

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

**MODELAGEM FRACIONÁRIA DO FLUXO DE ÁGUA EM MEIO POROSO NÃO
SATURADO**

PEDRO VICTOR SERRA MASCARENHAS

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

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO EM GEOTECNIA

**PUBLICAÇÃO: G.DM 309/2018
BRASÍLIA/DF: JULHO/2018**

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

**MODELAGEM FRACIONÁRIA DO FLUXO DE ÁGUA EM MEIO POROSO NÃO
SATURADO**

PEDRO VICTOR SERRA MASCARENHAS

**DISSERTAÇÃO DE MESTRADO SUBMETIDA AO DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA 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. LUCIANO SOARES DA CUNHA, D.Sc. (UnB)
(EXAMINADOR INTERNO)



PROF. SÍLVIO CRESTANA, D.Sc. (Embrapa Instrumentação/USP-São Carlos)
(EXAMINADOR EXTERNO)

DATA: BRASÍLIA/DF, 12 DE JULHO DE 2018.

FICHA CATALOGRÁFICA

MASCARENHAS, PEDRO VICTOR SERRA

Modelagem Fracionária do Fluxo de Água em Meio Poroso Não Saturado [Distrito Federal] 2018

xix, 128p., 297 mm (ENC/FT/UnB, Mestre, Geotecnia, 2018)

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

- | | |
|---------------------------|---------------------------|
| 1. Solos Não Saturados | 2. Cálculo Fracionário |
| 3. Distribuições estáveis | 4. Processos Estocásticos |
| I. ENC/FT/UnB | II. Mestre |

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

Mascarenhas, P.V.S. (2018). Modelagem Fracionária do Fluxo de Água em Meio Poroso Não Saturado. Dissertação de Mestrado, Publicação G.DM-309/2018, Departamento de Engenharia Civil e Ambiental, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 128 p.

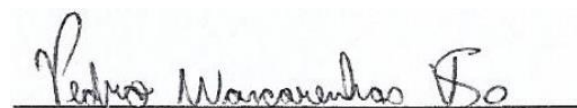
CESSÃO DE DIREITOS

NOME DO AUTOR: Pedro Victor Serra Mascarenhas

TÍTULO DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO: Modelagem Fracionária do Fluxo de Água em Meio Poroso Não Saturado

GRAU / ANO: Mestre / 2018

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.



Pedro Victor Serra Mascarenhas

SQN 107 bloco B Apt. 203

70743-020 - Brasília/DF – Brasil

AGRADECIMENTOS

Não existe, nesta vida, objetivo que se tenha alcançado sem conhecer pessoas, ser influenciado e ajudado por elas. Por isto, dedico esta dissertação a todos aqueles que, de alguma forma, contribuíram com a construção das ideias aqui presentes.

Primeiramente, gostaria de agradecer a todos os colegas e amigos do programa de pós-graduação em geotecnia da UnB do segundo semestre de 2016 e do primeiro semestre de 2017, que trilharam metade desta jornada de forma conjunta comigo e cujas discussões e conversas foram fundamentais para minha formação como engenheiro geotécnico.

Gostaria de agradecer a todos os colegas e amigos do grupo de pesquisa GeoFluxo, cujos conselhos acerca de apresentações e ideias apresentadas foram fundamentais para dar forma a meus pensamentos.

Gostaria de agradecer ao meu orientador, professor André Brasil, pela orientação e amizade formada durante todo o processo. Foram muitas horas de discussões. Sem seu olhar crítico e meticuloso acerca deste trabalho, talvez estivesse entregando um produto muito diferente do apresentado.

Agradeço a meus amigos da Federação Sul Americana de Krav Maga. Às vezes, tomar ares novos e sair da zona de conforto é tudo o que é preciso para ir mais além.

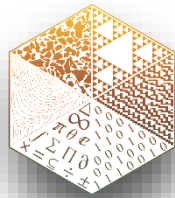
Agradeço à minha família, cuja convivência e apoio foram fundamentais para terminar mais uma etapa nesta vida, principalmente ao meu núcleo familiar: meu irmão, Daniel; minha mãe, Carla; e meu pai, Pedro. Também gostaria de agradecer ao meu padrasto Marcus.

Por último, gostaria de agradecer a meu amor, Gabriela Ortiga Pedrosa de Lima Nogueira: sem seu companheirismo e incentivo, talvez eu não fosse ser metade do que sou.



Universidade de Brasília- UnB
Programa de Pós-Graduação em Geotecnia
Dissertação de Mestrado em Geotecnia

Modelagem Fracionária do Fluxo de Água em Meio Poroso



Aluno: Pedro Victor Serra Mascarenhas

Orientador: André Luís Brasil Cavalcante, P.hD.

Grupo GeoFluxo

Brasília – 2018

MODELAGEM FRACIONÁRIA DO FLUXO DE ÁGUA EM MEIO POROSO NÃO SATURADO

RESUMO

A modelagem do fluxo de água em solo não saturados é fundamentada nos conceitos tradicionais de mecânica dos meios contínuos. Mais precisamente, os modelos gerados são descritos por equações diferenciais parciais na forma da equação de Richards. Estas equações podem apresentar dificuldades quanto ao seu emprego a casos práticos, que são causados por diversas razões: limitações quanto ao número de ensaios, escolha do modelo de ajuste dos parâmetros do solo adequado. Nesta dissertação, busca-se um modelo matemático que permita abordar o fenômeno usando soluções analíticas com melhor precisão. Para isto, emprega-se o cálculo fracionário. Desta forma, o trabalho propõe a reinterpretação do fenômeno de fluxo de água em solos não saturados por argumentos estatísticos acerca da movimentação da água em escala microscópica. Esta perspectiva torna possível definir uma nova equação de fluxo que apresenta operadores diferenciais de ordem não inteira: a equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária. