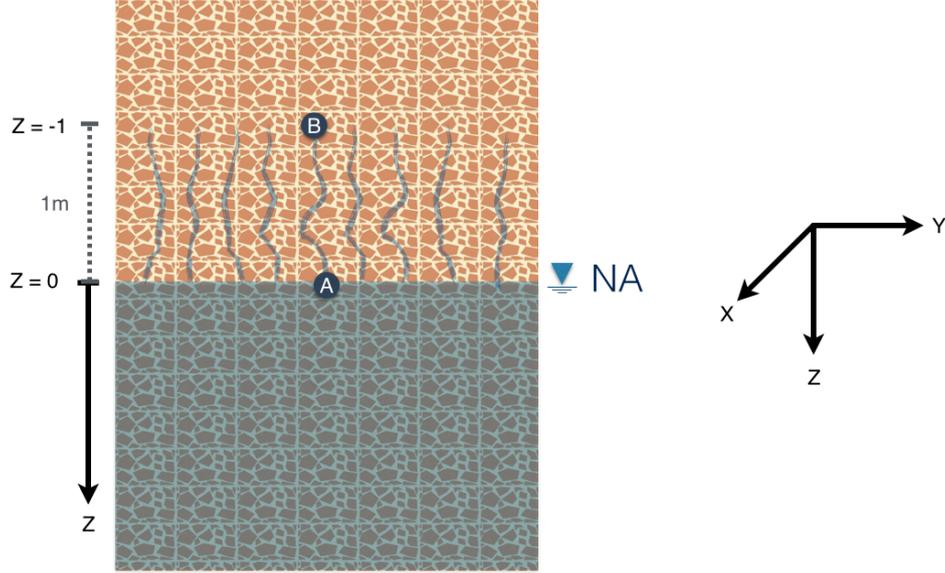


Figura 2.2: Solo em sistema de coordenadas com eixo vertical para baixo.

Logo, as energias dos pontos A e B são:

$$\phi_a = -0 + \frac{0}{1.9,81} = 0$$

$$\phi_b = -1 + \frac{9,81}{1.9,81} = 0$$

Como esperado, independentemente dos eixos adotados, a energia associada ao fluido em cada um dos pontos se manteve. Isso demonstra que a Eq. 2.5 representa fidedignamente a Eq. 2.4 no novo sistema de coordenadas. Contudo, para encontrar a solução da Equação de Richards é mais conveniente utilizar a Eq. 2.5.

A energia do fluido pode tanto ser associada à carga hidráulica total ϕ , quanto à energia por massa, denotado por Φ [$L^2 T^{-2}$]. Sendo que a energia por massa, para as coordenadas da Figura 2.2, é definida matematicamente por:

$$\Phi = -z g + \frac{\psi}{\rho_w} \quad (2.6)$$

2.2 Formulação da EDP

Cavalcante & Zornberg (2016, *in press*) descreveram a importância de obter uma boa formulação e solução da Equação de Richards. Primeiro, deve-se compreender que as soluções analíticas da Equação de Richards foram abundantemente descritas para casos de fluxo não transiente, considerando condições hidráulicas simplificadas. Segundo, quando se trata das condições transientes, geralmente, as soluções obtidas demandaram aproximações que implicaram em simplificações nas condições assumidas (Philip, 1960; Sander

et al., 1988; Hogarth et al., 1989, 1992; Parlange et al., 1992, 1997; Ross & Parlange, 1994; Hogarth & Parlange, 2000; Dell'Avanzi et al., 2004; Rathie, et al., 2012; Cavalcante, et al., 2013; Swamee, et al., 2014). Nos poucos estudos descritos, onde as soluções exatas para as condições transientes foram obtidas, as equações são apresentadas em formas integrais, as quais usualmente requerem uma abordagem numérica (Wang & Dooge, 1994; Basha, 1999; Chen et al., 2001; Chen et al., 2003). Todavia, o mais desejado é obter soluções explícitas e fechadas. Ao obter uma forma fechada da solução da Equação de Richards obtém-se as seguintes vantagens: facilita-se a avaliação paramétrica e valida-se a acurácia de abordagens numéricas, permitindo comparação entre soluções analíticas e numéricas.

Em essência, a equação de Richards é uma equação de conservação de massa (Schweizer, 2012). Formulada por Lorenzo A. Richards em 1931, tal equação se fundamenta no fato de que a diferença entre as massas de fluido que entram e saem de um volume de controle infinitesimal se igualam à taxa de variação do armazenamento de massa no referido volume. A Figura 2.3 mostra esquematicamente o fluxo em um volume de controle.

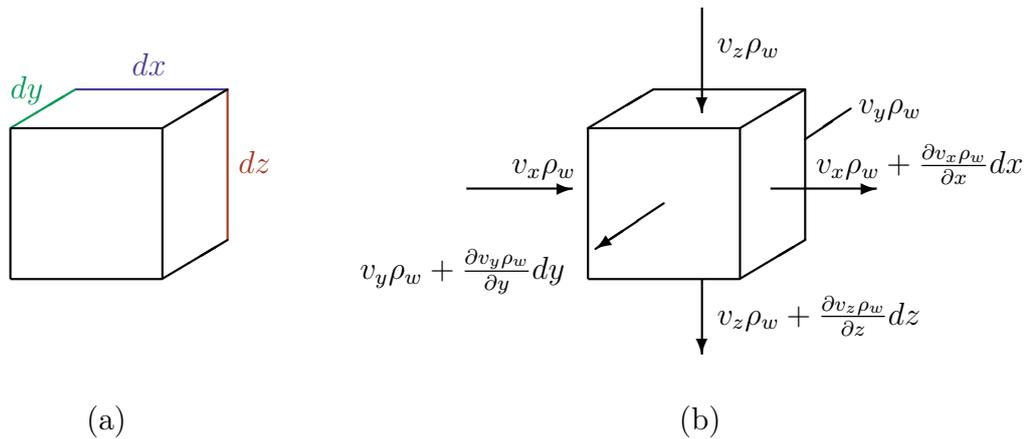


Figura 2.3: Fluxo de água: (a) Volume de controle (b) Fluxo de água entrando e saindo em meio volume de controle infinitesimal

Esse fluxo de massa pode ser matematicamente definido em duas partes. A primeira parte é a quantidade de massa que entra no volume de controle, $\dot{m}_{entra} [M T^{-1}]$, em um dado tempo, que é igual a:

$$\dot{m}_{entra} = v_x \rho_w (dz dy) + v_y \rho_w (dx dz) + v_z \rho_w (dx dy) \quad (2.7)$$

onde v_x , v_y e v_z são as velocidade nas direções x , y e z , respectivamente, $[L T^{-2}]$.

Já a segunda parte, que corresponde à quantidade de massa que sai do volume de controle, $\dot{m}_{sai} [M T^{-1}]$, em um dado tempo, pode ser descrita por:

$$\begin{aligned} \dot{m}_{sai} = & \left(v_x \rho_w + \frac{\partial(\rho_w v_x)}{\partial x} dx \right) (dz dy) + \left(v_y \rho_w + \frac{\partial(\rho_w v_y)}{\partial y} dy \right) (dx dz) \\ & + \left(v_z \rho_w + \frac{\partial(\rho_w v_z)}{\partial z} dz \right) (dx dy) \end{aligned} \quad (2.8)$$

Além disso, pode-se definir a massa armazenada por tempo no volume de controle, $\dot{m}_{arm} [M T^{-1}]$, como:

$$\dot{m}_{arm} = \dot{m}_{entra} - \dot{m}_{sai} \quad (2.9)$$

ou ainda,

$$\dot{m}_{arm} = \left[-\frac{\partial \rho_w v_x}{\partial x} - \frac{\partial \rho_w v_y}{\partial y} - \frac{\partial \rho_w v_z}{\partial z} \right] dx dy dz \quad (2.10)$$

Por outro lado, tem-se que a massa que ocupa os vazios de um volume de controle é dada por:

$$m_{arm} = \rho_w \theta (dx dy dz) \quad (2.11)$$

onde θ é o teor de umidade volumétrica [$L^3 L^{-3}$] e t é o tempo [T].

Logo, derivando a Eq. 2.11 em relação ao tempo, tem-se:

$$\dot{m}_{arm} = \frac{\partial(\rho_w \theta)}{\partial t} (dx dy dz) \quad (2.12)$$

Igualando a Eq. 2.10 à Eq. 2.12, obtém-se:

$$\frac{\partial \rho_w \theta}{\partial t} = -\frac{\partial \rho_w v_x}{\partial x} - \frac{\partial \rho_w v_y}{\partial y} - \frac{\partial \rho_w v_z}{\partial z} \quad (2.13)$$

Considerando que a água, para o nível de tensões do estudo, é incompressível, pode-se simplificar a Eq. 2.13 da seguinte forma:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\frac{\partial v_x}{\partial x} - \frac{\partial v_y}{\partial y} - \frac{\partial v_z}{\partial z} \quad (2.14)$$

Contudo, a fim de resolver a Eq. 2.14 é necessário definir matematicamente as componentes da velocidade. Por isso, o fluxo por unidade de área em cada direção pode ser expresso pela lei de Darcy-Buckingham (Buckingham, 1907; Narasimhan, 2004), que é a versão não-saturada da lei de Darcy, como mostrada a seguir:

$$v_x = -\frac{k_x(\psi)}{g} \frac{\partial \Phi}{\partial x} \quad (2.15)$$

$$v_y = -\frac{k_y(\psi)}{g} \frac{\partial \Phi}{\partial y} \quad (2.16)$$

$$v_z = -\frac{k_z(\psi)}{g} \frac{\partial \Phi}{\partial z} \quad (2.17)$$

onde $k_x(\psi)$, $k_y(\psi)$ e $k_z(\psi)$ são as funções de condutividade hidráulica expressas em termos da sucção, em cada uma das direções x , y e z , respectivamente, [LT^{-1}].

Substituindo a Eq. 2.6 nas Equações 2.15, 2.16, 2.17, pode-se obter as seguintes expressões:

$$v_x = -\frac{k_x(\psi)}{\rho_w g} \frac{\partial \psi}{\partial x} \quad (2.18)$$

$$v_y = -\frac{k_y(\psi)}{\rho_w g} \frac{\partial \psi}{\partial y} \quad (2.19)$$

$$v_z = -k_z(\psi) \left(\frac{1}{\rho_w g} \frac{\partial \psi}{\partial z} - 1 \right) \quad (2.20)$$

Agora, substituindo as Equações 2.18, 2.19 e 2.20 na Equação 2.14 é possível obter a Equação de Richards para fluxo transiente não saturado em três dimensões:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{k_x(\psi)}{\rho_w g} \frac{\partial \psi}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{k_y(\psi)}{\rho_w g} \frac{\partial \psi}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[k_z(\psi) \left(\frac{1}{\rho_w g} \frac{\partial \psi}{\partial z} - 1 \right) \right] \quad (2.21)$$

Percebe-se que a Eq. 2.21 possui, como variáveis, tanto a sucção quanto o teor de umidade volumétrica. Todavia, θ e ψ são dependentes entre si, o que permite reescrever a equação com apenas uma das variáveis. Para tanto, deve-se utilizar o conceito da difusividade do fluido em um meio não saturado. As formulações das difusividades não-saturadas são:

$$D_x(\theta) = \frac{k_x(\theta)}{\rho_w g} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \quad (2.22)$$

$$D_y(\theta) = \frac{k_y(\theta)}{\rho_w g} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \quad (2.23)$$

$$D_z(\theta) = \frac{k_z(\theta)}{\rho_w g} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \quad (2.24)$$

onde D_x , D_y e D_z são a difusividade nas direções x , y e z , respectivamente, [L^2T^{-1}].

Sabendo-se que:

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial x} \quad (2.25)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial y} = \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial y} \quad (2.26)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial z} = \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial z} \quad (2.27)$$

a Equação 2.21 pode ser reescrita, fazendo uso da Eq. 2.22 à Eq. 2.27, da seguinte forma:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial z} - k_z(\theta) \right) \quad (2.28)$$

2.2.1 Linearização da EDP

Antes de encontrar uma solução para a Eq. 2.28 é necessário linearizá-la.

Sabe-se que a derivada da condutividade hidráulica não saturada pode ser descrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial k_z(\theta)}{\partial z} = \frac{\partial k_z(\theta)}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial z} \quad (2.29)$$

Logo, definindo o coeficiente de advecção, a_s ($[LT^{-1}]$) não saturado como:

$$a_s(\theta) = \frac{\partial k_z(\theta)}{\partial \theta} \quad (2.30)$$

a Eq. 2.29 pode reescrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial k_z(\theta)}{\partial z} = a_s(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial z} \quad (2.31)$$

Fazendo uso da Eq. 2.31, a Eq. 2.28 pode ser reformulada como a seguir:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial z} \right) - a_s(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial z} \quad (2.32)$$

Para desenvolver a Eq. 2.32 é necessário definir os modelos constitutivos de condutividade hidráulica não saturada e difusividade não saturada. Para isso, Cavalcante & Zornberg (2016) propõe que a sucção, em função do teor de umidade volumétrica, seja expressa da seguinte forma:

$$\psi(\theta) = \frac{1}{\delta} \ln \left(\frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right) \quad (2.33)$$

onde θ_s é o teor volumétrica de umidade saturado [L^3L^{-3}], θ_r é o teor volumétrica de umidade residual [L^3L^{-3}] e δ é um parâmetro hidráulico de ajuste [$M^{-1}LT^2$].

Sendo assim, a derivada da Eq. 2.33 é:

$$\frac{\partial\psi}{\partial\theta} = \frac{1}{\delta(\theta - \theta_r)} \quad (2.34)$$

Além disso, a condutividade hidráulica não saturada não-saturada foi definida por Cavalcante & Zornberg (2016, *in press*) como:

$$k_x(\theta) = k_{sx} \frac{(\theta - \theta_r)}{(\theta_s - \theta_r)} \quad (2.35)$$

$$k_y(\theta) = k_{sy} \frac{(\theta - \theta_r)}{(\theta_s - \theta_r)} \quad (2.36)$$

$$k_z(\theta) = k_{sz} \frac{(\theta - \theta_r)}{(\theta_s - \theta_r)} \quad (2.37)$$

onde k_{sx} , k_{sy} e k_{sz} são as condutividades hidráulicas saturadas nas direções x , y e z , [LT^{-1}].

A partir das Equações 2.35, 2.36 e 2.37, as derivadas das condutividades hidráulicas não saturadas são:

$$\frac{\partial k_x(\theta)}{\partial\theta} = \frac{k_{sx}}{(\theta_s - \theta_r)} \quad (2.38)$$

$$\frac{\partial k_y(\theta)}{\partial\theta} = \frac{k_{sy}}{(\theta_s - \theta_r)} \quad (2.39)$$

$$\frac{\partial k_z(\theta)}{\partial\theta} = \frac{k_{sz}}{(\theta_s - \theta_r)} \quad (2.40)$$

Denomina-se, portanto, o coeficiente de advecção não-saturada constante, na direção z , como:

$$\bar{a}_s = \frac{k_{sz}}{(\theta_s - \theta_r)} \quad (2.41)$$

Combinando a Eq. 2.22 às Equações 2.34 e 2.35, a difusividade não-saturada constante em x pode ser expressa da seguinte forma:

$$\bar{D}_x = \frac{k_{sx}}{\rho_w g (\theta_s - \theta_r) \delta} \quad (2.42)$$

Já combinando a Eq. 2.23 às Equações 2.34 e 2.36, a difusividade não saturada constante em y pode ser expressa da seguinte forma:

$$\bar{D}_y = \frac{k_{sy}}{\rho_w g (\theta_s - \theta_r) \delta} \quad (2.43)$$

Similarmente, combinando a Eq. 2.24 às Equações 2.34 e 2.37, a difusividade não saturada constante em z pode ser expressa da seguinte forma:

$$\bar{D}_z = \frac{k_{sz}}{\rho_w g (\theta_s - \theta_r) \delta} \quad (2.44)$$

A partir das definições de \bar{a}_s , \bar{D}_x , \bar{D}_y e \bar{D}_z , Cavalcante & Zornberg (2016, *in press*) reformularam a Eq. 2.32 como:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \bar{D}_x \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \bar{D}_y \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} + \bar{D}_z \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} - \bar{a}_s \frac{\partial \theta}{\partial z} \quad (2.45)$$

Ao simplificar a Eq. 2.45 para um plano vertical tem-se:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \bar{D}_x \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \bar{D}_z \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} - \bar{a}_s \frac{\partial \theta}{\partial z} \quad (2.46)$$

Ao simplificar a Eq. 2.45 para um plano horizontal tem-se:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \bar{D}_x \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \bar{D}_y \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} \quad (2.47)$$

Por fim, para obter a linearização da Eq. 2.28 somente na direção vertical, basta tomar a Eq. 2.45 e considerar apenas os termos da direção z . Assim, a equação linear de Richards é descrita por Cavalcante & Zornberg (2016, *in press*) como:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \bar{D}_z \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} - \bar{a}_s \frac{\partial \theta}{\partial z} \quad (2.48)$$

É notável a relação entre a Eq. 2.48 com a equação que descreve o fenômeno de advecção-dispersão (Eq. 2.49), como vista a seguir:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_h \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - v_s \frac{\partial c}{\partial z} \quad (2.49)$$

onde c é a concentração do contaminante no meio em função do tempo e espaço [ML^{-3}], D_h é o coeficiente de dispersão hidrodinâmico longitudinal [L^2T^{-1}] e v_s é a velocidade de percolação do contaminante [LT^{-2}].

Logo, pode-se concluir que o fenômeno de advecção-dispersão de contaminantes é análogo ao fenômeno de transporte de água em um meio não saturado. Assim pode-se obter as soluções não apenas para casos restritos do fenômeno de fluxo não saturado, tal como acreditava-se (Celia et al., 1990), mas para todos os casos que há solução para a equação de dispersão-advecção. Todavia, o uso das soluções de um fenômeno para o outro deve ser feito considerando a diferente interpretação física para cada caso.

2.3 Interpretação gráfica das variáveis

As equações propostas por Cavalcante & Zornberg (2016, *in press*) possuem uma grande vantagem sobre as demais formulações: definem com simplicidade matemática expressões e com significado físico em cada um dos parâmetros. Portanto, é de grande valia analisar graficamente o comportamento das equações mostradas no tópico anterior.

A curva característica para fluxo não saturado é a representação gráfica de como a sucção varia com o teor de umidade volumétrica. Cavalcante & Zornberg (2016, *in press*) formularam uma curva característica para solos com uma dimensão de distribuição de poros (unimodal). Como geralmente representa-se a curva em função do módulo da sucção, a Eq. 2.33 pode ser adaptada da seguinte forma:

$$\theta(|\psi|) = \theta_r + (\theta_s - \theta_r) e^{-|\psi|^\delta} \quad (2.50)$$

A representação gráfica da Eq. 2.50 é a seguinte:

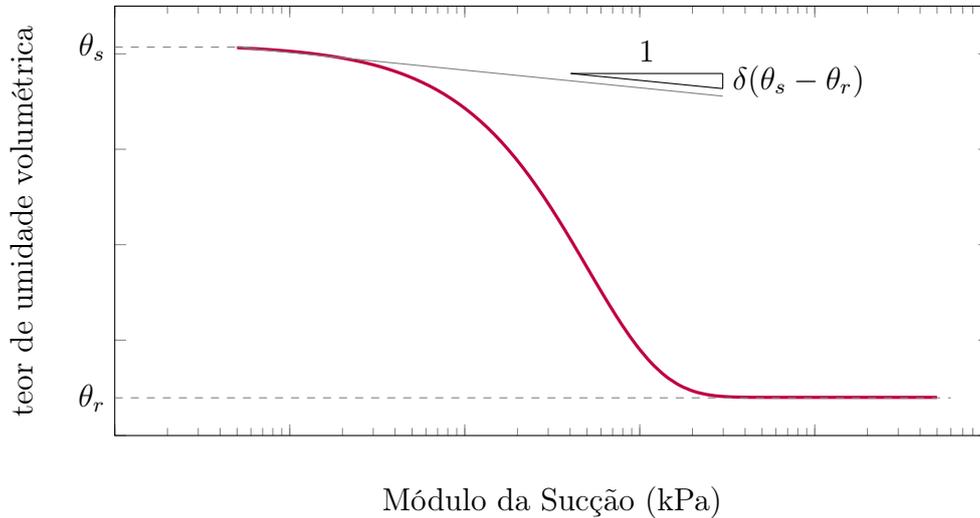


Figura 2.4: Teor de umidade volumétrica a partir do módulo da sucção.

Ao reescrever a função de condutividade hidráulica não saturada da Eq. 2.37 em termos de módulo de sucção, tem-se a seguinte expressão:

$$k_z(|\psi|) = k_s e^{-\delta|\psi|} \quad (2.51)$$

Qualitativamente, o comportamento da condutividade hidráulica a partir da variação do módulo da sucção pode ser percebida pela Figura 2.5.

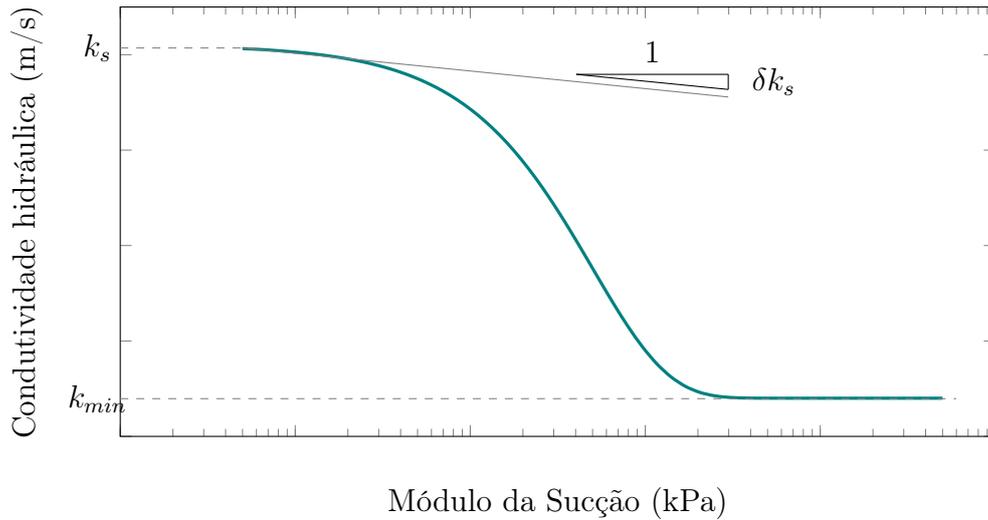


Figura 2.5: Condutividade hidráulica a partir da sucção.

Por fim, na Figura 2.6, demonstra-se como varia o comportamento do coeficiente de advecção hidráulica.

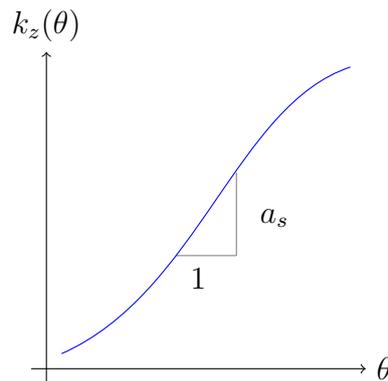


Figura 2.6: Interpretação física do coeficiente de advecção não saturado a_s

Assim como mostrado na Eq. 2.41, admite-se que quando o teor de umidade volumétrica não é próximo do residual, nem da saturação, o coeficiente a_s é constante. Isso porque, em uma faixa de umidade intermediária, os caminhos preferenciais de percolação da água já estão estabelecidos e as bolhas oclusas não exercem significativa influência ainda.

3 MÉTODO DAS DIFERENÇAS FINITAS

3.1 Discretização de 1ª ordem da Equação de Richards em 1D

A fim de obter uma formulação numérica que represente a Eq. 2.48 é necessário discretizá-la. Para isso, é preciso fazer uso da expansão polinomial de Taylor para duas variáveis, tempo e espaço. Assim, a expansão bidimensional de Taylor até a ordem n pode ser descrita como (Weir, 2009):

$$\theta(z + \Delta z, t + \Delta t) = \theta(z, t) + \left(\Delta z \frac{\partial \theta}{\partial z} + \Delta t \frac{\partial \theta}{\partial t} \right) \Big|_{(z,t)} + \dots + \frac{1}{n!} \left(\Delta z \frac{\partial}{\partial z} + \Delta t \frac{\partial}{\partial t} \right)^n \theta \Big|_{(z,t)} \quad (3.1)$$

onde $\theta(z + \Delta z, t + \Delta t)$ é a função θ avaliada em z e t , com os respectivos acréscimos Δz e Δt .

Agora deve-se fazer uso da expansão de Taylor para descrever o problema de forma discreta tal como Causon & Mingham (2010) e demais cientistas fizeram.

Considerando-se apenas a primeira ordem de diferenciação da expansão da Eq. 3.1, tem-se:

$$\theta(z + \Delta z, t + \Delta t) \simeq \theta(z, t) + \left(\Delta z \frac{\partial \theta}{\partial z} + \Delta t \frac{\partial \theta}{\partial t} \right) \Big|_{(z,t)} \quad (3.2)$$

Avaliando-se a Eq. 3.2 apenas com o acréscimo Δz na direção z , tem-se:

$$\theta_{j+1}^n \simeq \theta_j^n + \Delta z \frac{\partial \theta_j^n}{\partial z} \quad (3.3)$$

tal que:

$$\theta_{j+j_o}^{n+n_o} = \theta(z + j_o \Delta z, t + n_o \Delta t); \quad j_o, n_o \in \mathfrak{R} \quad (3.4)$$

Reordenando-se a Eq. 3.3, é possível definir a derivada da função em relação ao espaço da seguinte forma:

$$\frac{\partial \theta(z, t)}{\partial z} \simeq \frac{\theta_{j+1}^n - \theta_j^n}{\Delta z} \quad (3.5)$$

Para calcular a expressão equivalente à segunda derivada basta utilizar a formulação da Eq. 3.5 iterativamente (Ozisk et al., 1994). Assim, a derivada de segunda ordem pode ser definida como:

$$\frac{\partial^2 \theta(z, t)}{\partial z^2} \simeq \frac{\frac{\theta_{j+1}^n - \theta_j^n}{\Delta z} - \frac{\theta_j^n - \theta_{j-1}^n}{\Delta z}}{\Delta z} \quad (3.6)$$

Sendo que, a simplificação da Eq. 3.6 pode ser expressa como:

$$\frac{\partial^2 \theta(z, t)}{\partial z^2} \simeq \frac{\theta_{j+1}^n - 2\theta_j^n + \theta_{j-1}^n}{\Delta z^2} \quad (3.7)$$

Semelhantemente, pode-se encontrar, a partir da Eq. 3.2, a equivalência da derivada temporal em função do passo de tempo Δt . Ao realizar tais manipulações o resultado obtido é:

$$\frac{\partial \theta(z, t)}{\partial t} \simeq \frac{\theta_j^{n+1} - \theta_j^n}{\Delta t} \quad (3.8)$$

A fim de obter uma discretização de primeira ordem da Eq. 2.48, com as diferenças em avanço, basta utilizar as aproximações mostradas nas Equações 3.5, 3.7 e 3.8, como a seguir:

$$\frac{\theta_j^{n+1} - \theta_j^n}{\Delta t} \simeq \bar{D}_s \frac{\theta_{j+1}^n - 2\theta_j^n + \theta_{j-1}^n}{\Delta z^2} - \bar{a}_s \frac{\theta_{j+1}^n - \theta_j^n}{\Delta z} \quad (3.9)$$

Agrupando os termos de mesmo passo temporal e espacial da função θ , tem-se:

$$\theta_j^{n+1} \simeq \kappa_{-1} \theta_{j-1}^n + \kappa_0 \theta_j^n + \kappa_1 \theta_{j+1}^n \quad (3.10)$$

onde:

$$\kappa_{-1} = \frac{\bar{D}_s \Delta t}{\Delta z^2} \quad (3.11)$$

$$\kappa_0 = 1 - 2 \frac{\bar{D}_s \Delta t}{\Delta z^2} + \frac{\bar{a}_s \Delta t}{\Delta z} \quad (3.12)$$

$$\kappa_1 = \frac{\bar{D}_s \Delta t}{\Delta z^2} - \frac{\bar{a}_s \Delta t}{\Delta z} \quad (3.13)$$

Sendo que a condição de estabilidade, para a discretização na direção z , em uma simulação numérica, é (Chan, 1984):

$$2 \frac{\bar{D}_z \Delta t}{\Delta z^2} - \frac{\bar{a}_s \Delta t}{\Delta z} < 1 \quad (3.14)$$

A condição de estabilidade da Eq. 3.14 pode ser reescrita a luz a da Equação 3.12, da seguinte forma:

$$\kappa_0 > 0 \quad (3.15)$$

Caso se queira simular o fluxo não saturado para as direções horizontais, a saber, x e y , deve-se fazer uma consideração. A constante \bar{a}_s só se aplica à direção z e não para x nem y , uma vez que está associada à advecção causada pela aceleração gravitacional.

Assim, as constantes numéricas κ_{-1} , κ_0 e κ_1 para a direção x são reescritas da seguinte forma, respectivamente:

$$\kappa_{-1} = \frac{\overline{D}_s \Delta t}{\Delta x^2} \quad (3.16)$$

$$\kappa_0 = 1 - 2 \frac{\overline{D}_s \Delta t}{\Delta x^2} \quad (3.17)$$

$$\kappa_1 = \frac{\overline{D}_s \Delta t}{\Delta x^2} \quad (3.18)$$

Já para a direção y , as constantes κ_{-1} , κ_0 e κ_1 são:

$$\kappa_{-1} = \frac{\overline{D}_s \Delta t}{\Delta y^2} \quad (3.19)$$

$$\kappa_0 = 1 - 2 \frac{\overline{D}_s \Delta t}{\Delta y^2} \quad (3.20)$$

$$\kappa_1 = \frac{\overline{D}_s \Delta t}{\Delta y^2} \quad (3.21)$$

Assim, tanto para a direção x ou y a condição de estabilidade ainda prevalece como:

$$\kappa_0 > 0 \quad (3.22)$$

3.2 Condições de Contorno em 1D

A discretização da Eq. 2.48 representada pela Eq. 3.10 descreve como ocorre o fenômeno de transporte em meio não saturado em um domínio Ω . Todavia, o fenômeno ocorre limitado a condições de contorno expressas em $\partial\Omega$.

3.2.1 Condição de Neumann 1D

A primeira condição de contorno a ser citada é a condição de contorno de Neumann. Tal condição estabelece que a primeira derivada espacial da função, avaliada em $\partial\Omega \subset \mathfrak{R}^n$, é uma função escalar. Matematicamente, pode-se descrever a condição de Neumann como (Pao, 2013; Cortazar et al. 2008):

$$\frac{\partial\theta}{\partial n} = \nu(z, t); \quad \forall z \in \partial\Omega; \quad t \in \mathfrak{R}^+ \quad (3.23)$$

onde n é a normal à fronteira, $\partial\Omega$ é a fronteira e $\nu(z, t)$ é uma função escalar.

Usualmente, em fenômenos de natureza apenas difusiva, a condição de Neumann serve para representar fronteiras de duas formas. A primeira forma mais comum de utilizar a

condição de Neumann é quando há uma entrada ou saída constante de fluido (El-Zein, 2007; Ghasemizadeh et al., 2015). Para tanto, deve-se assinalar a função escalar $\nu(z, t)$ como uma constante c . Matematicamente, pode ser definida da seguinte forma:

$$\frac{\partial \theta}{\partial n} = c; \quad c \in \Re \quad (3.24)$$

Tratando-se apenas da dimensão z , a Eq. 3.24 pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$\frac{\partial \theta}{\partial z} = c \quad (3.25)$$

A segunda forma é quando a fronteira é impermeável ao fenômeno difusivo, tornando a função escalar $\nu(z, t)$ nula (Bear et al., 2012). Nota-se que isso é um caso particular da primeira forma. Matematicamente, essa fronteira pode ser definida como:

$$\frac{\partial \theta}{\partial n} = 0 \quad (3.26)$$

Pode-se descrever a condição de contorno de Neumann de forma discreta. Para isso, deve-se utilizar a expansão de Taylor e fazer uso dos termos até a derivada de primeira ordem (Thomas, 2010).

Combinando a Eq. 3.5 e a Eq. 3.23, a condição de contorno de Neumann, com a diferença Δz em avanço, é a seguinte:

$$\frac{\theta(z + \Delta z, t) - \theta(z, t)}{\Delta z} = \nu(z, t) \quad (3.27)$$

ou ainda,

$$\theta(z + \Delta z, t) = \theta(z, t) + \Delta z \nu(z, t) \quad (3.28)$$

Já, quando a formulação está com a diferença Δz em atraso, a formulação da condição de Neumann é a seguinte:

$$\frac{\theta(z, t) - \theta(z - \Delta z, t)}{\Delta z} = \nu(z, t) \quad (3.29)$$

ou,

$$\theta(z - \Delta z, t) = \theta(z, t) - \Delta z \nu(z, t) \quad (3.30)$$

3.2.2 Condição de Dirichlet 1D

Outra condição de contorno necessária à resolução da equação de Richards é a condição de Dirichlet. Nessa condição, a função θ é igualada a uma função escalar, quando avaliada no contorno $\partial\Omega \subset \Re^n$. Matematicamente, essa condição de contorno pode ser descrita como (Pao, 2013):

$$\theta = \delta(z, t); \quad \forall z \in \partial\Omega; \quad t \in \mathfrak{R}^+ \quad (3.31)$$

onde $\delta(z, t)$ é uma função escalar.

Tal condição de contorno serve para informar que uma determinada concentração de fluido é constante em um ponto do contorno (van Genuchten et al., 2013), para um determinado tempo.

Ao aplicar as condições de Dirichlet para o domínio discretizado, tem-se que:

$$\theta(z, t) = \delta(z, t) \quad (3.32)$$

ou ainda, em avanço,

$$\theta(z + \Delta z, t) = \delta(z + \Delta z, t) \quad (3.33)$$

ou também, em atraso,

$$\theta(z - \Delta z, t) = \delta(z - \Delta z, t) \quad (3.34)$$

3.2.3 Condição de Robin 1D

Para as equações diferenciais em geral é possível ainda estabelecer condições mistas. Tais condições são denominadas Robin e linearmente combinam condições de Neumann e Dirichlet em um mesmo ponto. Matematicamente, a condição de contorno de Robin pode ser definida como (Pao, 2013):

$$\alpha(z, t)\theta + \beta(z, t)\frac{\partial\theta}{\partial n} = \gamma(z, t); \quad \forall z \in \partial\Omega; \quad t \in \mathfrak{R}^+ \quad (3.35)$$

onde $\alpha(z, t)$, $\beta(z, t)$ e $\gamma(z, t)$ são funções escalares.

Nota-se que quando a função escalar α é identicamente nula a Eq. 3.35 passa a retratar uma condição de Neumann, como a seguir:

$$\frac{\partial\theta}{\partial n} = \frac{\gamma(z, t)}{\beta(z, t)} \quad (3.36)$$

tal que,

$$\frac{\gamma(z, t)}{\beta(z, t)} = \nu(z, t) \quad (3.37)$$

Entretanto, caso a função escalar β seja identicamente nula, a Eq. 3.35 passa a retratar uma condição de Dirichlet, como a seguir:

$$\theta = \frac{\gamma(z, t)}{\alpha(z, t)} \quad (3.38)$$

tal que,

$$\frac{\gamma(z, t)}{\alpha(z, t)} = \delta(z, t) \quad (3.39)$$

A vantagem de descrever as condições de contorno a partir da condição de Robin é que tanto a condição de Neumann como a de Dirichlet são apenas um caso específico. Para fenômenos difusivos-advectivos, as condições de Robin geralmente descrevem um fluxo estabelecido a partir do contorno (Hsieh & Yeh, 2014). Ou seja, a condição de Robin descreve que há um fluxo determinado a partir da fronteira. Com isso é possível determinar tanto entradas constantes de umidade, quanto zonas impermeáveis. Analiticamente, tem-se que uma fronteira com velocidade v_0 possui a seguinte condição de Robin:

$$k_z(\theta) - \overline{D}_z \frac{\partial \theta}{\partial z} = v_0 \quad (3.40)$$

onde v_0 é a velocidade de entrada do fluido na fronteira [LT^{-1}].

Abrindo a expressão da Eq. 3.40, com base na Eq. 2.37, tem-se:

$$k_{sz} \frac{(\theta - \theta_r)}{(\theta_s - \theta_r)} - \overline{D}_z \frac{\partial \theta}{\partial z} = v_0 \quad (3.41)$$

Isso implica que as funções escalares α , β e γ sejam, respectivamente:

$$\alpha(z, t) = \frac{k_{sz}}{(\theta_s - \theta_r)} \quad (3.42)$$

$$\beta(z, t) = -\overline{D}_z \quad (3.43)$$

$$\gamma(z, t) = v_0 + \frac{(k_{sz} \theta_r)}{(\theta_s - \theta_r)} \quad (3.44)$$

A forma discreta da Eq. 3.35, com o passo Δz em avanço, é a seguinte:

$$\alpha(z + \Delta z, t) \theta(z + \Delta z, t) + \beta(z + \Delta z, t) \frac{\theta(z + \Delta z, t) - \theta(z, t)}{\Delta z} = \gamma(z + \Delta z, t) \quad (3.45)$$

ou ainda,

$$\theta(z + \Delta z, t) = \frac{\gamma(z + \Delta z, t) \Delta z + \beta(z + \Delta z, t) \theta(z, t)}{\alpha(z + \Delta z, t) \Delta z + \beta(z + \Delta z, t)} \quad (3.46)$$

A condição de Robin com o passo em atraso é o seguinte:

$$\alpha(z - \Delta z, t) \theta(z - \Delta z, t) + \beta(z - \Delta z, t) \frac{\theta(z, t) - \theta(z - \Delta z, t)}{\Delta z} = \gamma(z - \Delta z, t) \quad (3.47)$$

ou,

$$\theta(z - \Delta z, t) = \frac{\gamma(z - \Delta z, t)\Delta z - \beta(z - \Delta z, t) \theta(z, t)}{\alpha(z - \Delta z, t) \Delta z - \beta(z - \Delta z, t)} \quad (3.48)$$

3.3 Discretização de 1ª ordem da Equação de Richards em 2D

Para deduzir a formulação do MDI 2D é necessário realizar a discretização da Eq. 2.46 com termos de primeira ordem. Para isso, utiliza-se a expansão de Taylor para duas variáveis espaciais (x e z) e uma variável temporal (t). Logo, a expansão de Taylor para as três variáveis pode ser expressa como (Weir et al., 2009):

$$\begin{aligned} \theta(x + \Delta x, z + \Delta z, t + \Delta t) = & \theta(x, z, t) + \left(\Delta x \frac{\partial \theta}{\partial x} + \Delta z \frac{\partial \theta}{\partial z} + \Delta t \frac{\partial \theta}{\partial t} \right) \Bigg|_{(x,z,t)} + \dots \\ & + \frac{1}{n!} \left(\Delta x \frac{\partial}{\partial x} + \Delta z \frac{\partial}{\partial z} + \Delta t \frac{\partial}{\partial t} \right)^n \theta \Bigg|_{(x,z,t)} \end{aligned} \quad (3.49)$$

onde $\theta(x + \Delta x, z + \Delta z, t + \Delta t)$ é a função θ avaliada em x , y e z com os respectivos acréscimos Δx , Δz e Δt .

Considerando-se apenas o termo de primeira ordem da Eq. 3.49 tem-se a seguinte expressão:

$$\theta(x + \Delta x, z + \Delta z, t + \Delta t) \simeq \theta(x, z, t) + \left(\Delta x \theta_x + \Delta z \frac{\partial \theta}{\partial z} + \Delta t \frac{\partial \theta}{\partial t} \right) \Bigg|_{(x,z,t)} \quad (3.50)$$

Avaliando-se a função θ apenas com acréscimo na direção x , tem-se:

$$\theta(x + \Delta x, z, t) \simeq \theta(x, z, t) + \Delta x \frac{\partial \theta(x, z, t)}{\partial x} \quad (3.51)$$

Reordenando-se a Eq. 3.51, obtém-se a seguinte expressão:

$$\frac{\partial \theta(x, z, t)}{\partial x} \simeq \frac{\theta(x + \Delta x, z, t) - \theta(x, z, t)}{\Delta x} \quad (3.52)$$

Aplicando-se o conceito da Eq. 3.52 iterativamente, a segunda derivada em relação a x pode ser aproximada por:

$$\frac{\partial^2 \theta(x, z, t)}{\partial x^2} \simeq \frac{\theta(x + \Delta x, z, t) - 2\theta(x, z, t) + \theta(x - \Delta x, z, t)}{\Delta x^2} \quad (3.53)$$

Repetindo-se os mesmos passos para a direção z , é possível obter

$$\frac{\partial \theta(x, z, t)}{\partial z} \simeq \frac{\theta(x, z + \Delta z, t) - \theta(x, z, t)}{\Delta z} \quad (3.54)$$

e também

$$\frac{\partial^2 \theta(x, z, t)}{\partial z^2} \simeq \frac{\theta(x, z + \Delta z, t) - 2\theta(x, z, t) + \theta(x, z - \Delta z, t)}{\Delta z^2} \quad (3.55)$$

Agora, para o tempo t , a primeira derivada pode ser descrita como:

$$\frac{\partial \theta(x, z, t)}{\partial t} \simeq \frac{\theta(x, z, t + \Delta t) - \theta(x, z, t)}{\Delta t} \quad (3.56)$$

A partir das Equações 3.53, 3.54, 3.55 e 3.56 a Equação 2.46 pode ser discretizada da seguinte forma:

$$\frac{\theta_{i,j}^{n+1} - \theta_{i,j}^n}{\Delta t} \simeq \overline{D}_x \frac{\theta_{i+1,j}^n - 2\theta_{i,j}^n + \theta_{i-1,j}^n}{\Delta x^2} + \overline{D}_z \frac{\theta_{i,j+1}^n - 2\theta_{i,j}^n + \theta_{i,j-1}^n}{\Delta z^2} - \overline{a}_s \frac{\theta_{i,j+1}^n - \theta_{i,j}^n}{\Delta z} \quad (3.57)$$

onde,

$$\theta_{i,j}^n = \theta(x_i, z_j, t_n); \quad i, j, n \in N \quad (3.58)$$

Pode-se reorganizar a Eq. 3.57 da seguinte maneira:

$$\theta_{i,j}^{n+1} = \kappa_{0,0} \theta_{i,j}^n + \kappa_{0,-1} \theta_{i,j-1}^n + \kappa_{1,0} \theta_{i+1,j}^n + \kappa_{0,1} \theta_{i,j+1}^n + \kappa_{-1,0} \theta_{i-1,j}^n \quad (3.59)$$

onde,

$$\kappa_{0,0} = 1 - 2 \frac{\overline{D}_x \Delta t}{\Delta x^2} - 2 \frac{\overline{D}_z \Delta t}{\Delta z^2} + \frac{\overline{a}_s \Delta t}{\Delta z} \quad (3.60)$$

$$\kappa_{0,-1} = \frac{\overline{D}_z \Delta t}{\Delta z^2} \quad (3.61)$$

$$\kappa_{1,0} = \frac{\overline{D}_x \Delta t}{\Delta x^2} \quad (3.62)$$

$$\kappa_{0,1} = \frac{\overline{D}_z \Delta t}{\Delta z^2} - \frac{\overline{a}_s \Delta t}{\Delta z} \quad (3.63)$$

$$\kappa_{-1,0} = \frac{\overline{D}_x \Delta t}{\Delta x^2} \quad (3.64)$$

Sendo que a condição de estabilidade, em uma simulação numérica, é (Chan, 1984):

$$2 \frac{\overline{D}_x \Delta t}{\Delta x^2} + 2 \frac{\overline{D}_z \Delta t}{\Delta z^2} - \frac{\overline{a}_s \Delta t}{\Delta z} < 1 \quad (3.65)$$

A condição de estabilidade também pode ser descrita a partir do coeficiente $\kappa_{0,0}$ combinando as Equações 3.60 e 3.65, da seguinte forma:

$$\kappa_{0,0} > 0 \quad (3.66)$$

Caso deseje-se discretizar a equação no plano $y - z$, as formulações apresentadas da Eq. 3.60 à Eq. 3.66 mantêm-se válidas, uma vez que não há diferença entre os eixos x e y e que a escolha de cada um é arbitrária. Todavia, caso queira-se discretizar a equação no plano $x - y$, há mudança nos coeficientes. Assim como mostrado no caso 1D, o coeficiente a_s é válido apenas para a direção z , uma vez que está associado à advecção causada pela aceleração da gravidade. Assim, para o plano $x - y$ os coeficientes $\kappa_{0,0}$, $\kappa_{0,-1}$, $\kappa_{1,0}$, $\kappa_{0,1}$ e $\kappa_{-1,0}$ podem, respectivamente, serem reescritos da seguinte maneira:

$$\kappa_{0,0} = 1 - \frac{2\bar{D}_x\Delta t}{\Delta x^2} - \frac{2\bar{D}_y\Delta t}{\Delta y^2} \quad (3.67)$$

$$\kappa_{0,-1} = \frac{\bar{D}_y\Delta t}{\Delta y^2} \quad (3.68)$$

$$\kappa_{1,0} = \frac{\bar{D}_x\Delta t}{\Delta x^2} \quad (3.69)$$

$$\kappa_{0,1} = \frac{\bar{D}_y\Delta t}{\Delta y^2} \quad (3.70)$$

$$\kappa_{-1,0} = \frac{\bar{D}_x\Delta t}{\Delta x^2} \quad (3.71)$$

Neste caso a condição de estabilidade pode ser descrita como (Chan, 1984):

$$2\frac{\bar{D}_x\Delta t}{\Delta x^2} + 2\frac{\bar{D}_y\Delta t}{\Delta y^2} < 1 \quad (3.72)$$

ou ainda,

$$\kappa_{0,0} > 0 \quad (3.73)$$

3.4 Condições de Contorno em 2D

Assim como visto no caso 1D, a resolução de uma equação diferencial em um domínio Ω é essencialmente influenciada pelas condições no contorno $\partial\Omega$ e pelas condições iniciais. A formulação discreta descrita na Eq. 3.59 não é suficiente para descrever o fenômeno de fluxo em meios não saturados para duas dimensões, para quaisquer condições de contorno. Por isso, deve-se considerar as condições de Neumann, Dirichlet e Robin em 2D.

3.4.1 Condição de Neumann 2D

A condição de contorno de Neumann para duas dimensões pode ser descrita da seguinte forma (Arfken, 2005):

$$\frac{\partial \theta}{\partial n} = \nu(x, z, t) \quad ; \quad x, z \in \partial \Omega \quad ; \quad t \in \mathfrak{R}^+ \quad (3.74)$$

onde n é a normal à fronteira, sendo igual a $\hat{i} = (1, 0, 0)$ ou a $\hat{k} = (0, 0, 1)$ e $\nu(x, z, t)$ é uma função escalar.

Quando $n = \hat{i}$, a condição de Neumann pode ser descrita simplesmente por:

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} = \nu(x, z, t) \quad (3.75)$$

De forma discreta e com Δx em atraso, a Eq. 3.75 pode ser descrita da seguinte forma:

$$\frac{\theta(x, z, t) - \theta(x - \Delta x, z, t)}{\Delta x} = \nu(x - \Delta x, z, t) \quad (3.76)$$

$$\theta(x - \Delta x, z, t) = \theta(x, z, t) - \nu(x - \Delta x, z, t) \Delta x \quad (3.77)$$

Já com Δx em avanço, a Eq. 3.75 pode ser expressa como:

$$\frac{\theta(x + \Delta x, z, t) - \theta(x, z, t)}{\Delta x} = \nu(x + \Delta x, z, t) \quad (3.78)$$

$$\theta(x + \Delta x, z, t) = \theta(x, z, t) + \nu(x + \Delta x, z, t) \Delta x \quad (3.79)$$

Por sua vez, quando $n = \hat{k}$, a condição de Neumann pode ser descrita por:

$$\frac{\partial \theta}{\partial z} = \nu(x, z, t) \quad (3.80)$$

A forma discreta para a Eq. 3.80 pode ser obtida de forma semelhante à da dimensão x . Dessa forma, a condição de Neumann em atraso é dada por:

$$\theta(x, z - \Delta z, t) = \theta(x, z, t) - \nu(x, z - \Delta z, t) \Delta z \quad (3.81)$$

e em avanço é dada por:

$$\theta(x, z + \Delta z, t) = \theta(x, z, t) + \nu(x, z + \Delta z, t) \Delta z \quad (3.82)$$

3.4.2 Condição de Dirichlet 2D

A condição de Dirichlet para duas dimensões pode ser representada por (Pao, 2013):

$$\theta(x, z, t) = \delta(x, z, t) \quad \forall x, z \in \partial\Omega ; t \in \mathfrak{R}^+ \quad (3.83)$$

onde $\delta(x, z, t)$ é uma função escalar.

Para quando o passo Δx estiver em atraso e em avanço, tem-se, respectivamente:

$$\theta(x - \Delta x, z, t) = \delta(x - \Delta x, z, t) \quad (3.84)$$

$$\theta(x + \Delta x, z, t) = \delta(x + \Delta x, z, t) \quad (3.85)$$

Já quando o passo Δz estiver em atraso e em avanço a Eq. 3.83 pode ser descrita, respectivamente, como:

$$\theta(x, z - \Delta z, t) = \delta(x, z - \Delta z, t) \quad (3.86)$$

$$\theta(x, z + \Delta z, t) = \delta(x, z + \Delta z, t) \quad (3.87)$$

3.4.3 Condição de Robin 2D

Por mais, pode-se também expressar a condição de Robin para o caso bidimensional. Tal contorno pode ser expresso matematicamente da seguinte maneira (Pao, 2013):

$$\alpha(x, z, t)\theta + \beta(x, z, t)\frac{\partial\theta}{\partial n} = \gamma(x, z, t) \quad ; \forall x, z \in \partial\Omega ; t \in \mathfrak{R}^+ \quad (3.88)$$

onde $\alpha(x, z, t)$, $\beta(x, z, t)$ e $\gamma(x, z, t)$ são funções escalares.

Quando a função escalar $\alpha(x, z, t)$ for nula, simplifica-se a expressão da Eq. 3.88 para o caso da Eq. 3.74, como mostrado a seguir:

$$\beta(x, z, t)\frac{\partial\theta}{\partial n} = \gamma(x, z, t) \quad (3.89)$$

ou ainda,

$$\frac{\partial\theta}{\partial n} = \nu(x, z, t) \quad (3.90)$$

tal que,

$$\frac{\gamma(x, z, t)}{\beta(x, z, t)} = \nu(x, z, t) \quad (3.91)$$

Já quando a função escalar $\beta(x, z, t)$ for nula, simplifica-se a expressão da Eq. 3.88 para o caso da Eq. 3.83, como a seguir:

$$\alpha(x, z, t) \cdot \theta = \gamma(x, z, t) \quad (3.92)$$

ou ainda,

$$\theta = \delta(x, z, t) \quad (3.93)$$

onde,

$$\frac{\gamma(x, z, t)}{\alpha(x, z, t)} = \delta(x, z, t) \quad (3.94)$$

A partir das Equações 3.90 e 3.93 verifica-se que a condição de Robin é capaz de simplificar-se em condições de Neumann e Dirichlet. Para aplicar a condição de Robin para o MDI 2D basta discretizar a formulação da Eq. 3.88. Há, todavia, quatro formas de discretizá-la. A primeira forma de discretizá-la é com $n = \hat{i}$ e com o passo Δx em atraso:

$$\begin{aligned} & \alpha(x - \Delta x, z, t) \theta(x - \Delta x, z, t) + \\ & \beta(x - \Delta x, z, t) \frac{\theta(x, z, t) - \theta(x - \Delta x, z, t)}{\Delta x} = \gamma(x - \Delta x, z, t) \end{aligned} \quad (3.95)$$

ou ainda,

$$\theta(x - \Delta x, z, t) = \frac{\gamma(x - \Delta x, z, t) \Delta x - \beta(x - \Delta x, z, t) \theta(x, z, t)}{\alpha(x - \Delta x, z, t) \Delta x - \beta(x - \Delta x, z, t)} \quad (3.96)$$

Já quando $n = \hat{i}$ e o passo Δx está em avanço, tem-se:

$$\begin{aligned} & \alpha(x + \Delta x, z, t) \theta(x + \Delta x, z, t) + \\ & \beta(x + \Delta x, z, t) \frac{\theta(x + \Delta x, z, t) - \theta(x, z, t)}{\Delta x} = \gamma(x + \Delta x, z, t) \end{aligned} \quad (3.97)$$

ou,

$$\theta(x + \Delta x, z, t) = \frac{\gamma(x + \Delta x, z, t) \Delta x + \beta(x + \Delta x, z, t) \theta(x, z, t)}{\alpha(x + \Delta x, z, t) \Delta x + \beta(x + \Delta x, z, t)} \quad (3.98)$$

Entretanto, quando $n = \hat{k}$ e o passo Δz está em atraso, tem-se:

$$\begin{aligned} & \alpha(x, z - \Delta z, t) \theta(x, z - \Delta z, t) + \\ & \beta(x, z - \Delta z, t) \frac{\theta(x, z, t) - \theta(x, z - \Delta z, t)}{\Delta z} = \gamma(x, z - \Delta z, t) \end{aligned} \quad (3.99)$$

ou ainda,

$$\theta(x, z - \Delta z, t) = \frac{\gamma(x, z - \Delta z, t) \Delta z - \beta(x, z - \Delta z, t) \theta(x, z, t)}{\alpha(x, z - \Delta z, t) \Delta z - \beta(x, z - \Delta z, t)} \quad (3.100)$$

Por fim, quando $n = \hat{k}$ e o passo Δz está em avanço, tem-se:

$$\begin{aligned} &\alpha(x, z + \Delta z, t) \theta(x, z + \Delta z, t) + \\ &\beta(x, z + \Delta z, t) \frac{\theta(x, z + \Delta z, t) - \theta(x, z, t)}{\Delta z} = \gamma(x, z + \Delta z, t) \end{aligned} \quad (3.101)$$

ou,

$$\theta(x, z + \Delta z, t) = \frac{\gamma(x, z + \Delta z, t) \Delta z + \beta(x, z + \Delta z, t) \theta(x, z, t)}{\alpha(x, z + \Delta z, t) \Delta z + \beta(x, z + \Delta z, t)} \quad (3.102)$$

4 MATERIAIS E MÉTODOS

4.1 Materiais

Para a presente dissertação foram utilizados dois materiais:

- Microtomografia de material granular para a aplicação do método numérico proposto.
- Registro fotográfico de uma fissura em rocha também para a aplicação do método numérico proposto.

4.1.1 Microtomografia

A tomografia computadorizada é o processo de obtenção de imagens de diversas seções de um volume, por meio de emissões de espectros de radiações em representações geométricas das seções do volume analisado (Herman, 2009). Tal que, um computador controla e avalia a emissão, absorção e difração das emissões de radiação (Herman, 2009 e Zubeldia, 2013).

Stock (2008) definiu a microtomografia computadorizada como sendo o processo pelo qual obtém-se imagens tomográficas por meio de um computador de resolução maior que 50 microns. Os primeiros trabalhos que conseguiram alcançar tal resolução devem-se aos estudos de Jim Elliot (Elliot & Dover, 1982).

Na geotecnia, as primeiras aplicações da microtomografia como ferramenta de análise do solo se deu por Petrovic et al. (1982), Hainsworth & Aylmore (1983) e Crestana et al. (1985). Ainda vale ressaltar que aplicações cada vez mais rebuscadas tem sido realizadas por meio da microtomografia, tal como recentemente mostrado por Zubeldia (2013) e Ozelim (2014).

A microtomografia utilizada foi realizada e cedida por Zubeldia (2013) e Zubeldia et al. (2015). O tomógrafo utilizado para projeção e reconstrução das imagens foi um microtomógrafo de raios X de quarta geração, modelo SkyScan 1172, pertencente à Embrapa Instrumentação Agropecuária - São Carlos especificado pela Tabela 4.1.

Tabela 4.1: Especificações técnicas do tomógrafo SkyScan 1172 (Zubeldia, 2013)

Detectabilidade de detalhes	1 μm
Tamanho do pixel (Máx. Magnificação)	<0,8 μm
Fonte de raios X	Tempo de vida >1000h, 20-100 kV, 0-250 uA (10 W max)
Detector de raios X	Câmera de 10 Mpixeis (4000x2300) com CCD de 12 Bits
Tamanho máximo do objeto	68 mm de diâmetro (com câmera offset)
Algoritmo de reconstrução	Feixe cônico volumétrica (Feldcamp)
Níveis de radiação	<1 $\mu Sv/h$ em qualquer ponto da superfície

Zubeldia (2013) também descreve que o microtomógrafo é composto por: um tubo de

raios X de micro foco com alta tensão, um porta-amostra com manipulador de precisão e uma câmera CCD. Tais dispositivos estão conectados a um computador de controle e aquisição de dados (host), que por sua vez é interligado em rede a um cluster de computadores a fim de reconstruir as imagens tomográficas. Tal microtomógrafo por ser visto na Figura 4.1.



Figura 4.1: Tomógrafo SkyScan 1172 (Zubeldia, 2013).

O material tomografado foi uma areia de uso comum para construção, do Distrito Federal, fornecida pelo laboratório de Geotecnia da UnB. De acordo com Zubeldia (2013) e Zubeldia et al. (2015), pode-se classificar a areia como pura e mal graduada, a partir da análise do Sistema Unificado de Classificação de Solos (SUCS).

Para realizar a microtomografia moldou-se um corpo de prova de $1,69 \text{ g/cm}^3$. Uma perspectiva tridimensional do corpo de prova tomografado pode ser vista na Figura 4.2.

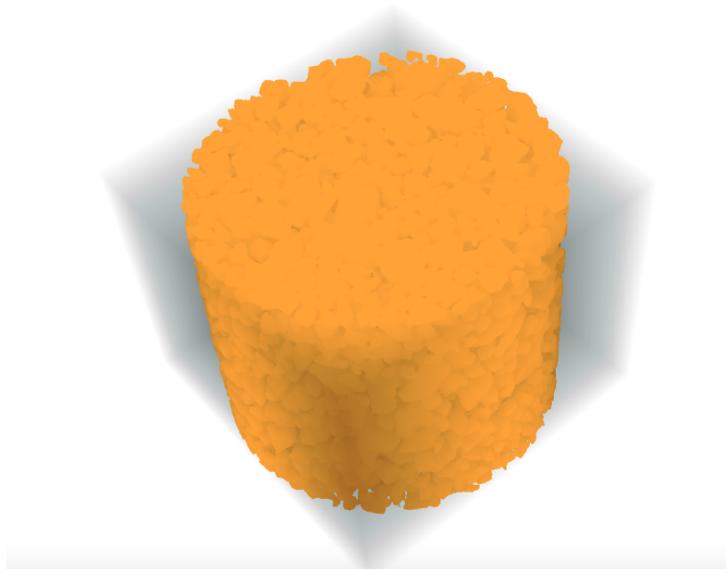


Figura 4.2: Perspectiva tridimensional da microtomografia

As imagens obtidas possuem resolução de 2000 x 2000 pixels, com precisão de $5,9 \mu m$ por pixel, e representam uma seção circular do corpo de prova. Todavia, para a simulação, a imagem da tomografia escolhida foi proporcionalmente reduzida para 308 x 308 pixels, com precisão de $38,31 \mu m$ por pixel.

4.1.2 Registro fotográfico

Para uma outra simulação da presente dissertação foi necessário utilizar um registro fotográfico de uma fissura em rocha. Para realizar a captura da imagem utilizou-se uma câmera com as seguintes especificações: 8 megapixels com $1,5 \mu$ pixels, abertura de f/2,2, cobertura de lentes de cristal de safira, lentes de cinco elementos, filtro IR híbrido, controle de exposição, auto HDR e auto estabilização de imagem.

A captura da fissura da rocha ocorreu na coordenadas $15^{\circ}43'59.9'' S 47^{\circ}51'49.0'' W$, localizado no Lago Norte, Distrito Federal. A imagem obtida possui uma resolução de 2448 x 3264 pixels. Por meio de uma escala milimetrada pôde-se verificar que cada pixel corresponde a $4,167 \cdot 10^{-5} m$ (Figura 4.3).



Figura 4.3: Captura da fissura em rocha com escala, recortada.

4.2 Métodos

4.2.1 Processamento de imagens

Para que a microtomografia e a imagem da fissura fossem utilizadas para as simulações foi necessário processar as imagens. O processamento das imagens serve para distinguir entre o domínio e o contorno de cada figura. Ou seja, o processamento de imagem serve para separar os pixels onde ocorre o fluxo não saturado e os pixels onde não ocorre. Logo, a solução adotada consiste em três etapas para a microtomografia e para a imagem da fissura.

O primeiro passo para a tomografia foi binarizar a imagem. O processo de binarização consistiu em calcular uma média do brilho dos pixels. Depois, atribuir, para os pixels mais escuros que a média, a cor preta e, para os pixels mais claros que a média, a cor branca. Assim, a nova imagem gerada passa a ter apenas duas cores - preta e branca. Para a tomografia considerou-se o fato de que os grãos do corpo de prova estavam limitados a um cilindro.

O segundo passo para a tomografia foi realizar um fechamento geodésico (*Geodesic closing*) a fim de que não haja "buracos" dentro dos grãos devido a possíveis limitações do algoritmo de binarização. Com isso, garante-se que os grãos que compõe a meso estrutura são representados inteiros, maciços.

O terceiro e último passo foi limitar os vazios do material à circunferência que circunscribe os grãos. Isso se deve ao fato que o corpo de prova tomografado estava limitado a um cilindro, e os vazios além desse cilindro não correspondem aos vazios do solo. Juntamente com essa detecção do cilindro, inverteu-se os esquemas cromáticos. Ou seja, trocou-se o preto pelo branco.

Já para a fissura, o primeiro passo foi binarizar a imagem. Com isso, atribuiu-se a cor preta para as partes mais escuras e branco para as cores mais claras.

Como algumas partes que não pertencem à fissura tiveram a cor preta atribuída na binarização, foi necessário retirá-los. Com isso, a segunda etapa para a fissura consiste em manter a cor preta apenas para a fissura e eliminar todas as formas menores.

Por fim, realizou-se o fechamento geodésico, a fim de que a fissura pudesse ficar plenamente preenchida em seu interior, apresentando uma continuidade.

Todos os processamentos de imagem foram feitos no Mathematica Wolfram 10.1 (WOLFRAM RESEARCH, 2015). O programa Mathematica foi concebido pelo físico Stephen Wolfram, sendo continuamente desenvolvido pela empresa Wolfram Research. O objetivo do programa é implementar funções que sejam úteis na aplicação, desenvolvimento e visualização de resultados nas áreas de engenharia, matemática, geoprocessamento, processamento de imagens, estatística, física. O intuito do programa, a partir da perspectiva da própria empresa, pode ser visto no sítio <http://www.wolfram.com/company/background.pt-br.html>.

4.2.2 Etapas de processamento das simulações

Para realizar as simulações numéricas e obter os resultados visuais dividiu-se o procedimento em três etapas. A primeira etapa corresponde ao pré-processamento, onde os domínios a serem simulados são preparados. A segunda etapa é a etapa de processamento, na qual os dados de teor de umidade volumétrica são calculados no tempo e no espaço. Já a terceira etapa é a etapa de pós-processamento, ou também da visualização dos dados.

O pré-processamento das simulações pode-se dar de duas formas. Para as simulações

que envolvem a micro-tomografia e a fratura, o pré-processamento corresponde à etapa de processamento das imagens por meio da linguagem Mathematica Wolfram 10.1 (WOLFRAM RESEARCH, 2015) e à transformação das imagens em matrizes pela linguagem Java. Já, para as outras simulações, as validações uni e bidimensionais apenas utilizou-se classes em Java capaz de gerar malhas euclidianas, de forma direta.

O processamento consiste em obter matrizes que avaliam, para cada nó do domínio, uma unidade correspondente, a cada passo tempo. O processamento foi realizado a partir de algoritmos na linguagem Java, fazendo uso do compilador NetBeans 8.1. A plataforma Netbeans foi desenvolvida pela Sun Microsystems, serve para os sistemas operacionais Windows, Mac OS X, Linux, Solaris. No caso das simulações apresentadas foi usada a plataforma para o sistema operacional Mac OS X. Além disso, a plataforma NetBeans 8.1 é mantida como um ambiente de desenvolvimento integrado *open – source*, que suporta todos os tipos de aplicação Java ¹.

O pós-processamento é a parte final da simulação e corresponde à etapa onde os resultados das simulações são visualizados. O pós-processamento foi feito em duas plataformas. Para as validações uni e bidimensionais utilizou-se o Mathematica Wolfram 10.1 (WOLFRAM RESEARCH, 2015). Já o pós-processamento das simulações da micro-tomografia e da fratura foi feito usando a linguagem JavaFX 2.1.0. A linguagem JavaFX serve para o desenvolvimento de aplicações para internet do tipo *rich*, sendo desenvolvida pela companhia Oracle. Essa linguagem foi escrita, compilada e executada na plataforma NetBeans 8.1.

4.2.3 Funções Analíticas

Apesar do presente trabalho ter uma forte ênfase numérica, é necessário obter soluções analíticas a fim de validar a nova formulação apresentada. Há duas validações, uma unidimensional e outra bidimensional.

A validação unidimensional é realizada por uma solução de Cavalcante & Zornberg (2016, *in press*).

A adaptação dos últimos autores consiste em reescrever a solução de contaminantes para fluxo não saturado, garantindo a correspondência de cada variável e parâmetro.

Já a validação bidimensional é realizada por uma solução de Borges & Cavalcante (2016, *in press*). Tal solução envolve tanto o uso da transformada de Fourier quanto da série de Fourier a fim de obter uma solução analítica para um problema de fluxo não saturado 2D.

¹<https://netbeans.org/kb/trails/platform.html>

4.2.4 Dedução do Método Discreto Iota-delta

O Método Discreto Iota-delta é uma extensão e generalização do Método das Diferenças Finitas. Por isso, para obter a formulação desse novo método numérico deve-se considerar as expressões discretizadas provenientes do Método das Diferenças Finitas. Isso é válido tanto para as formulações do contorno quanto para o domínio.

Todavia, para a dedução do MDI, não se considera apenas as formulações discretas do método das diferenças finitas, mas também critérios computacionais. A formulação numérica proposta tem a intenção não apenas de ser precisa matematica e fisicamente, mas também de permitir maior eficiência computacional. Por isso, há critérios computacionais na formulação algébrica do método proposto.

4.2.5 Fluxograma dos Método e Materiais

Pode-se organizar todas as ideias separadamente explicitadas nos tópicos anteriores em um fluxograma, a fim de correlacionar os passos empregados para a realização do trabalho. Tal sistematização pode ser verificada na Figura 4.4

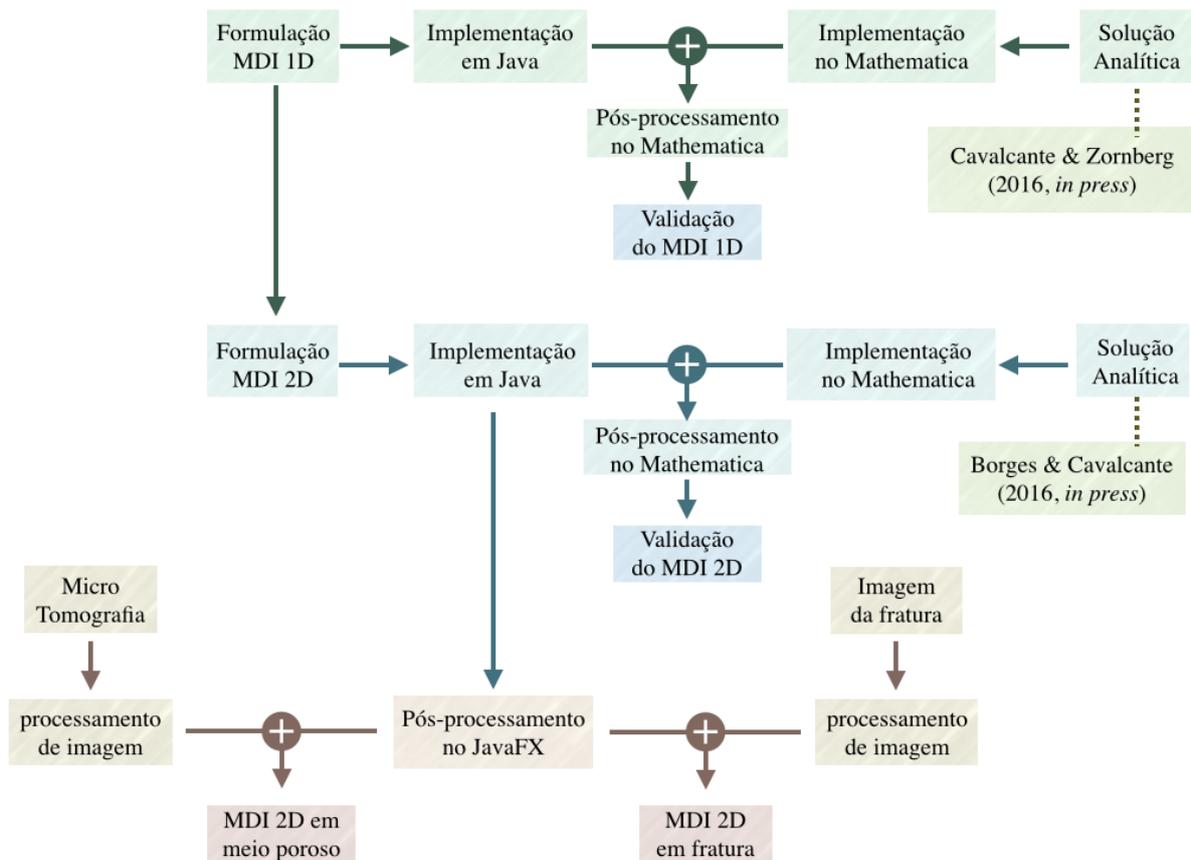


Figura 4.4: Fluxograma da metodologia do trabalho

5 DEDUÇÃO DO MÉTODO DISCRETO IOTA-DELTA

5.1 Intenção do Método

A nova abordagem numérica proposta nesse estudo é uma generalização do Método das Diferenças Finitas (MDF). O MDF é um método numérico que, quando descrito explicitamente, apresenta uma formulação forte e precisa ao descrever matematicamente o fenômeno físico. Contudo, é inviável descrever computacionalmente, em diferenças finitas, um domínio cuja geometria é rebuscada.

Por isso, o objetivo da nova abordagem numérica proposta é continuar com precisão matemática do MDF e permitir com que contornos complexos sejam facilmente resolvidos pela nova formulação. Para tanto, denomina-se esse método numérico, que é uma extensão e generalização do MDF, como Método Iota-Delta Discreto (MDI).

A nova abordagem numérica proposta (MDI) pode ser aplicada a qualquer EDP que possa ser resolvida por diferenças finitas. Todavia, nesse estudo em específico, aplica-se apenas para a Equação de Richards, que é o problema de fluxo não saturado.

5.2 Formulação do MDI 1D para a Equação de Richards

5.2.1 Discretização do Domínio

Uma vez obtida a formulação algébrica da Eq. 3.10, deve-se compreender como o domínio é discretizado. Sendo utilizada a expansão de Taylor, é possível representar o domínio como um conjunto de nós (Figura 5.1).

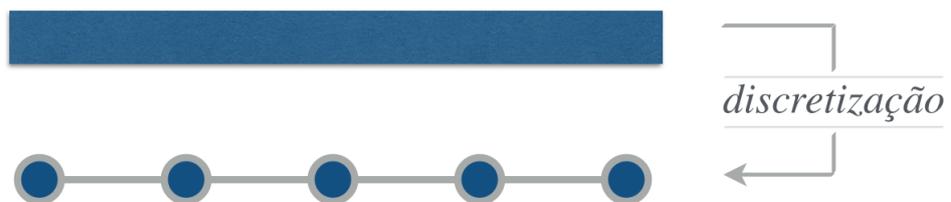


Figura 5.1: Discretização do domínio em 1D.

Os nós representam pontos do domínio, sendo que o valor de teor de umidade volumétrica atribuído a eles deva corresponder ao valor no domínio contínuo. Cada nó corresponde um passo de espaço j e pode ser avaliado um passo de tempo n . Com isso, é possível montar uma malha que varia espacial e temporalmente (Figura 5.2).

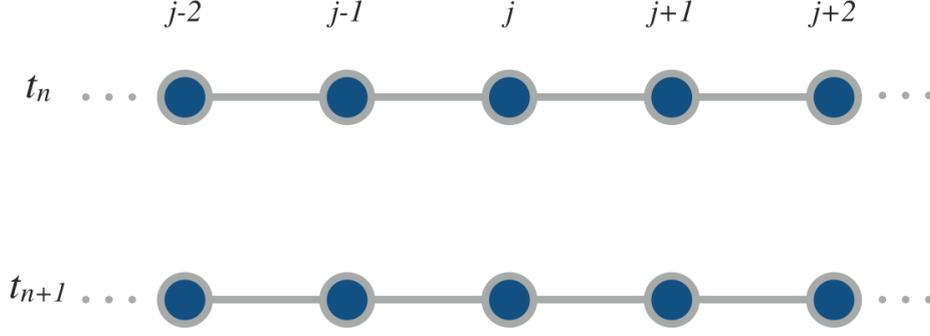


Figura 5.2: Malha do domínio discretizado.

5.2.2 Camadas de Condição de Contorno e Inicial

Em um domínio discretizado cada nó corresponde a um ponto do domínio contínuo que, por sua vez, possui características próprias. Por isso, deve-se caracterizar cada nó em relação a sua condição inicial e/ou condição de contorno. Para um domínio unidimensional as propriedades de cada nó podem ser organizadas em vetores unidimensionais. Portanto, os vetores necessários para caracterizarem o fenômeno são os seguintes:

Vetor de condição inicial:

$$\mathbf{I} = [\iota_1^0, \iota_2^0, \dots, \iota_j^0, \dots, \iota_{k-1}^0, \iota_k^0] \quad (5.1)$$

onde ι_j é a condição inicial do j -ésimo nó do domínio e k é o número total de nós no domínio.

Vetor dos parâmetros da função escalar α :

$$\mathbf{A} = [\alpha_1^n, \alpha_2^n, \dots, \alpha_j^n, \dots, \alpha_{k-1}^n, \alpha_k^n] \quad (5.2)$$

onde α_j^n refere-se à função escalar α da Eq. 3.35 para o j -ésimo nó do domínio e n é o passo de tempo da iteração numérica.

Vetor dos parâmetros da função escalar β :

$$\mathbf{B} = [\beta_1^n, \beta_2^n, \dots, \beta_j^n, \dots, \beta_{k-1}^n, \beta_k^n] \quad (5.3)$$

onde β_j^n refere-se à função escalar β da Eq. 3.35 para o j -ésimo nó do domínio.

Vetor dos parâmetros da função escalar γ :

$$\mathbf{C} = [\gamma_1^n, \gamma_2^n, \dots, \gamma_j^n, \dots, \gamma_{k-1}^n, \gamma_k^n] \quad (5.4)$$

onde γ_j^n refere-se à função escalar γ da Eq. 3.35 para o j -ésimo nó do domínio.

Qualitativamente, pode-se dizer que as camadas de vetores \mathbf{I} , \mathbf{A} , \mathbf{B} e \mathbf{C} são capazes de definir o fenômeno no meio discretizado. Uma ilustração dessa perspectiva qualitativa

da descrição numérica é feita pela Figura 5.3.

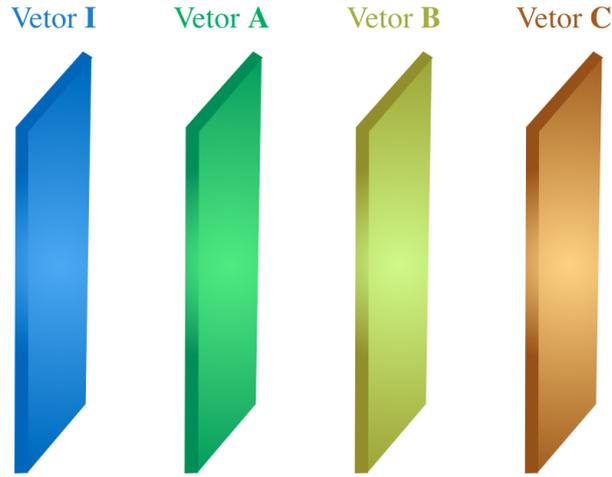


Figura 5.3: Descrição qualitativa dos vetores necessários para MDI 1D.

A partir da definição das camadas de vetores, é possível reescrever as condições de contorno de Robin das Equações 3.46 e 3.48 da seguinte forma, respectivamente:

$$\theta_{j+1}^n = \frac{\gamma_{j+1}^n \Delta z + \beta_{j+1}^n \theta_j^n}{\alpha_{j+1}^n \Delta z + \beta_{j+1}^n} \quad (5.5)$$

$$\theta_{j-1}^n = \frac{\gamma_{j-1}^n \Delta z - \beta_{j-1}^n \theta_j^n}{\alpha_{j-1}^n \Delta z - \beta_{j-1}^n} \quad (5.6)$$

onde,

$$\theta_j^n = \theta(z_j, t_n) \quad (5.7)$$

5.2.3 Formulação Algébrica

Sabe-se, pela Eq. 3.10, que os nós do passo de tempo n definem o valor dos nós no passo de tempo $n + 1$. Mais especificamente, a nó central e seus vizinhos, quando pertencem ao domínio, definem o valor do a nó central no passo de tempo seguinte (Figura 5.4).

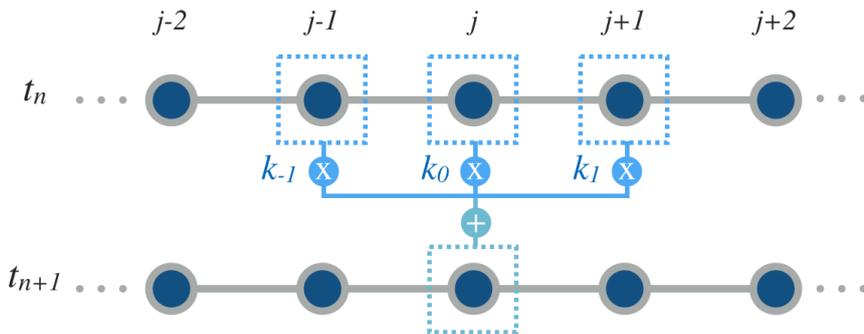


Figura 5.4: Cálculo do passo de tempo posterior a partir do domínio.

A expressão matemática para quando todos os nós iterados pertencem ao domínio é dada por:

$$\theta_j^{n+1} = k_{-1} \theta_{j-1}^n + k_0 \theta_j^n + k_1 \theta_{j+1}^n \quad (5.8)$$

Todavia, quando nós da fronteira aparecem, o cálculo do passo de tempo seguinte é distinto do mostrado na Eq. 3.10. Portanto, é necessário utilizar as equações que regem o comportamento na fronteira. A Figura 5.5 mostra quando um nó à esquerda apresenta a condição de Robin.

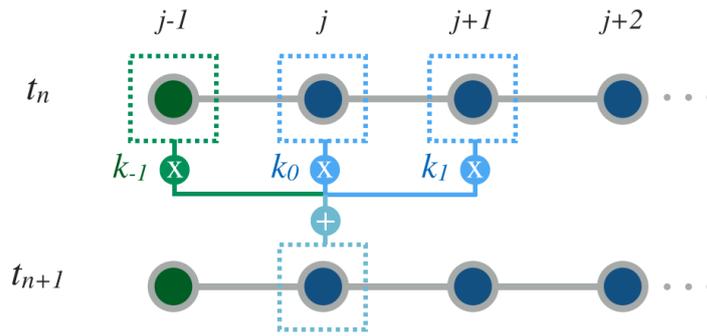


Figura 5.5: Nó de fronteira à esquerda com condição de Robin.

A condição de contorno impede que o nó seja utilizado no cálculo do passo de tempo posterior tal como na Eq. 5.8. Sendo assim, faz-se necessário mudar a parcela que multiplica κ_{-1} . Para isso, basta considerar a condição de Robin com o passo espacial em atraso, retratado pela Eq. 3.48. Dessa forma, a combinação das Equações 5.7 e 5.8 resulta na seguinte expressão:

$$\theta_j^{n+1} = k_{-1} \left(\frac{\gamma_{j-1}^n \Delta z - \beta_{j-1}^n \theta_j^n}{\alpha_{j-1}^n \Delta z - \beta_{j-1}^n} \right) + k_0 \theta_j^n + k_1 \theta_{j+1}^n \quad (5.9)$$

Contudo, pode-se formular uma expressão mais abrangente que a Eq. 5.9, que se adapte tanto para o caso da Figura 5.4 quanto para o caso da Figura 5.5. Essa expressão é a seguinte:

$$\theta_j^{n+1} = k_{-1} \left(h(\alpha_{j-1}^n, \beta_{j-1}^n) \theta_{j-1}^n + \frac{\gamma_{j-1}^n \Delta z - \beta_{j-1}^n \theta_j^n}{\alpha_{j-1}^n \Delta z - \beta_{j-1}^n + h(\alpha_{j-1}^n, \beta_{j-1}^n)} \right) + k_0 \theta_j^n + k_1 \theta_{j+1}^n \quad (5.10)$$

sendo que

$$h(\alpha, \beta) = 1 - \text{sgn}(\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}) \quad (5.11)$$

onde sgn é a função sinal, definida como:

$$\text{sgn}(x) = \begin{cases} -1, & \text{se } x < 0 \\ 0, & \text{se } x = 0 \\ 1, & \text{se } x > 0 \end{cases} \quad (5.12)$$

No caso das equações desenvolvidas neste estudo, não se usa o argumento negativo da função sgn , uma vez que o argumento da Eq. 5.11 só pode ser não-negativo. Esse caso apenas está presente devido a sua definição. Além disso, deve-se notar que caso não haja condição de contorno ($\alpha_{j-1}^n = \beta_{j-1}^n = \gamma_{j-1}^n = 0$) o valor da função h é unitário. E caso haja condição de contorno no nó j e tempo n , o valor de h é nulo. Por isso, a Eq. 5.10 pode ser simplificada como:

$$\theta_j^{n+1} = k_{-1} \left(h(0,0) \theta_{j-1}^n + \frac{0 \cdot \Delta z - 0 \cdot \theta_j^n}{0 \cdot \Delta z - 0 + h(0,0)} \right) + k_0 \theta_j^n + k_1 \theta_{j+1}^n \quad (5.13)$$

$$\theta_j^{n+1} = k_{-1} \left(1 \cdot \theta_{j-1}^n + \frac{0}{1} \right) + k_0 \theta_j^n + k_1 \theta_{j+1}^n \quad (5.14)$$

$$\theta_j^{n+1} = k_{-1} \theta_{j-1}^n + k_0 \theta_j^n + k_1 \theta_{j+1}^n \quad (5.15)$$

Verifica-se, portanto, que a Eq. 5.15 é igual à Eq. 5.8. Por mais, se $\alpha_{j-1}^n \neq 0$ e $\beta_{j-1}^n \neq 0$ a Eq. 5.10 fica:

$$\theta_j^{n+1} = k_{-1} \left(0 \cdot \theta_{j-1}^n + \frac{\gamma_{j-1}^n \Delta z - \beta_{j-1}^n \theta_j^n}{\alpha_{j-1}^n \Delta z - \beta_{j-1}^n + 0} \right) + k_0 \theta_j^n + k_1 \theta_{j+1}^n \quad (5.16)$$

$$\theta_j^{n+1} = k_{-1} \left(\frac{\gamma_{j-1}^n \Delta z - \beta_{j-1}^n \theta_j^n}{\alpha_{j-1}^n \Delta z - \beta_{j-1}^n} \right) + k_0 \theta_j^n + k_1 \theta_{j+1}^n \quad (5.17)$$

Percebe-se que a Eq. 5.17 é uma simplificação que a torna algebricamente igual à Eq. 5.9. Logo, comprova-se que a Eq. 5.10 é capaz de representar tanto o caso em que o nó da esquerda pertence ao domínio, quanto o caso em que pertence à fronteira.

Além disso, deve-se verificar o caso quando o nó da direita pertence ao contorno, como mostrado na Figura 5.6.

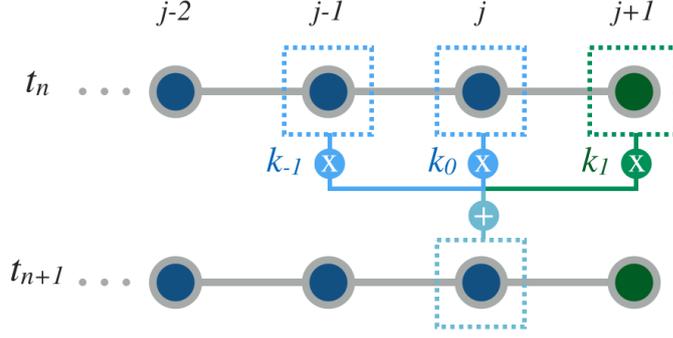


Figura 5.6: Nó de fronteira à direita com condição de Robin.

Sabe-se que a Eq. 5.10 é capaz de adaptar-se a todas as possibilidades do nó da esquerda. Contudo, nessa próxima etapa é necessário modificar o termo referente ao nó da direita, que multiplica a constante k_1 . Para isso, basta fazer uso da expressão discreta da fronteira de Robin, descrita pela Eq. 5.5 e combinar com a Eq. 5.10, da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \theta_j^{n+1} = & k_{-1} \left(h(\alpha_{j-1}^n, \beta_{j-1}^n) \theta_{j-1}^n + \frac{\gamma_{j-1}^n \Delta z - \beta_{j-1}^n \theta_j^n}{\alpha_{j-1}^n \Delta z - \beta_{j-1}^n + h(\alpha_{j-1}^n, \beta_{j-1}^n)} \right) + k_0 \theta_j^n \\ & + k_1 \left(\frac{\gamma_{j+1}^n \Delta z + \beta_{j+1}^n \theta_j^n}{\alpha_{j+1}^n \Delta z + \beta_{j+1}^n} \right) \end{aligned} \quad (5.18)$$

Entretanto, a Eq. 5.18 serve apenas para quando o nó da direita pertence exclusivamente à fronteira. Para permitir que a Eq. 5.18 fique adaptável à possibilidade de pertencer ao domínio, deve-se fazer a seguinte alteração:

$$\begin{aligned} \theta_j^{n+1} = & k_{-1} \left(h(\alpha_{j-1}^n, \beta_{j-1}^n) \theta_{j-1}^n + \frac{\gamma_{j-1}^n \Delta z - \beta_{j-1}^n \theta_j^n}{\alpha_{j-1}^n \Delta z - \beta_{j-1}^n + h(\alpha_{j-1}^n, \beta_{j-1}^n)} \right) + k_0 \theta_j^n \\ & + k_1 \left(h(\alpha_{j+1}^n, \beta_{j+1}^n) \theta_{j+1}^n + \frac{\gamma_{j+1}^n \Delta z + \beta_{j+1}^n \theta_j^n}{\alpha_{j+1}^n \Delta z + \beta_{j+1}^n + h(\alpha_{j+1}^n, \beta_{j+1}^n)} \right) \end{aligned} \quad (5.19)$$

Deve-se notar que quando o nó da direita pertence ao domínio $\alpha_{j+1}^n = \beta_{j+1}^n = \gamma_{j+1}^n = 0$. Com isso, a Eq. 5.19 simplifica-se para o caso da Eq. 5.10, como pode ser observado a seguir:

$$\begin{aligned}\theta_j^{n+1} = & k_{-1} \left(h(\alpha_{j-1}^n, \beta_{j-1}^n) \theta_{j-1}^n + \frac{\gamma_{j-1}^n \Delta z - \beta_{j-1}^n \theta_j^n}{\alpha_{j-1}^n \Delta z - \beta_{j-1}^n + h(\alpha_{j-1}^n, \beta_{j-1}^n)} \right) + k_0 \theta_j^n \\ & + k_1 \left(h(0, 0) \theta_{j+1}^n + \frac{0 \cdot \Delta z + 0 \cdot \theta_j^n}{0 \cdot \Delta z + 0 + h(0, 0)} \right)\end{aligned}\quad (5.20)$$

$$\begin{aligned}\theta_j^{n+1} = & k_{-1} \left(h(\alpha_{j-1}^n, \beta_{j-1}^n) \theta_{j-1}^n + \frac{\gamma_{j-1}^n \Delta z - \beta_{j-1}^n \theta_j^n}{\alpha_{j-1}^n \Delta z - \beta_{j-1}^n + h(\alpha_{j-1}^n, \beta_{j-1}^n)} \right) + k_0 \theta_j^n \\ & + k_1 \left(1 \cdot \theta_{j+1}^n + \frac{0}{1} \right)\end{aligned}\quad (5.21)$$

$$\begin{aligned}\theta_j^{n+1} = & k_{-1} \left(h(\alpha_{j-1}^n, \beta_{j-1}^n) \theta_{j-1}^n + \frac{\gamma_{j-1}^n \Delta z - \beta_{j-1}^n \theta_j^n}{\alpha_{j-1}^n \Delta z - \beta_{j-1}^n + h(\alpha_{j-1}^n, \beta_{j-1}^n)} \right) + k_0 \theta_j^n \\ & + k_1 \theta_{j+1}^n\end{aligned}\quad (5.22)$$

Já quando o nó da direita pertence ao contorno $\alpha_{j+1}^n \neq 0$, $\beta_{j+1}^n \neq 0$ e a Eq. 5.19 é reduzida à Eq. 5.18, como a seguir:

$$\begin{aligned}\theta_j^{n+1} = & k_{-1} \left(h(\alpha_{j-1}^n, \beta_{j-1}^n) \theta_{j-1}^n + \frac{\gamma_{j-1}^n \Delta z - \beta_{j-1}^n \theta_j^n}{\alpha_{j-1}^n \Delta z - \beta_{j-1}^n + h(\alpha_{j-1}^n, \beta_{j-1}^n)} \right) + k_0 \theta_j^n \\ & + k_1 \left(0 \cdot \theta_{j+1}^n + \frac{\gamma_{j+1}^n \Delta z + \beta_{j+1}^n \theta_j^n}{\alpha_{j+1}^n \Delta z + \beta_{j+1}^n + 0} \right)\end{aligned}\quad (5.23)$$

$$\begin{aligned}\theta_j^{n+1} = & k_{-1} \left(h(\alpha_{j-1}^n, \beta_{j-1}^n) \theta_{j-1}^n + \frac{\gamma_{j-1}^n \Delta z - \beta_{j-1}^n \theta_j^n}{\alpha_{j-1}^n \Delta z - \beta_{j-1}^n + h(\alpha_{j-1}^n, \beta_{j-1}^n)} \right) + k_0 \theta_j^n \\ & + k_1 \left(+ \frac{\gamma_{j+1}^n \Delta z + \beta_{j+1}^n \theta_j^n}{\alpha_{j+1}^n \Delta z + \beta_{j+1}^n} \right)\end{aligned}\quad (5.24)$$

A partir disso, é possível compreender que a Eq. 5.19 é capaz de expressar o resultado numérico quando os nós laterais pertencem ao domínio ou ao contorno. Por fim, basta formular a expressão para o caso em que nó central pertence ao contorno, como é o caso da Figura 5.7.

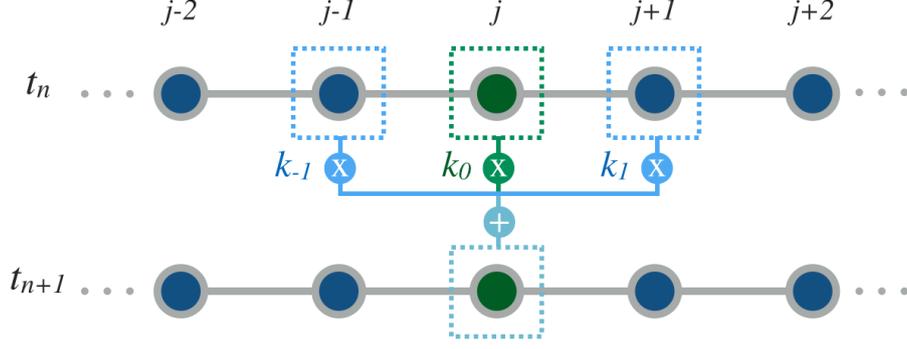


Figura 5.7: Nó de fronteira central com condição de Robin.

Como o objetivo é apenas calcular os nós do domínio, a expressão da Eq. 5.19 deve ser modificada da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \theta_j^{n+1} = & \left[k_{-1} \left(h(\alpha_{j-1}^n, \beta_{j-1}^n) \theta_{j-1}^n + \frac{\gamma_{j-1}^n \Delta z - \beta_{j-1}^n \theta_j^n}{\alpha_{j-1}^n \Delta z - \beta_{j-1}^n + h(\alpha_{j-1}^n, \beta_{j-1}^n)} \right) + k_0 \theta_j^n \right. \\ & \left. + k_1 \left(h(\alpha_{j+1}^n, \beta_{j+1}^n) \theta_{j+1}^n + \frac{\gamma_{j+1}^n \Delta z + \beta_{j+1}^n \theta_j^n}{\alpha_{j+1}^n \Delta z + \beta_{j+1}^n + h(\alpha_{j+1}^n, \beta_{j+1}^n)} \right) \right] h(\alpha_j^n, \beta_j^n) \end{aligned} \quad (5.25)$$

Dessa forma, quando o nó central não for uma condição de contorno ($\alpha_j^n = \beta_j^n = 0$), a Eq. 5.25 torna-se igual à Eq. 5.19, como mostrado a seguir:

$$\begin{aligned} \theta_j^{n+1} = & \left[k_{-1} \left(h(\alpha_{j-1}^n, \beta_{j-1}^n) \theta_{j-1}^n + \frac{\gamma_{j-1}^n \Delta z - \beta_{j-1}^n \theta_j^n}{\alpha_{j-1}^n \Delta z - \beta_{j-1}^n + h(\alpha_{j-1}^n, \beta_{j-1}^n)} \right) + k_0 \theta_j^n \right. \\ & \left. + k_1 \left(h(\alpha_{j+1}^n, \beta_{j+1}^n) \theta_{j+1}^n + \frac{\gamma_{j+1}^n \Delta z + \beta_{j+1}^n \theta_j^n}{\alpha_{j+1}^n \Delta z + \beta_{j+1}^n + h(\alpha_{j+1}^n, \beta_{j+1}^n)} \right) \right] h(0, 0) \end{aligned} \quad (5.26)$$

$$\begin{aligned} \theta_j^{n+1} = & \left[k_{-1} \left(h(\alpha_{j-1}^n, \beta_{j-1}^n) \theta_{j-1}^n + \frac{\gamma_{j-1}^n \Delta z - \beta_{j-1}^n \theta_j^n}{\alpha_{j-1}^n \Delta z - \beta_{j-1}^n + h(\alpha_{j-1}^n, \beta_{j-1}^n)} \right) + k_0 \theta_j^n \right. \\ & \left. + k_1 \left(h(\alpha_{j+1}^n, \beta_{j+1}^n) \theta_{j+1}^n + \frac{\gamma_{j+1}^n \Delta z + \beta_{j+1}^n \theta_j^n}{\alpha_{j+1}^n \Delta z + \beta_{j+1}^n + h(\alpha_{j+1}^n, \beta_{j+1}^n)} \right) \right] .1 \end{aligned} \quad (5.27)$$

$$\begin{aligned} \theta_j^{n+1} = & k_{-1} \left(h(\alpha_{j-1}^n, \beta_{j-1}^n) \theta_{j-1}^n + \frac{\gamma_{j-1}^n \Delta z - \beta_{j-1}^n \theta_j^n}{\alpha_{j-1}^n \Delta z - \beta_{j-1}^n + h(\alpha_{j-1}^n, \beta_{j-1}^n)} \right) + k_0 \theta_j^n \\ & + k_1 \left(h(\alpha_{j+1}^n, \beta_{j+1}^n) \theta_{j+1}^n + \frac{\gamma_{j+1}^n \Delta z + \beta_{j+1}^n \theta_j^n}{\alpha_{j+1}^n \Delta z + \beta_{j+1}^n + h(\alpha_{j+1}^n, \beta_{j+1}^n)} \right) \end{aligned} \quad (5.28)$$

Quando o nó central pertence à fronteira verifica-se uma diferença no cálculo. Nas simulações, principalmente as bidimensionais e tridimensionais, há muitos nós pertencentes à fronteira. Ou seja, muitos nós de fronteira, durante o processo de cálculo iterativo, assumem a posição central. Em alguns casos, como fronteiras de Dirichlet, é trivial determinar o valor do nó. Todavia, para diversos outros casos de fronteira é necessário utilizar formulações algébricas extensas, o que aumenta consideravelmente o tempo de processamento. Como será visto posteriormente, no Capítulo 7, há casos em que mais da metade dos nós pertencem à fronteira. Como não há o interesse de obter o valor dos nós da fronteira, uma vez que o fenômeno simulado está no domínio, opta-se por uma solução trivial computacionalmente, ao invés de calcular por expressões algébricas derivadas das EDPs que regem o fenômeno. Essa solução trivial é assinalar um valor nulo para os nós da fronteira. Isso diminui significativamente o tempo de processamento e não altera o resultado desejado, no aspecto da física-matemática.

Quando o nó central pertence à fronteira, tem-se que $\alpha_j^n \neq 0$ e/ou $\beta_j^n \neq 0$. Considerando a solução computacional, a Eq. 5.25 é simplificada da seguinte forma:

$$\theta_j^{n+1} = \left[k_{-1} \left(h(\alpha_{j-1}^n, \beta_{j-1}^n) \theta_{j-1}^n + \frac{\gamma_{j-1}^n \Delta z - \beta_{j-1}^n \theta_j^n}{\alpha_{j-1}^n \Delta z - \beta_{j-1}^n + h(\alpha_{j-1}^n, \beta_{j-1}^n)} \right) + k_0 \theta_j^n \right. \\ \left. + k_1 \left(h(\alpha_{j+1}^n, \beta_{j+1}^n) \theta_{j+1}^n + \frac{\gamma_{j+1}^n \Delta z + \beta_{j+1}^n \theta_j^n}{\alpha_{j+1}^n \Delta z + \beta_{j+1}^n + h(\alpha_{j+1}^n, \beta_{j+1}^n)} \right) \right] \cdot 0 \quad (5.29)$$

$$\theta_j^{n+1} = 0 \quad (5.30)$$

Conclui-se portanto que a Eq. 5.25 é capaz de expressar a formulação numérica para o fenômeno de fluxo-não saturado em 1D, independente dos nós avaliados pertencerem ao domínio ou às fronteiras de Neumann, Dirichlet e Robin.

Caso pretenda-se ter uma maior eficiência computacional, deve-se gerar um vetor \mathbf{h} definido como:

$$\mathbf{h} = [h_1^n, h_2^n, \dots, h_j^n, \dots, h_{k-1}^n, h_k^n] \quad (5.31)$$

onde:

$$h_j^n = h(\alpha_j^n, \beta_j^n) \quad (5.32)$$

Dessa forma, a nova composição dos vetores necessários para o MDI 1D podem ser qualitativamente descritos pela Figura 5.8.

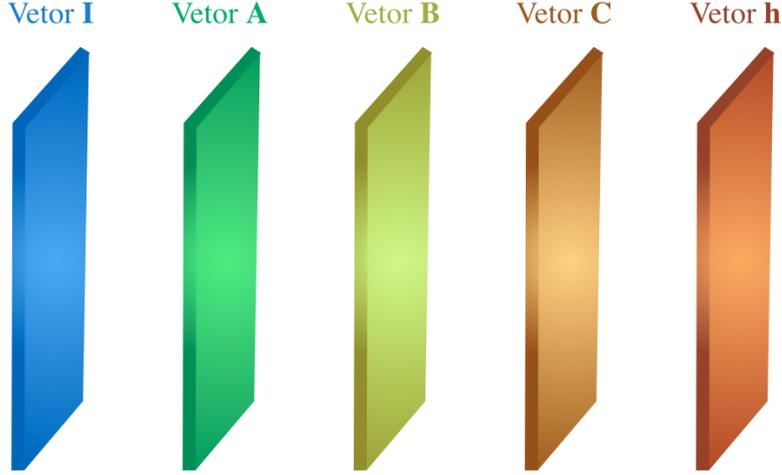


Figura 5.8: Vetores necessários para o MDI 1D com maior eficiência computacional

Assim, a Eq. 5.25 pode ser reescrita nos seguintes termos:

$$\theta_j^{n+1} = \left[k_{-1} \left(h_{j-1}^n \theta_{j-1}^n + \frac{\gamma_{j-1}^n \Delta z - \beta_{j-1}^n \theta_j^n}{\alpha_{j-1}^n \Delta z - \beta_{j-1}^n + h_{j-1}^n} \right) + k_0 \theta_j^n + k_1 \left(h_{j+1}^n \theta_{j+1}^n + \frac{\gamma_{j+1}^n \Delta z + \beta_{j+1}^n \theta_j^n}{\alpha_{j+1}^n \Delta z + \beta_{j+1}^n + h_{j+1}^n} \right) \right] h_j^n \quad (5.33)$$

Pode-se ainda descrever a Eq. 5.33 em termos da função Iota-Delta. Ozelim et al. (2013a) e Ozelim et al. (2013b) definiram a função Iota-Delta da seguinte maneira:

$$i\delta_n^m(x) = \text{mod}[\text{mod}[\dots \text{mod}[\text{mod}[x, \ell_i], p_{m-1}], \dots, p_j], n] \quad (5.34)$$

O índice j é designado por:

$$j(n) = \pi(n) + 1 \quad (5.35)$$

A função mod é definida por:

$$\text{mod}(x, p) = x - p \left\lfloor \frac{x}{p} \right\rfloor \quad (5.36)$$

O domínio é dado por:

$$m \geq j; m, n \in Z_+; x \in C \quad (5.37)$$

onde m e n são parâmetros da função iota-delta, ℓ_i é o m -ésimo número primo, $\pi(n)$ é a função contadora de primos, que dá a quantidade de primos maiores ou iguais a n .

Assim, a Eq. 5.33 pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\theta_j^{n+1} = h_j^n \sum_{i=0}^2 \left[k_{\ell_i} \left(h_{j+\ell_i}^n \theta_{j+\ell_i}^n + \ell_i^2 \frac{\gamma_{j+\ell_i}^n \Delta z + \ell_i \beta_{j+\ell_i}^n \theta_j^n}{\alpha_{j+\ell_i}^n \Delta z + \ell_i \beta_{j+\ell_i}^n + h_{j+\ell_i}^n} \right) \right] \quad (5.38)$$

onde:

$$\ell_i = \iota \delta_3^1 (i - 1) \quad (5.39)$$

Nota-se que a Eq. 5.39 poderia ser escrita trivialmente. Todavia, escolhe-se descrever pela função Iota-Delta o caso unidimensional uma vez que tal função será imprescindível no caso bidimensional. Além disso, a função iota-delta já foi usada para descrever numericamente fenômenos advectivos-dispersivos, tal como por Ozelim et al. (2013a) e Ozelim et al. (2016).

5.3 Formulação do MDI 2D para a Equação de Richards

5.3.1 Discretização do Domínio

Uma vez obtida a Eq. 3.59, que regula como o fenômeno ocorre em um domínio discreto, faz-se necessário considerar as fronteiras. Para isso, deve-se compreender como que um domínio bidimensional é discretizado. No caso de ter sido usada a expansão de Taylor, sucede-se que a discretização se dá em nós. Sendo assim, basta dividir o domínio em retângulos e atribuir um nó para cada vértice (Figura 5.9).

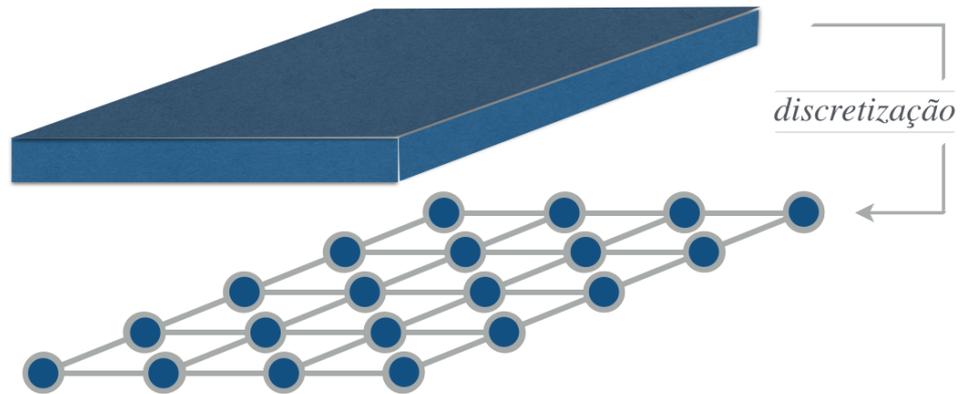


Figura 5.9: Discretização em um domínio bidimensional.

Com a discretização do domínio, cada nó passa a corresponder a uma posição (i, j) e pode ser avaliado em cada passo de tempo n .

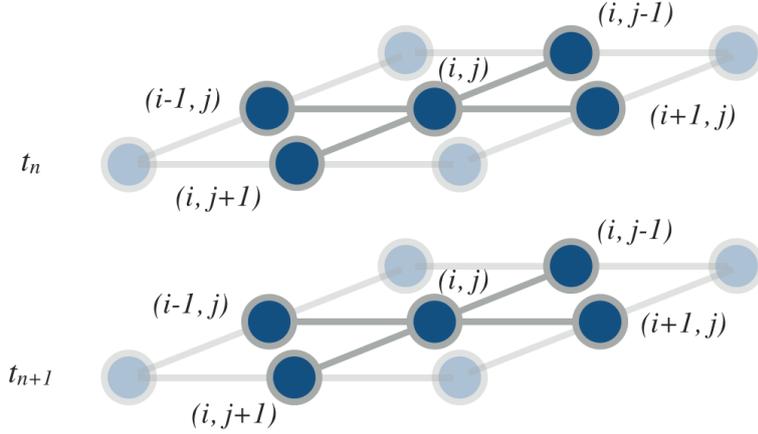


Figura 5.10: Malha do domínio discretizado bidimensional para dois passos de tempo.

5.3.2 Camadas de Condição de Contorno e Inicial

Uma vez que cada nó do domínio é definido a partir de dois índices espaciais e um temporal, as camadas de condição de contorno e inicial podem ser descritas por uma matriz, para cada passo de tempo.

Com isso, a matriz de condição inicial pode ser descrita como:

$$\mathbf{I} = \begin{bmatrix} \iota_{1,1}^0 & \iota_{1,2}^0 & \cdots & \iota_{1,j}^0 \\ \iota_{2,1}^0 & \iota_{2,2}^0 & \cdots & \iota_{2,j}^0 \\ \iota_{3,1}^0 & \iota_{3,2}^0 & \cdots & \iota_{3,j}^0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \iota_{i,1}^0 & \iota_{i,2}^0 & \cdots & \iota_{i,j}^0 \end{bmatrix} \quad (5.40)$$

onde i é o índice espacial referente a x , tal que $i = x/\Delta x$ e j é o índice espacial referente a z , tal que $j = z/\Delta z$.

Por mais, a matriz do parâmetro α pode ser descrita em ambas as dimensões espaciais tratadas. No caso, a matriz do parâmetro α na dimensão x é a seguinte:

$$\mathbf{A}_x^n = \begin{bmatrix} \alpha_{x1,1}^n & \alpha_{x1,2}^n & \cdots & \alpha_{x1,j}^n \\ \alpha_{x2,1}^n & \alpha_{x2,2}^n & \cdots & \alpha_{x2,j}^n \\ \alpha_{x3,1}^n & \alpha_{x3,2}^n & \cdots & \alpha_{x3,j}^n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \alpha_{xi,1}^n & \alpha_{xi,2}^n & \cdots & \alpha_{xi,j}^n \end{bmatrix} \quad (5.41)$$

onde n é o passo de tempo, tal que $n = t/\Delta t$.

Já para a dimensão z , a matriz do parâmetro α pode ser descrita como:

$$\mathbf{A}_z^n = \begin{bmatrix} \alpha_{z1,1}^n & \alpha_{z1,2}^n & \cdots & \alpha_{z1,j}^n \\ \alpha_{z2,1}^n & \alpha_{z2,2}^n & \cdots & \alpha_{z2,j}^n \\ \alpha_{z3,1}^n & \alpha_{z3,2}^n & \cdots & \alpha_{z3,j}^n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \alpha_{zi,1}^n & \alpha_{zi,2}^n & \cdots & \alpha_{zi,j}^n \end{bmatrix} \quad (5.42)$$

Da mesma forma, a matriz do parâmetro β tem de ser dividida em duas matrizes distintas. Para a dimensão x , a matriz do parâmetro β corresponde a:

$$\mathbf{B}_x^n = \begin{bmatrix} \beta_{x1,1}^n & \beta_{x1,2}^n & \cdots & \beta_{x1,j}^n \\ \beta_{x2,1}^n & \beta_{x2,2}^n & \cdots & \beta_{x2,j}^n \\ \beta_{x3,1}^n & \beta_{x3,2}^n & \cdots & \beta_{x3,j}^n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \beta_{xi,1}^n & \beta_{xi,2}^n & \cdots & \beta_{xi,j}^n \end{bmatrix} \quad (5.43)$$

Já para a dimensão z , a matriz do parâmetro β corresponde a:

$$\mathbf{B}_z^n = \begin{bmatrix} \beta_{z1,1}^n & \beta_{z1,2}^n & \cdots & \beta_{z1,j}^n \\ \beta_{z2,1}^n & \beta_{z2,2}^n & \cdots & \beta_{z2,j}^n \\ \beta_{z3,1}^n & \beta_{z3,2}^n & \cdots & \beta_{z3,j}^n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \beta_{zi,1}^n & \beta_{zi,2}^n & \cdots & \beta_{zi,j}^n \end{bmatrix} \quad (5.44)$$

De forma similar, as matrizes do parâmetro γ também têm de ser representadas para ambas as dimensões. Sendo que para as dimensões x é descrita como:

$$\mathbf{C}_x^n = \begin{bmatrix} \gamma_{x1,1}^n & \gamma_{x1,2}^n & \cdots & \gamma_{x1,j}^n \\ \gamma_{x2,1}^n & \gamma_{x2,2}^n & \cdots & \gamma_{x2,j}^n \\ \gamma_{x3,1}^n & \gamma_{x3,2}^n & \cdots & \gamma_{x3,j}^n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \gamma_{xi,1}^n & \gamma_{xi,2}^n & \cdots & \gamma_{xi,j}^n \end{bmatrix} \quad (5.45)$$

Já para a dimensão z , a matriz do parâmetro γ é a seguinte:

$$\mathbf{C}_z^n = \begin{bmatrix} \gamma_{z1,1}^n & \gamma_{z1,2}^n & \cdots & \gamma_{z1,j}^n \\ \gamma_{z2,1}^n & \gamma_{z2,2}^n & \cdots & \gamma_{z2,j}^n \\ \gamma_{z3,1}^n & \gamma_{z3,2}^n & \cdots & \gamma_{z3,j}^n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \gamma_{zi,1}^n & \gamma_{zi,2}^n & \cdots & \gamma_{zi,j}^n \end{bmatrix} \quad (5.46)$$

Qualitativamente, pode-se representar as matrizes necessárias para definir as condições de contorno e inicial como:

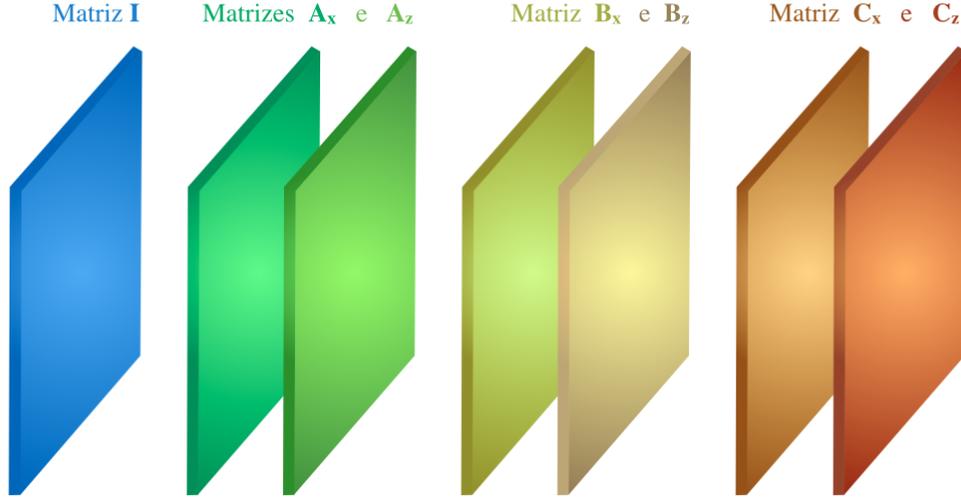


Figura 5.11: Exposição qualitativa das matrizes necessárias para o MDI 2D.

Uma vez descritos os parâmetros α_x , α_z , β_x , β_z , γ_x e γ_z , em termos de índices, pode-se reescrever as condições de contorno de Robin das Equações 3.96, 3.98, 3.100 e 3.102.

Para a condição de contorno do tipo Robin com Δx em atraso a reformulação é a seguinte:

$$\theta_{i-1,j}^n = \frac{\gamma_{x^{i-1,j}}^n \Delta x - \beta_{x^{i-1,j}}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{x^{i-1,j}}^n \Delta x - \beta_{x^{i-1,j}}^n} \quad (5.47)$$

Já com Δx em avanço, a reescrita é:

$$\theta_{i+1,j}^n = \frac{\gamma_{x^{i+1,j}}^n \Delta x + \beta_{x^{i+1,j}}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{x^{i+1,j}}^n \Delta x + \beta_{x^{i+1,j}}^n} \quad (5.48)$$

Além disso, a condição de contorno do tipo Robin, com Δz em atraso, pode ser descrito, por meio de índices, como:

$$\theta_{i,j-1}^n = \frac{\gamma_{z^{i,j-1}}^n \Delta z - \beta_{z^{i,j-1}}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{z^{i,j-1}}^n \Delta z - \beta_{z^{i,j-1}}^n} \quad (5.49)$$

Por fim, com Δz em avanço, pode ser reescrita como:

$$\theta_{i,j+1}^n = \frac{\gamma_{z^{i,j+1}}^n \Delta z + \beta_{z^{i,j+1}}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{z^{i,j+1}}^n \Delta z + \beta_{z^{i,j+1}}^n} \quad (5.50)$$

5.3.3 Formulação Algébrica

No domínio discretizado, o nó central e todos os nós perpendiculares a ele contribuem para o valor do nó central no passo de tempo posterior (Figura 5.12).

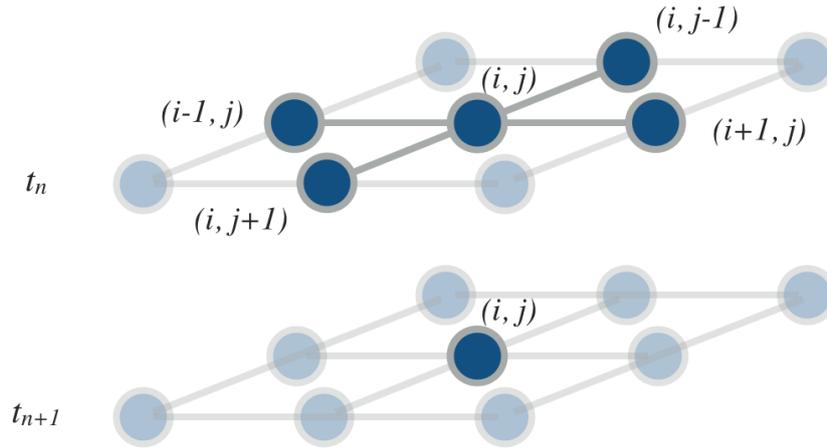


Figura 5.12: Malha do domínio discretizado bidimensional.

Quando todos os nós perpendiculares ao nó central pertencem ao domínio, a Eq. 3.59 regula a descrição do fenômeno. Sendo que o valor do nó central, no passo de tempo posterior, é uma combinação linear desses nós (Figura 5.12).

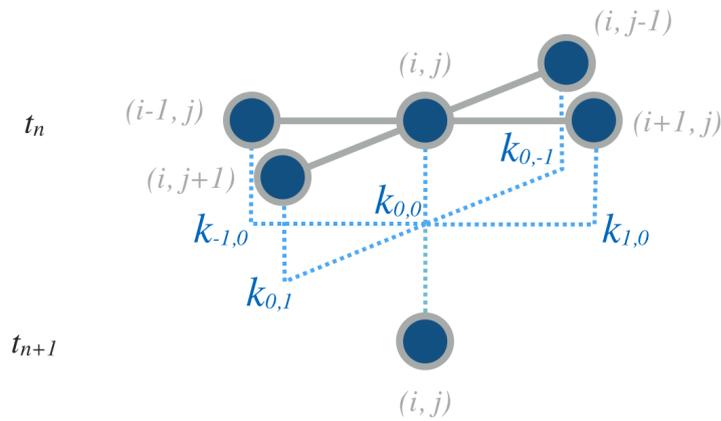


Figura 5.13: Nós do domínio que influenciam o nó central no passo de tempo posterior.

Todavia, quando algum dos nós pertence à fronteira é necessário reformular a Equação 3.59. Por exemplo, a Figura 5.14 retrata um nó pertencente à fronteira de Robin e os demais ao domínio.

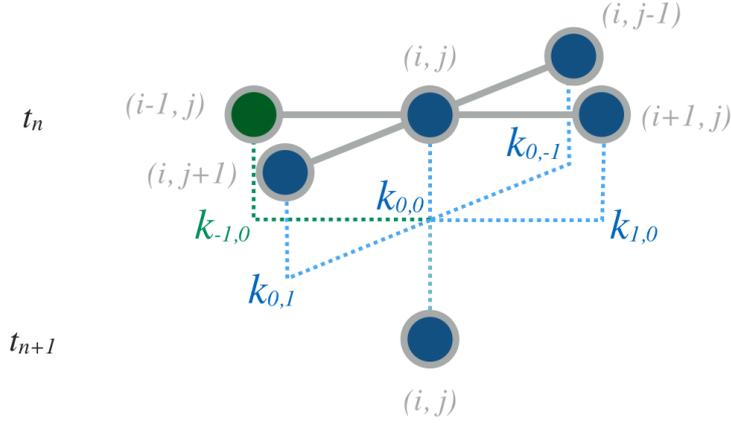


Figura 5.14: Malha com o nó $(i-1, j)$ pertencente à fronteira de Robin.

A descrição feita pela Eq. 3.59 não é suficiente para descrever quando há nós de fronteira. Por isso, é necessário substituir a Eq. 3.59 na Eq. 5.47, da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \theta_{i,j}^{n+1} = & \kappa_{-1,0} \left[\frac{\gamma_{x^{i-1,j}}^n \Delta x - \beta_{x^{i-1,j}}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{x^{i-1,j}}^n \Delta x - \beta_{x^{i-1,j}}^n} \right] + \kappa_{0,-1} \theta_{i,j-1}^n \\ & + \kappa_{1,0} \theta_{i+1,j}^n + \kappa_{0,1} \theta_{i,j+1}^n + \kappa_{0,0} \theta_{i,j}^n \end{aligned} \quad (5.51)$$

Deve-se compreender que a Eq. 5.51 serve unicamente para o caso em que o nó $(i-1, j)$ pertence à fronteira e os demais ao domínio. A fim de obter uma formulação adaptável à situação em que o nó $(i-1, j)$ possa pertencer ou não à fronteira, deve-se fazer a seguinte modificação:

$$\begin{aligned} \theta_{i,j}^{n+1} = & \kappa_{-1,0} \left[h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n) \theta_{i,j-1}^n + \frac{\gamma_{x^{i-1,j}}^n \Delta x - \beta_{x^{i-1,j}}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{x^{i-1,j}}^n \Delta x - \beta_{x^{i-1,j}}^n + h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n)} \right] \\ & + \kappa_{0,-1} \theta_{i,j-1}^n + \kappa_{1,0} \theta_{i+1,j}^n + \kappa_{0,1} \theta_{i,j+1}^n + \kappa_{0,0} \theta_{i,j}^n \end{aligned} \quad (5.52)$$

onde:

$$\alpha_{i+k_1, j+k_2}^n = \sqrt{(\alpha_{x^{i+k_1, j+k_2}}^n)^2 + (\alpha_{z^{i+k_1, j+k_2}}^n)^2}; k_1, k_2, \in Z \quad (5.53)$$

$$\beta_{i+k_1, j+k_2}^n = \sqrt{(\beta_{x^{i+k_1, j+k_2}}^n)^2 + (\beta_{z^{i+k_1, j+k_2}}^n)^2}; k_1, k_2, \in Z \quad (5.54)$$

$$\gamma_{i+k_1, j+k_2}^n = \sqrt{(\gamma_{x^{i+k_1, j+k_2}}^n)^2 + (\gamma_{z^{i+k_1, j+k_2}}^n)^2}; k_1, k_2, \in Z \quad (5.55)$$

Deve ser notado que quando o nó $(i-1, j)$ pertence à fronteira os valores de $\alpha_{i-1,j}^n$ e $\beta_{i-1,j}^n$ não serão simultaneamente nulos. Isso faz com que $h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n) = 0$, onde h é

a função descrita pela Eq. 5.11. Com isso, a Eq. 5.52 pode ser simplificada da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} \theta_{i,j}^{n+1} = & \kappa_{-1,0} \left[0 \cdot \theta_{i,j-1}^n + \frac{\gamma_{x^{i-1},j}^n \Delta x - \beta_{x^{i-1},j}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{x^{i-1},j}^n \Delta x - \beta_{x^{i-1},j}^n + 0} \right] \\ & + \kappa_{0,-1} \theta_{i,j-1}^n + \kappa_{1,0} \theta_{i+1,j}^n + \kappa_{0,1} \theta_{i,j+1}^n + \kappa_{0,0} \theta_{i,j}^n \end{aligned} \quad (5.56)$$

ou ainda,

$$\begin{aligned} \theta_{i,j}^{n+1} = & \kappa_{-1,0} \left[\frac{\gamma_{x^{i-1},j}^n \Delta x - \beta_{x^{i-1},j}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{x^{i-1},j}^n \Delta x - \beta_{x^{i-1},j}^n} \right] + \kappa_{0,-1} \theta_{i,j-1}^n \\ & + \kappa_{1,0} \theta_{i+1,j}^n + \kappa_{0,1} \theta_{i,j+1}^n + \kappa_{0,0} \theta_{i,j}^n \end{aligned} \quad (5.57)$$

Já quando o nó $(i-1, j)$ pertence ao domínio, os valores de $\alpha_{i-1,j}^n$, $\beta_{i-1,j}^n$ e $\gamma_{i-1,j}^n$ serão simultaneamente nulos. Isso implica que $h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n) = 1$. Logo, a Eq. 5.52 pode ser simplificada como:

$$\begin{aligned} \theta_{i,j}^{n+1} = & \kappa_{-1,0} \left[1 \cdot \theta_{i,j-1}^n + \frac{0 \cdot \Delta x - 0 \cdot \theta_{i,j}^n}{0 \cdot \Delta x - 0 + 1} \right] \\ & + \kappa_{0,-1} \theta_{i,j-1}^n + \kappa_{1,0} \theta_{i+1,j}^n + \kappa_{0,1} \theta_{i,j+1}^n + \kappa_{0,0} \theta_{i,j}^n \end{aligned} \quad (5.58)$$

$$\theta_{i,j}^{n+1} = \kappa_{-1,0} \theta_{i-1,j}^n + \kappa_{0,-1} \theta_{i,j-1}^n + \kappa_{1,0} \theta_{i+1,j}^n + \kappa_{0,1} \theta_{i,j+1}^n + \kappa_{0,0} \theta_{i,j}^n \quad (5.59)$$

Com isso, percebe-se que a Eq. 5.52 é flexível quanto ao nó $(i-1, j)$ pertencer à fronteira ou ao domínio, uma vez que tal equação simplificou-se tanto na Eq. 3.59 quanto na Eq. 5.51. Todavia, faz-se necessário investigar o caso quando os outros nós podem pertencer à fronteira. A Figura 5.15 mostra o caso em que o nó $(i+1, j)$ apresenta uma condição de fronteira de Robin.

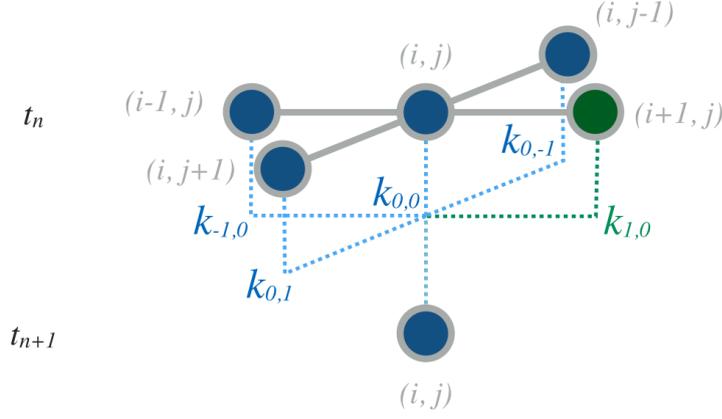


Figura 5.15: Malha com o nó $(i+1, j)$ pertencente à fronteira de Robin.

Como a Eq. 5.52 não é capaz de descrever o fenômeno quando o nó $(i+1, j)$ pertence ao contorno, é necessário ainda modificá-la. Portanto, deve-se combinar as Equações 5.48 e 5.52 da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \theta_{i,j}^{n+1} = & \kappa_{-1,0} \left[h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n) \theta_{i-1,j}^n + \frac{\gamma_{x^{i-1,j}}^n \Delta x - \beta_{x^{i-1,j}}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{x^{i-1,j}}^n \Delta x - \beta_{x^{i-1,j}}^n + h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n)} \right] \\ & + \kappa_{0,-1} \theta_{i,j-1}^n + \kappa_{1,0} \left[\frac{\gamma_{x^{i+1,j}}^n \Delta x + \beta_{x^{i+1,j}}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{x^{i+1,j}}^n \Delta x + \beta_{x^{i+1,j}}^n} \right] + \kappa_{0,1} \theta_{i,j+1}^n + \kappa_{0,0} \theta_{i,j}^n \end{aligned} \quad (5.60)$$

Todavia, a formulação apresentada na Eq. 5.60 é limitada ao caso em que o nó $(i+1, j)$ certamente pertence à fronteira. Com o objetivo de tornar tal formulação flexível quanto à condição do nó, deve-se fazer as seguintes modificações:

$$\begin{aligned} \theta_{i,j}^{n+1} = & \kappa_{-1,0} \left[h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n) \theta_{i-1,j}^n + \frac{\gamma_{x^{i-1,j}}^n \Delta x - \beta_{x^{i-1,j}}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{x^{i-1,j}}^n \Delta x - \beta_{x^{i-1,j}}^n + h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n)} \right] \\ & + \kappa_{1,0} \left[h(\alpha_{i+1,j}^n, \beta_{i+1,j}^n) \theta_{i+1,j}^n + \frac{\gamma_{x^{i+1,j}}^n \Delta x + \beta_{x^{i+1,j}}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{x^{i+1,j}}^n \Delta x + \beta_{x^{i+1,j}}^n + h(\alpha_{i+1,j}^n, \beta_{i+1,j}^n)} \right] \\ & + \kappa_{0,-1} \theta_{i,j-1}^n + \kappa_{0,1} \theta_{i,j+1}^n + \kappa_{0,0} \theta_{i,j}^n \end{aligned} \quad (5.61)$$

Caso o nó $(i+1, j)$ pertença à fronteira, os parâmetros $\alpha_{i+1,j}^n$ e $\beta_{i+1,j}^n$ passam a ter valores não-nulos simultaneamente, o que implica que $h(\alpha_{i+1,j}^n, \beta_{i+1,j}^n) = 0$. Assim, a Eq. 5.61 pode ser simplificada a ponto de igualar-se à Eq. 5.60, da seguinte maneira:

$$\begin{aligned}
\theta_{i,j}^{n+1} = & \kappa_{-1,0} \left[h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n) \theta_{i-1,j}^n + \frac{\gamma_{x^{i-1,j}}^n \Delta x - \beta_{x^{i-1,j}}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{x^{i-1,j}}^n \Delta x - \beta_{x^{i-1,j}}^n + h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n)} \right] \\
& + \kappa_{1,0} \left[0 \cdot \theta_{i+1,j}^n + \frac{\gamma_{x^{i+1,j}}^n \Delta x + \beta_{x^{i+1,j}}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{x^{i+1,j}}^n \Delta x + \beta_{x^{i+1,j}}^n + 0} \right] + \kappa_{0,-1} \theta_{i,j-1}^n + \kappa_{0,1} \theta_{i,j+1}^n \\
& + \kappa_{0,0} \theta_{i,j}^n
\end{aligned} \tag{5.62}$$

ou também,

$$\begin{aligned}
\theta_{i,j}^{n+1} = & \kappa_{-1,0} \left[h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{x^{i-1,j}}^n) \theta_{i-1,j}^n + \frac{\gamma_{x^{i-1,j}}^n \Delta x - \beta_{x^{i-1,j}}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{x^{i-1,j}}^n \Delta x - \beta_{x^{i-1,j}}^n + h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n)} \right] \\
& + \kappa_{1,0} \left[\frac{\gamma_{x^{i+1,j}}^n \Delta x + \beta_{x^{i+1,j}}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{x^{i+1,j}}^n \Delta x + \beta_{x^{i+1,j}}^n} \right] + \kappa_{0,-1} \theta_{i,j-1}^n + \kappa_{0,1} \theta_{i,j+1}^n + \kappa_{0,0} \theta_{i,j}^n
\end{aligned} \tag{5.63}$$

Por outro lado, caso o nó $(i+1, j)$ pertença ao domínio os parâmetros $\alpha_{i+1,j}^n = \beta_{i+1,j}^n = \gamma_{i+1,j}^n = 0$, com isso $h(\alpha_{i+1,j}^n, \beta_{i+1,j}^n) = 1$. Logo, a Eq. 5.61 pode ser descrita a fim de igualar-se à Eq. 5.52, como:

$$\begin{aligned}
\theta_{i,j}^{n+1} = & \kappa_{-1,0} \left[h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n) \theta_{i-2,j}^n + \frac{\gamma_{x^{i-1,j}}^n \Delta x - \beta_{x^{i-1,j}}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{x^{i-1,j}}^n \Delta x - \beta_{x^{i-1,j}}^n + h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n)} \right] \\
& + \kappa_{1,0} \left[1 \cdot \theta_{i+1,j}^n + \frac{0 \cdot \Delta x + 0 \cdot \theta_{i,j}^n}{0 \cdot \Delta x + 0 + 1} \right] + \kappa_{0,-1} \theta_{i,j-1}^n + \kappa_{0,1} \theta_{i,j+1}^n + \kappa_{0,0} \theta_{i,j}^n
\end{aligned} \tag{5.64}$$

ou ainda,

$$\begin{aligned}
\theta_{i,j}^{n+1} = & \kappa_{-1,0} \left[h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n) \theta_{i-1,j}^n + \frac{\gamma_{x^{i-1,j}}^n \Delta x - \beta_{x^{i-1,j}}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{x^{i-1,j}}^n \Delta x - \beta_{x^{i-1,j}}^n + h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n)} \right] \\
& + \kappa_{0,-1} \theta_{i,j-1}^n + \kappa_{1,0} \theta_{i+1,j}^n + \kappa_{0,1} \theta_{i,j+1}^n + \kappa_{0,0} \theta_{i,j}^n
\end{aligned} \tag{5.65}$$

As Equações 5.63 e 5.65 demonstram que a formulação da Eq. 5.61 é flexível quanto aos nós $(i-1, j)$ e $(i+1, j)$ pertencerem ou não ao domínio. Ou seja, a Eq. 5.61 é válida para o caso dos nós $(i-1, j)$ e $(i+1, j)$ pertecerem ao domínio ou ao contorno.

Contudo, ainda deve-se apresentar uma formulação capaz de descrever quando os outros nós pertencem à fronteira. Veja o caso da Figura 5.16, onde o nó $(i, j-1)$ pertence à fronteira, sendo uma condição de Robin.

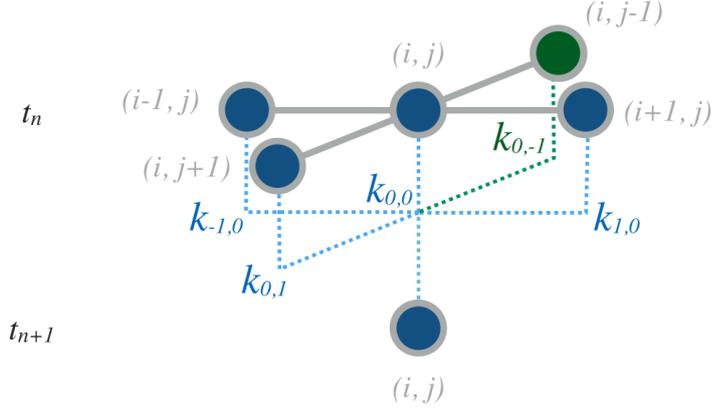


Figura 5.16: Malha com o nó $(i, j-1)$ pertencente à fronteira de Robin.

A modificação na Eq. 5.61, para descrever o caso em que o nó $(i, j-1)$ necessariamente pertence à fronteira, faz uso da Eq. 5.49 e é resulta na seguinte expressão:

$$\begin{aligned}
\theta_{i,j}^{n+1} = & \kappa_{-1,0} \left[h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n) \theta_{i-1,j}^n + \frac{\gamma_{x^{i-1,j}}^n \Delta x - \beta_{x^{i-1,j}}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{x^{i-1,j}}^n \Delta x - \beta_{x^{i-1,j}}^n + h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n)} \right] \\
& + \kappa_{1,0} \left[h(\alpha_{i+1,j}^n, \beta_{i+1,j}^n) \theta_{i+1,j}^n + \frac{\gamma_{x^{i+1,j}}^n \Delta x + \beta_{x^{i+1,j}}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{x^{i+1,j}}^n \Delta x + \beta_{x^{i+1,j}}^n + h(\alpha_{i+1,j}^n, \beta_{i+1,j}^n)} \right] \\
& + \kappa_{0,-1} \left[\frac{\gamma_{z^{i,j-1}}^n \Delta z - \beta_{z^{i,j-1}}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{z^{i,j-1}}^n \Delta z - \beta_{z^{i,j-1}}^n} \right] + \kappa_{0,1} \theta_{i,j+1}^n + \kappa_{0,0} \theta_{i,j}^n
\end{aligned} \quad (5.66)$$

Entretanto, a Eq. 5.66 limita-se ao caso em que o nó $(i, j-1)$ obrigatoriamente apresenta uma condição de Robin. A modificação necessária para que tal equação descreva tanto os casos do nó pertencer à fronteira quanto ao domínio é a seguinte:

$$\begin{aligned}
\theta_{i,j}^{n+1} = & \kappa_{-1,0} \left[h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n) \theta_{i-1,j}^n + \frac{\gamma_{x^{i-1,j}}^n \Delta x - \beta_{x^{i-1,j}}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{x^{i-1,j}}^n \Delta x - \beta_{x^{i-1,j}}^n + h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n)} \right] \\
& + \kappa_{1,0} \left[h(\alpha_{i+1,j}^n, \beta_{i+1,j}^n) \theta_{i+1,j}^n + \frac{\gamma_{x^{i+1,j}}^n \Delta x + \beta_{x^{i+1,j}}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{x^{i+1,j}}^n \Delta x + \beta_{x^{i+1,j}}^n + h(\alpha_{i+1,j}^n, \beta_{i+1,j}^n)} \right] \\
& + \kappa_{0,-1} \left[h(\alpha_{i,j-1}^n, \beta_{i,j-1}^n) \theta_{i,j-1}^n + \frac{\gamma_{z^{i,j-1}}^n \Delta z - \beta_{z^{i,j-1}}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{z^{i,j-1}}^n \Delta z - \beta_{z^{i,j-1}}^n + h(\alpha_{i,j-1}^n, \beta_{i,j-1}^n)} \right] \\
& + \kappa_{0,1} \theta_{i,j+1}^n + \kappa_{0,0} \theta_{i,j}^n
\end{aligned} \quad (5.67)$$

Caso o nó $(i, j-1)$ pertence a fronteira, $\alpha_{i,j-1}^n$ e $\beta_{i,j-1}^n$ não serão simultaneamente nulos, implicando no fato que $h(\alpha_{i,j-1}^n, \beta_{i,j-1}^n) = 0$. A partir dessa consideração, a Eq. 5.67 pode ser escrita como a Eq. 5.66, da seguinte maneira:

$$\begin{aligned}
\theta_{i,j}^{n+1} = & \kappa_{-1,0} \left[h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n) \theta_{i-1,j}^n + \frac{\gamma_{xi-1,j}^n \Delta x - \beta_{xi-1,j}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{xi-1,j}^n \Delta x - \beta_{xi-1,j}^n + h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n)} \right] \\
& + \kappa_{1,0} \left[h(\alpha_{i+1,j}^n, \beta_{i+1,j}^n) \theta_{i+1,j}^n + \frac{\gamma_{xi+1,j}^n \Delta x + \beta_{xi+1,j}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{xi+1,j}^n \Delta x + \beta_{xi+1,j}^n + h(\alpha_{i+1,j}^n, \beta_{i+1,j}^n)} \right] \\
& + \kappa_{0,-1} \left[0 \cdot \theta_{i,j-1}^n + \frac{\gamma_{zi,j-1}^n \Delta z - \beta_{zi,j-1}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{zi,j-1}^n \Delta z - \beta_{zi,j-1}^n + 0} \right] + \kappa_{0,1} \theta_{i,j+1}^n + \kappa_{0,0} \theta_{i,j}^n
\end{aligned} \tag{5.68}$$

ou também,

$$\begin{aligned}
\theta_{i,j}^{n+1} = & \kappa_{-1,0} \left[h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n) \theta_{i-1,j}^n + \frac{\gamma_{xi-1,j}^n \Delta x - \beta_{xi-1,j}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{xi-1,j}^n \Delta x - \beta_{xi-1,j}^n + h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n)} \right] \\
& + \kappa_{1,0} \left[h(\alpha_{i+1,j}^n, \beta_{i+1,j}^n) \theta_{i+1,j}^n + \frac{\gamma_{xi+1,j}^n \Delta x + \beta_{xi+1,j}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{xi+1,j}^n \Delta x + \beta_{xi+1,j}^n + h(\alpha_{i+1,j}^n, \beta_{i+1,j}^n)} \right] \\
& + \kappa_{0,-1} \left[\frac{\gamma_{zi,j-1}^n \Delta z - \beta_{zi,j-1}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{zi,j-1}^n \Delta z - \beta_{zi,j-1}^n} \right] + \kappa_{0,1} \theta_{i,j+1}^n + \kappa_{0,0} \theta_{i,j}^n
\end{aligned} \tag{5.69}$$

Já quando nó $(i, j - 1)$ pertença ao domínio $\alpha_{i,j-1}^n = \beta_{i,j-1}^n = \gamma_{i,j-1}^n = 0$, fazendo com que $h(\alpha_{i,j-1}^n, \beta_{i,j-1}^n) = 1$. Sendo assim, a Eq. 5.67 pode ser simplificada, igualando-se à Eq. 5.61:

$$\begin{aligned}
\theta_{i,j}^{n+1} = & \kappa_{-1,0} \left[h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n) \theta_{i-1,j}^n + \frac{\gamma_{xi-1,j}^n \Delta x - \beta_{xi-1,j}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{xi-1,j}^n \Delta x - \beta_{xi-1,j}^n + h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n)} \right] \\
& + \kappa_{1,0} \left[h(\alpha_{i+1,j}^n, \beta_{i+1,j}^n) \theta_{i+1,j}^n + \frac{\gamma_{xi+1,j}^n \Delta x + \beta_{xi+1,j}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{xi+1,j}^n \Delta x + \beta_{xi+1,j}^n + h(\alpha_{i+1,j}^n, \beta_{i+1,j}^n)} \right] \\
& + \kappa_{0,-1} \left[1 \cdot \theta_{i,j-1}^n + \frac{0 \cdot \Delta z - 0 \cdot \theta_{i,j}^n}{0 \cdot \Delta z - 0 + 1} \right] + \kappa_{0,1} \theta_{i,j+1}^n + \kappa_{0,0} \theta_{i,j}^n
\end{aligned} \tag{5.70}$$

ou ainda,

$$\begin{aligned}
\theta_{i,j}^{n+1} = & \kappa_{-1,0} \left[h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n) \theta_{i-1,j}^n + \frac{\gamma_{xi-1,j}^n \Delta x - \beta_{xi-1,j}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{xi-1,j}^n \Delta x - \beta_{xi-1,j}^n + h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n)} \right] \\
& + \kappa_{1,0} \left[h(\alpha_{i+1,j}^n, \beta_{i+1,j}^n) \theta_{i+1,j}^n + \frac{\gamma_{xi+1,j}^n \Delta x + \beta_{xi+1,j}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{xi+1,j}^n \Delta x + \beta_{xi+1,j}^n + h(\alpha_{i+1,j}^n, \beta_{i+1,j}^n)} \right] \\
& + \kappa_{0,-1} \theta_{i,j-1}^n + \kappa_{0,1} \theta_{i,j+1}^n + \kappa_{0,0} \theta_{i,j}^n
\end{aligned} \tag{5.71}$$

Ao observar as Equações 5.69 e 5.71, é possível compreender que a Eq. 5.67 é plenamente capaz de descrever o fenômeno de fluxo não saturado quando o nó $(i, j - 1)$ pertence ao domínio ou à fronteira de Robin. O último nó da vizinhança a ser analisado, como pertencente a fronteira, é o nó $(i, j - 1)$, assim como mostrado na Figura 5.17.

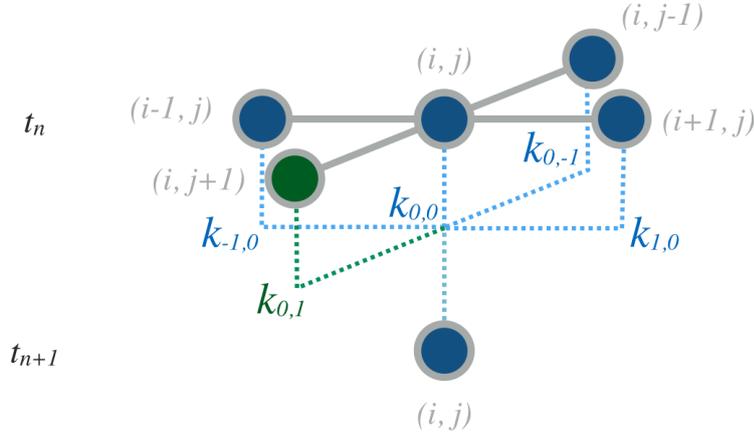


Figura 5.17: Malha com o nó $(i, j+1)$ pertencente à fronteira de Robin.

Decerto, a Eq. 5.67 não é capaz de descrever o fluxo quando o nó $(i, j + 1)$. Assim sendo, é necessário, fazendo uso da Eq. 5.50, realizar a seguinte modificação:

$$\begin{aligned}
\theta_{i,j}^{n+1} = & \kappa_{-1,0} \left[h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n) \theta_{i-1,j}^n + \frac{\gamma_{xi-1,j}^n \Delta x - \beta_{xi-1,j}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{xi-1,j}^n \Delta x - \beta_{xi-1,j}^n + h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n)} \right] \\
& + \kappa_{1,0} \left[h(\alpha_{i+1,j}^n, \beta_{i+1,j}^n) \theta_{i+1,j}^n + \frac{\gamma_{xi+1,j}^n \Delta x + \beta_{xi+1,j}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{xi+1,j}^n \Delta x + \beta_{xi+1,j}^n + h(\alpha_{i+1,j}^n, \beta_{i+1,j}^n)} \right] \\
& + \kappa_{0,-1} \left[h(\alpha_{i,j-1}^n, \beta_{i,j-1}^n) \theta_{i,j-1}^n + \frac{\gamma_{zi,j-1}^n \Delta z - \beta_{zi,j-1}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{zi,j-1}^n \Delta z - \beta_{zi,j-1}^n + h(\alpha_{i,j-1}^n, \beta_{i,j-1}^n)} \right] \\
& + \kappa_{0,1} \left[\frac{\gamma_{zi,j+1}^n \Delta z + \beta_{zi,j+1}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{zi,j+1}^n \Delta z + \beta_{zi,j+1}^n} \right] + \kappa_{0,0} \theta_{i,j}^n
\end{aligned} \tag{5.72}$$

Todavia, a Eq. 5.72 implica necessariamente que o nó $(i, j + 1)$ pertença à fronteira. A modificação necessária para tornar a Eq. 5.72 flexível quanto ao fato de pertencer ou não ao domínio é a seguinte:

$$\begin{aligned}
\theta_{i,j}^{n+1} = & \kappa_{-1,0} \left[h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n) \theta_{i-1,j}^n + \frac{\gamma_{xi-1,j}^n \Delta x - \beta_{xi-1,j}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{xi-1,j}^n \Delta x - \beta_{xi-1,j}^n + h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n)} \right] \\
& + \kappa_{1,0} \left[h(\alpha_{i+1,j}^n, \beta_{i+1,j}^n) \theta_{i+1,j}^n + \frac{\gamma_{xi+1,j}^n \Delta x + \beta_{xi+1,j}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{xi+1,j}^n \Delta x + \beta_{xi+1,j}^n + h(\alpha_{i+1,j}^n, \beta_{i+1,j}^n)} \right] \\
& + \kappa_{0,-1} \left[h(\alpha_{i,j-1}^n, \beta_{i,j-1}^n) \theta_{i,j-1}^n + \frac{\gamma_{zi,j-1}^n \Delta z - \beta_{zi,j-1}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{zi,j-1}^n \Delta z - \beta_{zi,j-1}^n + h(\alpha_{i,j-1}^n, \beta_{i,j-1}^n)} \right] \\
& + \kappa_{0,1} \left[h(\alpha_{i,j+1}^n, \beta_{i,j+1}^n) \theta_{i,j+1}^n + \frac{\gamma_{zi,j+1}^n \Delta z + \beta_{zi,j+1}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{zi,j+1}^n \Delta z + \beta_{zi,j+1}^n + h(\alpha_{i,j+1}^n, \beta_{i,j+1}^n)} \right] \\
& + \kappa_{0,0} \theta_{i,j}^n
\end{aligned} \tag{5.73}$$

Quando o nó $(i, j+1)$ pertence à fronteira, tem-se que $\alpha_{i,j+1}^n$ e $\beta_{i,j+1}^n$ não são identicamente nulos simultaneamente, determinando que $h(\alpha_{i,j+1}^n, \beta_{i,j+1}^n) = 0$. A partir dessa premissa, a Eq. 5.73 pode ser simplificada como:

$$\begin{aligned}
\theta_{i,j}^{n+1} = & \kappa_{-1,0} \left[h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n) \theta_{i-1,j}^n + \frac{\gamma_{xi-1,j}^n \Delta x - \beta_{xi-1,j}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{xi-1,j}^n \Delta x - \beta_{xi-1,j}^n + h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n)} \right] \\
& + \kappa_{1,0} \left[h(\alpha_{i+1,j}^n, \beta_{i+1,j}^n) \theta_{i+1,j}^n + \frac{\gamma_{xi+1,j}^n \Delta x + \beta_{xi+1,j}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{xi+1,j}^n \Delta x + \beta_{xi+1,j}^n + h(\alpha_{i+1,j}^n, \beta_{i+1,j}^n)} \right] \\
& + \kappa_{0,-1} \left[h(\alpha_{i,j-1}^n, \beta_{i,j-1}^n) \theta_{i,j-1}^n + \frac{\gamma_{zi,j-1}^n \Delta z - \beta_{zi,j-1}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{zi,j-1}^n \Delta z - \beta_{zi,j-1}^n + h(\alpha_{i,j-1}^n, \beta_{i,j-1}^n)} \right] \\
& + \kappa_{0,1} \left[0 \cdot \theta_{i,j+1}^n + \frac{\gamma_{zi,j+1}^n \Delta z + \beta_{zi,j+1}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{zi,j+1}^n \Delta z + \beta_{zi,j+1}^n + 0} \right] + \kappa_{0,0} \theta_{i,j}^n
\end{aligned} \tag{5.74}$$

ou ainda,

$$\begin{aligned}
\theta_{i,j}^{n+1} = & \kappa_{-1,0} \left[h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n) \theta_{i-1,j}^n + \frac{\gamma_{xi-1,j}^n \Delta x - \beta_{xi-1,j}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{xi-1,j}^n \Delta x - \beta_{xi-1,j}^n + h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n)} \right] \\
& + \kappa_{1,0} \left[h(\alpha_{i+1,j}^n, \beta_{i+1,j}^n) \theta_{i+1,j}^n + \frac{\gamma_{xi+1,j}^n \Delta x + \beta_{xi+1,j}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{xi+1,j}^n \Delta x + \beta_{xi+1,j}^n + h(\alpha_{i+1,j}^n, \beta_{i+1,j}^n)} \right] \\
& + \kappa_{0,-1} \left[h(\alpha_{i,j-1}^n, \beta_{i,j-1}^n) \theta_{i,j-1}^n + \frac{\gamma_{zi,j-1}^n \Delta z - \beta_{zi,j-1}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{zi,j-1}^n \Delta z - \beta_{zi,j-1}^n + h(\alpha_{i,j-1}^n, \beta_{i,j-1}^n)} \right] \\
& + \kappa_{0,1} \left[\frac{\gamma_{zi,j+1}^n \Delta z + \beta_{zi,j+1}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{zi,j+1}^n \Delta z + \beta_{zi,j+1}^n} \right] + \kappa_{0,0} \theta_{i,j}^n
\end{aligned} \tag{5.75}$$

Por mais, quando o nó $(i, j+1)$ pertence ao domínio, $\alpha_{i,j+1}^n = \beta_{i,j+1}^n = \gamma_{i,j+1}^n = 0$ e

$h(\alpha_{i,j+1}^n, \beta_{i,j+1}^n) = 1$. Logo, a Eq. 5.73 pode ser escrita como:

$$\begin{aligned}
\theta_{i,j}^{n+1} = & \kappa_{-1,0} \left[h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n) \theta_{i-1,j}^n + \frac{\gamma_{x^{i-1,j}}^n \Delta x - \beta_{x^{i-1,j}}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{x^{i-1,j}}^n \Delta x - \beta_{x^{i-1,j}}^n + h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n)} \right] \\
& + \kappa_{1,0} \left[h(\alpha_{i+1,j}^n, \beta_{i+1,j}^n) \theta_{i+1,j}^n + \frac{\gamma_{x^{i+1,j}}^n \Delta x + \beta_{x^{i+1,j}}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{x^{i+1,j}}^n \Delta x + \beta_{x^{i+1,j}}^n + h(\alpha_{i+1,j}^n, \beta_{i+1,j}^n)} \right] \\
& + \kappa_{0,-1} \left[h(\alpha_{i,j-1}^n, \beta_{i,j-1}^n) \theta_{i,j-1}^n + \frac{\gamma_{z^{i,j-1}}^n \Delta z - \beta_{z^{i,j-1}}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{z^{i,j-1}}^n \Delta z - \beta_{z^{i,j-1}}^n + h(\alpha_{i,j-1}^n, \beta_{i,j-1}^n)} \right] \\
& + \kappa_{0,1} \left[1 \cdot \theta_{i,j+1}^n + \frac{0 \cdot \Delta z + 0 \cdot \theta_{i,j}^n}{0 \cdot \Delta z + 0 + 1} \right] + \kappa_{0,0} \theta_{i,j}^n
\end{aligned} \tag{5.76}$$

ou também,

$$\begin{aligned}
\theta_{i,j}^{n+1} = & \kappa_{-1,0} \left[h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n) \theta_{i-1,j}^n + \frac{\gamma_{x^{i-1,j}}^n \Delta x - \beta_{x^{i-1,j}}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{x^{i-1,j}}^n \Delta x - \beta_{x^{i-1,j}}^n + h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n)} \right] \\
& + \kappa_{1,0} \left[h(\alpha_{i+1,j}^n, \beta_{i+1,j}^n) \theta_{i+1,j}^n + \frac{\gamma_{x^{i+1,j}}^n \Delta x + \beta_{x^{i+1,j}}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{x^{i+1,j}}^n \Delta x + \beta_{x^{i+1,j}}^n + h(\alpha_{i+1,j}^n, \beta_{i+1,j}^n)} \right] \\
& + \kappa_{0,-1} \left[h(\alpha_{i,j-1}^n, \beta_{i,j-1}^n) \theta_{i,j-1}^n + \frac{\gamma_{z^{i,j-1}}^n \Delta z - \beta_{z^{i,j-1}}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{z^{i,j-1}}^n \Delta z - \beta_{z^{i,j-1}}^n + h(\alpha_{i,j-1}^n, \beta_{i,j-1}^n)} \right] \\
& + \kappa_{0,1} \theta_{i,j+1}^n + \kappa_{0,0} \theta_{i,j}^n
\end{aligned} \tag{5.77}$$

Portanto, as Equações 5.75 e 5.77 demonstram a capacidade da Eq. 5.73 de se adaptar à fronteira ou ao domínio, em relação ao nó $(i, j+1)$, uma vez que podem ser simplificadas nas Equações 5.72 e 5.67, respectivamente.

Por fim, o último nó que se deve avaliar é o nó central. A Figura 5.18 retrata o caso de quando o nó central pertence à fronteira, sendo uma condição de Robin.

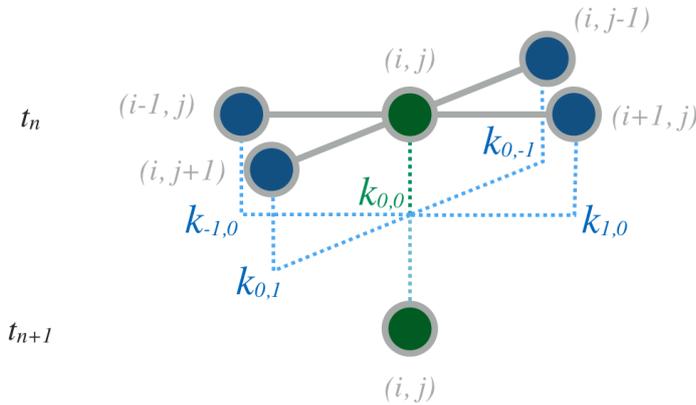


Figura 5.18: Malha com o nó (i, j) pertencente à fronteira de Robin.

Neste caso, definir um valor para o nó (i, j) significa avaliar quantitativamente um nó de fronteira. Em alguns casos é possível aferir o valor de um nó de fronteira, como no caso de ser uma fronteira de Dirichlet. Todavia, há casos em que não é possível determinar o valor na fronteira. Nos casos de fluxo não saturado não há interesse notável em calcular o valor dos nós da fronteira, mas apenas do domínio onde está sendo simulado o fenômeno. Além disso, caso fosse implementado o cálculo dos nós de fronteira, o tempo de processamento iria aumentar significativamente. Por esses motivos, caso o nó central pertença à fronteira decide-se definir seu valor como zero. Deve-se compreender que isso é uma decisão computacional, não uma definição algébrica.

Para tanto, deve-se ser feita a seguinte modificação na Eq. 5.73:

$$\begin{aligned}
\theta_{i,j}^{n+1} = & \left\{ \kappa_{-1,0} \left[h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n) \theta_{i-1,j}^n + \frac{\gamma_{xi-1,j}^n \Delta x - \beta_{xi-1,j}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{xi-1,j}^n \Delta x - \beta_{xi-1,j}^n + h(\alpha_{i-1,j}^n, \beta_{i-1,j}^n)} \right] \right. \\
& + \kappa_{1,0} \left[h(\alpha_{i+1,j}^n, \beta_{i+1,j}^n) \theta_{i+1,j}^n + \frac{\gamma_{xi+1,j}^n \Delta x + \beta_{xi+1,j}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{xi+1,j}^n \Delta x + \beta_{xi+1,j}^n + h(\alpha_{i+1,j}^n, \beta_{i+1,j}^n)} \right] \\
& + \kappa_{0,-1} \left[h(\alpha_{i,j-1}^n, \beta_{i,j-1}^n) \theta_{i,j-1}^n + \frac{\gamma_{zi,j-1}^n \Delta z - \beta_{zi,j-1}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{zi,j-1}^n \Delta z - \beta_{zi,j-1}^n + h(\alpha_{i,j-1}^n, \beta_{i,j-1}^n)} \right] \\
& + \kappa_{0,1} \left[h(\alpha_{i,j+1}^n, \beta_{i,j+1}^n) \theta_{i,j+1}^n + \frac{\gamma_{zi,j+1}^n \Delta z + \beta_{zi,j+1}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{zi,j+1}^n \Delta z + \beta_{zi,j+1}^n + h(\alpha_{i,j+1}^n, \beta_{i,j+1}^n)} \right] \\
& \left. + \kappa_{0,0} \theta_{i,j}^n \right\} h(\alpha_{i,j}^n, \beta_{i,j}^n)
\end{aligned} \tag{5.78}$$

A fim de obter um melhor desempenho computacional, pode-se definir uma nova matriz, denominada \mathbf{h} :

$$\mathbf{h}^n = \begin{bmatrix} h_{1,1}^n & h_{1,2}^n & \cdots & h_{1,j}^n \\ h_{2,1}^n & h_{2,2}^n & \cdots & h_{2,j}^n \\ h_{3,1}^n & h_{3,2}^n & \cdots & h_{3,j}^n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ h_{i,1}^n & h_{i,2}^n & \cdots & h_{i,j}^n \end{bmatrix} \tag{5.79}$$

onde,

$$h_{i,j}^n = h(\alpha_{i,j}^n, \beta_{i,j}^n) \tag{5.80}$$

Com isso, a nova composição de matrizes necessárias à simulação numérica do fenômeno é descrita pela Figura 5.19.

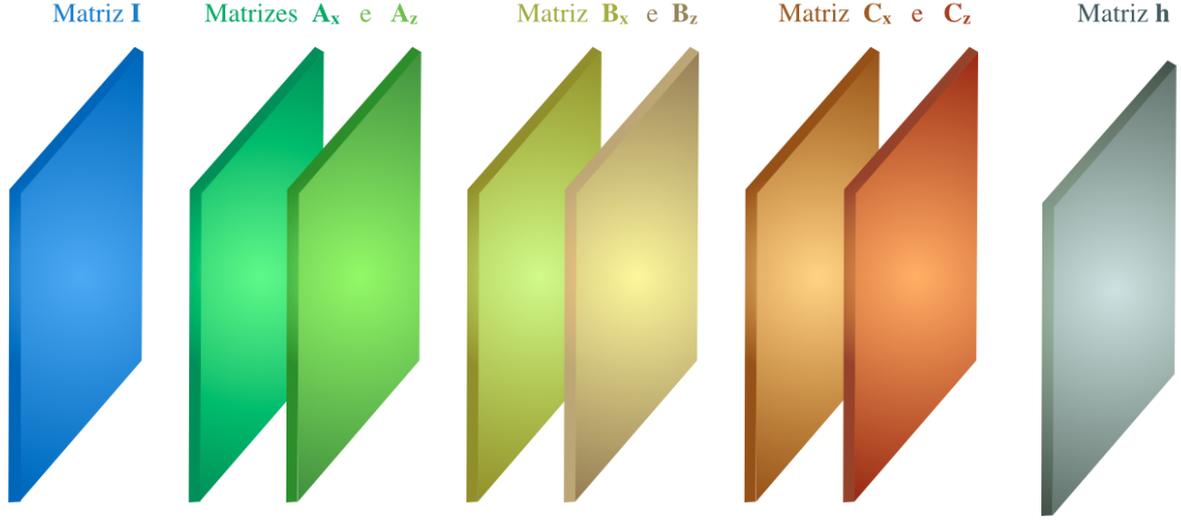


Figura 5.19: Composição de Matrizes para o MDI 2D.

Assim, é possível reescrever a Eq. 5.78 em termos da Eq. 5.80 como a seguir:

$$\begin{aligned}
\theta_{i,j}^{n+1} = & \left\{ \kappa_{-1,0} \left[h_{i-1,j}^n \theta_{i-1,j}^n + \frac{\gamma_{x^{i-1,j}}^n \Delta x - \beta_{x^{i-1,j}}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{x^{i-1,j}}^n \Delta x - \beta_{x^{i-1,j}}^n + h_{i-1,j}^n} \right] \right. \\
& + \kappa_{1,0} \left[h_{i+1,j}^n \theta_{i+1,j}^n + \frac{\gamma_{x^{i+1,j}}^n \Delta x + \beta_{x^{i+1,j}}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{x^{i+1,j}}^n \Delta x + \beta_{x^{i+1,j}}^n + h_{i+1,j}^n} \right] \\
& + \kappa_{0,-1} \left[h_{i,j-1}^n \theta_{i,j-1}^n + \frac{\gamma_{z^{i,j-1}}^n \Delta z - \beta_{z^{i,j-1}}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{z^{i,j-1}}^n \Delta z - \beta_{z^{i,j-1}}^n + h_{i,j-1}^n} \right] \\
& + \kappa_{0,1} \left[h_{i,j+1}^n \theta_{i,j+1}^n + \frac{\gamma_{z^{i,j+1}}^n \Delta z + \beta_{z^{i,j+1}}^n \theta_{i,j}^n}{\alpha_{z^{i,j+1}}^n \Delta z + \beta_{z^{i,j+1}}^n + h_{i,j+1}^n} \right] \\
& \left. + \kappa_{0,0} \theta_{i,j}^n \right\} h_{i,j}^n
\end{aligned} \tag{5.81}$$

Pode-se ainda reescrever a Eq. 5.81 em termos da função iota-delta (Ozelim et al., 2013a; Ozelim et al. 2013b). Isso permite com que seja resumida em um somatório simples, tal como descrito a seguir:

$$\theta_{i,j}^{n+1} = h_{i,j}^n \sum_{m=0}^4 \left\{ \kappa_{i_m,j_m} \left[\left(h \theta + p_m \frac{\gamma_{v_m} \Delta v_m + s_m \beta_{v_m} \theta_{i,j}^n}{\alpha_{v_m} \Delta v_m + s_m \beta_{v_m} + h} \right) \right]_{i+i_m,j+j_m}^n \right\} \tag{5.82}$$

onde,

$$i_m = \iota \delta_3^4 (2m) - 1 \tag{5.83}$$

$$j_m = \iota\delta_3^4[(m+1)^3] - 1 \quad (5.84)$$

$$s_m = \iota\delta_3^4[(m+2)^2 + 2] - 1 \quad (5.85)$$

$$\Delta v_m = \iota\delta_2^4(3m+1)\Delta x + [1 - \iota\delta_2^4(3m+1)]\Delta z \quad (5.86)$$

$$v_m = \iota\delta_2^4(3m+1)x + [1 - \iota\delta_2^4(3m+1)]z \quad (5.87)$$

$$p_m = \iota\delta_2^4[(2m-3)^4] \quad (5.88)$$

5.3.4 Aplicações

O Método Discreto Iota-delta possui diversas aplicações inovadoras tais como:

- Realizar a modelagem de fenômenos físicos que ocorrem em estruturas geotécnicas a fim de projetar ou reavaliar projetos já existentes. No caso de projetos já existentes basta utilizar o modelo geométrico com as respectivas propriedades físicas.
- Prever o comportamento físico em regiões cuja topografia está disponível, a fim de prever como que o fluxo ocorre.
- Integrar instrumentação com o processamento do MDI. Tal que os valores obtidos por meio das instrumentações sejam impostos como condições de contorno ou inicial para a simulação do método numérico.
- Integrar processamento de imagem com a simulação numérica prévia ou simultaneamente. Permitindo com que a imagem do meio simulado sirva como condições iniciais ou de contorno para a aplicação do MDI.

6 VALIDAÇÃO DO MÉTODO DISCRETO IOTA-DELTA

6.1 Validação do MDI para a Eq. de Richards 1D

6.1.1 Descrição qualitativa da validação

Para verificar a validade da formulação numérica faz-se necessário comparar o resultado de uma formulação analítica com o resultado do MDI 1D. Para que essa comparação possa ser feita, propõe-se uma simulação. Assim sendo, nessa primeira etapa será simulado o fluxo em meios não saturados para dois solos distintos, um solo mais fino e um solo mais granular.

Para a simulação, considera-se que uma fonte constante de umidade é colocada no limite superior do solo. Isso é válido, por exemplo, quando um reservatório é preenchido ou quando há um acúmulo de água acima do solo.

Além disso, considera-se que os solos já possuem uma umidade inicial. Ou seja, que antes do fenômeno de fluxo não saturado ocorrer já existe uma umidade no perfil de cada solo. Considera-se ainda que o solo é um meio semi-infinito, com começo mas sem fim.

A Figura 6.1 ilustra como que um acúmulo de água acima do solo pode representar o caso da primeira simulação.

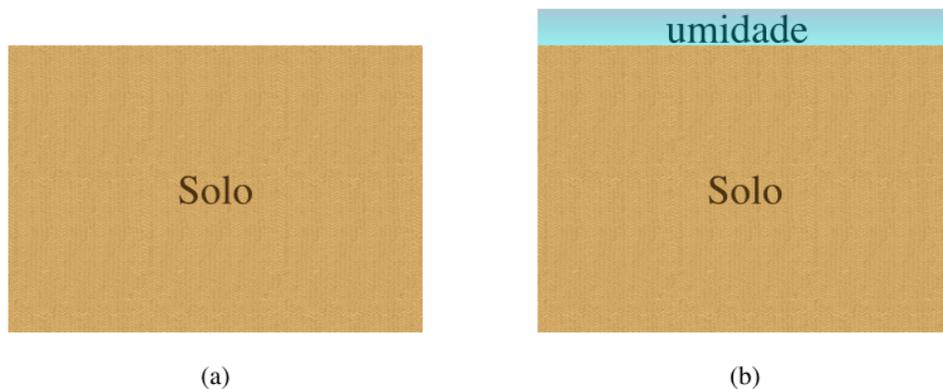


Figura 6.1: Caso representado pela simulação 1D (a) antes do início do fenômeno e (b) no momento inicial do fenômeno.

6.1.2 Descrição matemática da validação

Para obter uma representação do problema descrito qualitativamente, é preciso descrevê-lo quantitativamente. Ou seja, faz-se necessário retratar o caso tratado a partir de uma perspectiva matemática.

A condição de contorno do topo do solo pode ser expressa por:

$$\theta(0, t) = \theta_i \quad (6.1)$$

Ainda, o fato do solo ser semi-infinito e não poder ter sua umidade alterada quando avaliado em uma distância que tende ao infinito pode ser escrita como:

$$\lim_{z \rightarrow \infty} \frac{\partial \theta(z, t)}{\partial z} = 0 \quad (6.2)$$

Já o teor de umidade volumétrica inicial, ao longo de todo o solo, pode ser representado por:

$$\theta(z, 0) = \theta_0 \quad (6.3)$$

onde $z \geq 0$; $t \geq 0$.

Na simulação compara-se a solução analítica com solução numérica, dada pelo MDI 1D. Tal que, a resolução analítica para a Eq. 2.48, com as condições de contorno das Eqs. 6.1 e 6.2, e a condição inicial dada pela Eq. 6.3, foi descrita por Cavalcante & Zornberg (2016, *in press*) da seguinte forma:

$$\theta(z, t) = \theta_i + \frac{(\theta_0 - \theta_i)}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{z - a_s t}{2\sqrt{D_z t}} \right) + \exp \left(\frac{a_s z}{D_z} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{z + a_s t}{2\sqrt{D_z t}} \right) \right] \quad (6.4)$$

Para a simulação unidimensional são considerados os parâmetros das Tabelas 6.1 e 6.2, que descrevem tanto os parâmetros numéricos dos solos como os parâmetros físicos utilizados para a simulação, respectivamente. Considera-se o solo 1 como um solo granular e o solo 2 como um solo mais fino.

Tabela 6.1: Parâmetros numéricos da simulação de validação 2D.

Parâmetros Numéricos do Solo		
	Solo 1	Solo 2
Δt (s)	0,001	0,001
Δz (m)	0,001	0,001
κ_{-1}	0,340103	0,0291542
κ_0	0,319761	0,941691
κ_1	0,340136	0,0291545
α_j^n	1	1
β_j^n	0	0
γ_j^n	0,35	0,40

Tabela 6.2: Parâmetros físicos da simulação de validação 1D.

Parâmetros Físicos do Solo		
	Solo 1	Solo 2
γ_w (kN/m^3)	9,8	
k_{s_z} (m/s)	10^{-5}	10^{-7}
δ	0,01	0,001
θ_s	0,40	0,45
θ_r	0,10	0,15
θ_i	0,15	0,20
θ_0	0,35	0,40

6.1.3 Características Físicas dos Solos

Os solos simulados foram escolhidos a fim de representarem dois tipos comuns de solos, assim como já dito, um mais granular e outro mais fino. Com isso, o intuito da simulação, além de apresentar uma validação para o MDI 1D, é discernir como ocorre o fluxo não saturado em cada tipo de solo.

Para se ter uma compreensão melhor do fenômenos, é necessário, antes, verificar o comportamento físico de cada solo. As duas curvas mais relevantes para a compreensão da natureza do solo antes da simulação, no que diz respeito ao fluxo não saturado, é a curva característica e a curva de condutividade hidráulica não saturada.

Sabe-se que à medida que a água estabelece caminhos preferenciais devido ao fluxo, mais facilidade há para sua passagem. Assim, pode-se compreender que a condutividade hidráulica não saturada varia com a sucção, como já mostrado em tópicos anteriores. Plotando para o Solo 1, que é mais granular, pode-se obter a Figura 6.2.

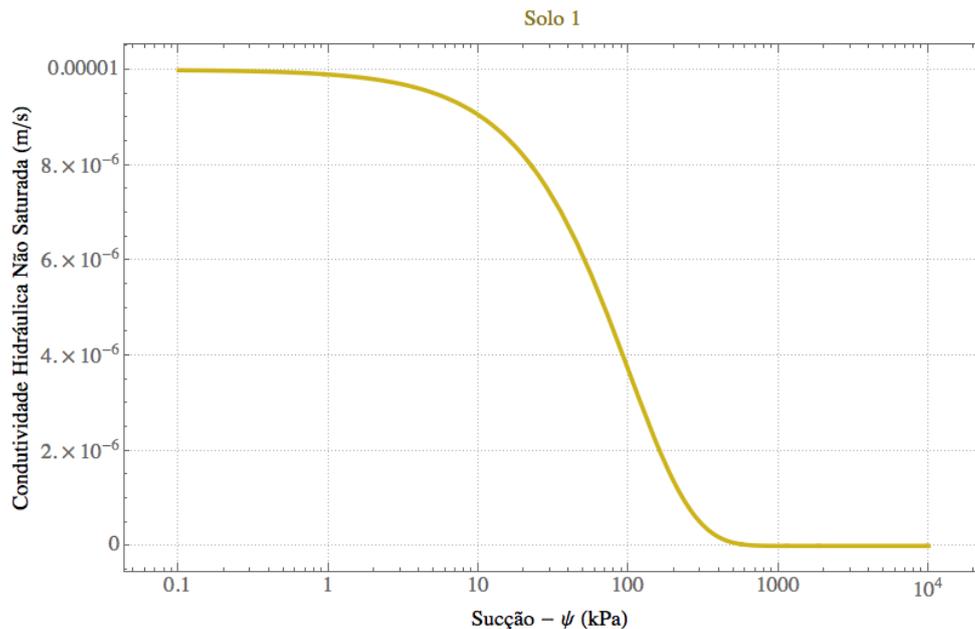


Figura 6.2: Validação 1D - curva de condutividade hidráulica não saturada do Solo 1.

Semelhantemente, pode-se plotar a curva de condutividade hidráulica não saturada para o Solo 2, que é mais fino, e obter a representação da Figura 6.3.

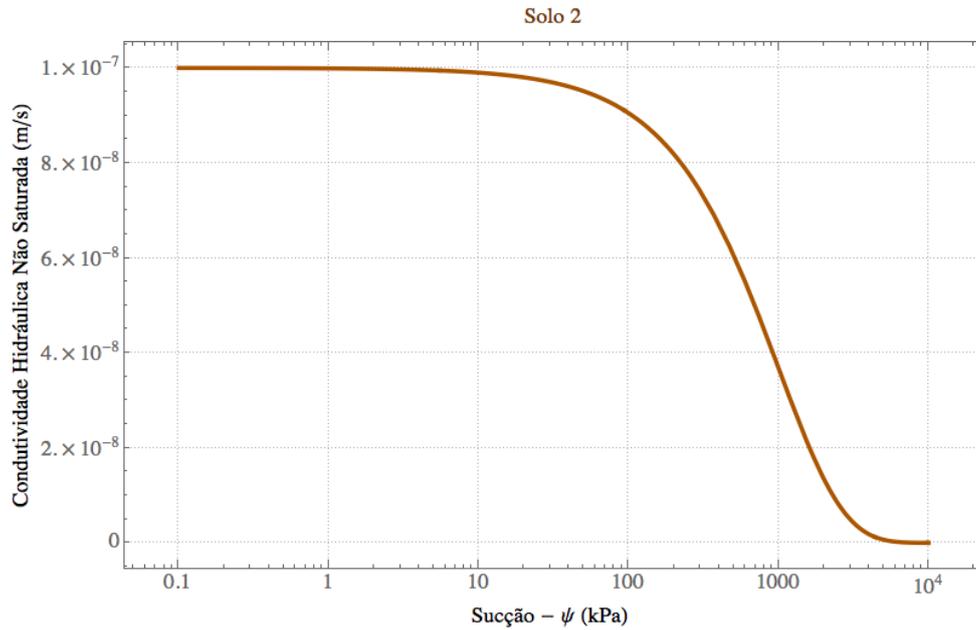


Figura 6.3: Validação 1D - curva de condutividade hidráulica não saturada do Solo 2.

Agora, combinando as duas curvas de condutividade hidráulica não saturada e utilizando as escalas de ambos os eixos em razão logarítmica, pode-se comparar as condutividades hidráulicas não saturadas de ambos os solos, tal como visto na Figura 6.4.

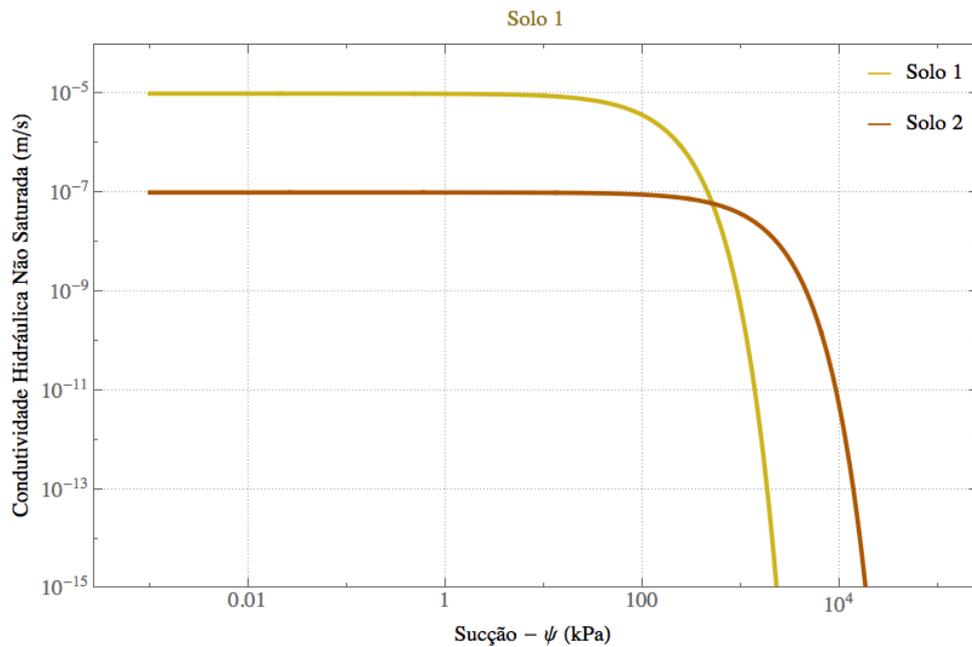


Figura 6.4: Validação 1D - curvas de condutividade hidráulica não saturada dos Solos 1 e 2.

Deve-se notar que a condutividade hidráulica não saturada do solo granular, com

alto teor de umidade volumétrica, é maior do que a do solo fino. Todavia, ao aumentar gradativamente a sucção para ambos os solos, percebe-se que o solo fino é mais permeável. Isso demonstra que nem sempre o comportamento saturado é preponderante em todos os graus de saturação, permitindo com que um solo granular funcione como uma barreira à umidade.

Além das curvas de condutividade hidráulica não saturada dos solos, é necessário mostrar as curvas características. A curva característica, assim como visto anteriormente, estabelece uma relação entre o teor de umidade volumétrica e a sucção, em um solo. A medida que o teor de umidade aumenta, a sucção diminui.

As curvas características de ambos os solos podem ser representados conjuntamente, tal como visto na Figura 6.5. Diferentemente da condutividade hidráulica não saturada, a curva característica de ambos os solos não se cruzam. Isso demonstra que as características mantém o mesmo comportamento ao longo da variação da sucção. Além disso, pode-se compreender que solo mais finos possui uma curva característica de maior magnitude uma vez que são capazes de armazenar maior umidade, tal como solos expansivos e solos moles.

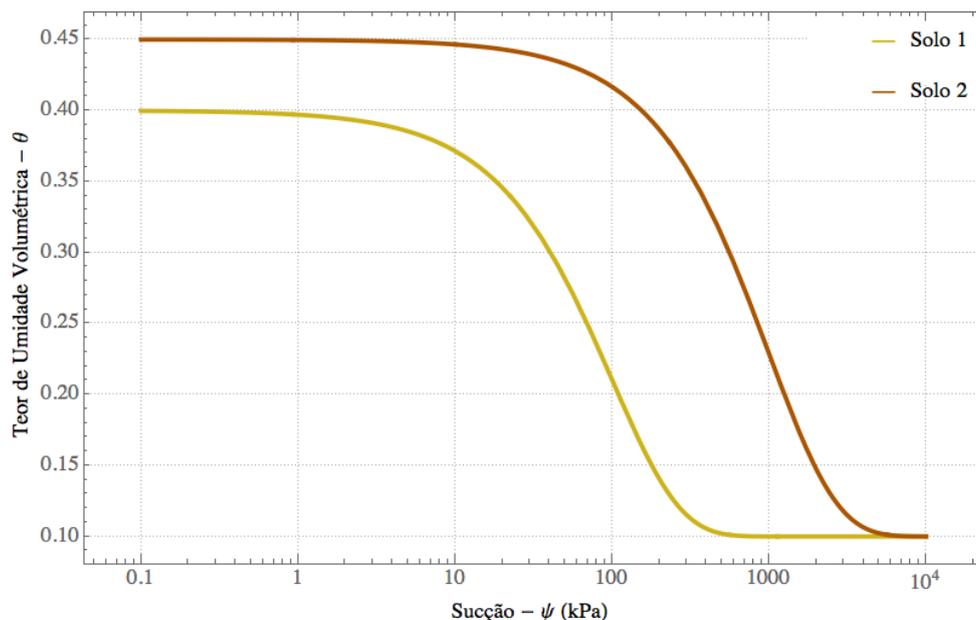


Figura 6.5: Validação 1D - curvas características dos solos 1 e 2.

6.1.4 Simulação

Para a validação do MDI 1D simulou-se numericamente como o teor de umidade variava com o tempo e espaço. E, utilizando as curvas de condutividade hidráulica não saturada e característica, pôde-se verificar como a sucção e a condutividade hidráulica não saturada variaram espacial e temporalmente.

Para representar como a umidade varia com o tempo e o espaço, plotou-se primeiro a umidade variando com o tempo, para três profundidades específicas, e, depois, a umidade

variando com a profundidade, para três tempos. Assim, a Figura 6.6 representa a umidade pela profundidade para o solo 1, e a Figura 6.7 para o solo 2.

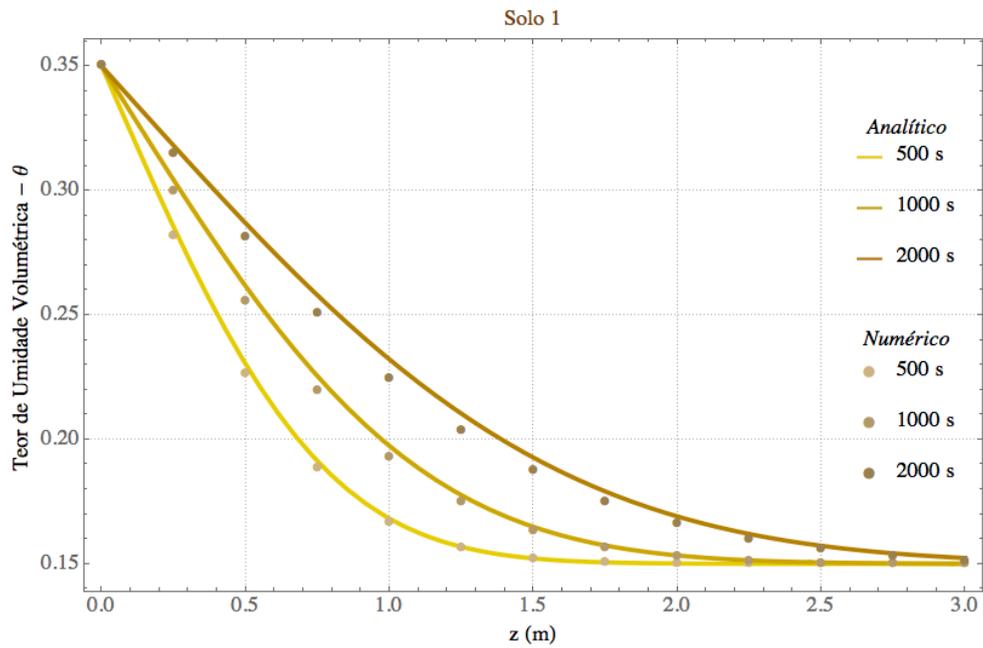


Figura 6.6: Solo 1 - teor de umidade volumétrica por profundidade, para vários tempos.

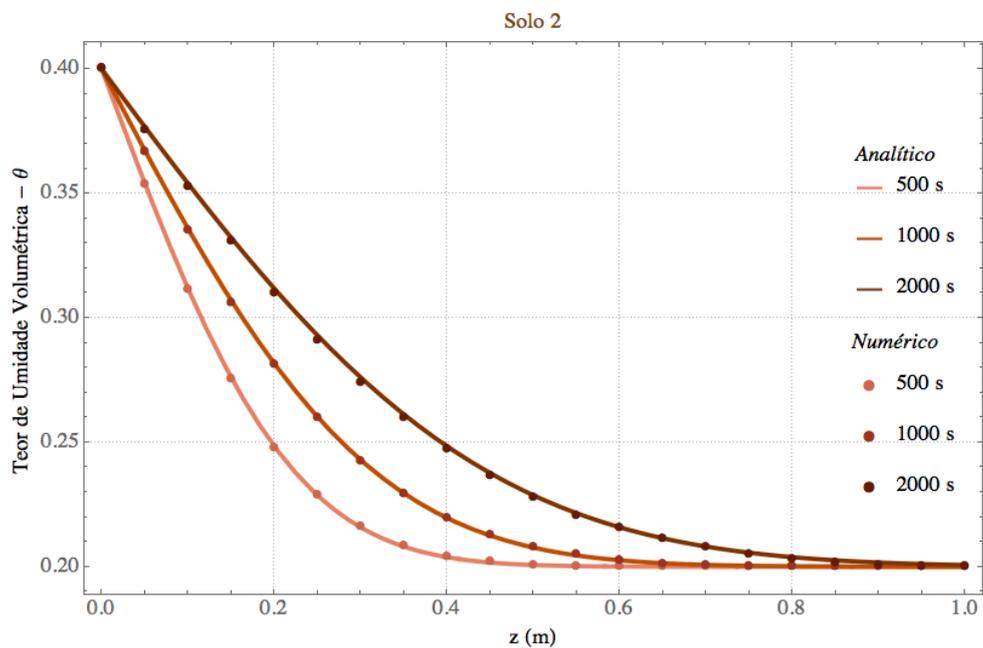


Figura 6.7: Solo 2 - teor de umidade volumétrica por profundidade, para vários tempos.

Nota-se que no solo mais granular, a umidade volumétrica do topo consegue influenciar até 3 m de profundidade, enquanto no solo mais fino o seu alcance é de apenas 1 m, para um mesmo intervalo de tempo. Já as Figuras 6.8 e 6.9 representam como a umidade varia com o tempo para diversas profundidades, para o solo 1 e 2, respectivamente.

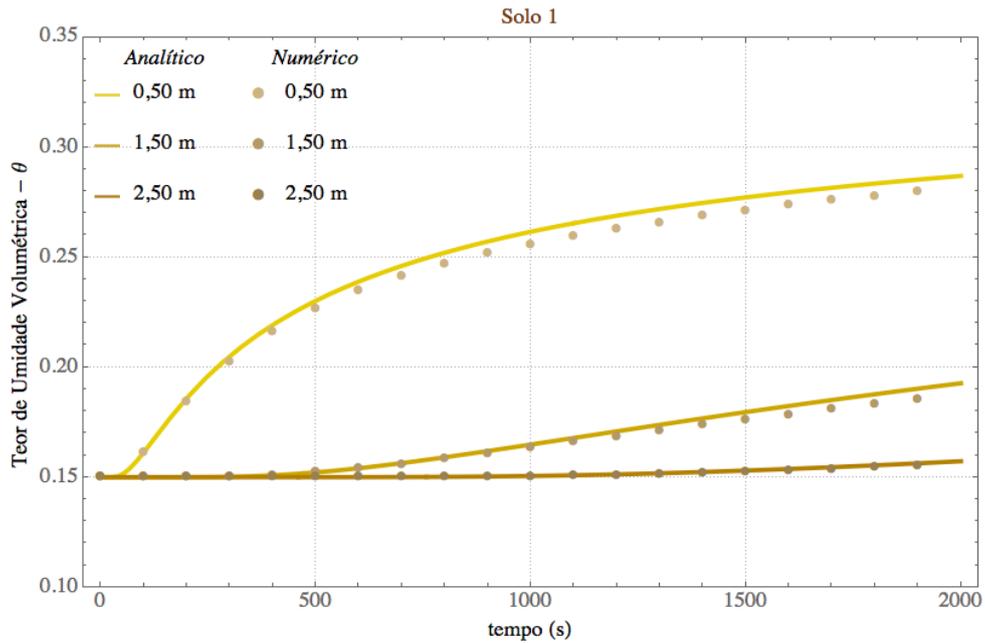


Figura 6.8: Solo 1 - teor de umidade volumétrica por tempo, para várias profundidades.

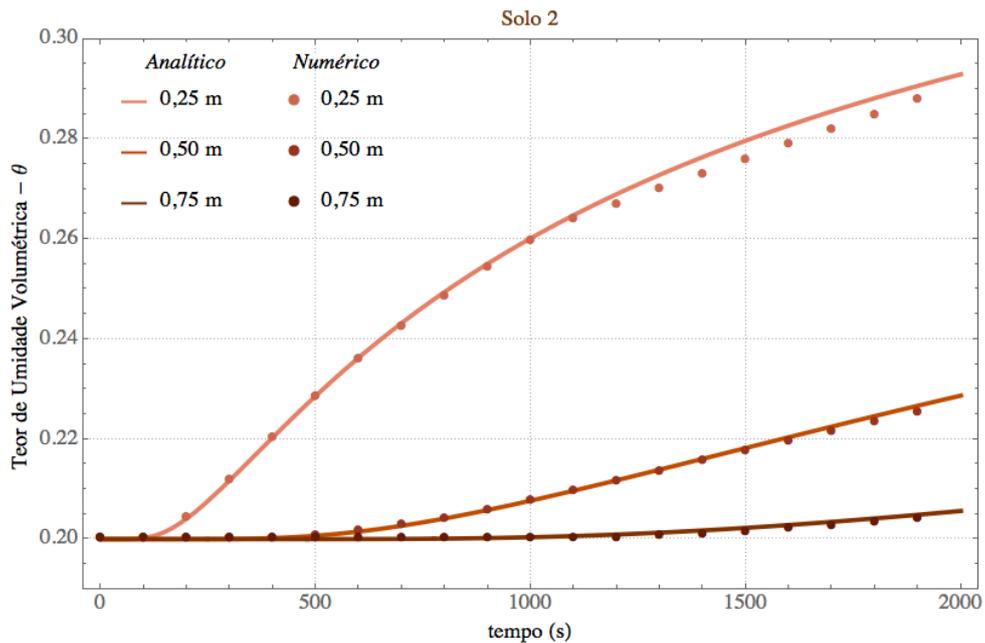


Figura 6.9: Solo 2 - teor de umidade volumétrica por tempo, para várias profundidades.

Tanto na Figura 6.6 como na Figura 6.8 pode-se notar que o erro numérico é mais perceptível do que nas Figuras 6.7 e 6.9. Isso se dá porque a advecção no solo 1 é maior do que no solo 2, uma vez que a condutividade hidráulica não saturada do solo granular é maior que a do solo fino. A advecção, quando tratada numericamente, pode gerar erros numéricos, mesmo que pequenos. Outra razão dos erros é o fato da malha numérica ser finita, e não semi-infinita como propõe o modelo analítico. Assim, o teor de umidade volumétrica é barrado em seu avanço mais cedo.

Por mais, pode-se comparar como que ocorre o avanço da umidade, comparativamente, entre os solos 1 e 2, para uma profundidade definida, tal como mostrado na Figura 6.10.

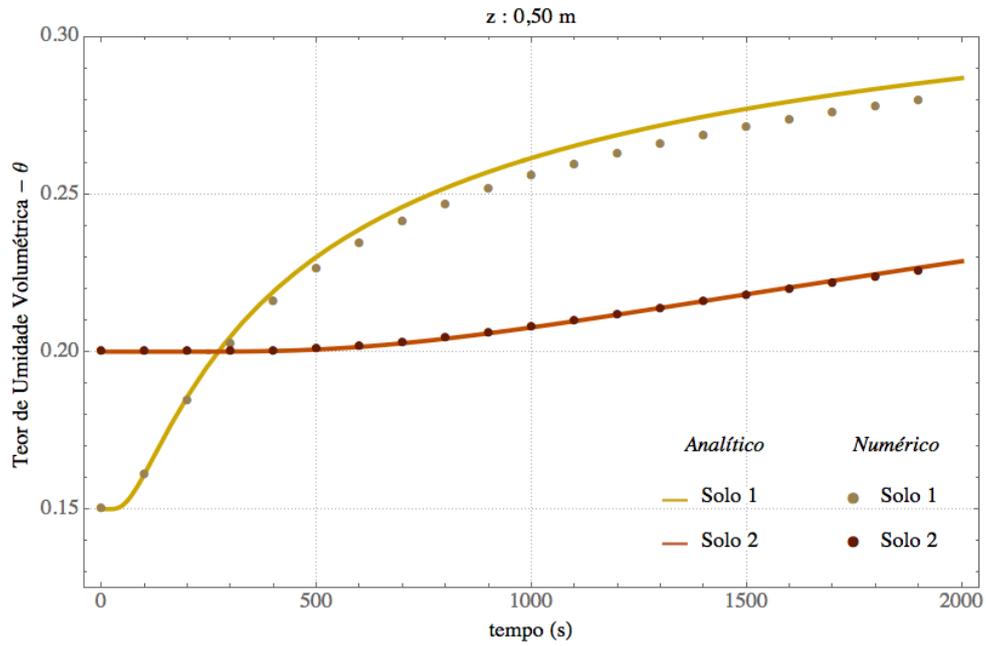


Figura 6.10: Solo 1 e 2 - teor de umidade volumétrica por tempo, para $z = 0,5\text{m}$.

Verifica-se a partir da Figura 6.10 que, apesar da umidade do solo mais fino ser inicialmente maior, o solo mais granular rapidamente consegue sobrepujar o teor de umidade volumétrica. Além disso, é possível representar a sucção pelo espaço e tempo. As Figuras 6.11 e 6.12 representam a sucção variando com o espaço para três tempos determinados para os solo 1 e 2, respectivamente.

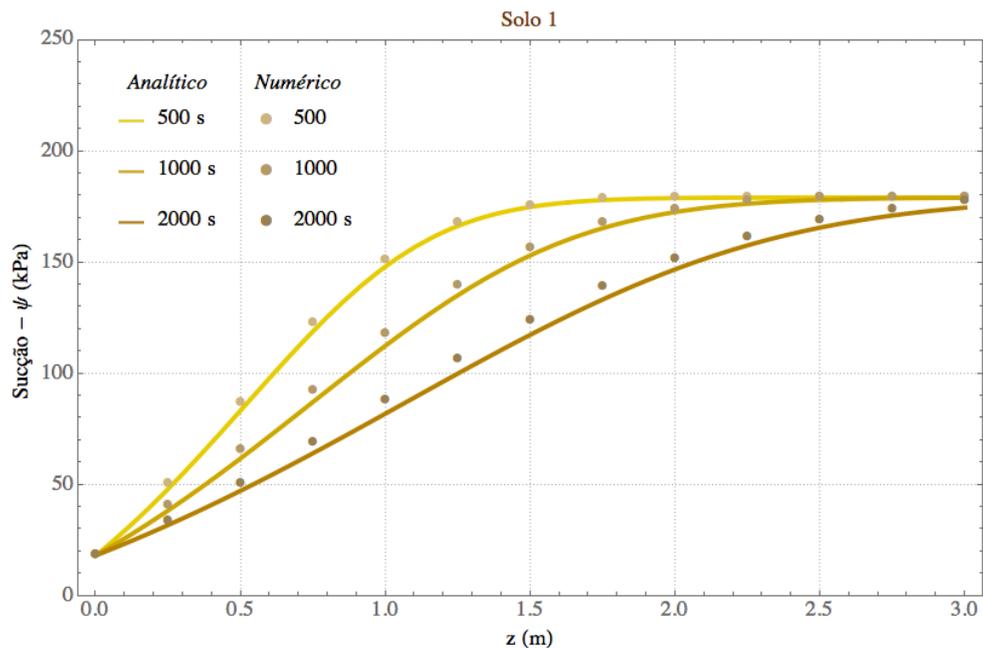


Figura 6.11: Solo 1 - sucção por profundidade, para vários tempos.

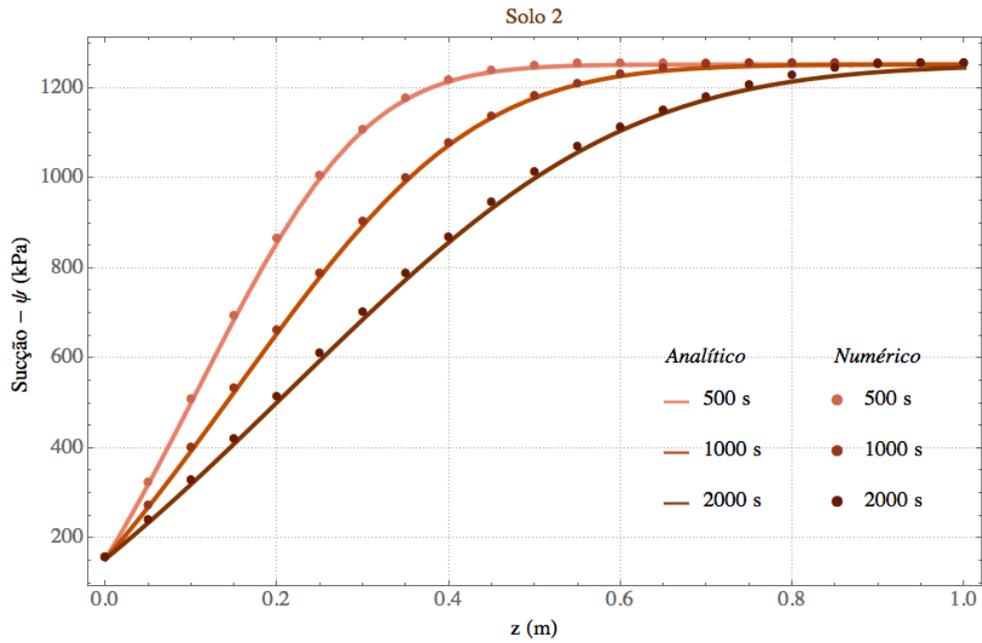


Figura 6.12: Solo 2 - sucção por profundidade, para vários tempos.

Nota-se que a sucção do solo mais fino é significativamente maior que a do solo granular e que ela possui maior inclinação inicial, uma vez que é difícil a água se transportar .

Ainda, pode-se plotar como a sucção varia com o tempo para três profundidades definidas. Assim, as Figuras 6.13 e 6.14 o fazem para os solos 1 e 2, respectivamente.

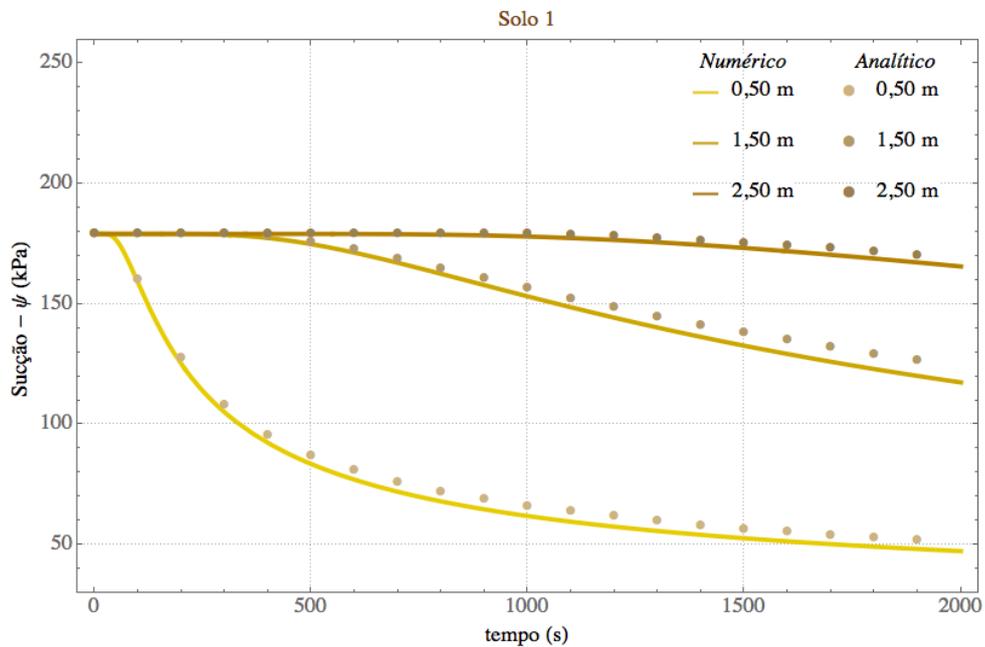


Figura 6.13: Solo 1 - sucção por tempo, para várias profundidades.

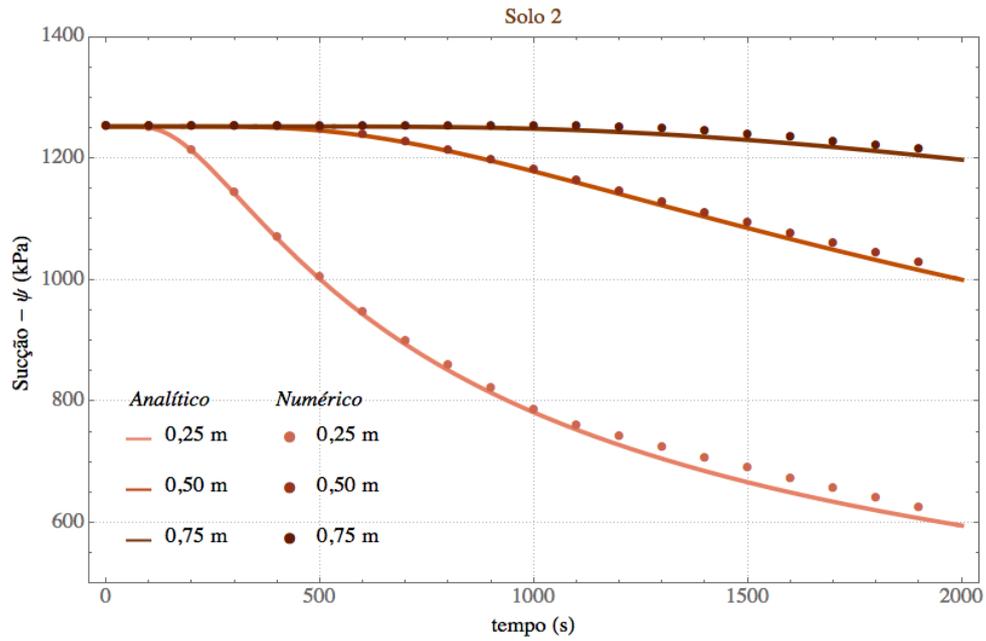


Figura 6.14: Solo 2 - sucção por tempo, para várias profundidades.

Observa-se ainda que o erro da sucção, diferentemente do erro da umidade, é uma erro positivo. Isso se dá pelo fato da umidade ser inversamente proporcional à sucção, tal como verificado na curva característica.

Por mais, pode-se plotar como a condutividade hidráulica varia com o tempo e espaço. Para isso, as Figura 6.15 e 6.16 mostram como a condutividade hidráulica varia com a profundidade para três tempos determinados, para os solos 1 e 2, respectivamente.

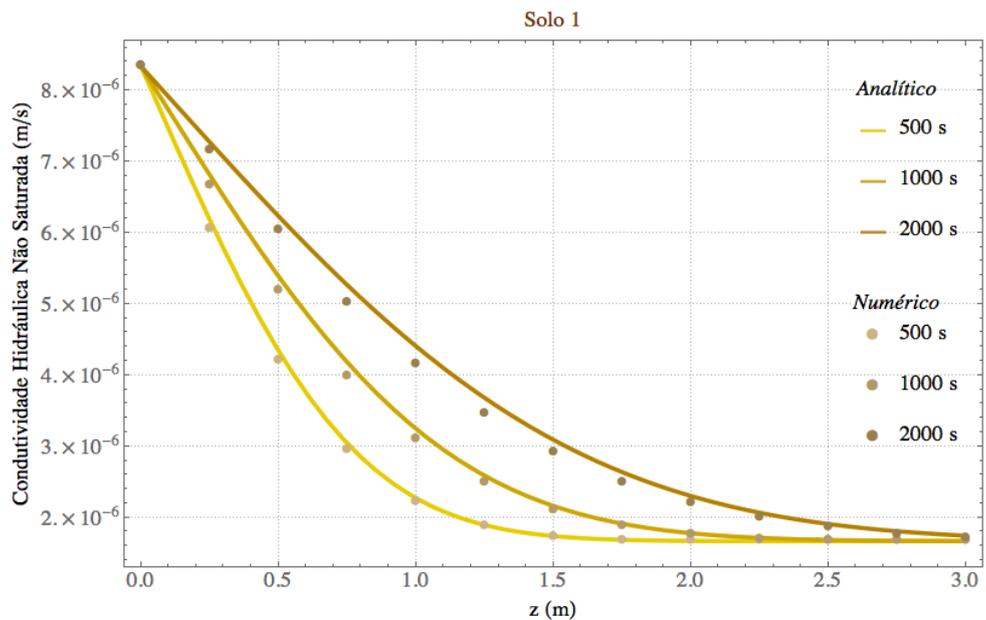


Figura 6.15: Solo 1 - condutividade hidráulica não saturada por profundidade, para vários tempos.

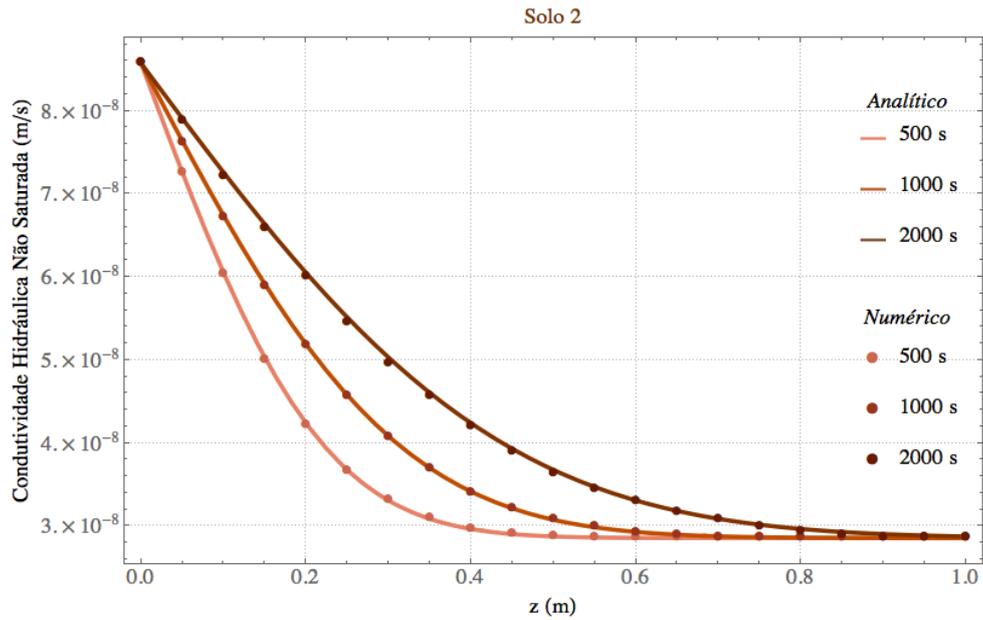


Figura 6.16: Solo 2 - condutividade hidráulica não saturada por profundidade, para vários tempos.

Como a condutividade hidráulica é diretamente proporcional ao teor de umidade volumétrica, ambas as curvas possuem formatos semelhantes. Isso pode-se também ser verificado para o caso das Figuras 6.17 e 6.18, que retratam como a condutividade hidráulica não saturada varia com o tempo, para três profundidades determinadas.

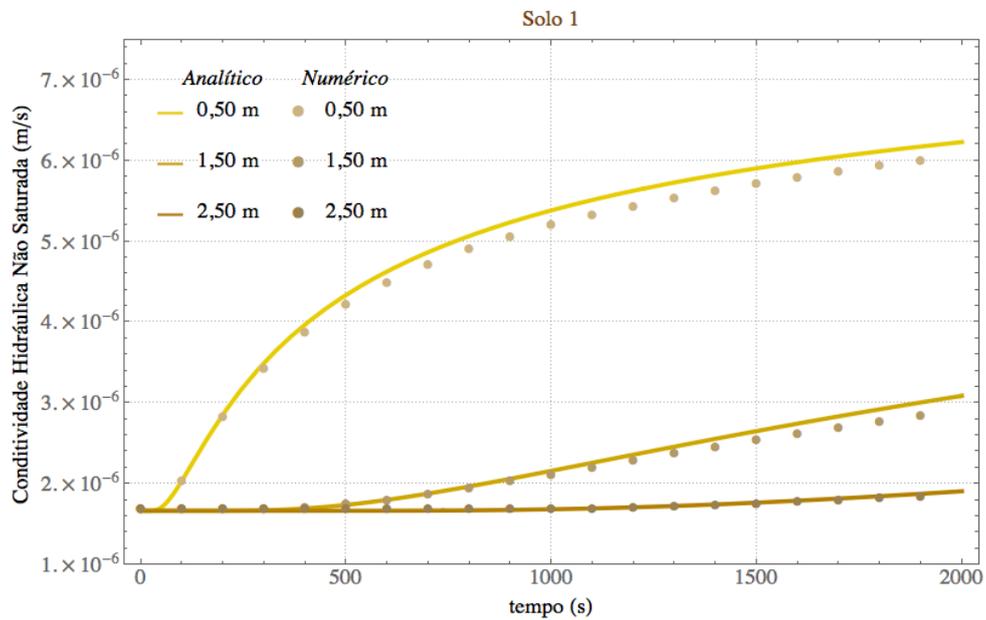


Figura 6.17: Solo 1 - condutividade hidráulica não saturada por tempo, para várias profundidades.

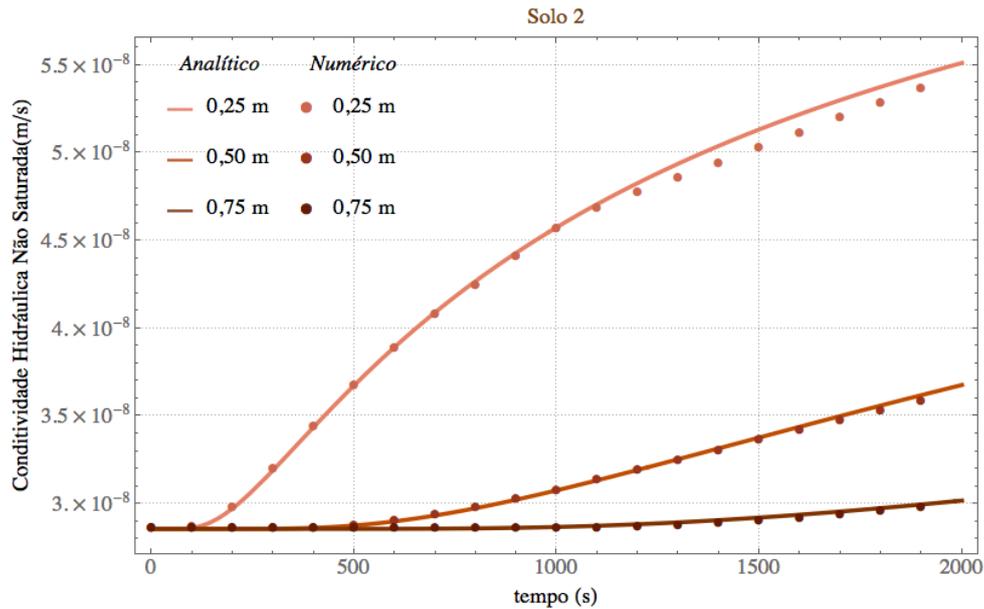


Figura 6.18: Solo 2 - condutividade hidráulica não saturada por tempo, para várias profundidades.

Nota-se também que, como o teor de umidade volumétrica é diretamente proporcional à condutividade, o erro também é proporcional. No caso, o erro é negativo.

Conclui-se que a simulação unidimensional de fluxo em meios não saturados demonstrou que o MDI 1D gera resultados precisos. Todavia, percebeu-se leves erros numéricos em relação à curva analítica. Esses erros podem ser tanto negativos, para os casos da umidade e condutividade hidráulica, quanto positivo, para o caso da sucção. Sendo que o erro está geralmente associado à parcela advectiva. Dessa forma, solos mais permeáveis são propensos a terem maiores erros numéricos.

Além disso, o resultado apresentado pela simulação numérica é estável, não apresentando oscilações, e representa fidedignamente o comportamento físico do fluxo não saturado.

6.2 Validação do MDI para a Eq. de Richards 2D

6.2.1 Descrição qualitativa da validação

O MDI, no presente estudo, foi apresentado tanto na sua forma unidimensional como na sua forma bidimensional. Assim, faz-se necessário validar não somente o caso 1D mas também o caso 2D. Por isso, é preciso que uma solução analítica bidimensional seja comparada com uma simulação numérica do MDI 2D.

Para a validação 2D, considera-se o solo como um meio finito verticalmente e infinito horizontalmente. Além disso, considera-se que o solo possui uma umidade inicial ao longo de todo seu perfil e que esse teor de umidade volumétrica é constante no topo e na base dos limites verticais. Por mais, considera-se que uma região retangular de

maior teor de umidade volumétrica está justaposta à parte superior do solo. Assim, essa umidade volumétrica, ao longo do tempo, se propaga pelo solo. A Figura 6.19 representa qualitativamente como que é a condição do solo inicialmente.

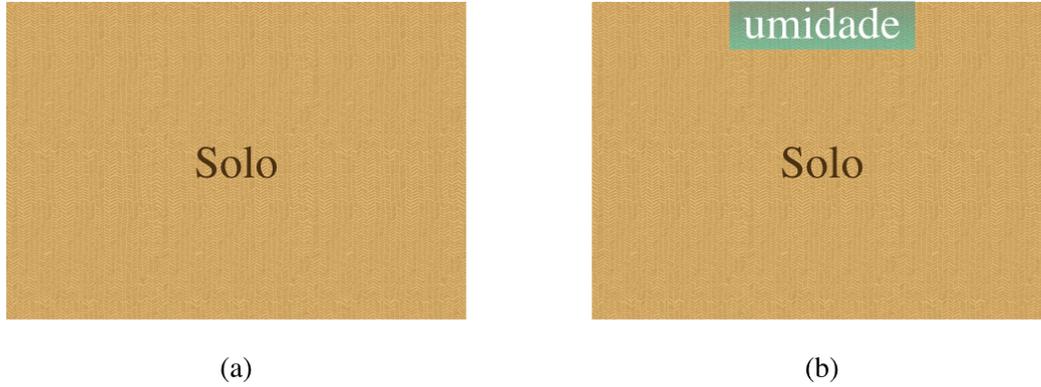


Figura 6.19: Caso representado pela simulação 2D (a) antes e (b) depois.

Tal caso pode ser encontrado na prática geotécnica quando há chuvas, degelo ou vazamentos de instalações hidro-sanitárias. Por isso, considera-se esse exemplo como relevante para a engenharia, além de capaz de validar o MDI em duas dimensões.

6.2.2 Descrição matemática da validação

As descrições qualitativas, contudo, podem ser expressas matematicamente, tal como explicitadas no apêndice A. A equação diferencial resolvida, nesse caso, é dado pela Eq. 2.46, sendo expressa por:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \bar{D}_x \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \bar{D}_z \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} - \bar{a}_s \frac{\partial \theta}{\partial z} \quad (6.5)$$

Matematicamente, a condição de contorno vertical superior é dada pela Eq. A.1, sendo reescrita pela seguinte expressão:

$$\theta(x, 0, t) = \theta_0 \quad (6.6)$$

Como dito, essa condição significa que há um umidade constante na parte superior do solo. Além disso, a condição de contorno vertical inferior afirma o mesmo que a condição passada, que há um teor de umidade volumétrica fixo, tal como descrito pela Eq. A.2 e representado a seguir:

$$\theta(x, l_z, t) = \theta_0 \quad (6.7)$$

Já as condições de contorno laterais afirmam que, quando a umidade é avaliada nos seus extremos, tendendo a infinito, não há variação do teor de umidade volumétrica. Tais

condições de contorno são válidas uma vez que não há período de tempo finito capaz de expressar mudanças de teor de umidade volumétrica nos extremos horizontais. Essa condições são expressas pelas Equações A.3 e A.4 e descritas a seguir:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{\partial \theta(x, z, t)}{\partial x} = 0 \quad (6.8)$$

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} \frac{\partial \theta(x, z, t)}{\partial x} = 0 \quad (6.9)$$

Por mais a condição inicial, que representa o teor de umidade volumétrica no tempo 0s, é descrita pela Eq. A.5 e representado matematicamente como:

$$\theta(x, z, 0) = (\theta_i - \theta_0) [H(z) - H(z - b_z)] [H(x + b_x) - H(z - b_x)] + \theta_0 \quad (6.10)$$

A solução analítica para as condições de contorno e inicial descritas para a Eq. 6.5, para o caso da validação 2D, pode ser descrita pela Eq. A.85, sendo expressa por (Borges & Cavalcante, 2016 *in press*):

$$\begin{aligned} \theta(x, z, t) = & \theta_0 + \frac{(\theta_i - \theta_0)}{2} \left[erf \left(\frac{b_x - x}{\sqrt{4\pi D_x t}} \right) + erf \left(\frac{b_x + x}{\sqrt{4\pi D_x t}} \right) \right] \\ & \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \left[\frac{4\bar{D}_z e^{-\frac{\bar{a}_s b_z}{2\bar{D}_z}} \left(-2\pi\bar{D}_z n e^{\frac{\bar{a}_s b_z}{2\bar{D}_z}} + \bar{a}_s l_z \sin \left(\frac{\pi b_z n}{l_z} \right) + 2\pi\bar{D}_z n \cos \left(\frac{\pi b_z n}{l_z} \right) \right)}{\bar{a}_s^2 l_z^2 + 4\pi^2 \bar{D}_z^2 n^2} \right] \right. \\ & \left[n\pi \cos \left(\frac{n\pi}{l_z} b_z \right) + \frac{l_z a_s}{2D_z} \sin \left(\frac{n\pi}{l_z} b_z \right) \right] \\ & \left. exp \left[-t \left(\frac{a_s^2}{4D_z} + \frac{D_z n^2 \pi^2}{l_z^2} \right) \right] exp \left[\frac{\bar{a}_s z}{2\bar{D}_z} \right] \sin \left(\frac{n\pi}{l_z} z \right) \right\} \end{aligned} \quad (6.11)$$

Além disso, as constantes adotadas para simulação podem ser verificadas nas Tabelas 6.3 e 6.4.

Tabela 6.3: Parâmetros físicos da simulação de validação 2D.

Parâmetros Físicos do Solo				
γ_w	(kN/m^3)	9,8	θ_s	0,61
l_z	(m)	5,0	θ_0	0,10
b_z	(m)	0,5	θ_r	0,01
b_x	(m)	2,0	θ_i	0,50
k_{sx}	(m/s)	10^{-6}	δ	0,01
k_{sz}	(m/s)	10^{-6}		

Tabela 6.4: Parâmetros numéricos da simulação de validação 2D.

Parâmetros Numéricos				
Δx	(m)	0,01	$\kappa_{0,0}$	0,9319894
Δz	(m)	0,01	$\kappa_{0,-1}$	0,0170068
Δt	(s)	0,1	$\kappa_{1,0}$	0,0170068
$\alpha_{i,j}^n$	(m/s)	1	$\kappa_{0,1}$	0,0169901
$\beta_{i,j}^n$	(m^2/s)	0	$\kappa_{-1,0}$	0,0170068
$\gamma_{i,j}^n$	(m/s)	0,10		

6.2.3 Características Físicas dos Solos

Para compreender o fenômeno físico de forma mais completa, é necessário analisar as curvas que definem o comportamento do fluxo não saturado no solo. Para isso, plota-se duas curvas relevantes - a curva característica e a curva de condutividade hidráulica não saturada.

A curva característica, assim como já descrito, descreve como que a sucção varia com o teor de umidade volumétrica. A Figura 6.20 descreve graficamente essa propriedade, para o solo da validação 2D.

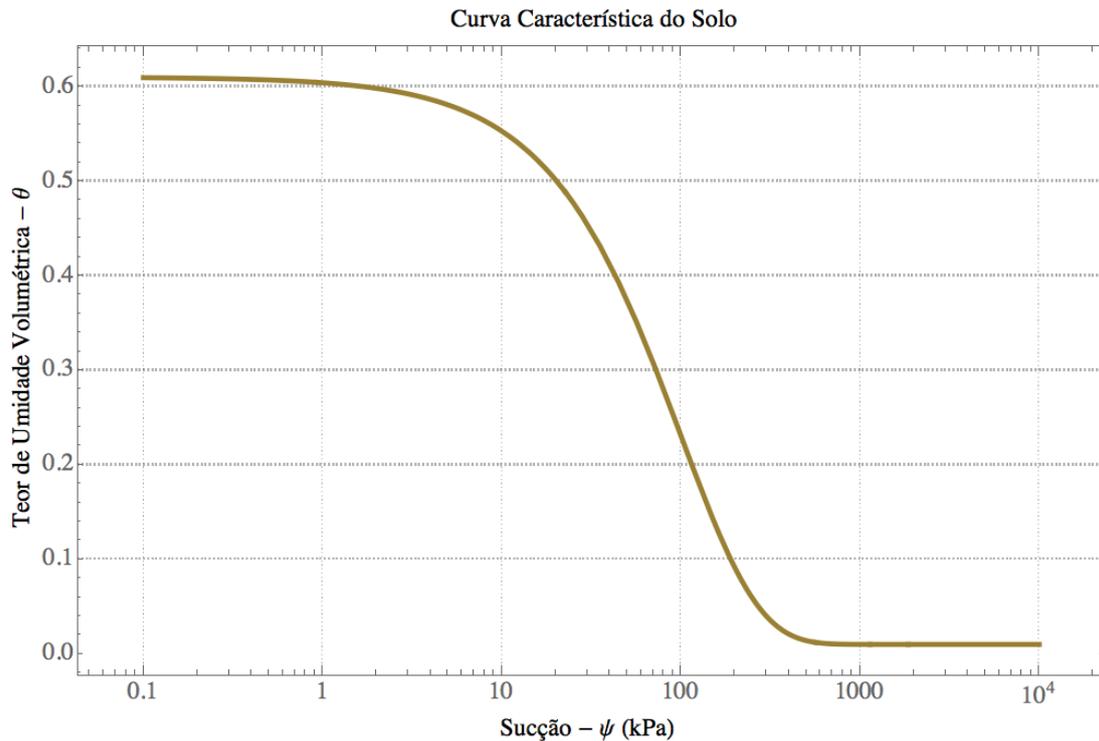


Figura 6.20: Validação 2D - Curva característica

A outra curva relevante para compreender o solo revela como a condutividade hidráulica varia com a sucção. Tal curva, para o solo, pode ser representada pela Figura 6.21.

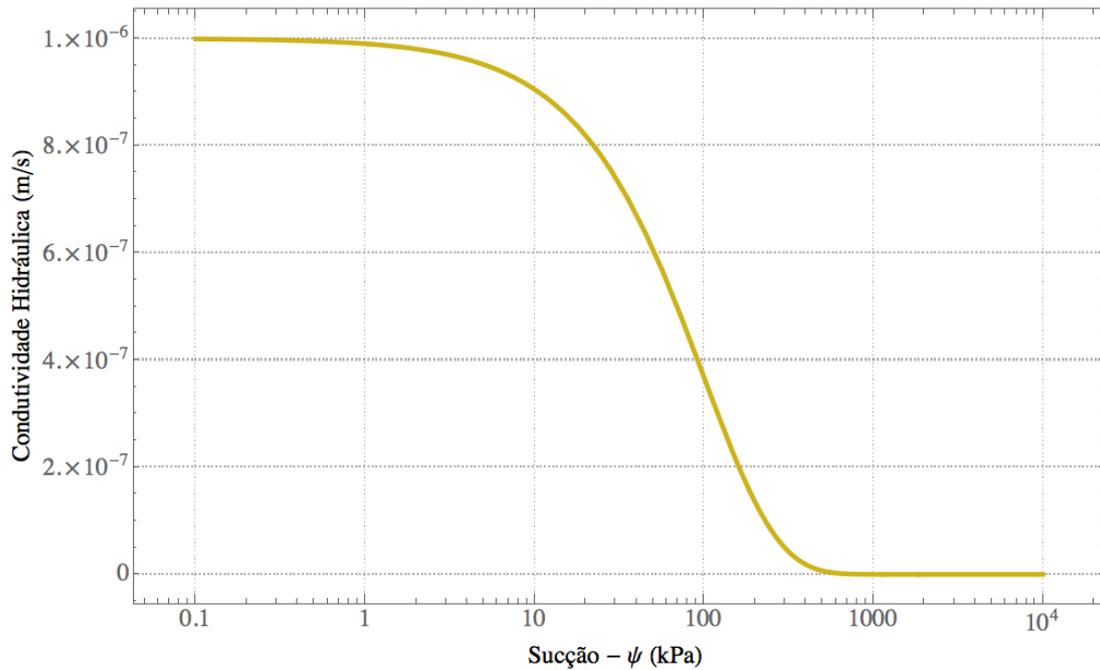


Figura 6.21: Validação 2D - Curva de condutividade hidráulica não saturada

Nota-se que tanto a curva característica quanto a de condutividade hidráulica representam bem o comportamento de um solo. Além disso, percebe-se que o solo em questão possui comportamentos similares a de um solo granular fino.

6.2.4 Simulação

Para a validação do MDI 2D simulou-se numericamente como o teor de umidade volumétrica variava espacial e temporalmente no solo. O tempo inicial do fenômeno é representado pela Figura 6.22. Nesta figura, representou-se a região de maior umidade e a região de menor umidade com cores distintas, para compreensão do fenômeno.

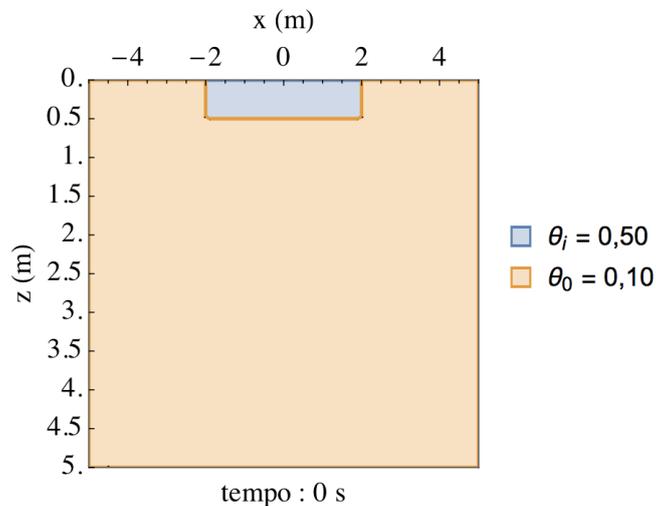


Figura 6.22: Validação 2D - condição inicial

Já, para compreender como a solução analítica é compatível com a simulação numérica, plotou-se diversas curvas de teores de umidade volumétrica, para cada tempo. Ou seja, representou-se alguns cortes da função de teor de umidade volumétrica, para o passo de tempo especificado. Essa técnica foi utilizada porque seria mais difícil de averiguar a acurácia do método numérico caso a solução fosse representada por um gráfico tridimensional. Dessa forma, a Figura 6.23 representa a evolução do fenômeno para 1000s.

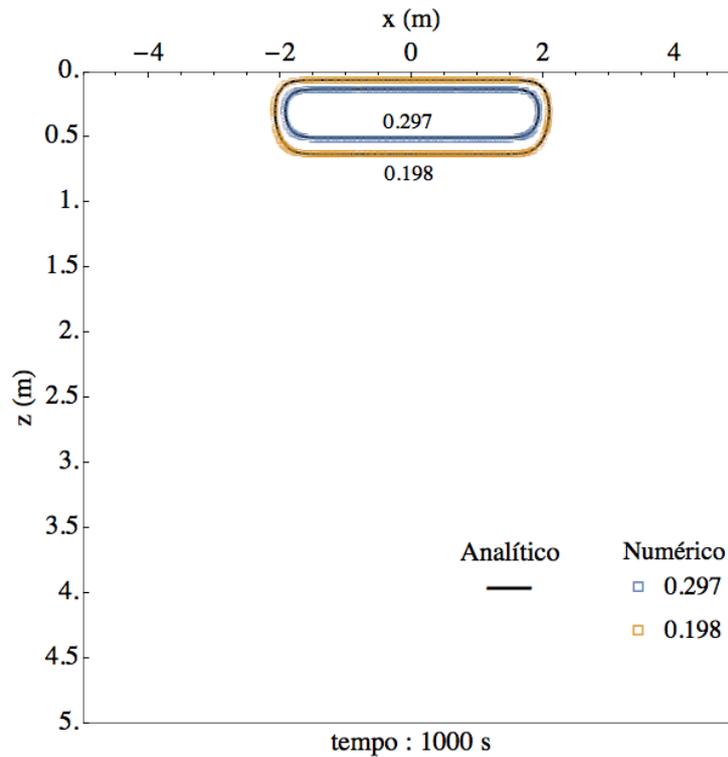


Figura 6.23: Validação 2D - teor de umidade volumétrica no tempo 1000 s.

Como pode ser notado, as curvas analíticas, para cada teor de umidade volumétrica específico, são representadas pelo traçado contínuo em preto. Já a simulação numérica é representada por pequenos quadrados em colorido. Por mais, deve-se compreender que a umidade correspondente às curvas estão escritas logo acima delas. Para o tempo 4000 s o fenômeno pode ser representado pela Figura 6.24.

Deve-se perceber que até o tempo de 4000 s não há erro relativo que seja notado entre a curva analítica e a solução numérica. Tampouco, há erro significativo para a precisão de Engenharia Geotécnica.

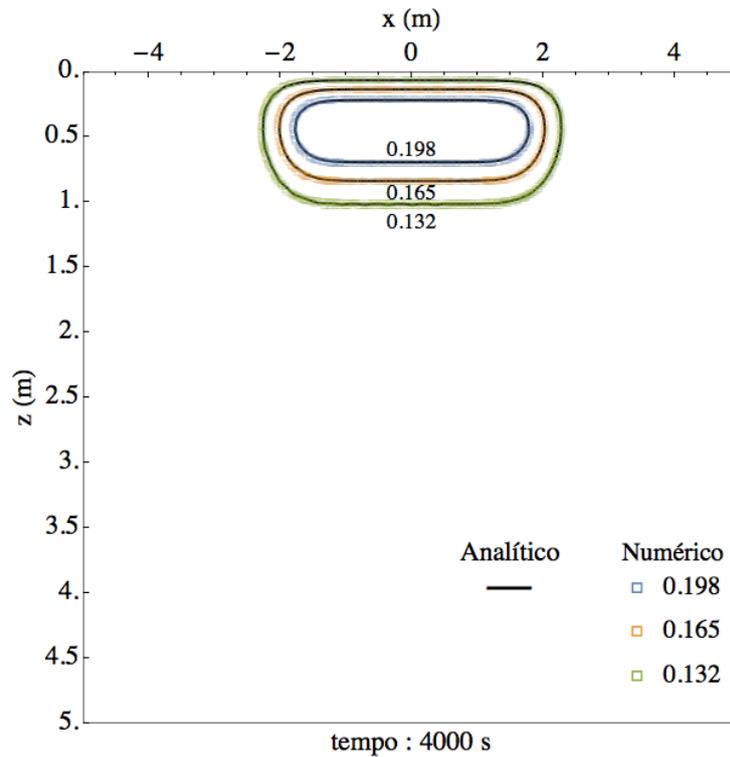


Figura 6.24: Validação 2D - teor de umidade volumétrica no tempo 4000 s.

A Figura 6.25 representa a evolução do fenômeno até o tempo de 10 000 s.

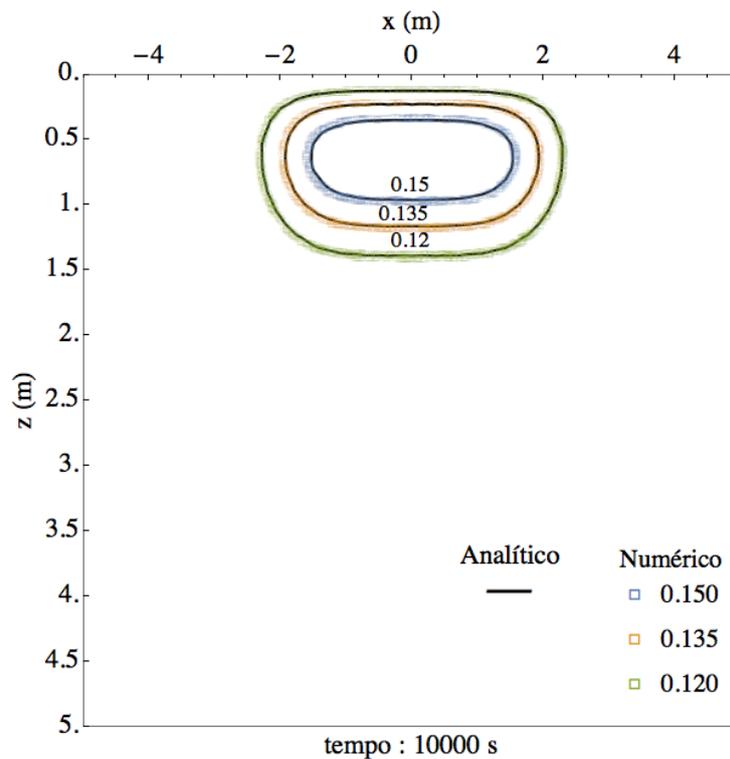


Figura 6.25: Validação 2D - teor de umidade volumétrica no tempo 10 000 s.

No tempo de 10 000 s o erro tampouco começa a ser notado, uma vez que a solução

numérica ainda se ajusta perfeitamente à curva analítica. Em seguida, a Figura 6.26 representa a evolução até o tempo de 20 000 s.

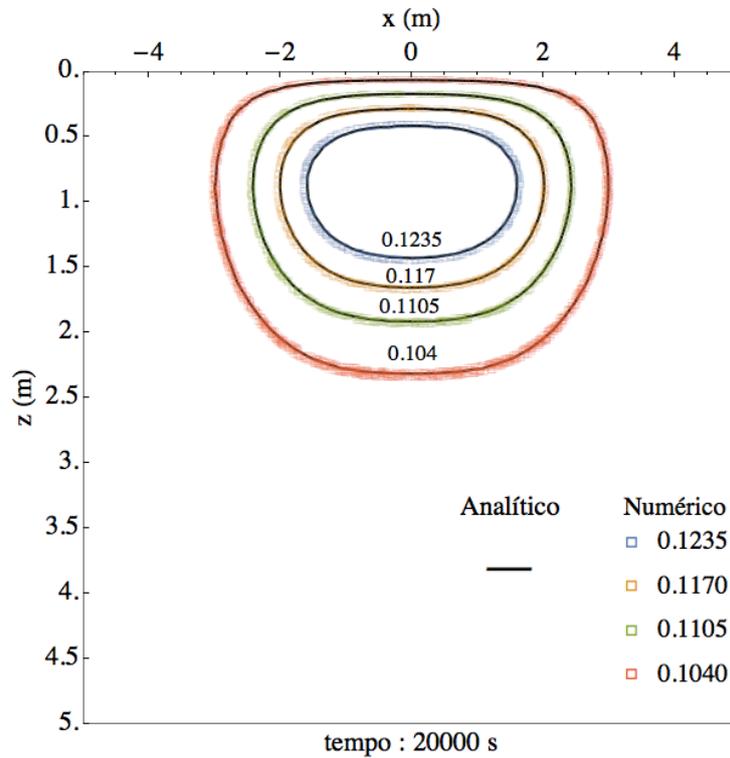


Figura 6.26: Validação 2D - teor de umidade volumétrica no tempo 20 000 s.

No tempo de 20 000 s verifica-se claramente como que o avanço da umidade deixa de ter a simetria em relação ao eixo horizontal, como tinha no tempo inicial e passa a ser simétrico apenas em relação ao eixo vertical. Isso ocorre uma vez que o topo limita a umidade, enquanto no meio do solo o teor de umidade volumétrica avança livremente. Adiante no tempo, A Figura 6.27 representa a evolução até o tempo de 40 000 s.

Nota-se que no tempo 40 000 s, o teor de umidade volumétrica deixa de ter um aspecto retangular, típico da condição inicial, e passa a ser cada vez mais arredondado. Isso se deve, principalmente, à natureza do fenômeno difusivo-advectivo no fluxo não saturado, que permite que o teor de umidade volumétrica avance em todas as direções.

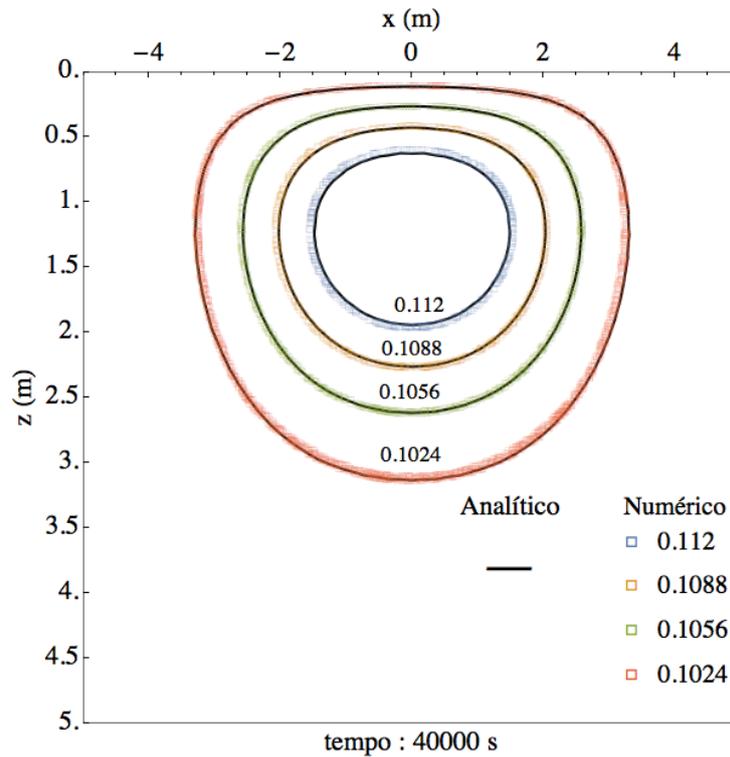


Figura 6.27: Validação 2D - teor de umidade volumétrica no tempo 40 000 s.

Já a Figura 6.28 representa a evolução até o tempo de 50 000 s.

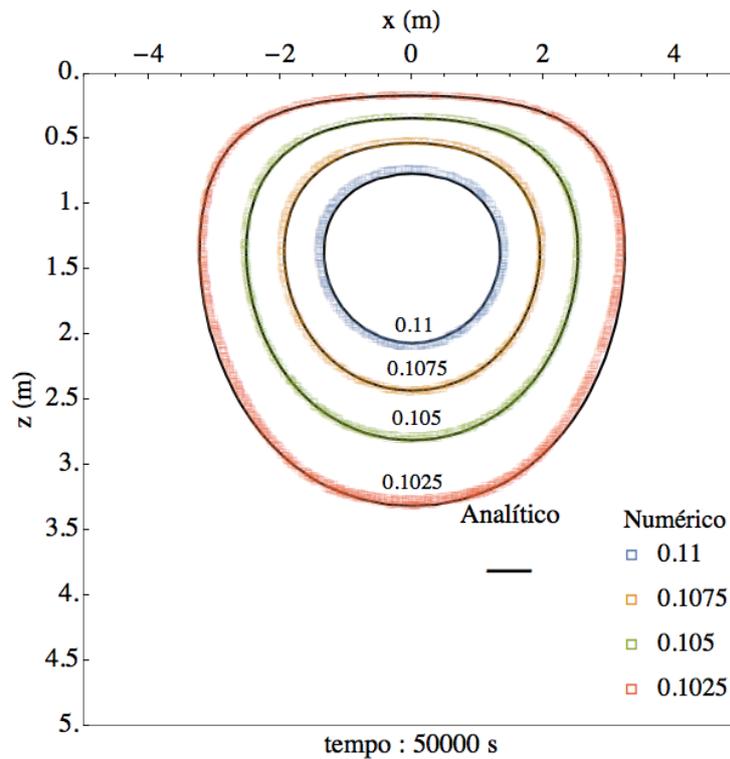


Figura 6.28: Validação 2D - teor de umidade volumétrica no tempo 50 000 s.

No tempo 50 000 s passa-se a perceber que existe algum erro numérico. Nota-se que, devido a limitação horizontal dos nós numéricos, o avanço da umidade se restringe

horizontalmente, fazendo como que a resposta numérica fique situada ao interior das curvas analíticas. Já verticalmente, a simulação numérica apresenta um leve atraso, sendo mais precisa na parte de baixo das curvas do que na parte superior. Adiante, a Figura 6.28 representa a evolução até o tempo de 60 000 s.

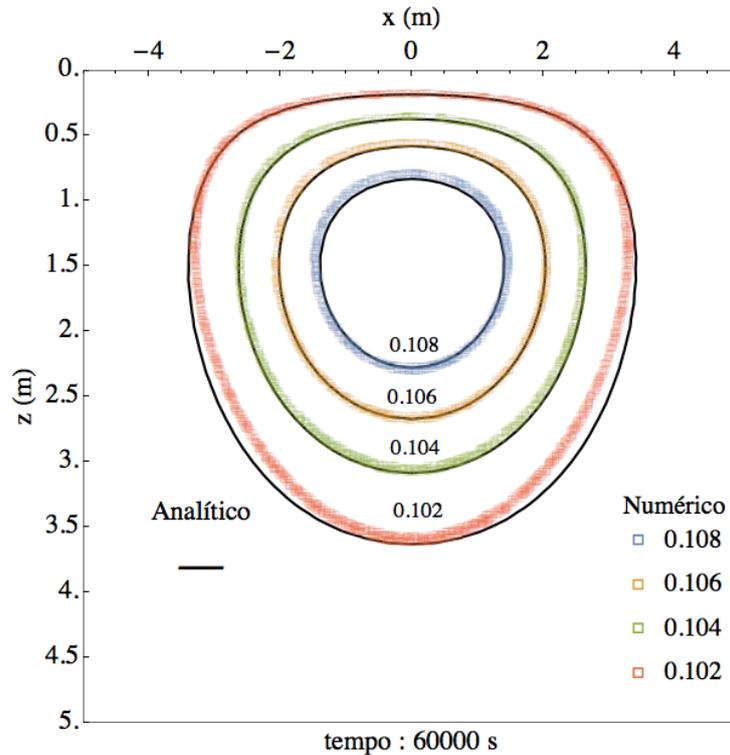


Figura 6.29: Validação 2D - teor de umidade volumétrica no tempo 60 000 s.

A partir do tempo de 60 000 s o erro passa a ser facilmente perceptivo, todavia, ainda aceitável. Sendo que, para a discretização temporal e espacial escolhida, a solução numérica passa a apresentar um resultado levemente impreciso, principalmente para os menores teores de umidade volumétrica.

Por fim, pode-se notar que o MDI para duas dimensões é capaz de representar fidedignamente o fenômeno, ser estável e convergir para a solução numérica com erros significativamente pequenos. Ainda, deve-se considerar que determinadas discretizações geram resultados confiáveis até certo número de iterações temporais. Verificou-se ainda que a solução numérica passa destoar levemente da solução analítica apenas após grande período de tempo simulado.

7 APLICAÇÃO DO MDI A MEIOS POROSOS E FRACTURADOS

O objetivo do presente capítulo é mostrar que o MDI não apenas é capaz de trazer soluções a problemas descritos por outras ferramentas, mas mostrar a sua singularidade em resolver problemas mais elaborados.

Para isso, escolheu-se dois problemas com geometria, tão rebuscada quanto pode-se assimilar computacionalmente, da natureza de meios porosos e fraturados.

7.1 Simulação em meio poroso

7.1.1 Descrição qualitativa

A primeira aplicação do MDI nesse capítulo ocorre para um meio poroso. Mais especificamente, o domínio escolhido para a simulação foi uma seção bidimensional de um solo arenoso. Essa seção de solo foi capturada por um micro-tomógrafo, por meio de raios X. O micro-tomógrafo é capaz de registrar algumas centenas de seções de um corpo de prova. Nesse caso, o escaneamento foi realizado e cedido por Zubeldia (2013), utilizando o equipamento SkyScan 1172 micro-C da Embrapa Instrumentação Agropecuária - São Carlos.

Como apenas a geometria do meio foi obtida, propõe-se, nessa simulação, tanto os parâmetros físicos e numéricos, como as condições de contorno e inicial.

Considera-se que os grãos da mesoestrutura são impermeáveis e que o cilindro que limita os grãos de forma circular, mesmo que não tenha aparecido na tomografia, seja impermeável também. Admite-se também que o meio entre os grãos é válido para simular o fluxo não saturado, sendo composto por um solo microestruturado e não por vazios simplesmente.

Por mais, considera-se que a microestrutura possui um teor de umidade volumétrica uniformemente distribuído. Além disso, para que a simulação não seja estacionária, considerou-se uma zona retangular de maior teor de umidade volumétrica central.

7.1.2 Domínio da simulação

A imagem original, cedida por Zubeldia (2013), é a Figura 7.1 e representa um areia fina. Como pode-se perceber pela Figura 7.1, os grãos da mesoestrutura são representados pelas cores mais escuras, enquanto a microestrutura, pelas cores mais claras. Nota-se, que o contorno circular que delimita os grãos, apesar de existir, não interferiu nas ondas eletromagnéticas. Todavia, deve-se considerar esse contorno para a simulação.

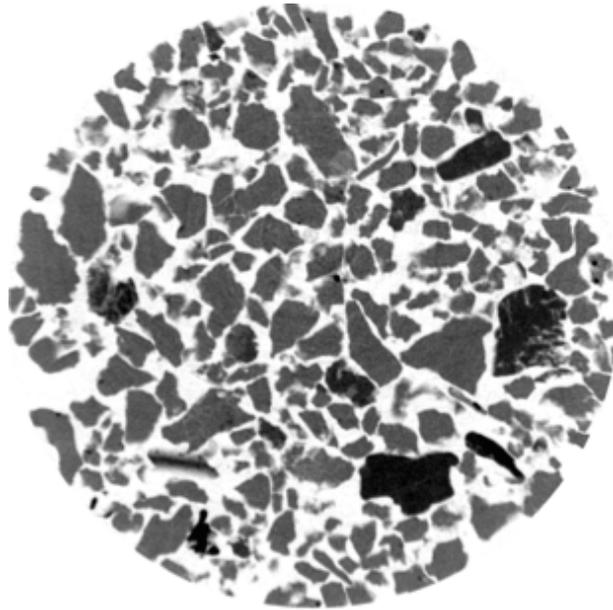


Figura 7.1: Micro-tomografia cedida por Zubeldia (2013)

Utilizando um algoritmo do Wolfram Mathematica 10.1 (WOLFRAM RESEARCH), é possível obter uma distinção binária entre a meso e a microestrutura (Figura 7.2). De tal forma que a mesoestrutura seja denotada pela cor preta e, a microestrutura, pela cor branca. Além disso, usou-se um fechamento geodésico, para deixar as partículas mais monolíticas. O fechamento geodésico consiste na eliminação das pequenas partes em branco nos grãos.



Figura 7.2: Binarização da micro-tomografia

Por fim, acrescentou-se um círculo circunscrivendo o solo e invertiu-se o esquema de cores (Figura 7.3).

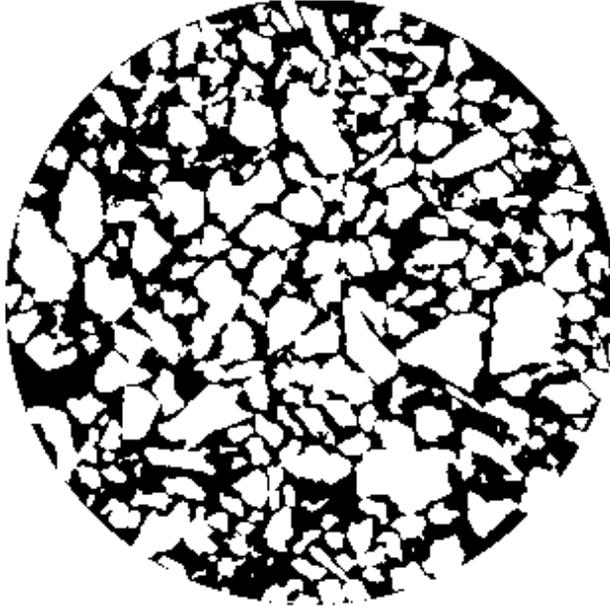


Figura 7.3: Binarização da micro-tomografia com círculo e cores invertidas

Assim, a Figura 7.3 expressa o domínio do fenômeno pela cor preta e a fronteira pela cor branca. O próximo passo é transformar tal imagem em matrizes que expressem as condições de contorno.

7.1.3 Descrição matemática

A presente simulação, por apresentar complexa geometria, não pode ser facilmente descrita em termos analíticos. Assim, a descrição matemática se dá apenas pelos parâmetros físicos e numéricos associados à simulação do fenômeno e à microestrutura, tal como apresentados nas Tabela 7.1 e 7.2.

Tabela 7.1: Parâmetros físicos da simulação com a micro-tomografia

Parâmetros Físicos do Solo	
γ_w (kN/m^3)	9,8
k_{s_x} (m/s)	10^{-7}
k_{s_z} (m/s)	10^{-7}
δ	0,02
θ_s	0,60
θ_r	0,05
θ_0	0,55
θ_i	0,10

Deve-se ressaltar que os passos espaciais Δx e Δz equivalem ao comprimento de cada pixel na imagem original. Isso ocorre visto que cada pixel da Figura 7.3 corresponde a um nó do domínio discretizado.

Tabela 7.2: Parâmetros numéricos da simulação com a micro-tomografia

Parâmetros Numéricos				
$\kappa_{0,0}$	0,747177	α_x^n	(m/s)	0
$\kappa_{0,-1}$	0,0632058	α_y^n	(m/s)	0
$\kappa_{1,0}$	0,0632058	β_x^n	(m ² /s)	1
$\kappa_{0,1}$	0,0632058	β_y^n	(m ² /s)	1
$\kappa_{-1,0}$	0,0632058	γ_x^n	(m/s)	0
Δx (m)	$38,31 \cdot 10^{-6}$	γ_y^n	(m/s)	0
Δy (m)	$38,31 \cdot 10^{-6}$	Δt	(s)	10^{-4}

7.1.4 Características Físicas dos Solos

Para compreender como o fluxo não saturado ocorre na microestrutura, deve-se usar algumas curvas que caracterizam fisicamente o domínio. Duas curvas essenciais são: a curva característica e a curva de condutividade hidráulica não saturada.

A curva característica, como já mostrada anteriormente, relaciona o teor de umidade volumétrica do meio com a sucção presente. De forma que a Figura 7.4 foi adotada como a curva para o solo em questão.

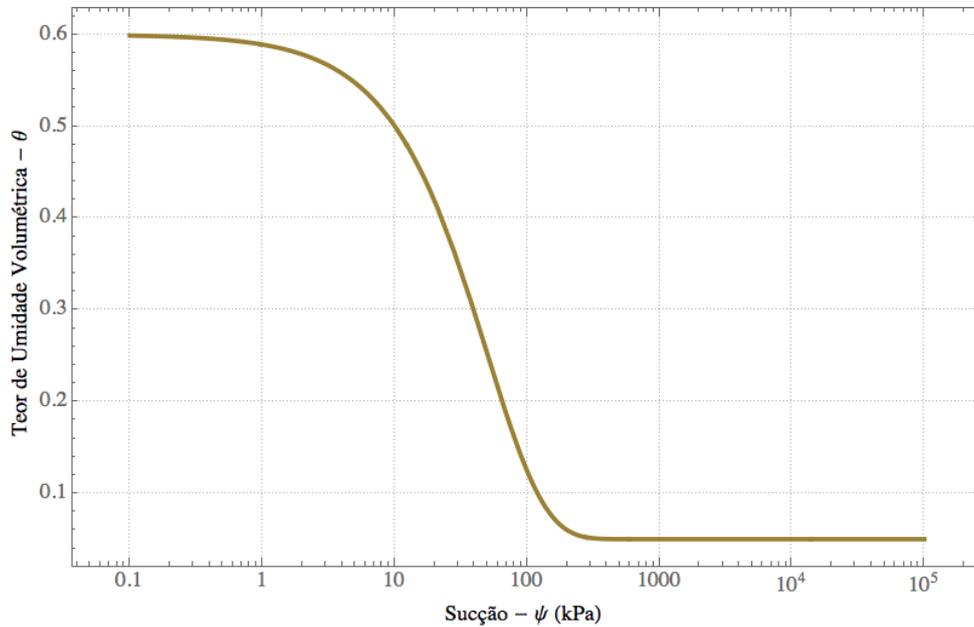


Figura 7.4: Curva característica do solo

A curva de condutividade hidráulica não saturada para a dimensão y é representada pela Figura 7.5.

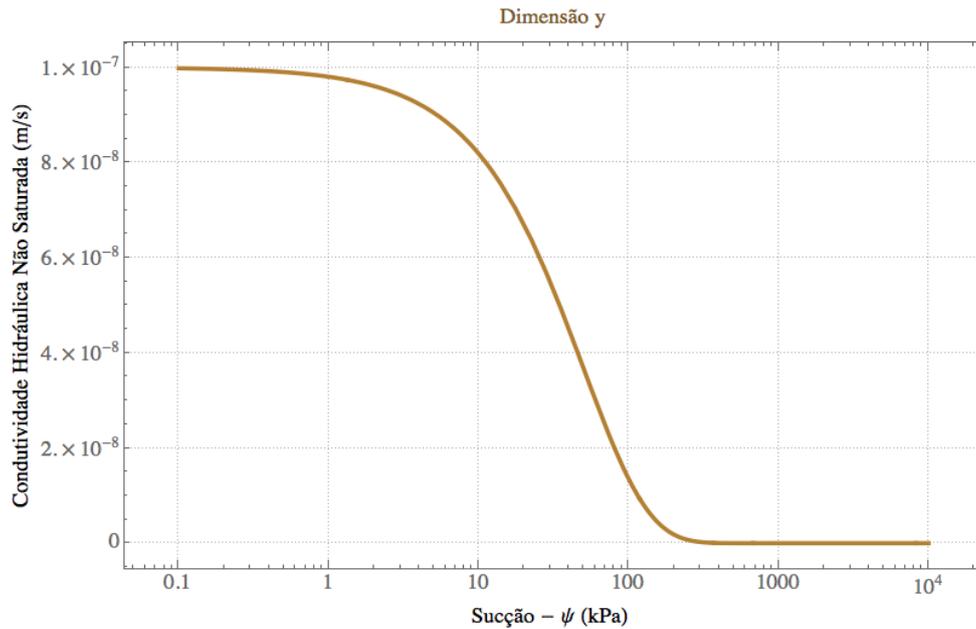


Figura 7.5: Curva de condutividade hidráulica não saturada - dimensão y

Já para a dimensão x , que é a horizontal, a Figura 7.6 estabelece a correlação entre condutividade hidráulica e e sucção.

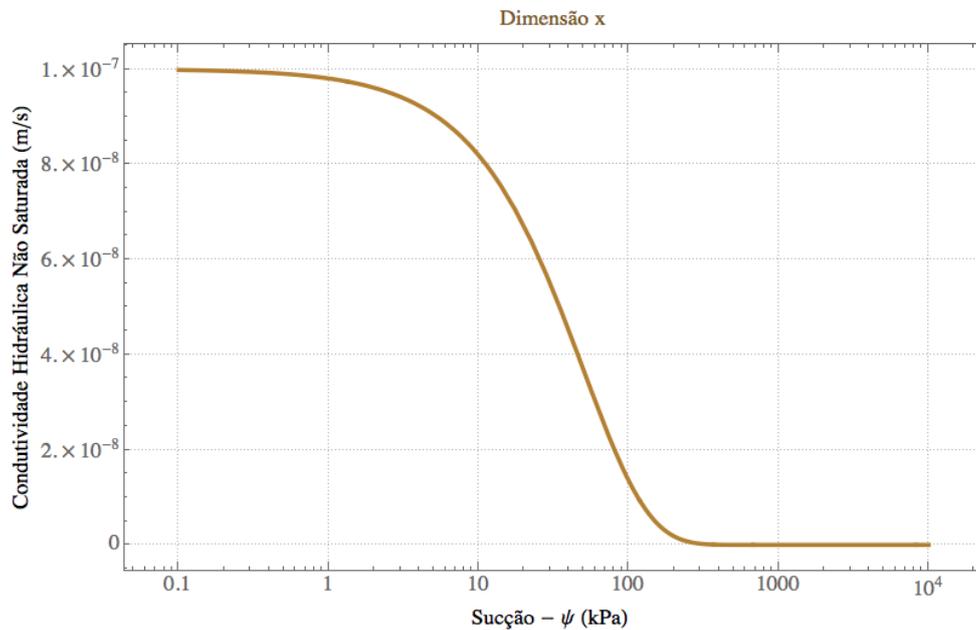


Figura 7.6: Curva de condutividade hidráulica não saturada - dimensão x

7.1.5 Simulação

Na presente simulação representou-se como o teor de umidade volumétrica varia temporal e espacialmente. Para isso, atribuiu-se cor cinza ao contorno da simulação, a saber, a mesoestrutura e seu limite circular, e uma escala cromática para o domínio. No domínio, foi atribuído diferentes cores para cada teor de umidade volumétrica. Para os maiores

teores de umidade volumétrica foi atribuído uma escala cromática que vai do vermelho, que indica maior teor de umidade volumétrica, até o azul escuro, que indica o menor teor de umidade volumétrica, passando pelo laranja, amarelo e verde.

A escala da simulação é pequena, logo para espaços curtos de tempo, a variação do teor de umidade volumétrica é relevante. Diferentemente da validação uni ou bidimensional, que envolviam a escala de metros, a escala tratada é de milímetros. Assim, a precisão tratada é muito maior, tal como a evolução do fenômeno em relação ao domínio é mais rápida. Por isso, plota-se pequenos tempos e, por fim, mostra-se como que o teor de umidade estabiliza-se.

A Figura 7.7 mostra a condição inicial (tempo 0 s), em que no centro há um retângulo de maior teor de umidade volumétrica e para todo o restante do domínio, um menor teor.

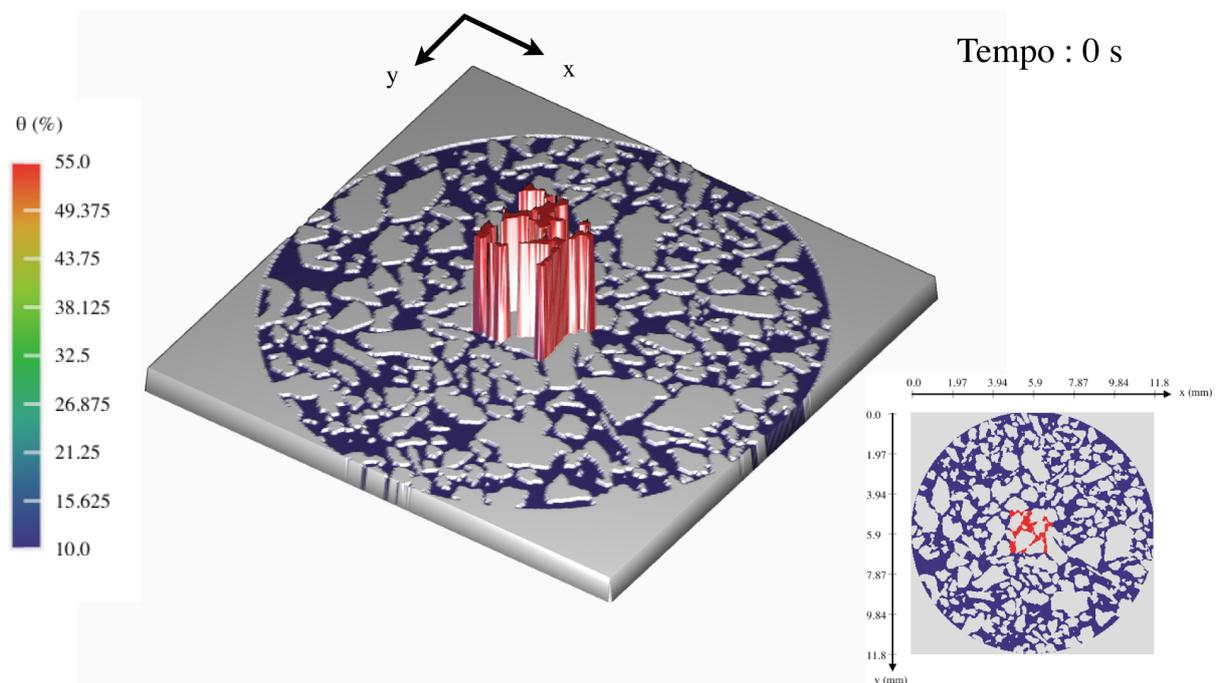


Figura 7.7: Teor de umidade volumétrica no tempo 0 s.

Deve-se compreender que, pelo fato de haver grãos espalhados pelo domínio, o retângulo de umidade ocupa todo o espaço disponível na microestrutura, não sendo um retângulo na concepção euclidiana.

Adiante, o teor de umidade volumétrica para o tempo 1 s é representado pela Figura 7.8. Deve-se lembrar que, pelo fato da simulação representar o plano $x - y$ não há preferência de transporte para nenhum dos eixos. O único fator limitante para o fluxo não saturado é a geometria da mesoestrutura, que forma caminhos preferenciais e obstáculos.

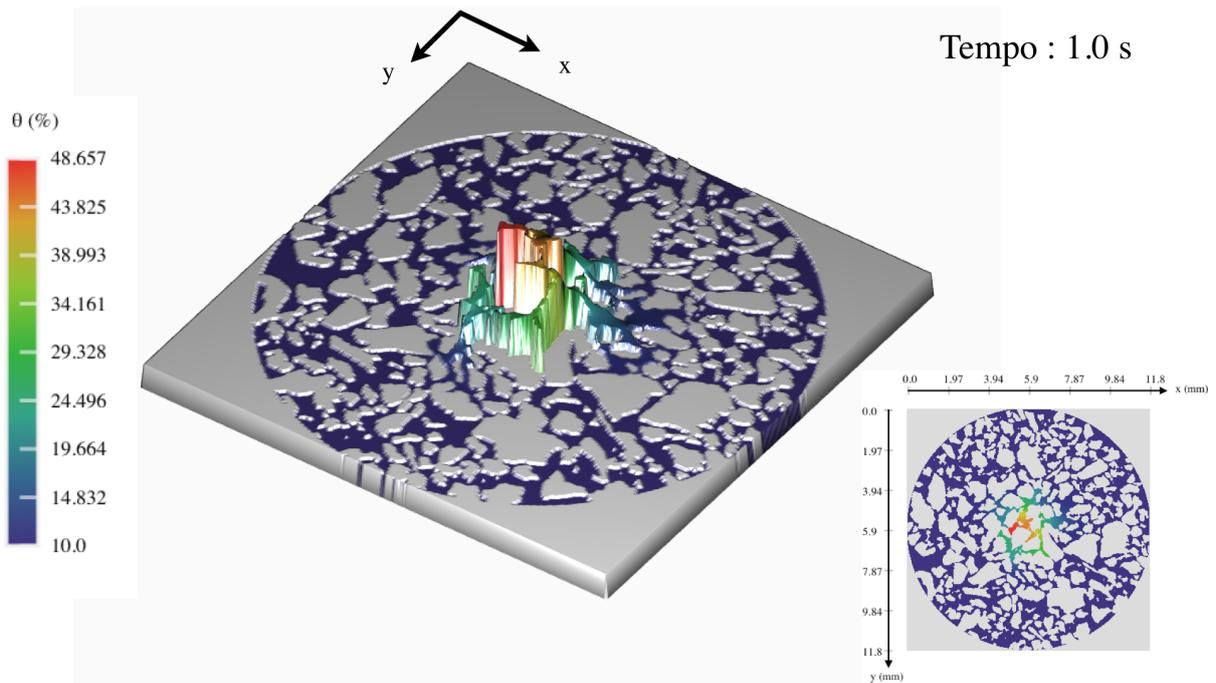


Figura 7.8: Teor de umidade volumétrica no tempo 1 s.

A partir de 2 segundos transcorridos da simulação, rapidamente percebe-se que o caminho preferencial do teor de umidade volumétrica é o canto superior direito. Na Figura 7.9 nota-se que o canto inferior esquerdo também apresenta caminhos que facilitam o transporte do fluido.

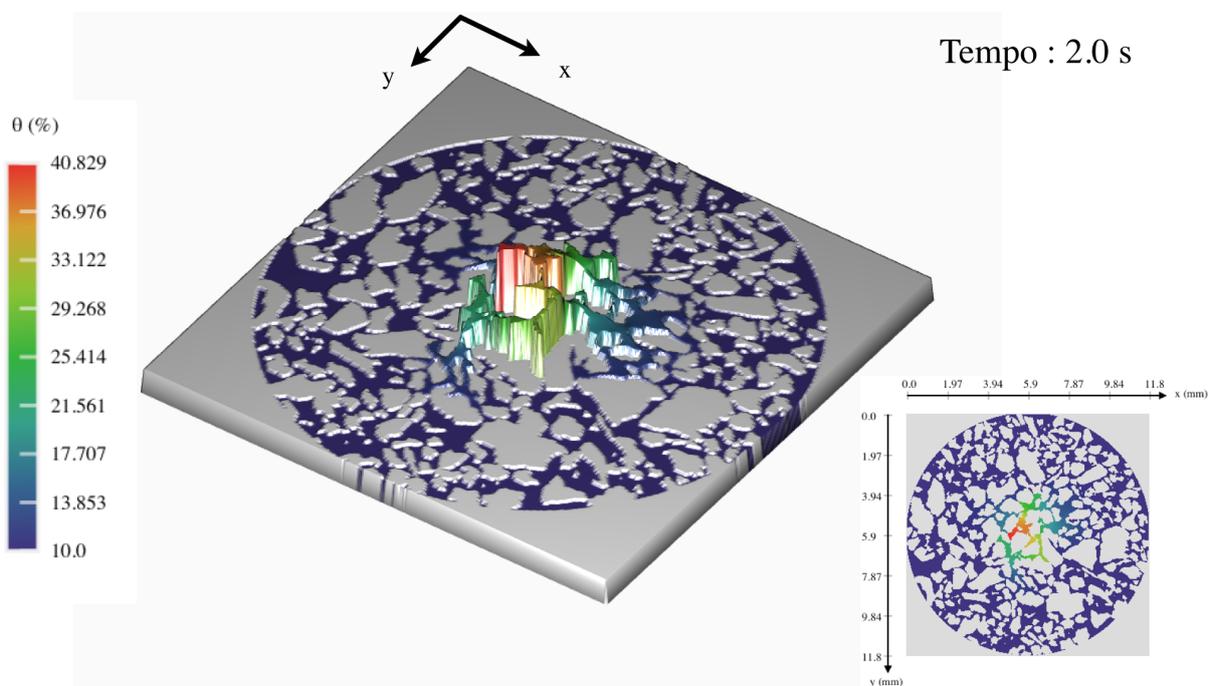


Figura 7.9: Teor de umidade volumétrica no tempo 2 s.

Um detalhe, que pode ser notado tanto na Figura 7.10 quanto nas Figuras 7.7 a 7.9, é que, na região superior esquerda, o fluido é barrado pela mesoestrutura, que não permitem

a passagem. Isso faz com que essas regiões apresentem a cor vermelha, que indica maior teor de umidade volumétrica. Assim, o fluido terá que contornar a mesoestrutura chegar ao lado oposto.

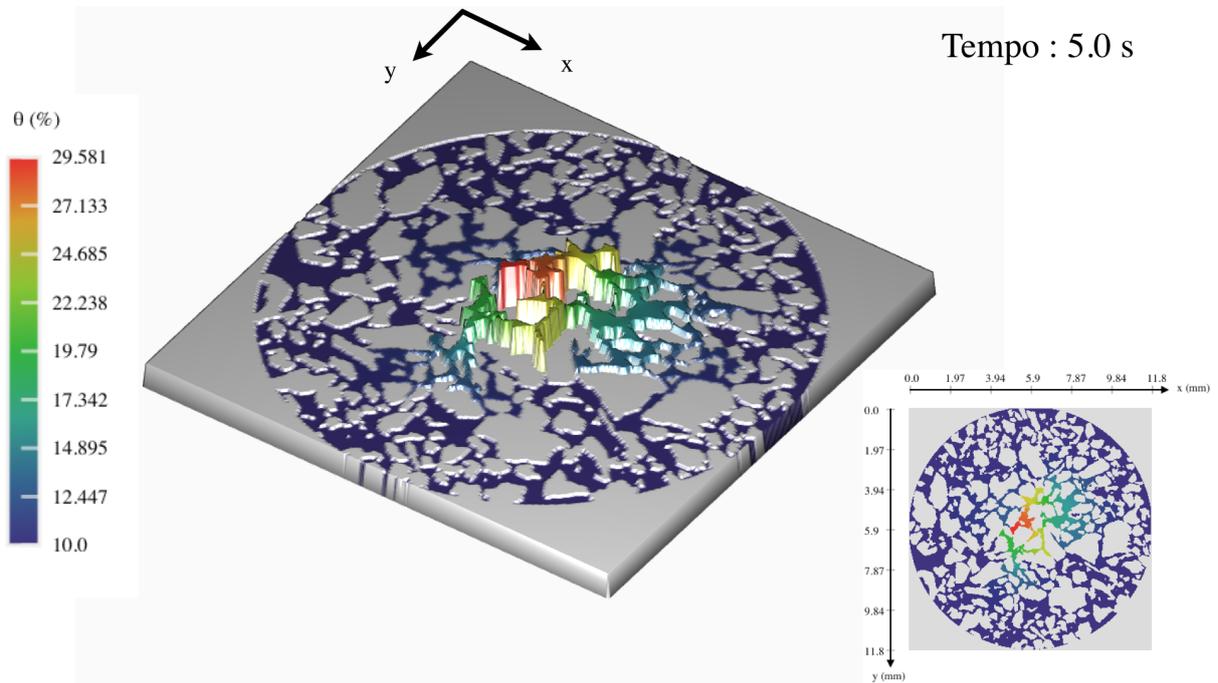


Figura 7.10: Teor de umidade volumétrica no tempo 5 s.

Nas Figuras 7.11, 7.12, 7.13 e 7.14 vê-se que o fluido consegue chegar na região inferior direita. Isso ocorre pela contribuição das partes inferior esquerda e superior direita que já possuíam maiores teores de umidade volumétrica.

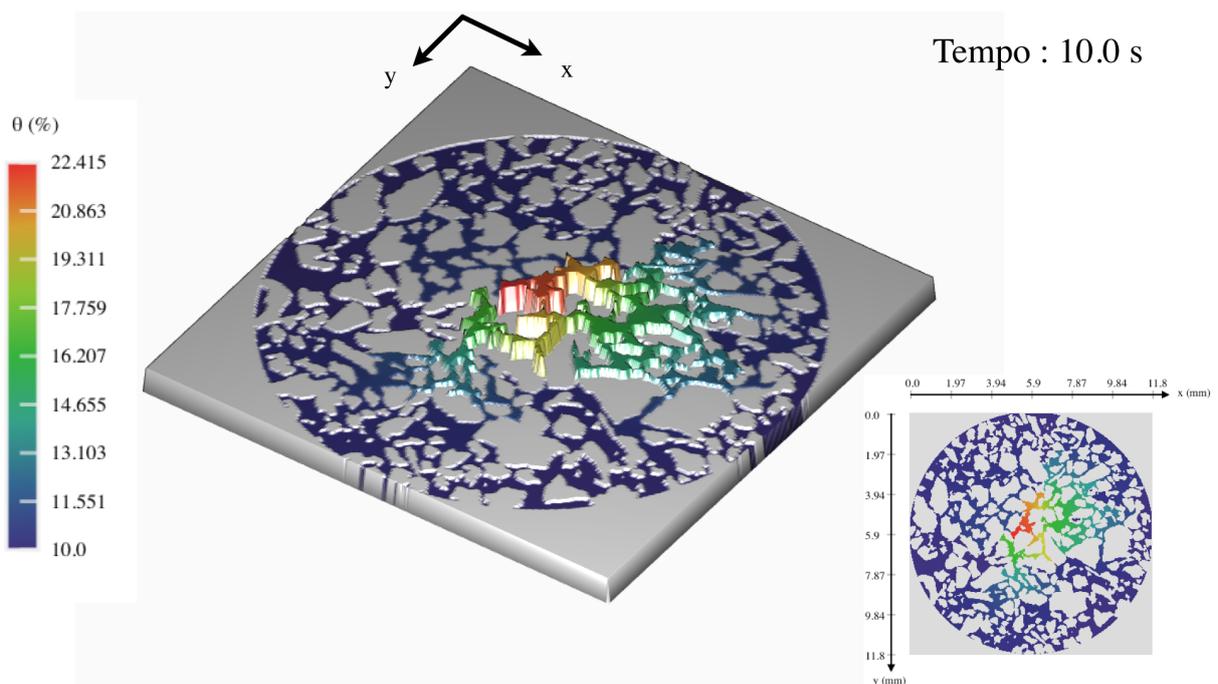


Figura 7.11: Teor de umidade volumétrica no tempo 10 s.

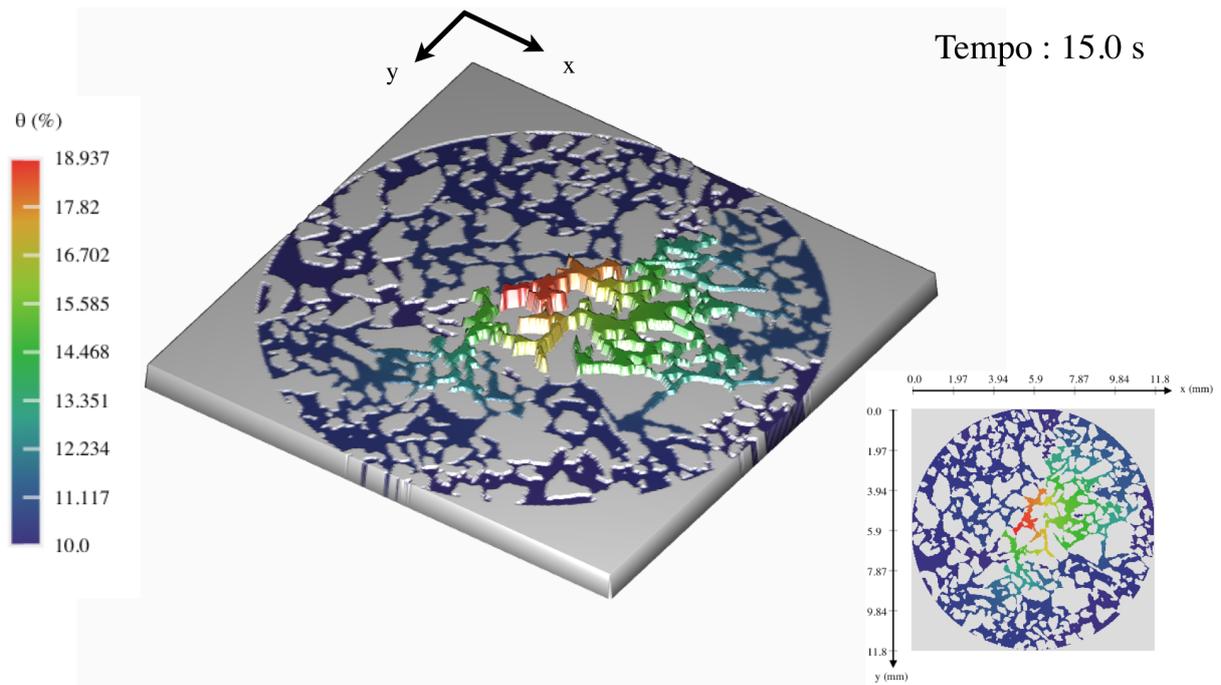


Figura 7.12: Teor de umidade volumétrica no tempo 15 s.

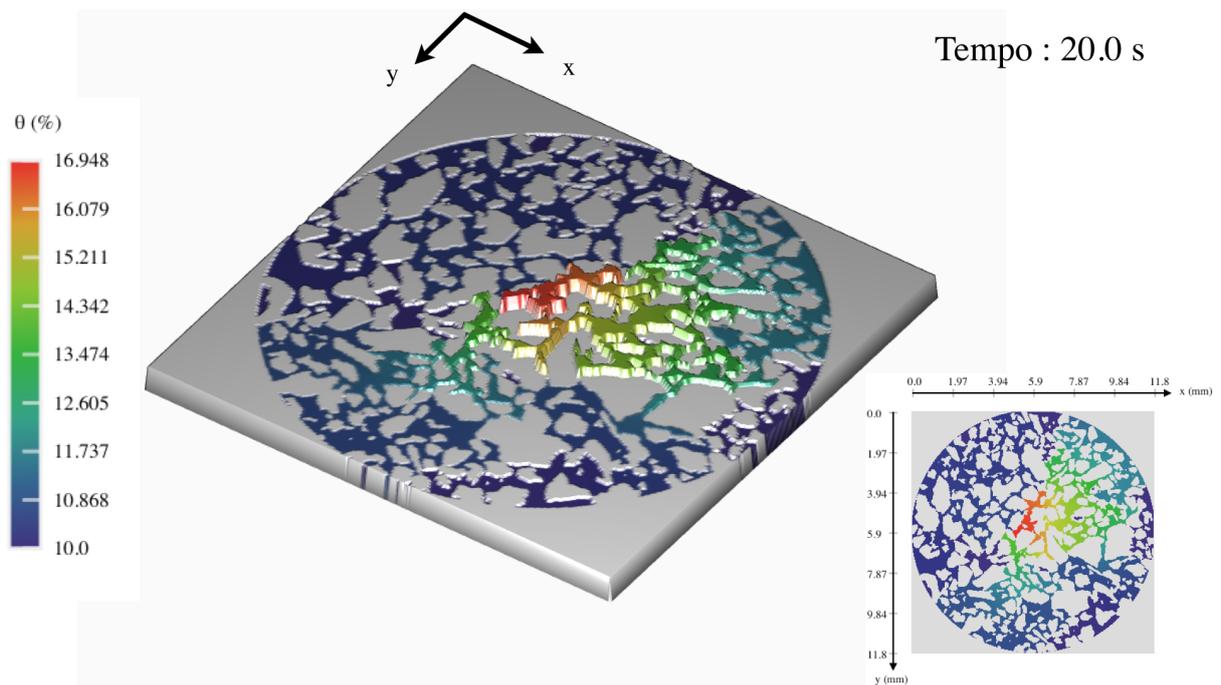


Figura 7.13: Teor de umidade volumétrica no tempo 20 s.

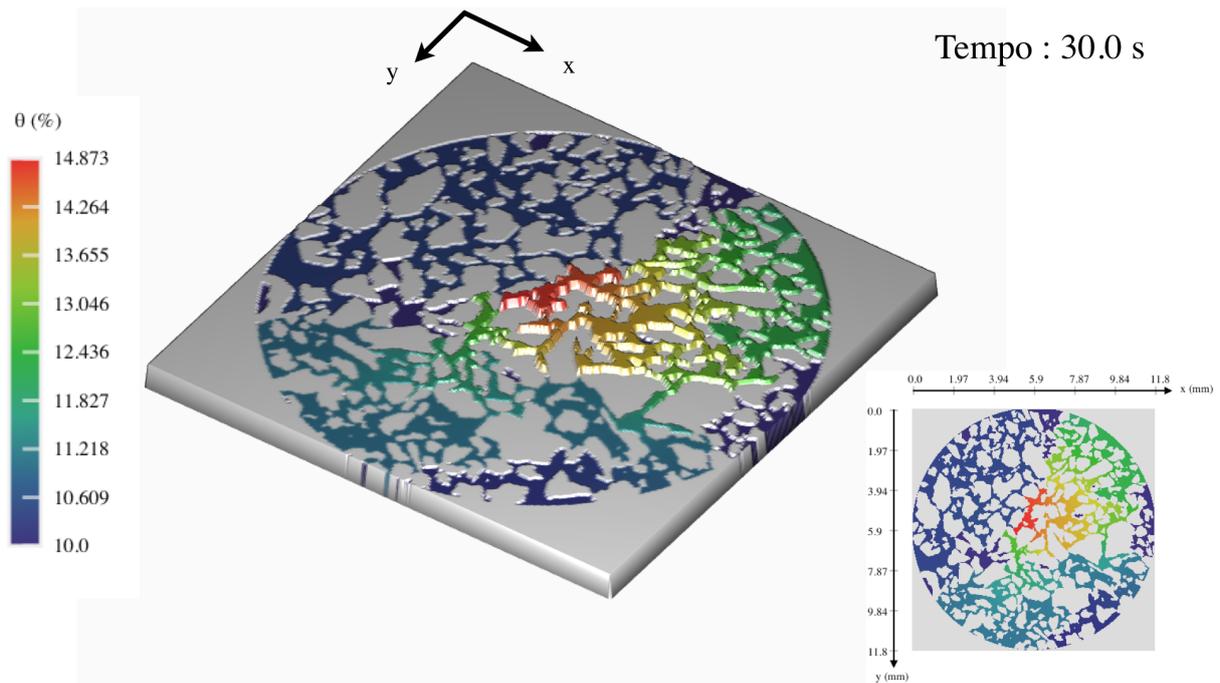


Figura 7.14: Teor de umidade volumétrica no tempo 30 s.

Na Figura 7.15 já consegue-se notar que a região inferior como um todo está homogênea e com teor de umidade volumétrica próxima a 11,67%. Além disso, nesse tempo, verifica-se que a frente de umidade consegue contornar a mesoestrutura e chegar na parte superior esquerda.

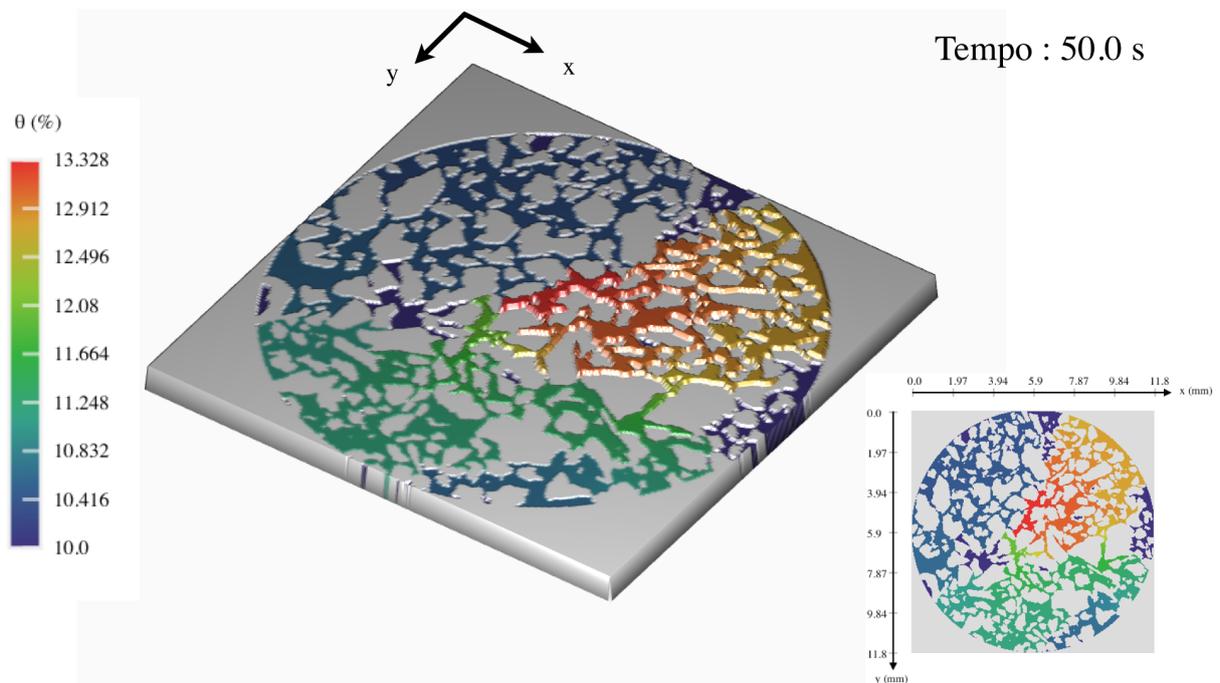


Figura 7.15: Teor de umidade volumétrica no tempo 50 s.

No tempo de 100 s (Figura 7.16), o teor de umidade volumétrica inicial já conseguiu influenciar praticamente todos a microestrutura interconectada. Nota-se, que apenas as

cores das seções que estão isolados, que possuem a cor azul escura. Além disso, percebe-se que a parte superior direita está aumentando a concentração da parte inferior direita. Com isso, a região inferior que antes estava uniforme, passa a ficar distinta.

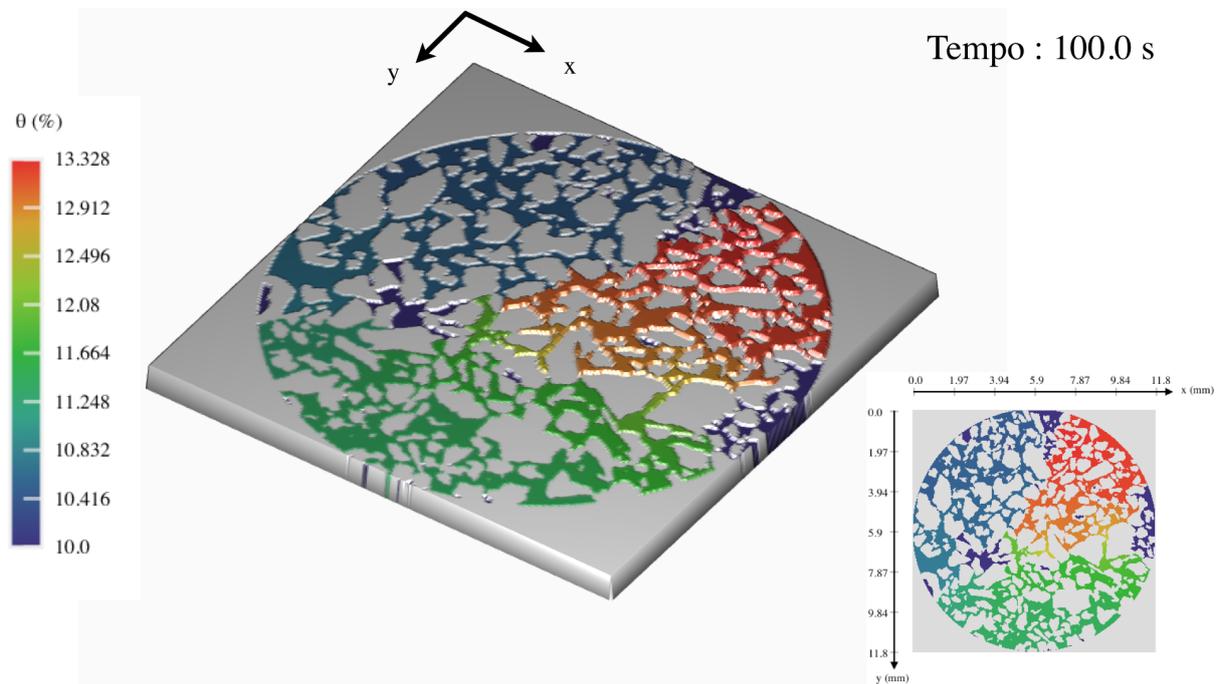


Figura 7.16: Teor de umidade volumétrica no tempo 30s.

Como a dimensão do domínio é da ordem de milímetros o fenômeno ocorre rapidamente. Isso pode ser verificado pelo fato que, aos 200 segundos, a distribuição de teor de umidade volumétrica passa a ser quase homogêneo, com uma variação apenas de 2,85% entre o maior e o menor teor de umidade volumétrica. Além disso, para a precisão representada graficamente, não há variação relevante entre o tempo de 200 s (Figura 7.17) e o de 800 s (Figura 7.18).

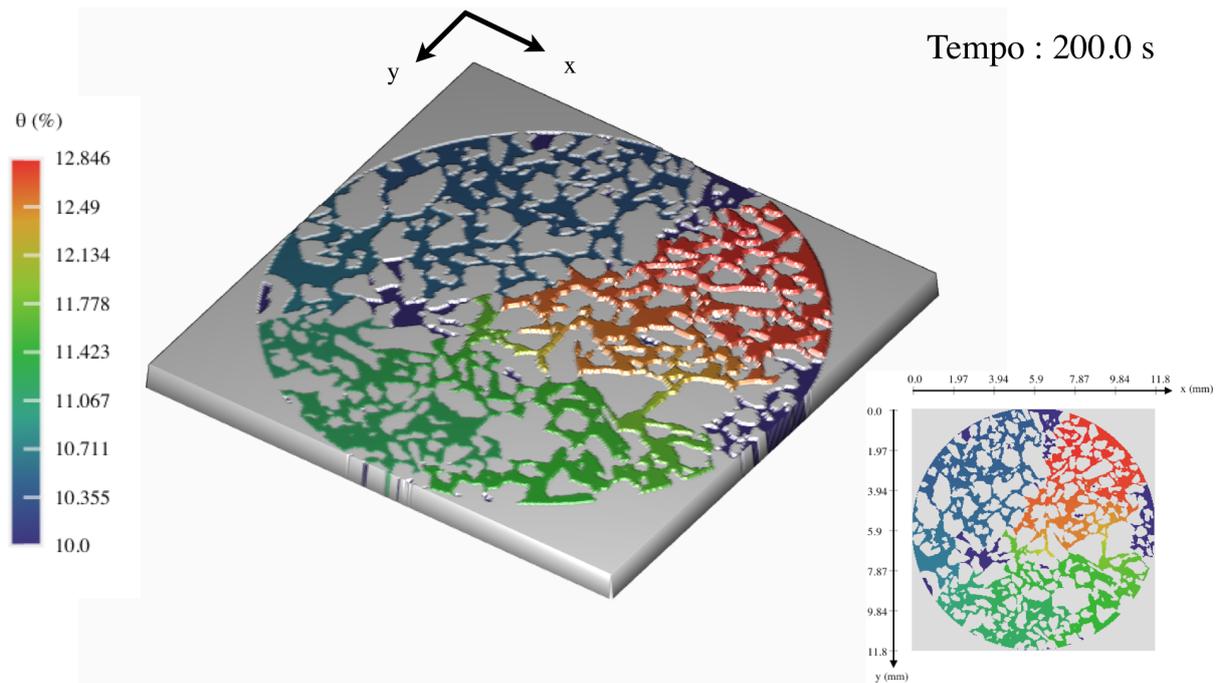


Figura 7.17: Teor de umidade volumétrica no tempo 200 s.

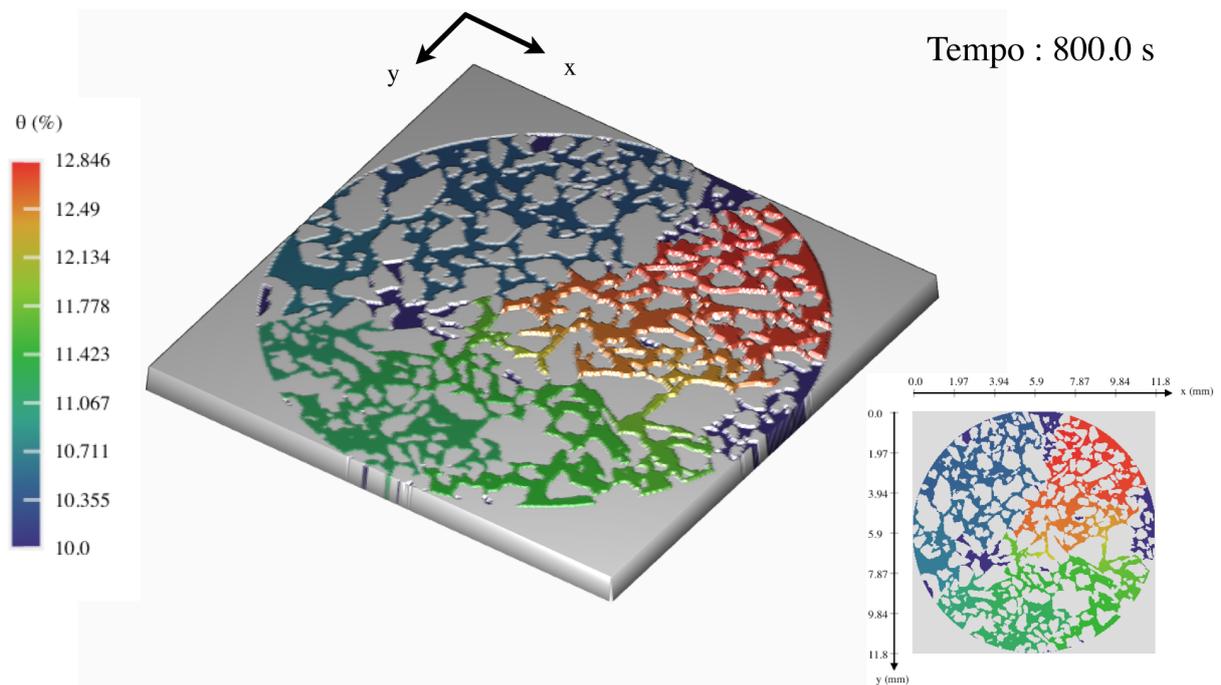


Figura 7.18: Teor de umidade volumétrica no tempo 800 s.

Como a simulação é bidimensional, partes da microestrutura permanecem isoladas. Isso, todavia, é inerente ao número de dimensões simuladas. No caso 3D, o fluido é capaz de contornar a mesoestrutura pela dimensão z .

A simulação foi capaz de mostrar que o transporte de fluidos, em um meio poroso, é profundamente determinada pela geometria do meio. Além disso, pela simulação, pôde-se

verificar a difusividade real do fluido no meio poroso, e verificar como que os caminhos preferenciais e bloqueios dos grãos ajudam e interferem no fluxo não saturado.

Ainda, pode-se verificar que, tal como na natureza, um teor de umidade volumétrica perfeitamente homogêneo é improvável. Isso ocorre pois haverá sempre regiões cujo acesso do fluido é barrado. Além disso, o equilíbrio final do fenômeno é extremamente demorado, uma vez que há pequenos gradientes depois de dezenas de segundos e os caminhos de transporte são bem curvilíneos.

Por fim, percebe-se como o MDI é capaz simular o fenômeno em um nível microscópico. Isso é útil para mostrar a natureza do fluxo não saturado na escala dos grãos (mesoescala).

7.1.6 Caso anisotrópico da micro-tomografia

O MDI 2D também é capaz de simular o fluxo não saturado em meios anisotrópicos. A fim de demonstrar isso, decidiu-se simular o fenômeno no mesmo meio e com as mesmas condições iniciais e de contorno, modificando apenas as condutividades hidráulicas não saturadas. Para que a anisotropia fosse facilmente percebida, escolheu-se aumentar a condutividade hidráulica não saturada na direção y em 5 vezes, e manter a mesma na direção x . As Figuras 7.19 e 7.20 representam, respectivamente, as condutividades hidráulicas não saturadas para as direções x e y no caso anisotrópico.

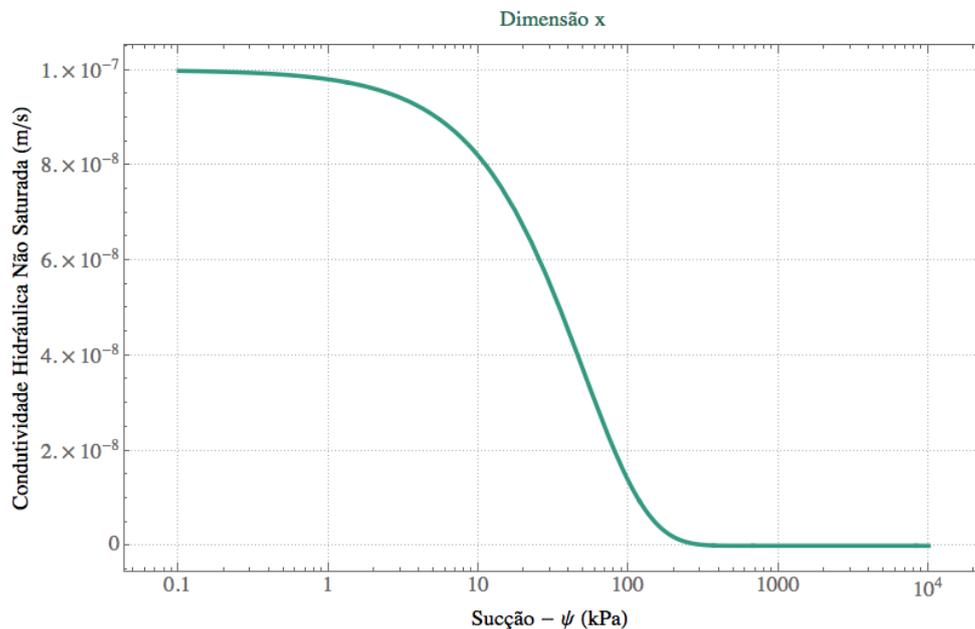


Figura 7.19: Condutividade hidráulica não saturada em x - caso anisotrópico.

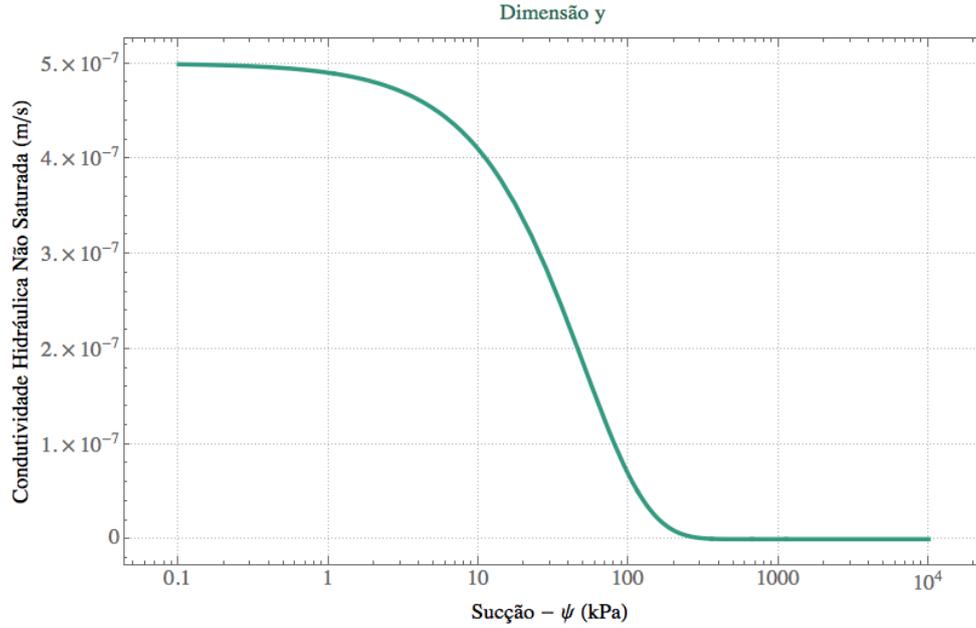


Figura 7.20: Condutividade hidráulica não saturada em y - caso anisotrópico.

Dessa forma, todos parâmetros físicos da Tabela 7.1 são mantidos para o caso anisotrópico, exceto a condutividade hidráulica saturada em y , que passa a ter valor de $k_{s_y} = 5.10^{-7} \text{ m/s}$. Conseqüentemente, os parâmetros para a simulação numérica também são alterados, passando a ter os valores presentes na Tabela 7.3.

Tabela 7.3: Parâmetros numéricos da simulação anisotrópica com a micro-tomografia

Parâmetros Numéricos			
$\kappa_{0,0}$	0,24153	α_x^n (m/s)	0
$\kappa_{0,-1}$	0,316029	α_y^n (m/s)	0
$\kappa_{1,0}$	0,0632058	β_x^n (m^2/s)	1
$\kappa_{0,1}$	0,316029	β_y^n (m^2/s)	1
$\kappa_{-1,0}$	0,0632058	γ_x^n (m/s)	0
Δx (m)	$38,31.10^{-6}$	γ_y^n (m/s)	0
Δy (m)	$38,31.10^{-6}$	Δt (s)	10^{-4}

Visto que a condutividade hidráulica não saturada na direção y é maior que na direção x , espera-se que haja uma mudança para a simulação anisotrópica. A mudança esperada é que o fluido se disperse mais rapidamente pelos grãos, especialmente na direção vertical. De fato, pode-se verificar isso já nos segundos iniciais. Desde o primeiro segundo de simulação percebe-se que, no caso anisotrópico, o avanço é mais rápido do que caso isotrópico (Figura 7.21). Isso ocorre pois há caminhos verticais em maior quantidade perto do retângulo de maior teor de umidade volumétrica, no tempo inicial.

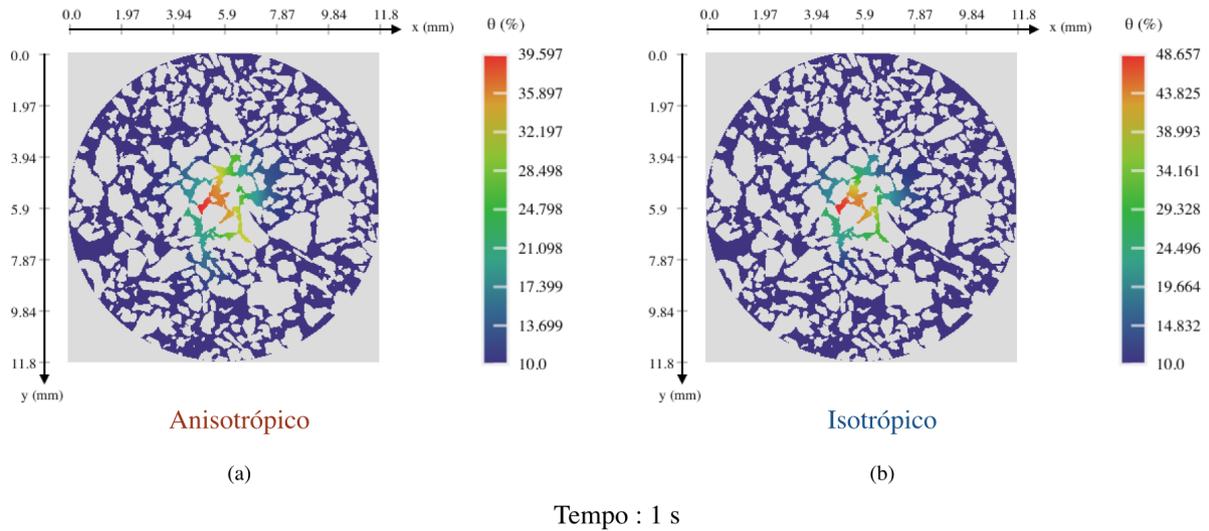


Figura 7.21: Simulação em 1 s para (a) caso anisotrópico e (b) caso isotrópico.

Verifica-se que aos 5 s (Figura 7.22) o avanço do teor de umidade volumétrica no caso anisotrópico é significativamente maior que no caso isotrópico.

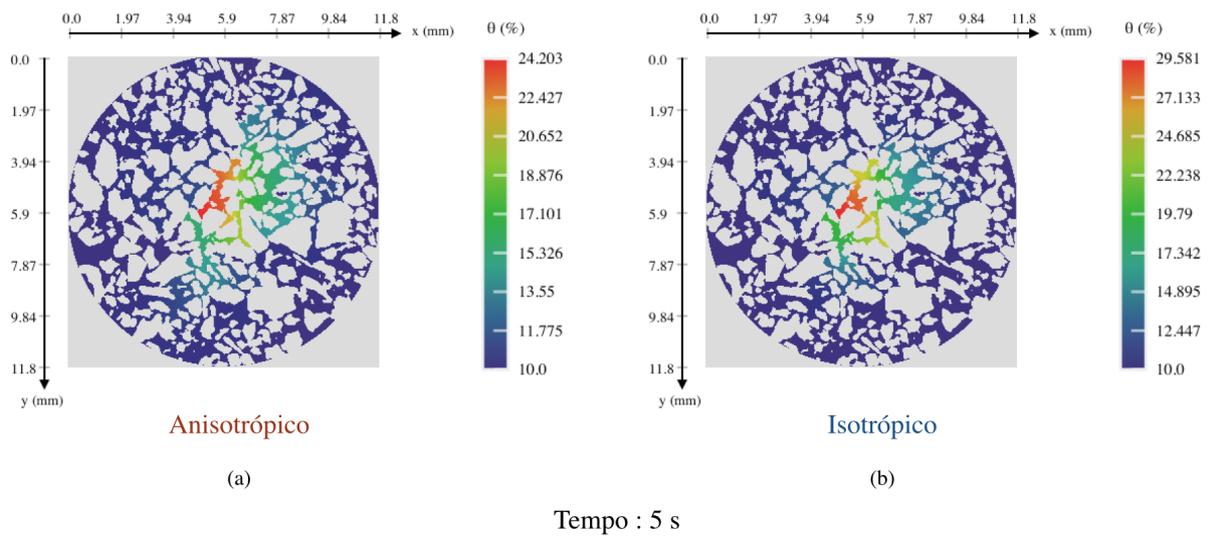


Figura 7.22: Simulação em 5 s para (a) caso anisotrópico e (b) caso isotrópico.

Pode-se ainda notar que aos 20 s (Figura 7.23), o caso anisotrópico já demonstra maior avanço na parte superior esquerda.

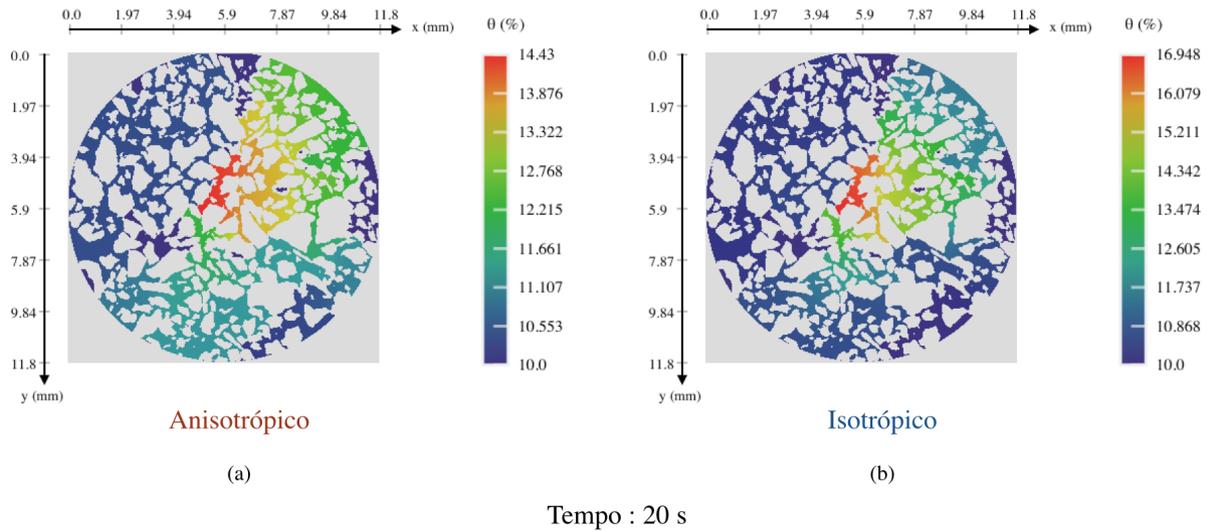


Figura 7.23: Simulação em 20 s para (a) caso anisotrópico e (b) caso isotrópico.

Apesar da progressão do teor de umidade volumétrica ser mais rápida para poucos segundos, o mesmo não pode ser afirmado para maiores tempos. Para 800 s (Figura 7.24), o caso anisotrópico apresenta uma distribuição mais desigual do que para o caso isotrópico. Ao longo do tempo, o fluido acaba se concentrando mais nas extremidades verticais e passa a ter dificuldade de ser transportado horizontalmente, prejudicando a dispersão como um todo.

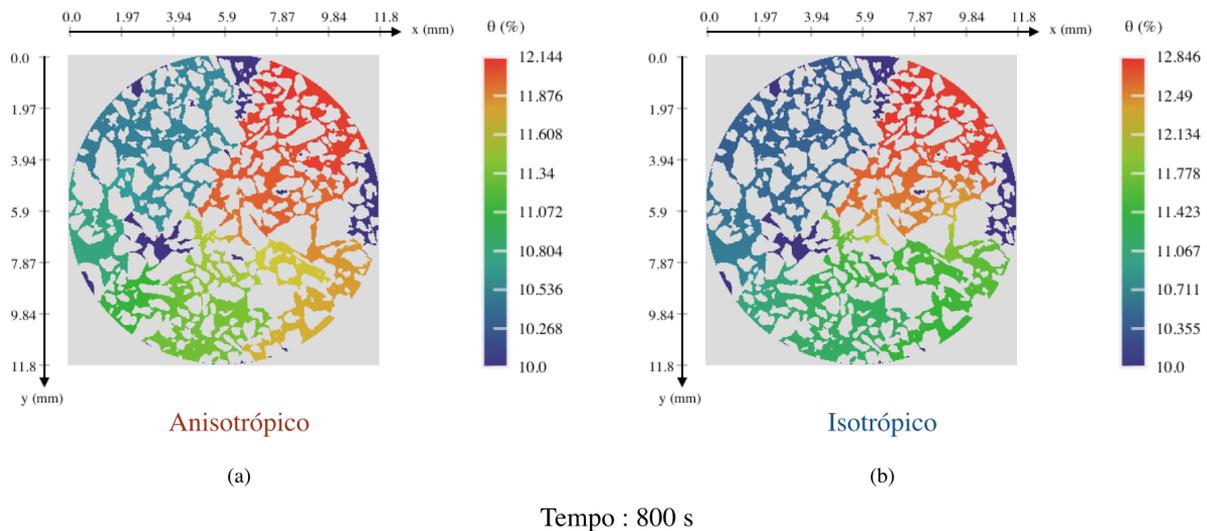


Figura 7.24: Simulação em 800 s para (a) caso anisotrópico e (b) caso isotrópico.

Isso permite concluir que nem sempre quando a permeabilidade em um sentido for maior, irá implicar em uma maior dispersão do fluido como um todo para espaços de tempos finitos.

7.2 Simulação em meio fraturado

7.2.1 Descrição qualitativa

Nesta simulação, a intenção é descrever como que o fluxo não saturado ocorre em um meio fraturado. Para isso, escolheu-se uma rocha fraturada que foi registrada com uma escala.

Considera-se que a fratura, denotada pela parte mais escura da imagem, constitui um domínio válido para o fluxo não saturado. Tal hipótese é plausível uma vez que, na fissura, provavelmente há decomposições físicas e químicas da rocha original. Isso implica que a fissura não é constituída unicamente de vazios.

Além disso, considera-se que na parte superior da fissura há um teor de umidade volumétrica maior, e que no restante da fratura há um teor de umidade volumétrica menor. Essa decisão reflete como que infiltrações, chuvas e demais transposições de fluidos para a fratura são capazes de dar início ao fenômeno de fluxo não saturado.

Ainda, considera-se que tudo que envolve a fratura é impermeável, uma vez que as diferenças de condutividade hidráulica não saturada entre a zona fraturada e a rocha certamente possuem ordens de grandeza bem distintas.

7.2.2 Domínio da simulação

A imagem originalmente capturada, como visto pela Figura 4.3, foi recortada a fim de considerar apenas a parte relevante da fissura para a simulação. Assim, o domínio utilizado para a simulação, ainda sem tratamento, é descrito pela Figura 7.25.



Figura 7.25: Fratura em rocha utilizada para a simulação.

Após o recorte da imagem, usou-se um filtro que binariza a imagem (Figura 7.26). O algoritmo de binarização atribui cor preta para os pixels mais escuros e cor branca para os pixels mais claros. Assim, atribui-se a cor preta para a fratura, e branca para o restante da rocha.



Figura 7.26: Fratura binarizada.

Em seguida retira-se da imagem pequenas partes que, apesar de terem a cor preta, não pertencem à fratura (Figura 7.27).



Figura 7.27: Fratura binarizada sem pequenas partes.

Por fim aplica-se um fechamento geodésico, que tem a intenção de tornar a fissura mais uniforme, sem descontinuidades internas (Figura 7.28). Sendo que essa é a imagem final utilizada como o meio de simulação do fenômeno.



Figura 7.28: Fratura com fechamento geodésico.

7.2.3 Descrição matemática

A única descrição matemática possível do problema tratado é por meio dos parâmetros físicos e numéricos adotados. Como apenas a geometria do problema foi obtida, todos os parâmetros são estimados. Sendo que as Tabelas 7.4 e 7.5 descreve-os.

Tabela 7.4: Parâmetros físicos da simulação em meio fraturado.

Parâmetros Físicos do Solo	
γ_w (kN/m^3)	9,8
k_{sx} (m/s)	10^{-7}
k_{sz} (m/s)	10^{-7}
δ	0,01
θ_s	0,55
θ_r	0,05
θ_0	0,52
θ_i	0,07

Tabela 7.5: Parâmetros numéricos da simulação em meio fraturado.

Parâmetros Numéricos			
$\kappa_{0,0}$	0,0597432	α_x^n (m/s)	0
$\kappa_{0,-1}$	0,235064	α_z^n (m/s)	10^{-7}
$\kappa_{1,0}$	0,235064	β_x^n (m^2/s)	$2,04 \cdot 10^{-6}$
$\kappa_{0,1}$	0,235063	β_z^n (m^2/s)	$2,04 \cdot 10^{-6}$
$\kappa_{-1,0}$	0,235064	γ_x^n (m/s)	0
Δx (m)	$41,67 \cdot 10^{-6}$	γ_z^n (m/s)	10^{-8}
Δy (m)	$41,67 \cdot 10^{-6}$	Δt (s)	$2 \cdot 10^{-4}$

Deve-se compreender que o Δx e o Δz adotados foram obtidos ao dividir o tamanho dos intervalos da escala pela quantidade de pixels que ocupavam.

7.2.4 Características Físicas do Solo

Para compreender como que o fenômeno ocorre no solo, faz-se necessário, antes de apresentar a simulação, mostrar as curvas que definem seu comportamento não saturado. As duas curvas mais relevantes são a curva característica e a curva de condutividade hidráulica não saturada.

A curva característica determina como que o teor de umidade volumétrica na fratura varia com a sucção. De tal forma que, quanto maior a sucção, menor o teor de umidade volumétrica, e vice-versa, tal como mostrado na Figura 7.29.

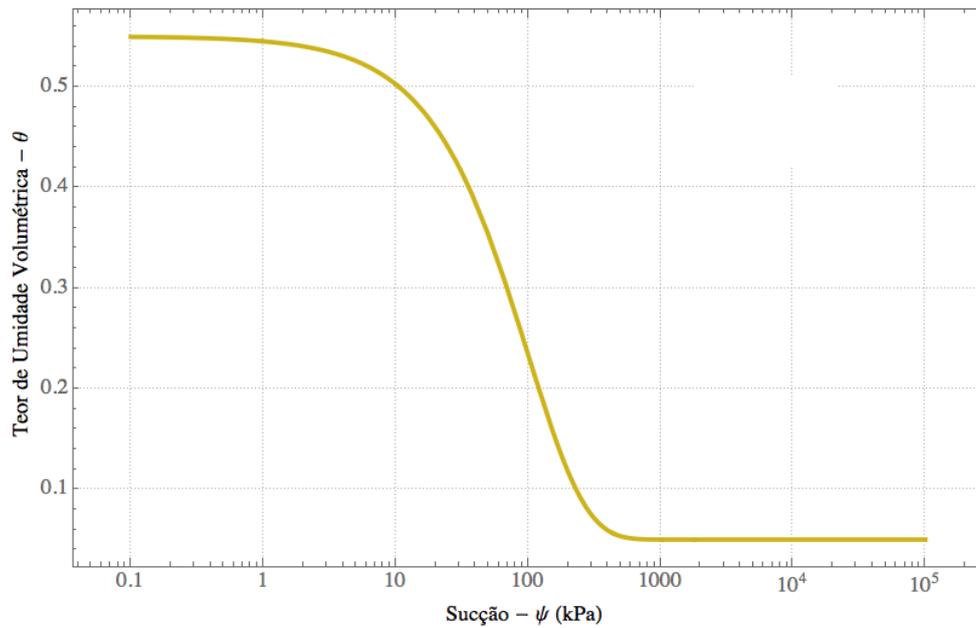


Figura 7.29: Curva característica da fratura.

Já a curva de condutividade hidráulica mostra como que a sucção presente no meio afeta a condutividade hidráulica. Semelhante à curva característica, quanto maior a sucção menor a condutividade hidráulica, tal como visto nas Figuras 7.30 e 7.31, para as dimensões x e z , respectivamente.

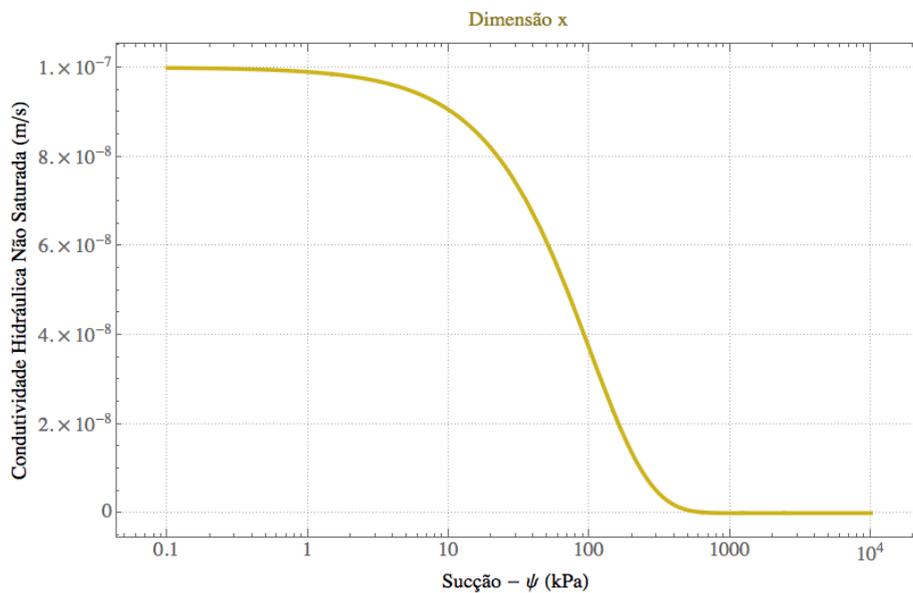


Figura 7.30: Curva de condutividade hidráulica não saturada na direção x .

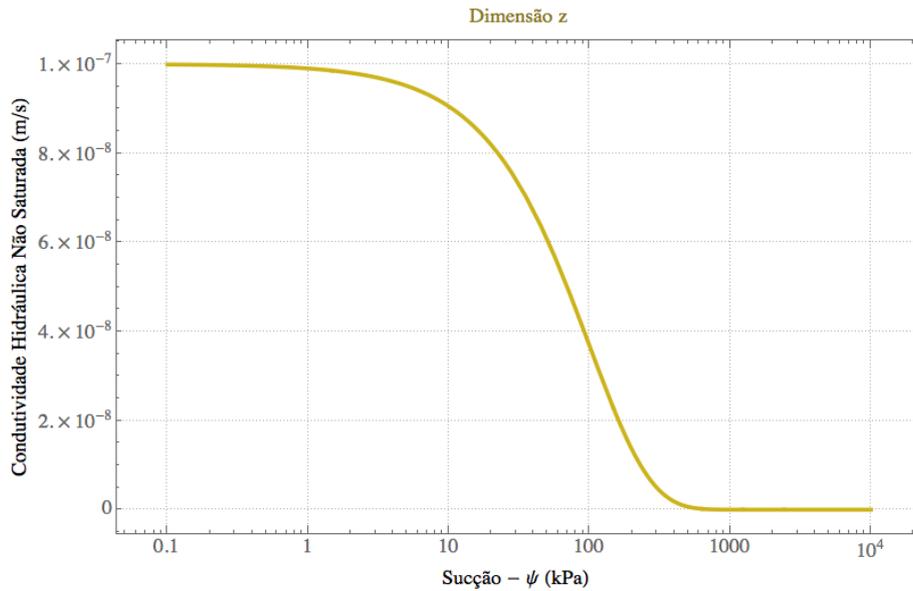


Figura 7.31: Curva de condutividade hidráulica não saturada na direção z .

7.2.5 Simulação

A simulação representa como que o teor de umidade volumétrica varia com o tempo e espaço na fratura. Para o contorno, atribui-se cinza, enquanto que para os pixels do domínio, atribuiu-se cores em uma escala cromática. A escala cromática varia do vermelho, que indica maior teor de umidade volumétrica, até o azul escuro, que indica menor teor, passando pelo laranja, amarelo e verde, respectivamente.

A condição inicial de teor de umidade volumétrica na fratura pode ser vista na Figura 7.32, correspondente ao tempo 0. Nesse tempo inicial há um maior teor de umidade volumétrica no topo e menor no restante da fratura.

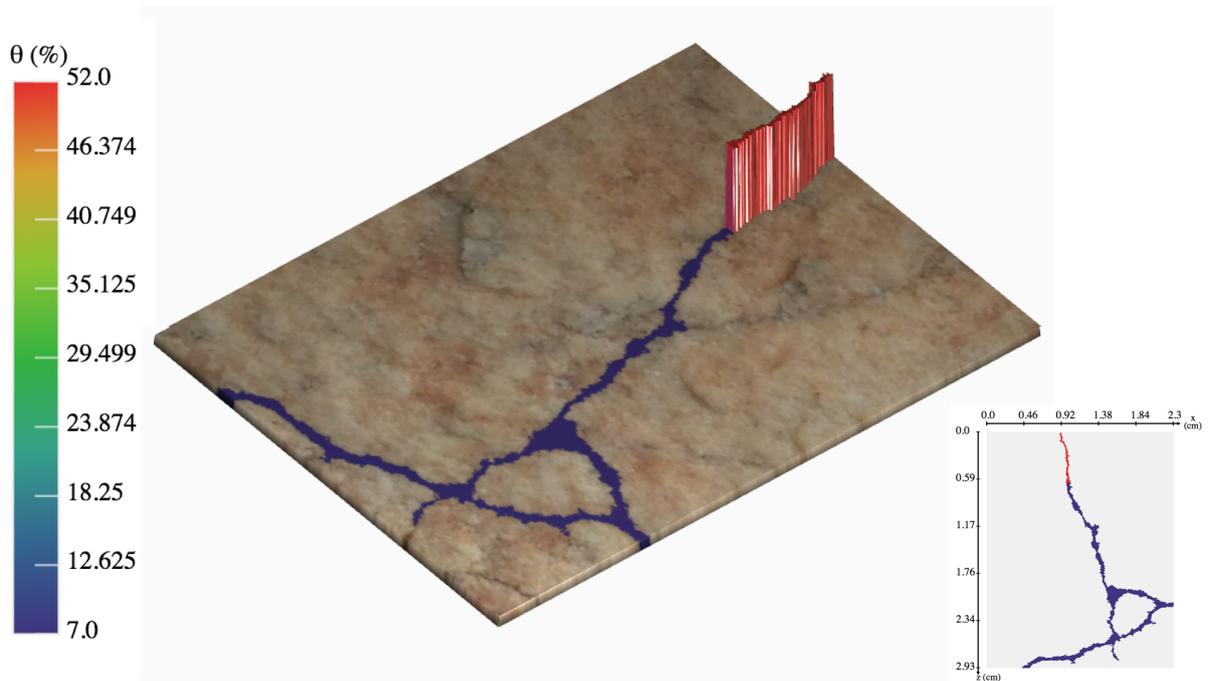


Figura 7.32: Teor de umidade volumétrica na fratura no tempo 0 s.

Logo depois do tempo inicial, percebe-se pela Figura 7.33, que o teor de umidade volumétrica passa a se distribuir e que o máximo de concentração, diminui.

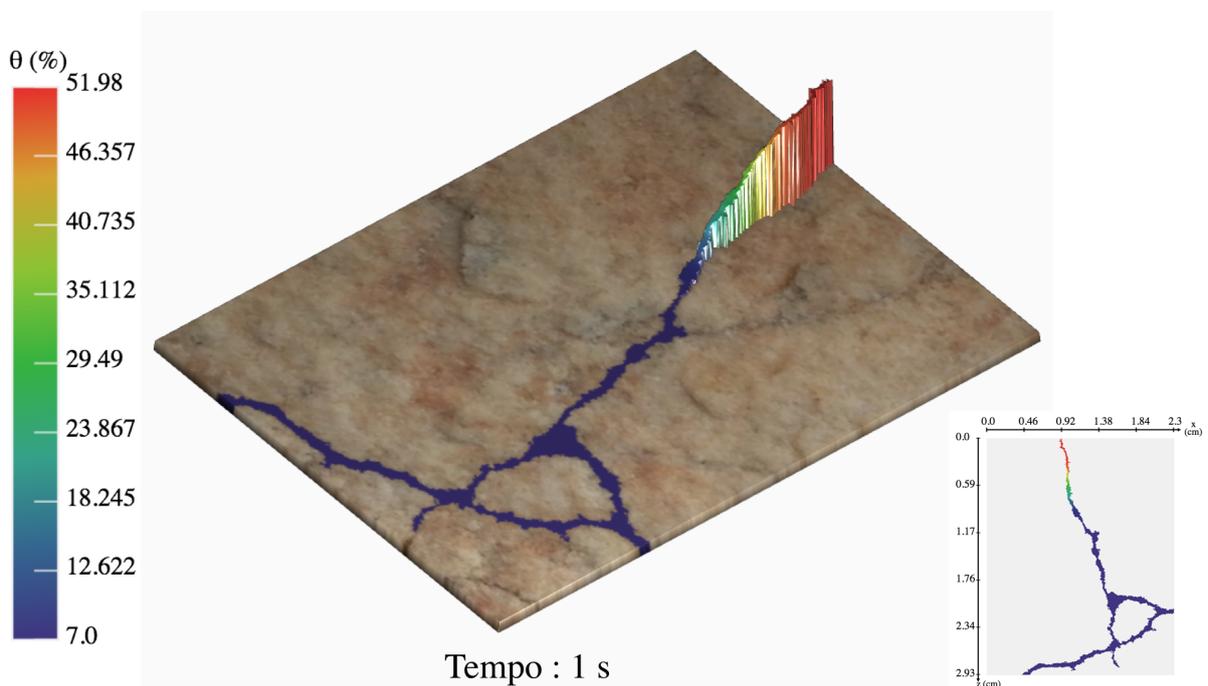


Figura 7.33: Teor de umidade volumétrica na fratura no tempo 1 s.

Já no tempo 10 s (Figura 7.34) nota-se claramente que, ao mesmo tempo que o teor de umidade volumétrica avança para a parte inferior da fratura, ele diminui na parte superior. Como não há condições de contorno que indicam entrada de mais fluidos, o teor de cima é transportado para baixo.

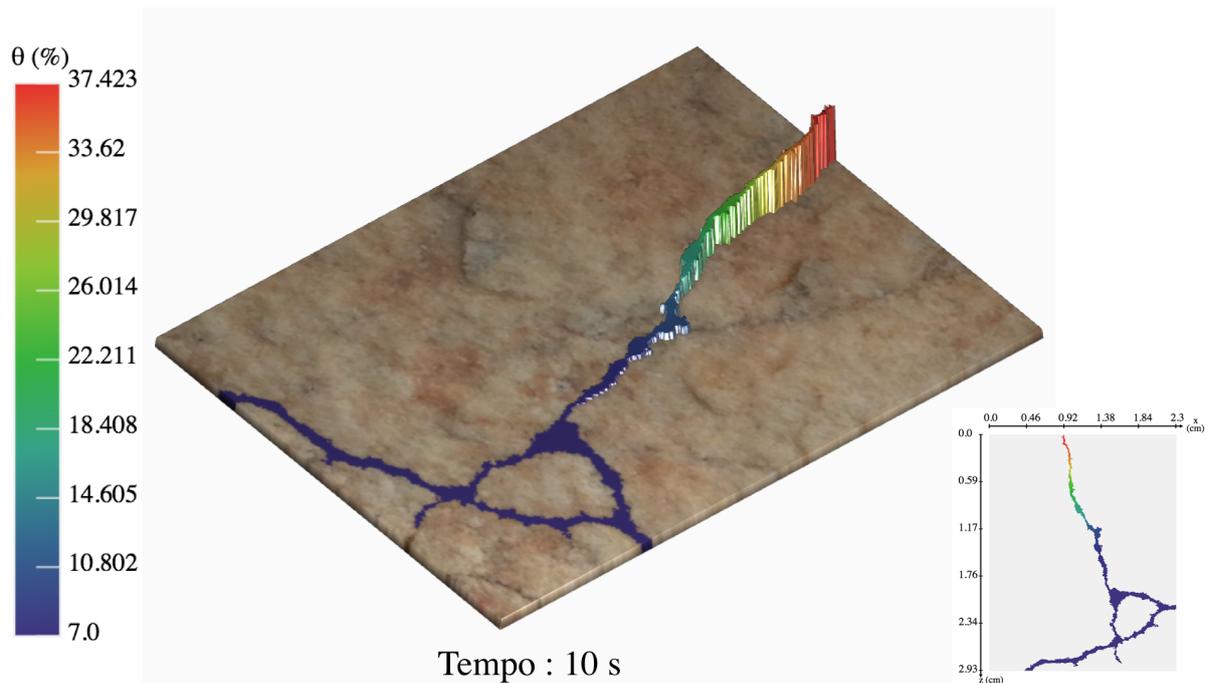


Figura 7.34: Teor de umidade volumétrica na fratura no tempo 10 s.

Apesar da secção transversal da fratura, em relação à direção do fluxo, variar geometricamente, há apenas um sentido longitudinal até por volta do tempo 40 s (Figura 7.35). Isso faz com que, até esse período, o fluxo se caracterize mais uniformemente.

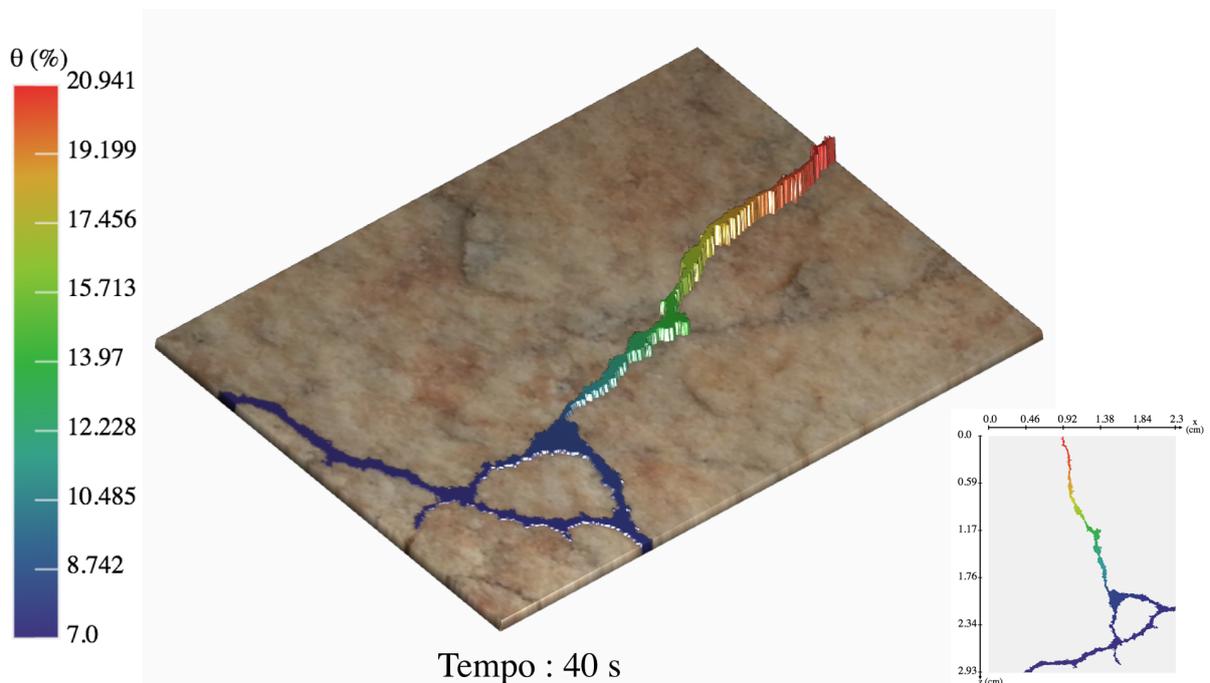


Figura 7.35: teor de umidade volumétrica na fratura no tempo 40 s.

Já por volta do tempo 70 s (Figura 7.36), o teor de umidade volumétrica passa a divergir, uma vez que a frente de maior teor atinge a divisão na fratura. Deve-se verificar

que a fratura irá convergir novamente, todavia, a diferença entre os caminhos implicará em mudança no fluxo.

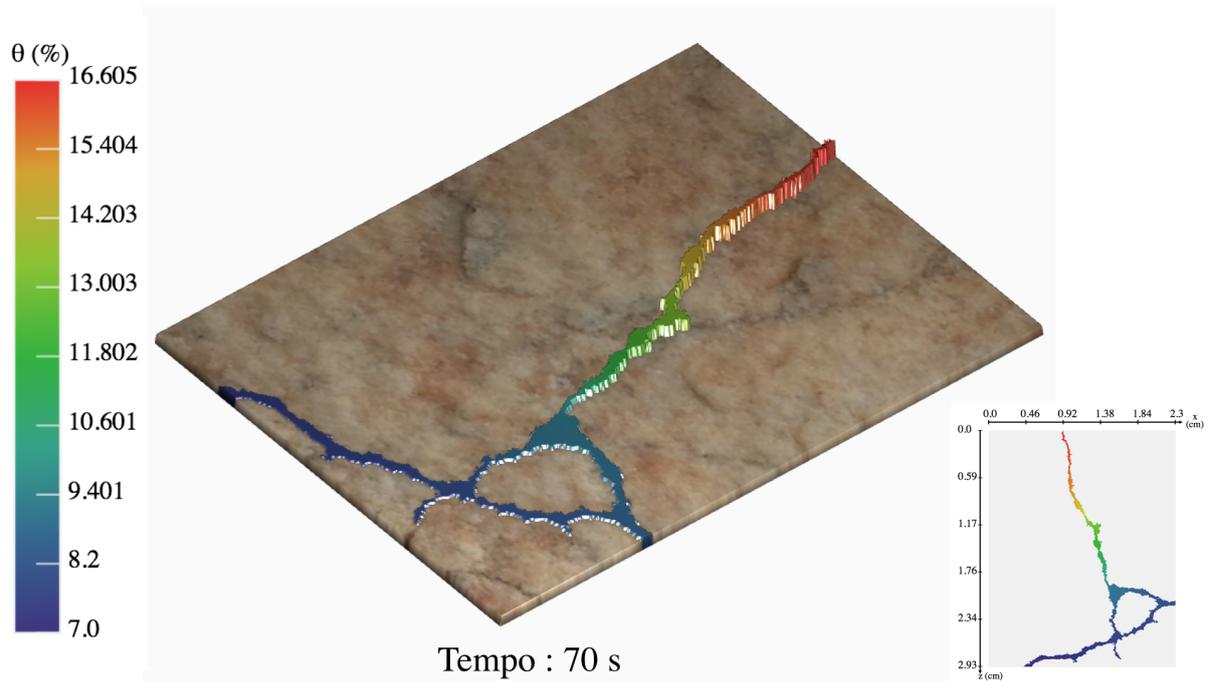


Figura 7.36: Teor de umidade volumétrica na fratura no tempo 70 s.

No tempo de 100 s (Figura 7.37), pode-se perceber que o caminho da fratura que divergiu para a direita conseguiu propagar mais. Isso ocorre porque o caminho da esquerda possui um afunilamento, dificultando o transporte do fluido.

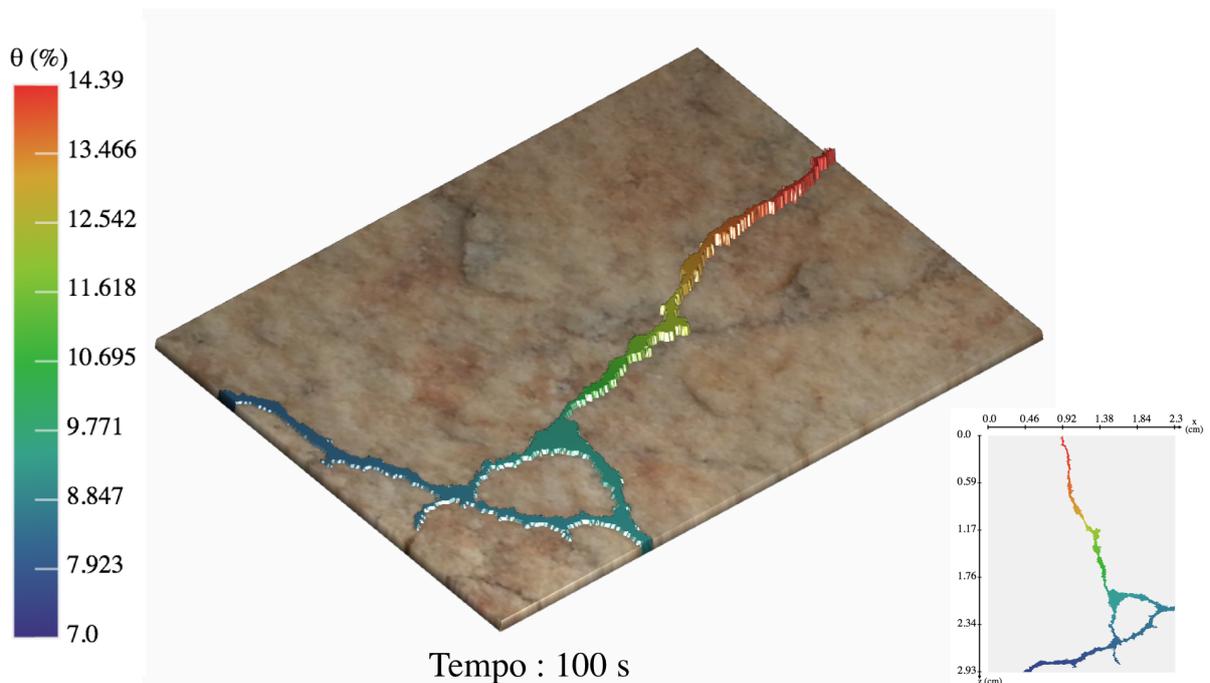


Figura 7.37: Teor de umidade volumétrica na fratura no tempo 100 s.

No tempo de 150 s (Figura 7.38), o teor de umidade volumétrica é capaz de influenciar significativamente toda a fratura. Isso se verifica pois não há mais a cor que representa a umidade inicial, de 7%. A escala de cores da legenda, todavia, mantém a variação que vai do teor de umidade volumétrica máximo no presente até o teor de umidade volumétrica mínimo presente no início, a fim de representar o avanço do fenômeno.

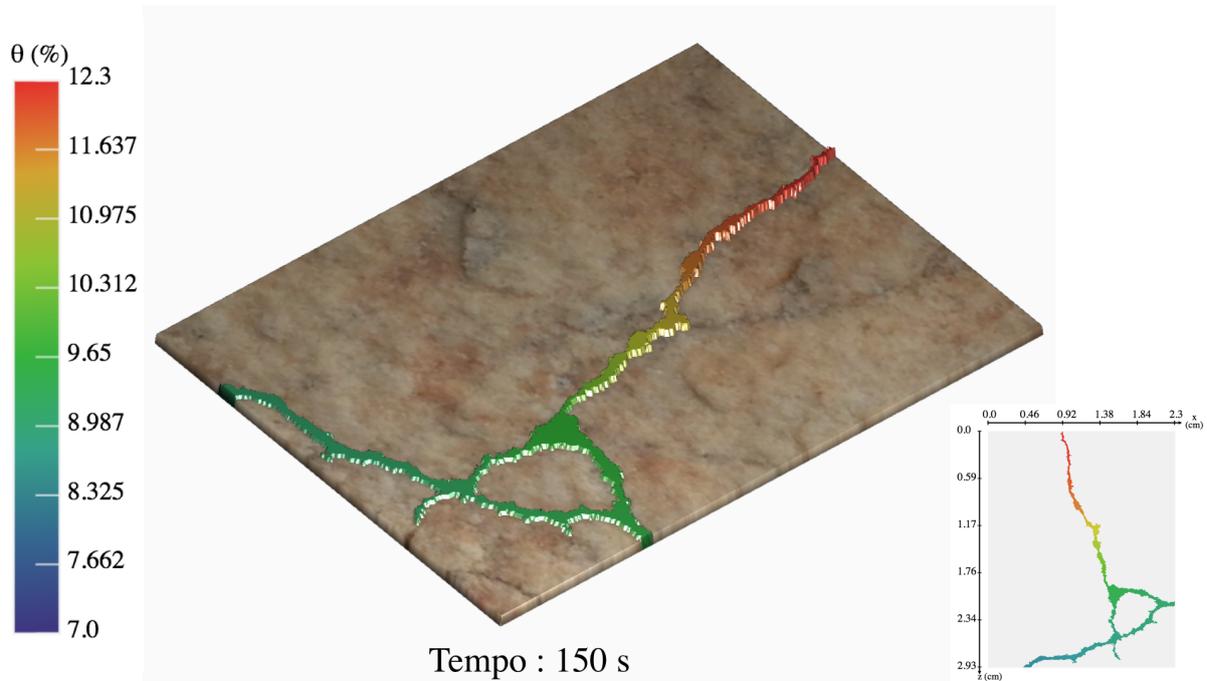


Figura 7.38: Teor de umidade volumétrica na fratura no tempo 150 s.

Da Figura 7.39 à Figura 7.43 verifica-se que o teor de umidade volumétrica passa a se homogeneizar pela fratura, uma vez que a condição inicial já passou a influenciar todo o domínio.

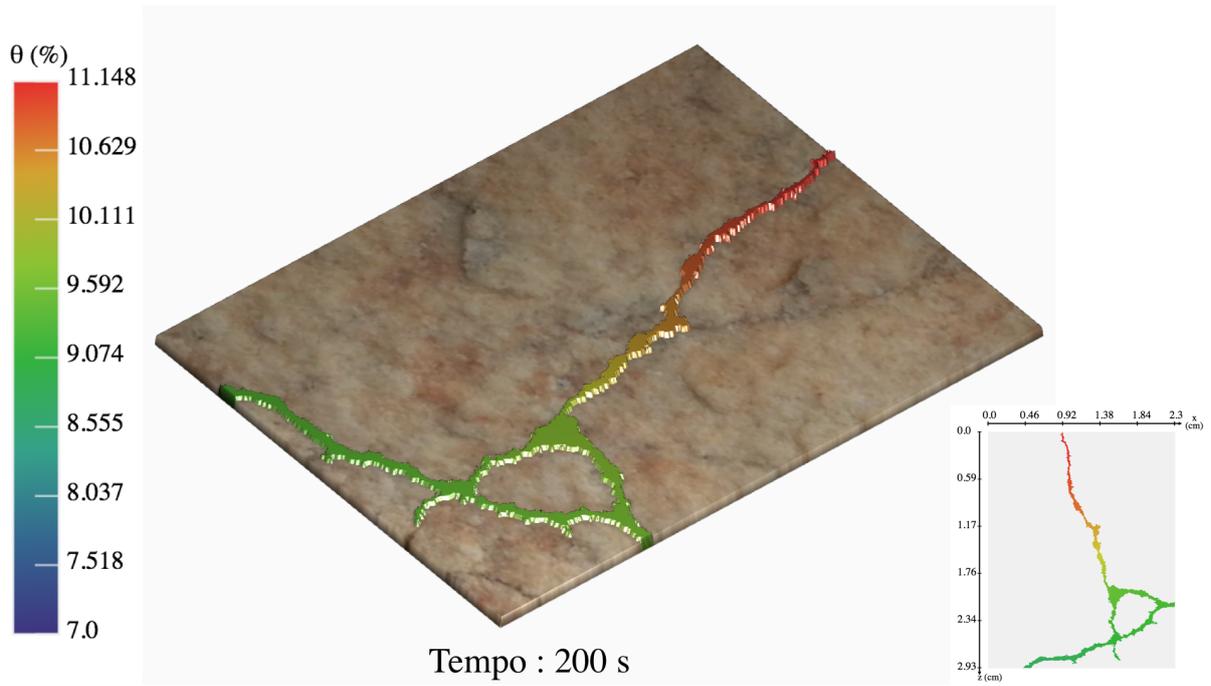


Figura 7.39: Teor de umidade volumétrica na fratura no tempo 200 s.

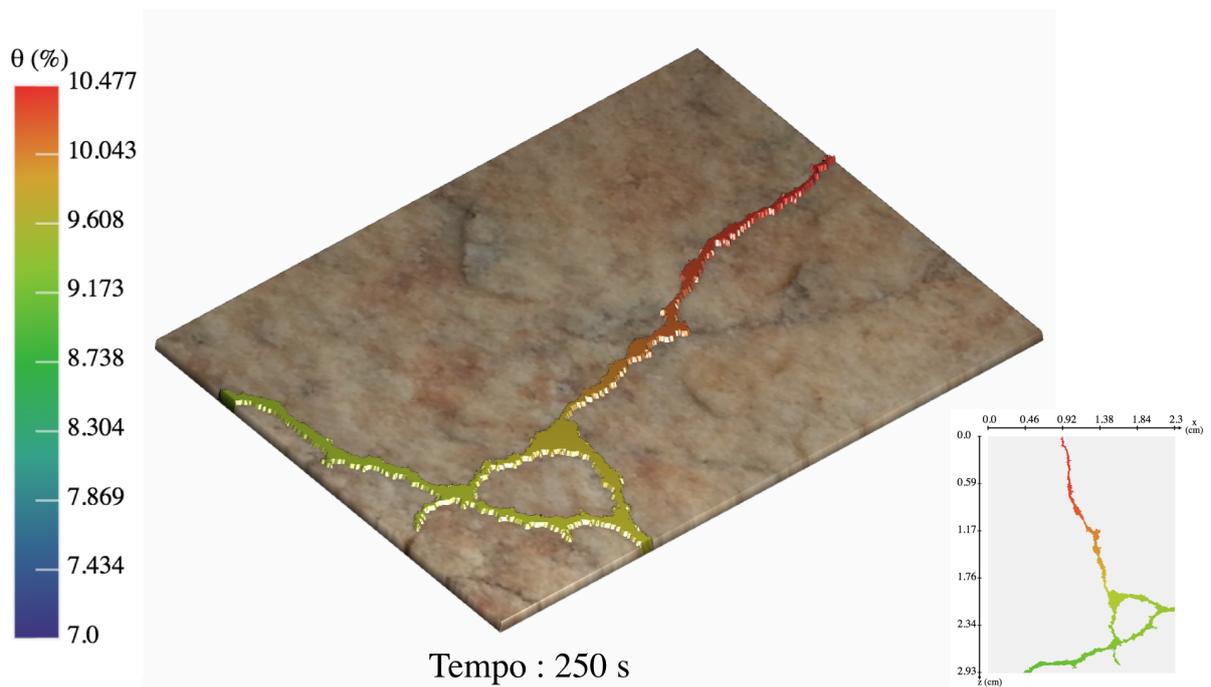


Figura 7.40: Teor de umidade volumétrica na fratura no tempo 250 s.

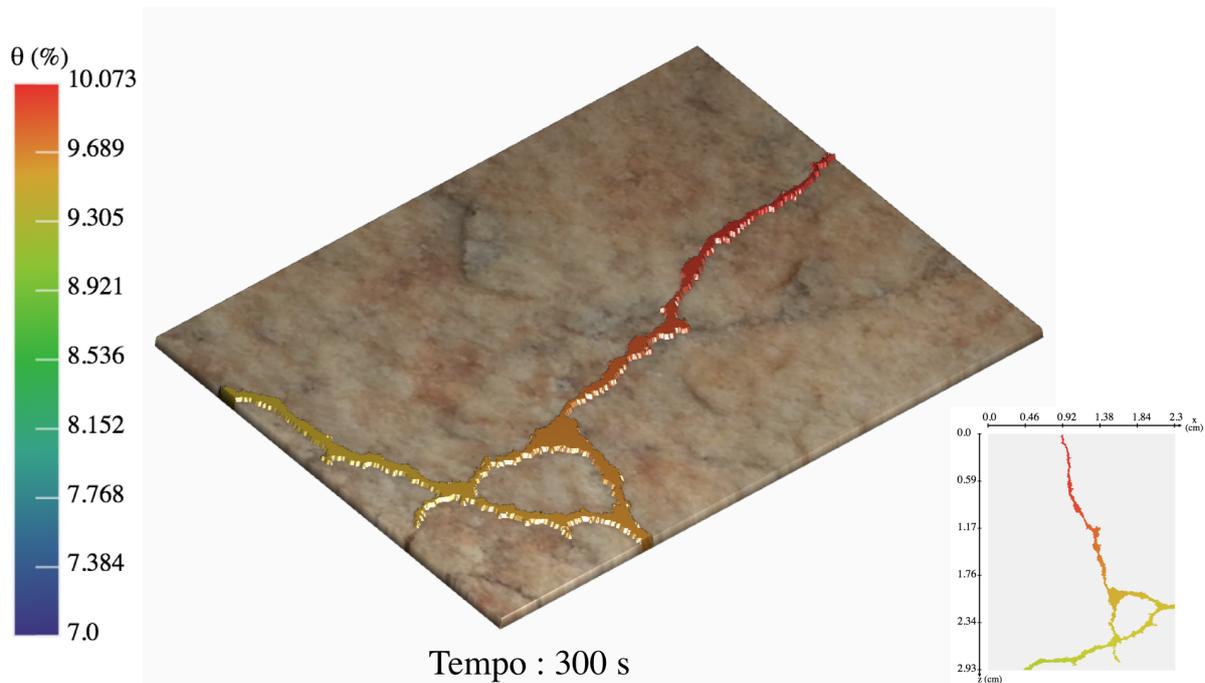


Figura 7.41: Teor de umidade volumétrica na fratura no tempo 300 s.

Como a dimensão da fratura é da ordem de centímetros, dezenas e centenas de segundos produzem mudanças relevantes na configuração do teor de umidade volumétrica. Por isso, alcança-se a estabilidade do problema rapidamente. Assim, a estabilidade do teor de umidade volumétrica se dá por volta de 9,3%, como verificado pela Figura 7.42.

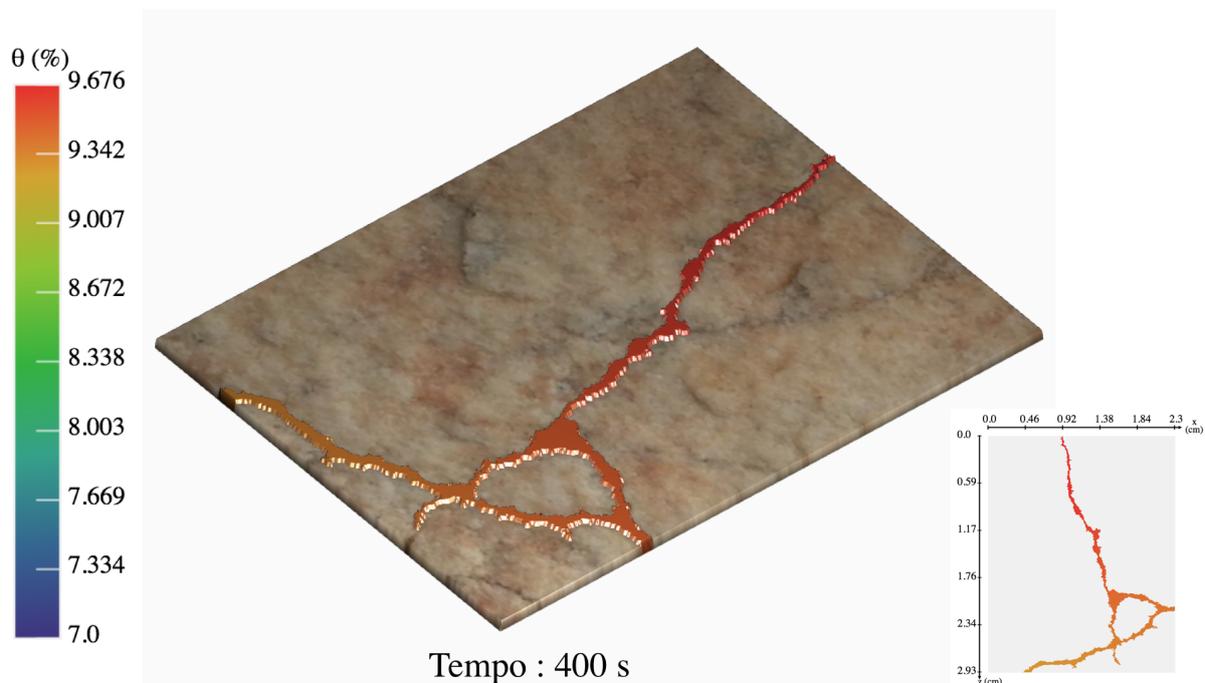


Figura 7.42: Teor de umidade volumétrica na fratura no tempo 400 s.

Depois do tempo de 400 s, o teor de umidade volumétrica passa a mudar lentamente. Os segundos iniciais são extremamente relevantes para compreender o fenômeno de fluxo

não saturado. Nota-se que a partir de 400 s, não há variação significativa das concentrações. Assim, o tempo 1000 s representa uma configuração *quasi finalis*, ou seja, não há variação significativa da Figura 7.43 para os tempos posteriores.

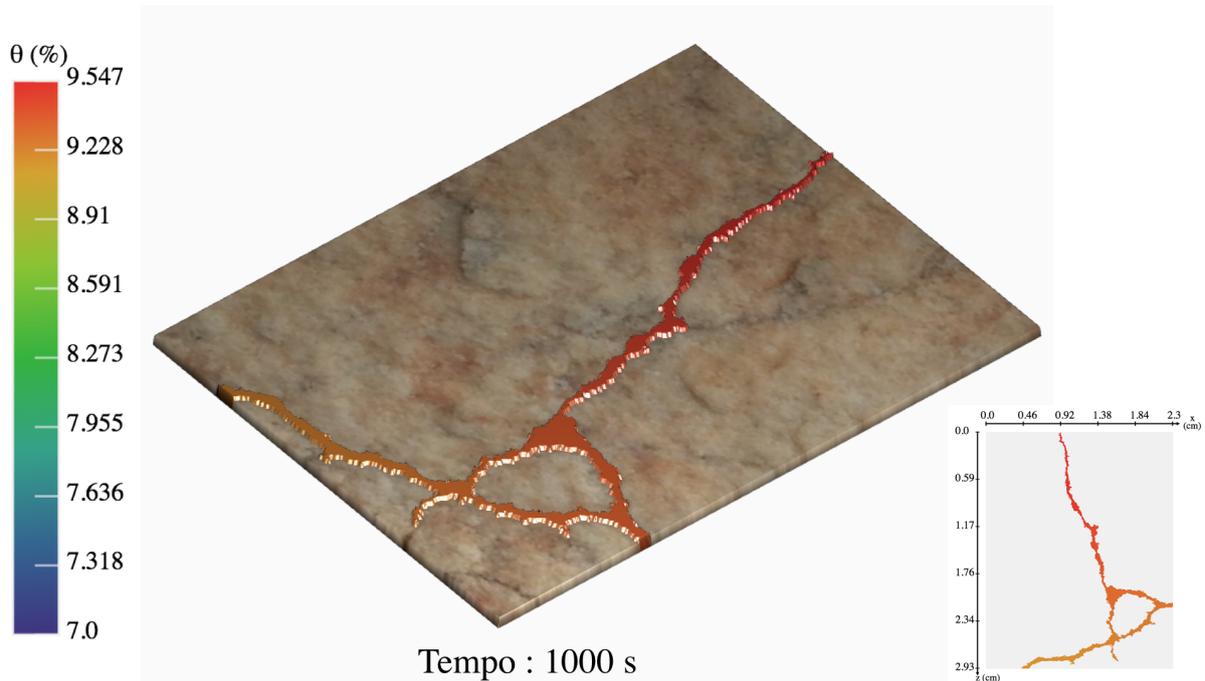


Figura 7.43: Teor de umidade volumétrica na fratura no tempo 1000 s.

Percebe-se, pela simulação analisada, que o fluxo em fraturas pode ocorrer com significativa rapidez e quase alcançar a estabilidade em centenas de segundos. Deve-se compreender, contudo, que a ordem de grandeza da fratura é de centímetros. Certamente, fraturas com maiores dimensões possuem tempos maiores para o desenrolar do fenômeno físico.

Ainda, a natureza do fenômeno revela que caminhos preferenciais são buscados para o transporte do fluido, a fim de que o teor de umidade volumétrica avance o mais rapidamente possível pela fratura. Tal que, não apenas as seções longitudinais são determinantes para o fluxo não saturado, mas também as seções transversais, que permitem maior ou menor fluxo. Isso implica que mesmo que um caminho seja maior longitudinalmente, como o caso do caminho da direita da fratura, o fluido pode ser direcionado para essa região.

Por fim, pode-se notar que qualquer imagem, que passe por simples algoritmos de processamento, serve como domínio computacional para simular o fluxo não saturado. Ou seja, o MDI pode ser aplicado para previsão de fluxo não saturado em locais que podem ser monitorados por câmeras.

7.2.6 Caso anisotrópico para a fratura

Assim como no caso da micro tomografia, decidiu-se fazer uma comparação entre o caso isotrópico e anisotrópico. Assim, demonstra-se não somente a capacidade do MDI 2D de simular casos anisotrópicos, mas também qual a influência da mudança da condutividade hidráulica não saturada no fluxo na fratura.

Para que o efeito da anisotropia fosse facilmente notado, decidiu-se manter a condutividade hidráulica não saturada na direção z e aumentar 3 vezes na direção x . Desse forma, pode-se observar o comportamento da condutividade hidráulica não saturada nas direções x e z pelas Figuras 7.44 e 7.45, respectivamente.

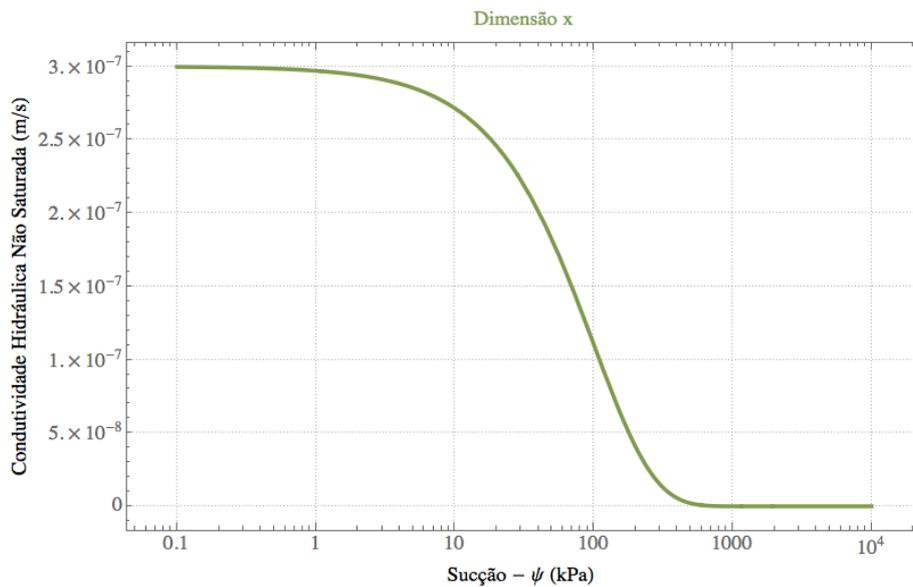


Figura 7.44: Caso anisotrópico da fissura, condutividade hidráulica não saturada em x

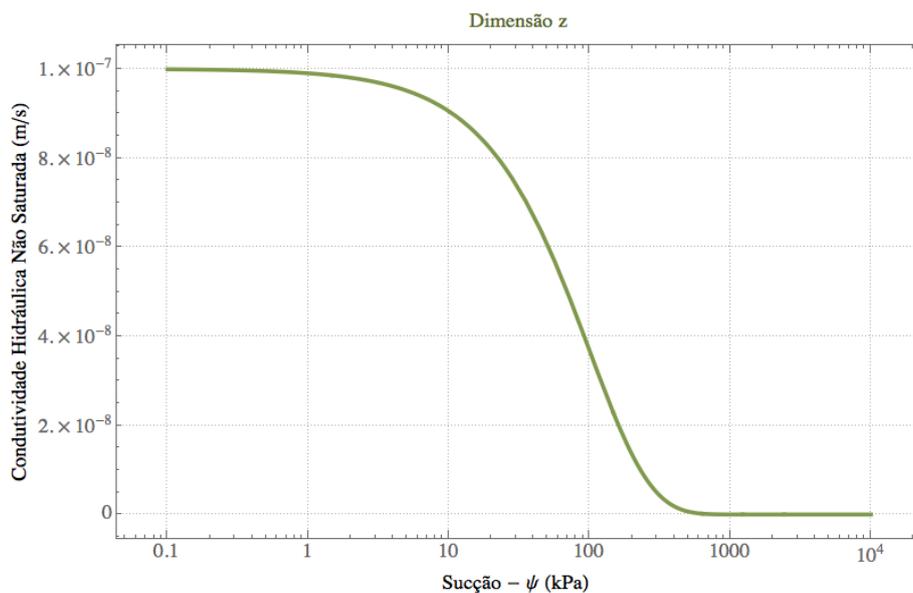


Figura 7.45: Caso anisotrópico da fissura, condutividade hidráulica não saturada em z

Assim, todos parâmetros físicos da Tabela 7.4 são mantidos para o caso anisotrópico, exceto a condutividade hidráulica saturada em x , que passa a ter valor $k_{sx} = 3 \cdot 10^{-7} \text{ m/s}$. Logo, os parâmetros para a simulação numérica são alterados e passam a ter os valores presentes na 7.6.

Tabela 7.6: Parâmetros numéricos da simulação em meio fraturado - caso anisotrópico.

Parâmetros Numéricos			
$\kappa_{0,0}$	0,0597428	α_x^n (m/s)	0
$\kappa_{0,-1}$	0,117532	α_z^n (m/s)	10^{-7}
$\kappa_{1,0}$	0,352597	β_x^n (m^2/s)	$2,04 \cdot 10^{-6}$
$\kappa_{0,1}$	0,117532	β_z^n (m^2/s)	$2,04 \cdot 10^{-6}$
$\kappa_{-1,0}$	0,352597	γ_x^n (m/s)	0
Δx (m)	$41,67 \cdot 10^{-6}$	γ_z^n (m/s)	10^{-8}
Δy (m)	$41,67 \cdot 10^{-6}$	Δt (s)	10^{-4}

No caso anisotrópico, até os 40 s de simulação, o fluxo não saturado ocorre principalmente na direção z . Isso faz com que não haja diferenças notáveis com o caso isotrópico. Assim, percebe-se alguma diferença a partir dos 70 s. Deve-se notar que aos 70 s, o teor de umidade volumétrica, no caso anisotrópico (Figura 7.46), conseguiu avançar mais do que no caso isotrópico. Isso ocorre pois, a partir desse tempo, o teor de umidade volumétrica já alcançou a bifurcação da fratura. O caminho da esquerda dessa bifurcação está orientado mais horizontalmente, permitindo com que a condutividade hidráulica não saturada em x influencie grandemente o fluxo.

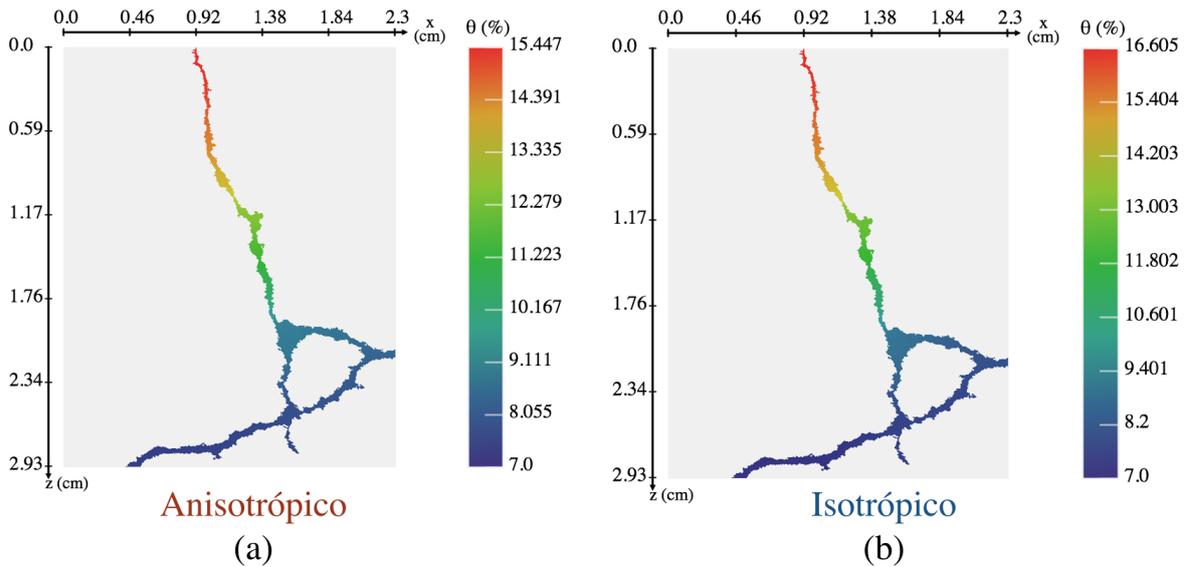


Figura 7.46: Tempo 70 s para (a) caso anisotrópico e (b) isotrópico.

A convergência da fratura, após sua bifurcação, é composta por um caminho vertical à direita e um caminho inclinado, à esquerda. Nesse caminho da esquerda, a condutividade

hidráulica não saturada em x consegue influenciar fortemente o fenômeno. Percebe-se como que o teor de umidade volumétrica no tempo de 100 s para o caso anisotrópico (Figura 7.47) consegue avançar muito mais do que para o mesmo tempo no caso isotrópico (Figura 7.37).

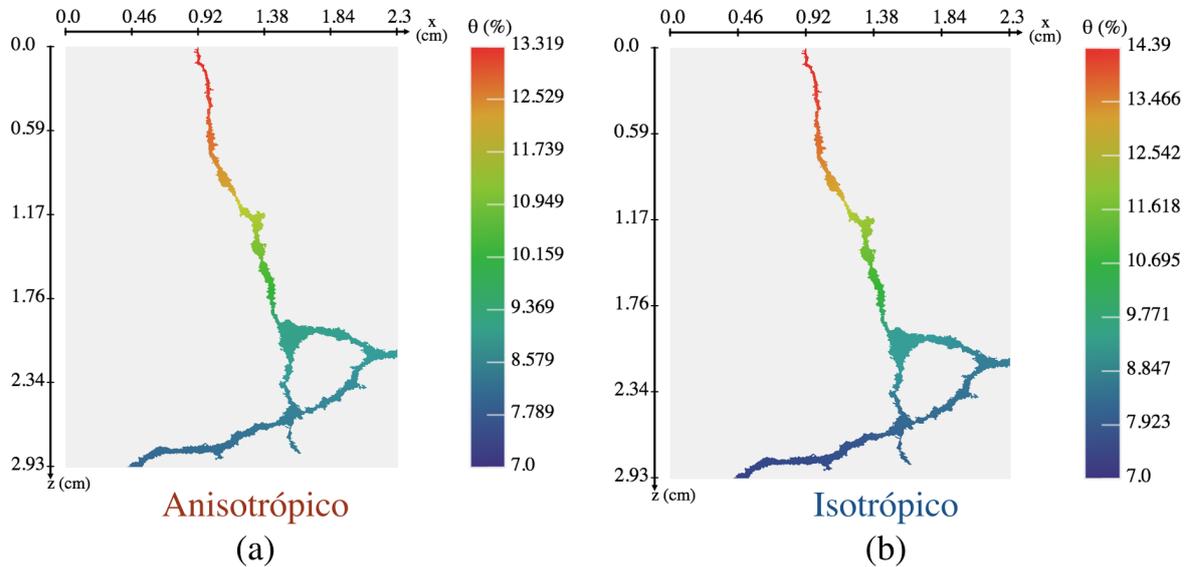


Figura 7.47: Tempo 100 s para (a) caso anisotrópico e (b) isotrópico.

Por mais, deve-se notar que o tempo de 250 s para o caso anisotrópico se assemelha mais ao tempo de 300 s do caso isotrópico (Figura 7.41), do que ao tempo de 250 s do caso isotrópico (Figura 7.48) .

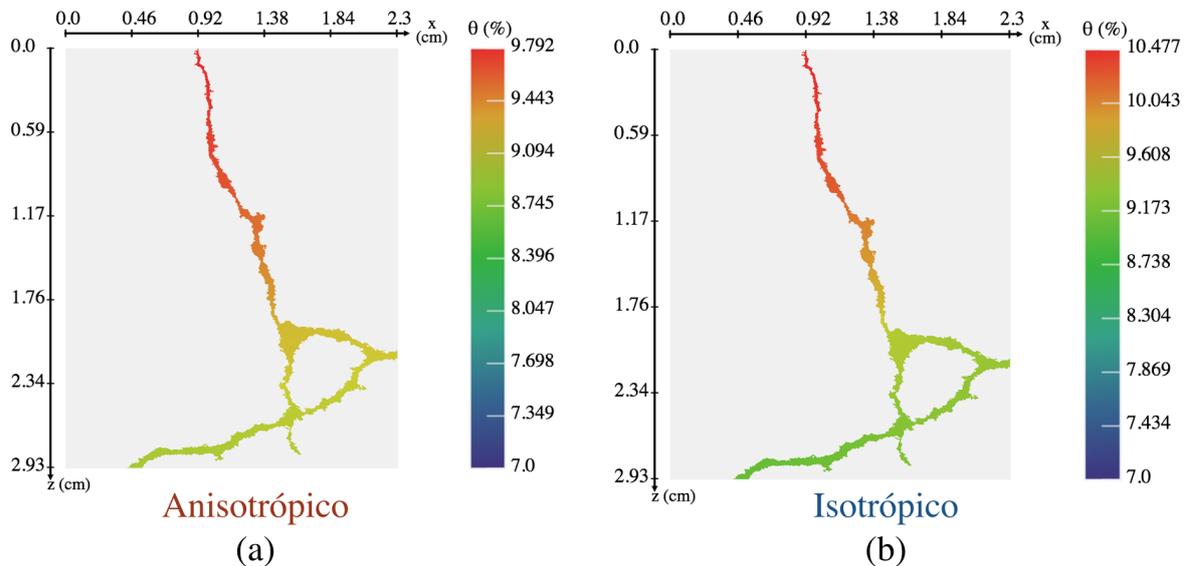


Figura 7.48: Tempo 250 s para (a) caso anisotrópico e (b) isotrópico.

Por fim, aos 1000 s, nota-se que o caso anisotrópico (Figura 7.49) avançou mais. Todavia, a configuração final ainda é bem semelhante à do caso isotrópico, para o mesmo tempo (Figura 7.43).

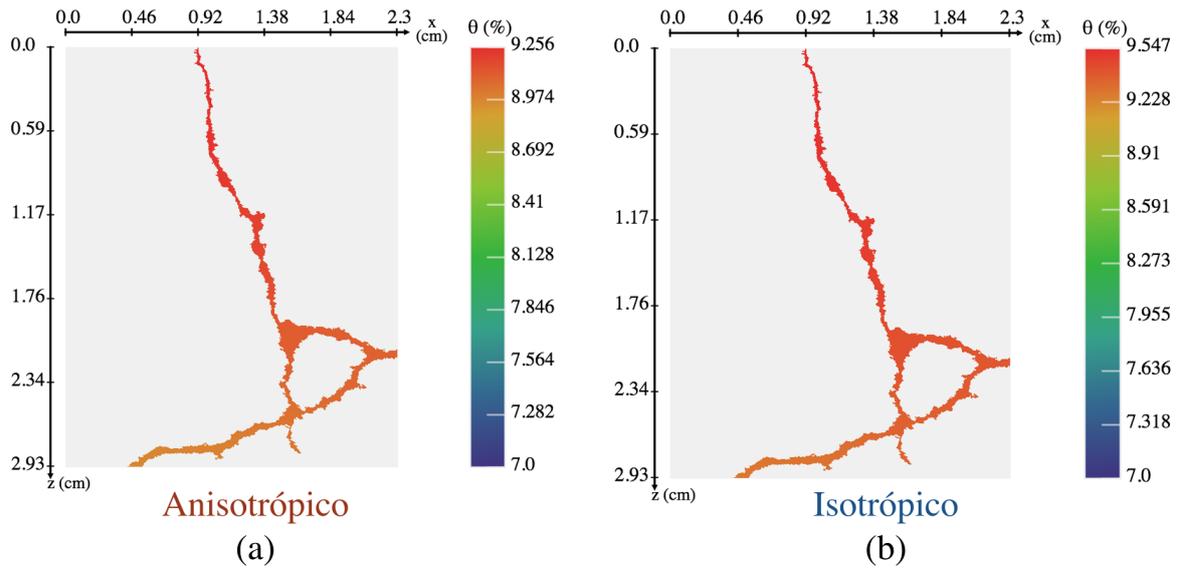


Figura 7.49: Tempo 1000 s para (a) caso anisotrópico e (b) isotrópico.

Entende-se que a grande diferença notada para o caso isotrópico e anisotrópico é quando a fratura diverge e converge. Nesse ponto a divergência passa a ser bem relevante.

8 CONCLUSÃO

8.1 Presentes conclusões

A partir do estudo feito, das teorias desenvolvidas, dos algoritmos implementados, das simulações realizadas e constatações feitas, chega-se às seguintes conclusões:

- Os modelos constitutivos propostos por Cavalcante & Zornberg (2016, *in press*) possuem grande relevância para o estudo de fluxo em meios não saturados. Primeiro, pode-se claramente considerar que os modelos constitutivos representam o comportamento físico do solo, tanto em relação a curva característica, quanto a curva de condutividade hidráulica não saturada. Isso permite que tais curvas sejam ajustadas aos respectivos ensaios e modelem fidedignamente o comportamento não saturado dos solos. Além disso, os parâmetros de ajuste das curvas são poucos, θ_r , θ_s , δ , k_s . Apesar do δ , todos os outros termos das equações constitutivas já foram extensivamente abordados e utilizados na mecânica dos solos não saturados e podem ser obtidos a partir de ensaios geotécnicos. Assim, o único parâmetro de ajuste é o δ . Isso implica que as equações possuem grande significado físico, sendo de fácil compreensão e manipulação matemática.

- Constata-se que ao longo da história das pesquisas em solos não saturados sempre houve dificuldade em encontrar soluções analíticas para a equação de Richards. Dificuldade essa que dificultava tanto a compreensão do fenômeno em si, quanto da validação de métodos numéricos e outras abordagens. Todavia, assim como apresentado no trabalho, os modelos constitutivos propostos por Cavalcante & Zornberg (2016, *in press*) são capazes de linearizar a Equação de Richards. Tal linearização torna a Equação de Richards mais fácil de ser resolvida, sem que haja nenhuma perda, nem no caráter da representação física nem da matemática. Pelo contrário, após a linearização é possível encontrar soluções analíticas para a Equação de Richards. Os modelos constitutivos, quando aplicados à Equação da continuidade são capazes de gerar uma equação parabólica linear, do tipo Difusão-Advecção, que é a Equação de Richards linearizada.

- Uma vez que a Equação de Richards é linearizada por Cavalcante & Zornberg (2016, *in press*), sendo transformada em uma equação do tipo Advecção-Difusão, todas as soluções da Equação de Advecção-Dispersão, que retrata o transporte de contaminantes, pode ser aplicada ao fluxo não saturado. Todavia, ao aplicar-se as soluções da Equação de Advecção-Dispersão, deve-se considerar a mudança das variáveis e parâmetros. Ou seja, a concentração de contaminante passa a representar o teor de umidade volumétrica, o coeficiente de dispersão hidrodinâmico passa a representar o coeficiente de difusividade não saturado e a velocidade de percolação passa a representar o coeficiente de advecção não-saturada. Assim, todas as diversas soluções analíticas obtidas para transporte de contaminantes passam a ser aplicadas a fluxo não saturado. O grande ganho desse fato é que a evolução das soluções analíticas para ambos os campos da geotecnia passam a

caminhar juntos.

- As soluções analíticas, apesar de apresentarem grande utilidade matemática e serem eficientes computacionalmente não resolvem todos os problemas da engenharia geotécnica. Muitos dos problemas de geotecnia envolvem tanto condições de contorno diversas quanto uma geometria altamente rebuscada. As soluções analíticas apresentam dificuldade de resoluções para ambos os casos, sendo principalmente limitadas quanto à geometria do domínio. Por isso, métodos numéricos são de extrema importância, a fim de apresentarem resultados com geometria e contornos mais verossímeis.

- Verificou-se que o MDI 1D foi validado corretamente com o auxílio da solução analítica de Calvacante & Zornberg (2016, *in press*). A comparação entre a solução analítica e o MDI 1D demonstrou que o método numérico apresenta pequenos erros e que é confiável ao descrever fisicamente o fluxo não saturado. Além disso, o MDI 2D foi plenamente validado com o auxílio da solução analítica 2D de Borges & Cavalcante (2016, *in press*). Ao plotar os contornos de teor de umidade volumétrica, verificou-se um excelente ajuste e pequenos erros, comprovando a eficácia do método numérico proposto, em duas dimensões.

- O Método Discreto Iota-delta é um método numérico que consegue responder às demandas decorrentes das limitações analíticas. O propósito do MDI é descrever os domínios tão preciso quanto for possível expressar computacionalmente. Assim, não apenas geometrias lineares e retangulares podem ser utilizadas como domínio, mas também geometrias complexas como as obtidas microtomografias e capturas fotográficas. Como cada nó é tratado individualmente, o MDI consegue simular o fenômeno em domínios tão precisos quanto registros fotográficos ou gerados computacionalmente. Dessa forma, o Método Discreto Iota-delta é capaz de apresentar soluções que traduzam, em termos matemáticos e computacionais, a natureza do fluxo não saturado e seu domínio de forma precisa. Sendo que o MDI é capaz de auxiliar o entendimento do fluxo não saturado em domínios onde a experimentação, observação e avaliação do fenômeno são difíceis de serem realizadas.

- O Método Discreto Iota-delta provou ser um método numérico que possui uma boa acurácia matemática, ajustando-se precisamente às curvas analíticas. Isso não apenas valida a sua convergência, mas demonstra que, de fato, é capaz de representar a natureza do fluxo não saturado assim como as soluções analíticas. Deve-se compreender, todavia, que como todo método numérico há erros. Tais erros são causados tanto pelo refinamento da malha, como pela escolha do passo de tempo. Além disso, o erro se evidencia de forma mais significativa nos casos em que a advecção do fenômeno é mais relevante. Sabe-se que a mesma natureza de erro se aplica às formulações numéricas da Equação de Advecção-Dispersão. Todavia, há técnicas para corrigir esse erro, caso se revele de grande importância, além de que pode ser minimizado a medida que os passos temporais e espaciais são refinados.

- O Método Discreto Iota-delta foi formulado não apenas com o intuito de gerar resul-

tados precisos, em uma perspectiva da física-matemática, mas também fornecer resultados que sejam eficientes computacionalmente. Uma vez que a limitação dos métodos numéricos é o processamento, levou-se em conta na formulação algébrica a escolha dos nós a serem processados. Apesar de ser possível inferir o teor de umidade volumétrica para os nós do contorno em alguns casos, não é de interesse para a compreensão do fenômeno calcular tais nós. Assim, limitou-se a formulação do método numérico à computar o teor de umidade volumétrica no domínio. Isso não implica que os nós do contorno são desprezados, pelo contrário, são plenamente considerados. Todavia, apenas não se calcula o teor de umidade volumétrica. Assim, o tempo de processamento baixa significativamente, impedindo que esforço computacional seja empregado em vão.

- O fluxo não saturado quando simulado nos domínios porosos e fraturados, respectivamente representados pela micro-tomografia e pela fratura, apresenta resultados muito importantes. Percebe-se que a água, ao se mover no solo busca caminhos preferenciais. Tais caminhos preferenciais são determinados tanto pela extensão longitudinal quanto pelas seções transversais. Decerto, o fluido tende a transportar-se pelo caminho mais curto, ou seja, de menor dimensão longitudinal. Todavia, afunilamentos das seções transversais são determinantes ao dificultarem a passagem do fluido. Além disso, percebe-se que o teor de umidade volumétrica no solo é, de fato, apenas uma média das umidades. Pela simulação da tomografia, percebe-se que há sempre regiões isoladas, regiões de difícil acesso e regiões que concentram mais o fluido. Assim, a simulação confirmou, descrevendo matematicamente, a natureza da distribuição do teor de umidade volumétrica no solo.

8.2 Sugestões para pesquisas futuras

Em vista do que já foi realizado, sugere-se para a continuação da pesquisa os seguintes tópicos:

- Formular o MDI para 3 dimensões.
- Adicionar à formulação do MDI a correção da advecção pelo método CIP.
- Desenvolver novos modelos constitutivos de colapso e expansão, levando em consideração a mecânica dos meios contínuos e o fluxo em meios não saturados.
- Encontrar um EDP capaz de descrever, de maneira acoplada, o fluxo em meios não saturados com expansão ou colapso, utilizando os modelos constitutivos desenvolvidos.
- Descrever o MDI para essa nova EDP, considerando agora, uma perspectiva lagrangiana, onde a malha pode-se mover. Isso a fim de observar, computacionalmente, o fluxo causando tensões e deformações no solo.
- Descrever o MDI para outras EDPs relacionadas à Geotecnia e às outras áreas da física-matemática.
- Descrever uma nova EDP válida tanto para a condição saturada quanto para a não saturada, na perspectiva que Cavalcante & Zorneberg (2016, *in press*) fizeram.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Araujo, G.L.S., Palmeira, E.M. & Cunha, R.P. (2009). Behaviour of geosynthetic-encased granular columns in porous collapsible soil. *Geosynthetics International*, Volume 16 Issue 6, Dezembro 2009, 433-451.
- Arfken, G. B. & Weber, H. J. (2005). *Mathematical Methods for Physicists*. 6th edition, Elsevier Academic Press, p. 33.
- Bear, J., Tsang, C-F. & De Marsily G. (2012). *Flow and Contaminant Transport in Fractured Rock*. Academic Press, 1 edition, 560p.
- Buckingham, E. (1907). Studies on the movement of soil moisture. *Bull.* 38, USDA, Bureau of 781 Soils, Washington, DC.
- Causon, D. M. & Mingham, C. G. (2010). *Introductory Finite Difference Methods for PDEs*. Ventus Publishing ApS, ISBN 978-87-7681-642-1.
- Cavalcante, A. L. B. & Zornberg, J. G. (2016). Efficient Approach to Solve transient Unsaturated flow problems part A: Analytical Solutions. (In Press)
- Cavalcante, A.L.B., Ozelim, L.C.S.M., Swamee, P.K., Rathie, P.N. (2013). Explicit numerical iterative methods applied to the three-parameter infiltration equation, *Soils and Rock*, V. x, pp.
- Celia, M. A, Bouloutas, E. T. & Zarba R. L. (1990). "A general Mass-Conservative Numerical Solution for the Unsaturated Flow Equation". *Water Resources Research*, Volume 26, Número 7, p. 1483–1496.
- Chan, T. F. (1984). Stability Analysis of Finite Difference Schemes for the Advection-Diffusion Equation. *SIAM Journal on Numerical Analysis* Volume 21, No. 2, p. 272-284.
- Chen, Jiann-Mou, Tan, Yih-Chi, Chen, Chu-Hui (2003). Analytical solutions of one-dimensional infiltration before and after ponding. *Hydrol. Process* v. 17, p. 815-822.
- Chen, Jiann-Mou, Tan, Yih-Chi, Chen, Chu-Hui, Parlange, J.Y. (2001). Analytical solutions for linearized Richards equation with arbitrary time-dependent surface fluxes. *Water Resour. Res.* v. 37, p. 1091-1093.
- Cortazar, C., Elgueta, M., Rossi, J. D. & Wolanski N. (2008). How to Approximate the Heat Equation with Neumann Boundary Conditions by Nonlocal Diffusion Problems. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, Volume 187, Issue 1, p. 137-156.
- Crestana, S., Mascarenhas, S. e Pozzi-Mucelli, R. S. (1985). Static and dynamic three dimensional studies of water in soil using computed tomographic scanning. *Soil Sci.* 140:326–332.
- Dell'Avanzi, E., Zornberg, J. G., and Cabral, A. (2004). Suction profiles and scale factors for unsaturated flow under increased gravitational field. *Soils and Foundations*, vol. 44, n. 3, p. 79-89.
- Elliott, J. C., Dover, S. D. (1982). X-ray microtomography. *Journal of Microscopy*, 126 (2): 211-213.
- El-Zein, A. (2008). A general approach to the modelling of contaminant transport through composite landfill liners with intact or leaking geomembranes. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, Issue 32, p. 265–287.
- Fredlund, D. G. & Rahardjo, H. (1993). *Soil Mechanics for Unsaturated Soil*. John Wiley & Sons, Inc., 605 Third Avenue, New York, NY 10158-0012. ISBN 0-471-85008-X
- Gerscovicha, D.M.S., Vargas Jr. E.A. & de Campos, T.M.P. (2006). On the evaluation of unsaturated flow in a natural slope in Rio de Janeiro, Brazil. *Engineering Geology*,

- Volume 88, Issues 1–2, 22 Novembro 2006, 23–40.
- Ghasemizadeh, R., Yu, X., Butscher, C., Hellweger, F., Padilla, I. & Alshawabkeh, A. (2015). Equivalent Porous Media (EPM) Simulation of Groundwater Hydraulics and Contaminant Transport in Karst Aquifers. *PLoS ONE* 10(9): e0138954. doi:10.1371/journal.pone.0138954
- Hainsworth, J. M. & Aylmore, L. A. G. (1983). The use of computer assisted tomography to determine spatial distribution of soil water content. *Aust. J. Soil Res.* 21:435–440.
- Halliday, D., Resnick, R. & Walker, J. (2012). *Fundamentos da física, volume 2: gravitação, ondas e termodinâmica*. LTC. Rio de Janeiro. 288 p.
- Herman, G. T. (2009). *Fundamentals of computerized tomography: Image reconstruction from projection*. Springer. Estados Unidos. 300 p.
- Hogarth, W.L., Parlange, J.Y. (2000). Application and improvement of a recent approximate analytical solution of Richards' equation. *Water Resour. Res.*, v. 36, p. 1965-1968.
- Hogarth, W.L., Parlange, J.Y., Braddock, R.D. (1989). First, integrals of the infiltration equation, 2, nonlinear conductivity. *Soil Sci.* v. 148(), p. 165-171.
- Hogarth, W.L., Parlange, J.Y., Norbury, J. (1992). Addendum to "First integrals of the infiltration equation". *Soil Sci.* v. 154, p. 341-343.
- Hsieh, P-F. & Yeh, H-D. (2014). Semi-analytical and approximate solutions for contaminant transport from an injection well in a two-zone confined aquifer system. *Journal of Hydrology*, Volume 519, Part A, p. 1171 - 1176.
- Jones, L. D. & Jefferson, I. (2012). Expansive soils. In: Burland, J., (ed.) *ICE manual of geotechnical engineering*. Volume 1, geotechnical engineering principles, problematic soils and site investigation. London, UK, ICE Publishing, 413-441.
- Morse, P. M. and Feshbach, H. (1953). *Boundary Conditions and Eigenfunctions*. New York, McGraw-Hill, 997 p.
- Narasimhan, T.N. (2004). Darcy's law and unsaturated flow. *Vadose Zone Journal*. Soil Science Society of America, V. 3, p. 1059.
- Ogata, A. & Banks, R.B. (1961). A solution of the differential equation of longitudinal dispersion in porous media. U.S. Geological Survey Professional Paper 411-A, A1-A9.
- Ortigao, J. A., Kochen, R., Farias, M. M. & Assis, A. P. (1996). Tunnelling in Brasília porous clay. *Canadian Geotechnical Journal*, 1996, 33 (4), 565-573, 10.1139/t96-082-304
- Ozisik, N. , Orlande, H.R.B., Colaço, M. J., Cotta R. M., (1994). *Finite Difference Methods in Heat Transfer*, Second Edition . CRC Press, 480 p.
- Ozelim, L.C. de S.M., Cavalcante, A.L.B. & Borges, L.P. de F. (2013 a). Continuum versus Discrete: A Physically Interpretable General Rule For Cellular Automata By Means of Modular Arithmetic. *Complex Systems*. V. 22 (1), pp. 75-99.
- Ozelim, L. C. de S. M.; Cavalcante, A. L. B. e Borges, L. P de F. (2013 b). On the Iota- Delta Function: Universality in Cellular Automata's Representation. *Complex Systems*, vol. 21(4), 269-282.
- Ozelim, L.C. de S.M. (2014). *Concepção e Validação de um Modelo Matemático-Digital para o Meio Poroso por meio de Microtomografia, Autômatos Celulares e Impressões 3D*. Tese de Doutorado, Publicação G.TD-096/2014, Departamento de Engenharia Civil e Ambiental, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 108 p.
- Ozelim, L. C. de S. M.; Cavalcante, A. L. B. & Baetens, J. M. (2016). On the iota-delta function: a link between cellular automata and partial differential equations for

- modeling advection–dispersion from a constant source. Springer US, The Journal of Supercomputing. p. 1-13.
- Pao, C. V. (2013) . Nonlinear Parabolic and Elliptic Equations. Springer, 777 p.
- Parlange, J.Y., Barry, D.A., Parlange, M.B., Hogarth, W.L., Haverkamp, R., Ross, P.J., Ling, L. Steenhuis, T.S. (1997). New approximate analytical technique to solve Richards' equation for arbitrary surface boundary conditions. *Water Resour. Res.* v. 33, p. 903-906.
- Parlange, M.B., Prasad, S.N., Parlange, J.Y., Romkens, M.J.M. (1992). Extension of the Heaslet-Alksne technique to arbitrary soil water diffusivities. *Water Resour. v.* 28, p. 2793-2797.
- Petrovic, A. M., Siebert, J. E. e Rieke, P. E. (1982). Soil bulk density analysis in three dimensions by computed tomographic scanning. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 46:445–450.
- Philip, J.R. (1960). General method of exact solution of the concentration-dependent diffusion equation. *Aust. J. Phys.* V. 13, p. 1-12.
- Rathie, P.N., Swamee, P.K., Cavalcante, A.L.B., Ozelim, L.C. de S.M. (2012). Lagrange's inversion theorem and infiltration. *World Academy of Science, Engineering and Technology*, Vol. 6, pp. 386-391.
- Richards, L.A. (1931). Capillary conduction of liquids through porous mediums. *Journal of Applied Physics* 1, p. 318-333.
- Sander, G.C., Parlange, J.Y., Kuhnelt, V., Hogarth, W.L., Lockington, D., O'Kane, J.P.J. (1988). Exact nonlinear solution for constant flux infiltration. *J. Hydrol.* V. 97, p. 341-346.
- Schweizer, B. (2012). The Richards equation with hysteresis and degenerate capillary pressure. Elsevier, *Journal of Differential Equations* 252. p. 5594-5612.
- Shelton, M. L. (2009). *Hydroclimatology Perspectives and Applications*. Cambridge University Press, Cambridge, UK. 400 p.
- Stock, S. R. (2008). Recent advances in x-ray microtomography applied to materials. *Int. Mater. Rev.* 53:129–181.
- Swamee, P.K., Rathie, P.N., Ozelim, L.C. de S.M. & Cavalcante, A.L.B. (2014). Recent advances on solving the three-parameters infiltration equation. *Journal of Hydrology.* V. 509, pp. 188-192.
- Thomas, J. W. (2010). *Numerical Partial Differential Equations: Finite Difference Methods*. New York, Springer, 437p.
- van Genuchten, M. T., Leij, F. J., Skaggs, T. H., Toride, N., Bradford, S. A. & M. Pontedeiro, E. M. (2013). Exact analytical solutions for contaminant transport in rivers 1. The equilibrium advection-dispersion equation. *Journal of Hydrology and Hydromechanics*, Volume 61, Issue 2, p. 146–160.
- Wang, Q.J., Dooge, J.C.I. (1994). Limiting cases of water fluxes at the land surface. *J. Hydrol.* V. 155, p. 429-440.
- Weir, M. D., Hass, J. & Giordano, F. R. (2009). *Cálculo (George B. Thomas Jr.)*, volume II. São Paulo, Addison Wesley, 647 p.
- Wolfram Research, Inc. (2015). *Mathematica*, Version 10.1, Champaign, IL.
- Zubeldia, E. H. (2013). *Uso dos autômatos celulares bidimensionais e imagens tomográficas na geração de meios porosos artificiais*. Dissertação de Mestrado, Publicação G.DM-231/2013, Departamento de Engenharia Civil e Ambiental, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 93 p.
- Zubeldia, E.H., Ozelim, L.C. de S.M., Cavalcante, A.L.B. & Crestana, S. (2015). Cellular Automata and X-Ray Microcomputed Tomography Images for Generating Artificial

Porous Media. Int. J. Geomech., 10.1061/(ASCE)GM. 1943-5622.0000527, 04015057.

A SOLUÇÃO ANALÍTICA

O presente anexo possui o objetivo de apresentar a solução analítica da formulação utilizada na validação 2D do Método Discreto Iota-delta.

A.1 Definição do Problema

A validação do MDI 2D, assim como descrito, se dá pela comparação entre as soluções analíticas e numérica de um problema bidimensional. Matematicamente, a EDP a ser resolvida é a da Eq. 2.46. Além dessa EDP é necessário definir as equações que regulam o contorno e a condição inicial do problema.

As condições de contorno em z são:

$$\theta(x, 0, t) = \theta_0 \quad (\text{A.1})$$

$$\theta(x, l_z, t) = \theta_0 \quad (\text{A.2})$$

onde:

$$0 \leq z \leq l_z; \quad l_z, \theta_0 \in \Re$$

Além disso, na direção x as condições são:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{\partial \theta(x, z, t)}{\partial x} = 0 \quad (\text{A.3})$$

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} \frac{\partial \theta(x, z, t)}{\partial x} = 0 \quad (\text{A.4})$$

tal que $-\infty < x < \infty$.

Já a condição inicial é dada por:

$$\theta(x, z, 0) = (\theta_i - \theta_0) [H(z) - H(z - b_z)] [H(z + b_x) - H(z - b_x)] + \theta_0 \quad (\text{A.5})$$

onde H é a função Heaviside definida por:

$$H(x) = \frac{1 + \text{sgn}(x)}{2} \quad (\text{A.6})$$

Pode-se compreender, pela Eq. A.5, que a condição inicial do problema é um retângulo de umidade θ_i no centro dos eixos, com o restante do domínio com umidade θ_0 .

Para resolver o problema especificado deve-se separá-lo em dois. O primeiro referente à solução permanente, que não varia com o tempo. E o segundo, referente à solução

homogênea, cujas fronteiras em z possuem valor nulo. De forma que :

$$\theta(x, z, t) = \theta_p(x, z, t) + \theta_h(x, z, t) \quad (\text{A.7})$$

onde $\theta_p(x, z, t)$ é a solução permanente e $\theta_h(x, z, t)$ é a solução homogênea.

A.2 Problema e solução permanente

O problema permanente é aquele capaz de solucionar as condições de contorno em z , mesmo que trivialmente, e que é invariante com o tempo. Assim sendo, pode-se arbitrariamente definir a solução permanente $\theta_p(x, z, t)$ como:

$$\theta_p(x, z, t) = \theta_0 \quad (\text{A.8})$$

A.3 Problema homogêneo

Ao determinar a solução permanente obrigatoriamente define-se o problema homogêneo. Isso implica que, a EDP da Eq. 2.46 pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\theta_p(x, 0, t) + \theta_h(x, 0, t))}{\partial t} = \overline{D}_x \frac{\partial^2(\theta_p(x, 0, t) + \theta_h(x, 0, t))}{\partial x^2} + \\ \overline{D}_z \frac{\partial^2(\theta_p(x, 0, t) + \theta_h(x, 0, t))}{\partial z^2} - \overline{a}_s \frac{\partial(\theta_p(x, 0, t) + \theta_h(x, 0, t))}{\partial z} \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

ou ainda,

$$\frac{\partial\theta_h(x, 0, t)}{\partial t} = \overline{D}_x \frac{\partial^2\theta_h(x, 0, t)}{\partial x^2} + \overline{D}_z \frac{\partial^2\theta_h(x, 0, t)}{\partial z^2} - \overline{a}_s \frac{\partial\theta_h(x, 0, t)}{\partial z} \quad (\text{A.10})$$

Além disso ao substituir a Eq. A.1 na Eq A.7 tem-se:

$$\theta_p(x, 0, t) + \theta_h(x, 0, t) = \theta_0 \quad (\text{A.11})$$

Já fazendo uso da Eq. A.8 na Eq. A.11 obtém-se:

$$\theta_h(x, 0, t) = 0 \quad (\text{A.12})$$

Paralelamente, ao substituir a Eq. A.2 na Eq. A.7, tem-se:

$$\theta_p(x, l_z, t) + \theta_h(x, l_z, t) = \theta_0 \quad (\text{A.13})$$

Fazendo uso da Eq. A.8 na Eq. A.13 chega-se à seguinte expressão:

$$\theta_h(x, l_z, t) = 0 \quad (\text{A.14})$$

As condições de contorno em x podem ser especificadas substituindo a Eq. A.7 na Eq. A.3 :

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{\partial[\theta_p(x, z, t) + \theta_h(x, z, t)]}{\partial x} = 0 \quad (\text{A.15})$$

ou ainda,

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{\partial \theta_h(x, z, t)}{\partial x} = 0 \quad (\text{A.16})$$

e substituindo a Eq. A.7 na Eq. A.4:

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} \frac{\partial[\theta_p(x, z, t) + \theta_h(x, z, t)]}{\partial x} = 0 \quad (\text{A.17})$$

ou ainda,

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} \frac{\partial \theta_h(x, z, t)}{\partial x} = 0 \quad (\text{A.18})$$

Ainda, a Eq. A.7 pode ser substituída na Eq. A.5 ,gerando a seguinte condição inicial para o problema homogêneo:

$$\theta_p(x, z, 0) + \theta_h(x, z, 0) = (\theta_i - \theta_0)[H(z) - H(z - b_z)][H(x + b_x) - H(z - b_x)] + \theta_0 \quad (\text{A.19})$$

ou ainda,

$$\theta_h(x, z, 0) = (\theta_i - \theta_0)[H(z) - H(z - b_z)][H(x + b_x) - H(z - b_x)] \quad (\text{A.20})$$

A.4 Divisão do problema homogêneo

O problema homogêneo pode ser dividido em dois problemas da seguinte forma:

$$\theta_h(x, z, t) = f(x, t)g(z, t) \quad (\text{A.21})$$

Dessa forma, substituindo a Eq. A.21 na Eq. A.10 tem-se a nova formulação EDP que rege o fenômeno:

$$\frac{\partial[f(x, t)g(z, t)]}{\partial t} = \overline{D}_x \frac{\partial^2[f(x, t)g(z, t)]}{\partial x^2} + \overline{D}_z \frac{\partial^2[f(x, t)g(z, t)]}{\partial z^2} - \overline{a}_s \frac{\partial[f(x, t)g(z, t)]}{\partial z} \quad (\text{A.22})$$

$$g(z, t) \frac{\partial f(x, t)}{\partial t} + f(x, t) \frac{\partial g(z, t)}{\partial t} = \overline{D}_x g(z, t) \frac{\partial^2 f(x, t)}{\partial x^2} + \overline{D}_z f(x, t) \frac{\partial^2 g(z, t)}{\partial z^2} - \overline{a}_s f(x, t) \frac{\partial g(z, t)}{\partial z} \quad (\text{A.23})$$

Dividindo todos os termos por $f(x, t)g(z, t)$ tem-se:

$$\frac{1}{f(x, t)} \frac{\partial f(x, t)}{\partial t} + \frac{1}{g(z, t)} \frac{\partial g(z, t)}{\partial t} = \overline{D}_x \frac{1}{f(x, t)} \frac{\partial^2 f(x, t)}{\partial x^2} + \overline{D}_z \frac{1}{g(z, t)} \frac{\partial^2 g(z, t)}{\partial z^2} - \overline{a}_s \frac{1}{g(z, t)} \frac{\partial g(z, t)}{\partial z} \quad (\text{A.24})$$

A.4.1 Definição da $f(x, t)$

Pelo fato das variáveis x, y e t serem independentes entre si, pode-se separar a Eq. A.24 em duas EDPs. A primeira EDP refere-se apenas à direção x e ao tempo t , sendo expressa por:

$$\frac{1}{f(x, t)} \frac{\partial f(x, t)}{\partial t} = \overline{D}_x \frac{1}{f(x, t)} \frac{\partial^2 f(x, t)}{\partial x^2} \quad (\text{A.25})$$

Multiplicando a Eq. A.25 por $f(x, t)$ tem-se:

$$\frac{\partial f(x, t)}{\partial t} = \overline{D}_x \frac{\partial^2 f(x, t)}{\partial x^2} \quad (\text{A.26})$$

Além disso, as condições de contorno da função $f(x, t)$ podem ser especificadas fazendo uso das Equações A.16 e A.18. Substituindo a Eq. A.21 na Eq. A.16 tem-se o contorno à direita como:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{\partial [f(x, t)g(z, t)]}{\partial x} = 0 \quad (\text{A.27})$$

Colocando $g(z, t)$ para fora da derivada:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} g(z, t) \frac{\partial f(x, t)}{\partial x} = 0 \quad (\text{A.28})$$

Considerando que $g(z, t)$ não é uma solução trivial, tem-se que:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{\partial f(x, t)}{\partial x} = 0 \quad (\text{A.29})$$

A condição inicial da função $f(x, t)$ pode ser obtida ao combinar as Equações A.21 e A.20 da seguinte forma:

$$f(x, 0)g(z, 0) = (\theta_i - \theta_0)[H(z) - H(z - b_z)][H(x + b_x) - H(x - b_x)] \quad (\text{A.30})$$

Deve-se notar que a parte direita da Eq. A.30 é composta por três termos. O primeiro termo é uma constante, o segundo é uma função apenas de z e o último é apenas uma função de x . Paralelamente, pode-se perceber que a parte esquerda da Eq. A.30 possui dois, sendo o primeiro apenas uma função de x e o segundo apenas uma função de z . Assim, pode-se igualar o termo da esquerda que é apenas função de x com o termo da direita que também é apenas função de x , da seguinte forma:

$$f(x, 0) = H(x + b_x) - H(z - b_x) \quad (\text{A.31})$$

A.4.2 Resolução de $f(x, t)$

A fim de encontrar uma solução para $f(x, t)$ deve-se usar a transformada de Fourier. A transformada de Fourier é uma transformada integral capaz de mapear uma variável cujos limites são infinitos. No caso, a variável de espaço x que será mapeada pela transformada integral em uma variável w . Assim, tomando a Eq. A.26 tem-se a seguinte aplicação:

$$\mathcal{F} \left[\frac{\partial f(x, t)}{\partial t} \right] = \mathcal{F} \left[\overline{D}_x \frac{\partial^2 f(x, t)}{\partial x^2} \right] \quad (\text{A.32})$$

ou ainda,

$$\frac{\partial \hat{f}(w, t)}{\partial t} = -w^2 \overline{D}_x \hat{f}(w, t) \quad (\text{A.33})$$

Considerando que:

$$\hat{f}(w, t) = C(w) e^{kt} \quad (\text{A.34})$$

então, a Eq. A.33 pode ser reescrita como:

$$k C(w) e^{kt} = -w^2 \overline{D}_x C(w) e^{kt} \quad (\text{A.35})$$

Isso implica que:

$$k = -w^2 \overline{D}_x \quad (\text{A.36})$$

Logo, $\hat{f}(w, t)$ pode ser reescrita combinando as Equações A.34 e A.36:

$$\hat{f}(w, t) = C(w) e^{-w^2 \overline{D}_x t} \quad (\text{A.37})$$

Sabe-se que $\hat{f}(w, 0)$ é a transformada de Fourier da função $f(x, t)$, já que:

$$\hat{f}(w, 0) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(s, 0) e^{iws} ds \quad (\text{A.38})$$

Logo, combinando as Equações A.38 e A.37, é possível obter a seguinte expressão para $C(w)$:

$$C(w) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(s, 0) e^{iws} ds \quad (\text{A.39})$$

Assim, a função $\hat{f}(w, t)$ pode ser reescrita pela combinação da Eq. A.34 e Eq. A.39, da seguinte forma:

$$\hat{f}(w, t) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(s, 0) e^{iws} ds e^{kt} \quad (\text{A.40})$$

Aplicando a transformada inversa de Fourier à Eq. A.40 tem-se:

$$\mathcal{F}^{-1} \left[\hat{f}(w, t) \right] = \mathcal{F}^{-1} \left[\sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(s, 0) e^{iws} ds e^{-w^2 D_x t} \right] \quad (\text{A.41})$$

assim,

$$f(x, t) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(s, 0) e^{iws} ds e^{-w^2 D_x t} e^{-iwx} dw \quad (\text{A.42})$$

ou ainda,

$$f(x, t) = \frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(s, 0) \left[\int_{-\infty}^{\infty} e^{-w^2 D_x t} e^{iws(s-x)} dw \right] ds \quad (\text{A.43})$$

portanto,

$$f(x, t) = \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{4\pi} \sqrt{D_x t}} \int_{-\infty}^{\infty} f(s, 0) e^{\frac{-(s-x)^2}{4D_x t}} ds \quad (\text{A.44})$$

Substituindo a condição inicial da Eq. A.31 na Eq. A.44 tem-se:

$$f(x, t) = \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{4\pi} \sqrt{D_x t}} \int_{-\infty}^{\infty} [H(s + b_x) - H(s - b_x)] e^{\frac{-(s-x)^2}{4D_x t}} ds \quad (\text{A.45})$$

Integrando a Eq. A.45 encontra-se a expressão final de $f(x, t)$:

$$f(x, t) = \frac{1}{2} \left[\text{erf} \left(\frac{b_x - x}{\sqrt{4\pi D_x t}} \right) + \text{erf} \left(\frac{b_x + x}{\sqrt{4\pi D_x t}} \right) \right] \quad (\text{A.46})$$

onde erf é a função erro dada por:

$$\text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt \quad (\text{A.47})$$

A.4.3 Definição de $g(z, t)$

Já a outra EDP refere-se apenas à direção z e ao tempo t , sendo designada como:

$$\frac{1}{g(z, t)} \frac{\partial g(z, t)}{\partial t} = \overline{D}_z \frac{1}{g(z, t)} \frac{\partial^2 g(z, t)}{\partial z^2} - \overline{a}_s \frac{1}{g(z, t)} \frac{\partial g(z, t)}{\partial z} \quad (\text{A.48})$$

Multiplicando a Eq. A.48 por $g(z, t)$ tem-se:

$$\frac{\partial g(z, t)}{\partial t} = \overline{D}_z \frac{\partial^2 g(z, t)}{\partial z^2} - \overline{a}_s \frac{\partial g(z, t)}{\partial z} \quad (\text{A.49})$$

Além disso, pode-se descrever as condições de contorno para $g(z, t)$. Fazendo uso das Equações A.21 e A.12, a condição de contorno em $z = 0$ é:

$$f(x, t)g(0, t) = 0 \quad (\text{A.50})$$

e sabendo que $f(x, t)$ não é uma solução trivial, tem-se:

$$g(0, t) = 0 \quad (\text{A.51})$$

Já fazendo uso das Equações A.21 e A.2, a condição de contorno em $z = l_z$ é:

$$f(x, t)g(l_z, t) = 0 \quad (\text{A.52})$$

Logo, pelo mesmo motivo, tem-se:

$$g(l_z, t) = 0 \quad (\text{A.53})$$

Retomando a Eq. A.30 pode-se inferir a condição inicial de $g(z, t)$, sendo expressa por:

$$g(z, 0) = (\theta_i - \theta_0)[H(z) - H(z - b_z)] \quad (\text{A.54})$$

A.4.4 Resolução de $g(z, t)$

Uma vez que o domínio em z é finito, o caminho mais fácil para solucionar a função $g(z, t)$ é realizar a separação de variáveis. A separação de variáveis tem a intenção de tornar $g(z, t)$ um produto de uma função espacial por uma função temporal da seguinte forma:

$$g(z, t) = u(z)h(t) \quad (\text{A.55})$$

Assim, substituindo-se a Eq. A.55 na Eq. A.49, tem-se:

$$\frac{\partial[u(z)h(t)]}{\partial t} = \overline{D}_z \frac{\partial^2[u(z)h(t)]}{\partial z^2} - \overline{a}_s \frac{\partial[u(z)h(t)]}{\partial z} \quad (\text{A.56})$$

ou também,

$$u(z) h'(t) = \overline{D}_z u''(z) h(t) - \overline{a}_s u'(z) h(t) \quad (\text{A.57})$$

Dividindo a Eq. A.57 por $u(z) h(t)$, encontra-se:

$$\frac{h'(t)}{h(t)} = \overline{D}_z \frac{u''(z)}{u(z)} - \overline{a}_s \frac{u'(z)}{u(z)} \quad (\text{A.58})$$

A.4.5 Resolução de $u(z)$

Para encontrar uma solução para $u(z)$ basta igualar a parte referente a z da Eq. A.58 à uma constante λ , como a seguir:

$$\overline{D}_z \frac{u''(z)}{u(z)} - \overline{a}_s \frac{u'(z)}{u(z)} = \lambda \quad (\text{A.59})$$

Considerando que $u(z)$ pode genericamente ser descrita por:

$$u(z) = c_1 e^{c_2 z} ; \quad c_1, c_2 \in \Re \quad (\text{A.60})$$

a Eq. A.59 pode ser reescrita como:

$$\overline{D}_z c_2^2 - \overline{a}_s c_2 - \lambda = 0 \quad (\text{A.61})$$

Assim, c_2 pode ser isolada, considerando que $\overline{a}_s^2 + 4 \overline{D}_z \lambda < 0$, da seguinte maneira:

$$c_2 = \frac{\overline{a}_s \pm i \sqrt{|\overline{a}_s^2 + 4 \overline{D}_z \lambda|}}{2 \overline{D}_z} \quad (\text{A.62})$$

ou ainda:

$$c_2 = k_1 \pm i k_2 \quad (\text{A.63})$$

onde:

$$k_1 = \frac{\overline{a}_s}{2 \overline{D}_z} \quad (\text{A.64})$$

$$k_2 = \frac{\sqrt{|\overline{a}_s^2 + 4 \overline{D}_z \lambda|}}{2 \overline{D}_z} \quad (\text{A.65})$$

Considerando as Equações A.60, A.64 e A.65, $u(z)$ pode ser descrita como:

$$u(z) = a_1 e^{k_1 z} \sin(k_2 z) + a_2 e^{k_1 z} \cos(k_2 z) \quad (\text{A.66})$$

Substituindo $z = 0$ na Eq. A.66, tem-se:

$$u(0) = a_1 \cdot 0 + a_2 \cdot 1 \quad (\text{A.67})$$

Agora, avaliando a Eq. A.51 e a Eq. A.67 e considerando que a função $h(t)$ não é identicamente nula a fim de que não redunde em uma solução trivial, sabe-se que $g(0, t) = u(0)$, logo:

$$a_1 \cdot 0 + a_2 \cdot 1 = 0 \quad (\text{A.68})$$

Implicando no fato que:

$$a_2 = 0 \quad (\text{A.69})$$

Por mais, ao considerar $z = l_z$ na Eq. A.66, tem-se:

$$u(l_z) = a_1 e^{k_1 l_z} \sin(k_2 l_z) \quad (\text{A.70})$$

Todavia, ao considerar a Eq. A.53 e a Eq. A.70, é possível obter a seguinte expressão:

$$\sin(k_2 l_z) = 0 \quad (\text{A.71})$$

O que indica que:

$$k_2 = \frac{n \pi}{l_z} \quad (\text{A.72})$$

Dessa forma, considerando as Equações A.65 e A.72, a constante λ pode ser expressa por:

$$\lambda = -\frac{a_s^2}{4 D_z} - \frac{D_z n^2 \pi^2}{l_z^2} \quad (\text{A.73})$$

Por último, $u(z)$ pode ser descrita, considerando as Equações A.66, A.69 e A.72, como:

$$u(z) = a_1 e^{k_1 z} \sin\left(\frac{n\pi}{l_z} z\right) \quad (\text{A.74})$$

A.4.6 Resolução de $h(t)$

Para encontrar uma solução para a função $h(t)$ é necessário considerá-la como:

$$h(t) = b_1 e^{b_2 t} ; \quad b_1, b_2 \in \Re \quad (\text{A.75})$$

Substituindo a Eq. A.75 na Eq. A.58, pode-se encontrar a seguinte expressão:

$$b_2 = \lambda \quad (\text{A.76})$$

Assim, a função $h(t)$ pode ser expressa por:

$$h(t) = b_1 e^{\lambda t} \quad (\text{A.77})$$

A.4.7 Combinando $u(z)$ e $h(t)$

Para encontrar a expressão final de $g(z, t)$ é necessário unir as funções $u(z)$ e $h(t)$, combinando as Equações A.55, A.74 e A.77, da seguinte forma:

$$g(z, t) = C_n e^{\lambda t} e^{k_1 z} \sin\left(\frac{n\pi}{l_z} z\right); \quad C_n \in \Re \quad (\text{A.78})$$

Considerando $t = 0$, a Eq. A.78 pode ser descrita como:

$$g(z, 0) = C_n e^{k_1 z} \sin\left(\frac{n\pi}{l_z} z\right) \quad (\text{A.79})$$

Igualando a Eq. A.79 à condição inicial descrita pela Eq. A.54 encontra-se a seguinte expressão:

$$C_n \sin\left(\frac{n\pi}{l_z} z\right) = e^{-k_1 z} (\theta_i - \theta_0) [H(z) - H(z - b_z)] \quad (\text{A.80})$$

Logo, deve-se encontrar a série de Fourier que descreve a expressão à direita da Eq. A.80. Para isso, basta calcular os coeficientes C_n , que podem ser definidos pela integral a seguir:

$$C_n = \frac{2}{l_z} \int_0^{l_z} e^{-k_1 z} (\theta_i - \theta_0) [H(z) - H(z - b_z)] \sin\left(\frac{n\pi}{l_z} z\right) dz \quad (\text{A.81})$$

Solucionando a integral da Eq. A.81 encontra-se a seguinte expressão:

$$C_n = \frac{4\bar{D}_z e^{-\frac{\bar{a}_s b_z}{2\bar{D}_z}} \left(-2\pi\bar{D}_z n e^{\frac{\bar{a}_s b_z}{2\bar{D}_z}} + \bar{a}_s l_z \sin\left(\frac{\pi b_z n}{l_z}\right) + 2\pi\bar{D}_z n \cos\left(\frac{\pi b_z n}{l_z}\right) \right)}{\bar{a}_s^2 l_z^2 + 4\pi^2 \bar{D}_z^2 n^2} \quad (\text{A.82})$$

A.5 Expressão final da θ_h

Uma vez definidas as funções $f(x, t)$ e $g(z, t)$, basta combiná-las para encontrar a solução homogênea. Assim, considerando as Equações A.20, A.46 e A.78, a função θ_h pode ser descrita como

$$\theta_h(x, z, t) = \frac{(\theta_i - \theta_0)}{2} \left[\operatorname{erf}\left(\frac{b_x - x}{\sqrt{4\pi t}}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{b_x + x}{\sqrt{4\pi t}}\right) \right] \sum_{n=1}^{\infty} C_n e^{\lambda t} e^{k_1 z} \sin\left(\frac{n\pi}{l_z} z\right) \quad (\text{A.83})$$

A.6 Expressão final da θ

Para obter a expressão final de θ é necessário somar as soluções permanente e homogênea. A partir das Equações A.7 , A.8 e A.83, a função θ pode ser descrita por:

$$\theta(x, z, t) = \theta_0 + \frac{(\theta_i - \theta_0)}{2} \left[erf \left(\frac{b_x - x}{\sqrt{4\pi t}} \right) + erf \left(\frac{b_x + x}{\sqrt{4\pi t}} \right) \right] \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ C_n e^{\lambda t} e^{k_1 z} \sin \left(\frac{n\pi}{l_z} z \right) \right\} \quad (\text{A.84})$$

Pode-se ainda expressar a Eq. A.84 sem o uso de variáveis intermediárias. Para isso, basta considerar as Equações A.73, A.64, A.82 e A.84, da seguinte forma:

$$\theta(x, z, t) = \theta_0 + \frac{(\theta_i - \theta_0)}{2} \left[erf \left(\frac{b_x - x}{\sqrt{4\pi D_x t}} \right) + erf \left(\frac{b_x + x}{\sqrt{4\pi D_x t}} \right) \right] \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \left[\frac{4\bar{D}_z e^{-\frac{\bar{a}_s b_z}{2\bar{D}_z}} \left(-2\pi \bar{D}_z n e^{\frac{\bar{a}_s b_z}{2\bar{D}_z}} + \bar{a}_s l_z \sin \left(\frac{\pi b_z n}{l_z} \right) + 2\pi \bar{D}_z n \cos \left(\frac{\pi b_z n}{l_z} \right) \right)}{\bar{a}_s^2 l_z^2 + 4\pi^2 \bar{D}_z^2 n^2} \right] \left[n\pi \cos \left(\frac{n\pi}{l_z} b_z \right) + \frac{l_z \bar{a}_s}{2\bar{D}_z} \sin \left(\frac{n\pi}{l_z} b_z \right) \right] \exp \left[-t \left(\frac{\bar{a}_s^2}{4\bar{D}_z} + \frac{D_z n^2 \pi^2}{l_z^2} \right) \right] \exp \left[\frac{\bar{a}_s z}{2\bar{D}_z} \right] \sin \left(\frac{n\pi}{l_z} z \right) \right\} \quad (\text{A.85})$$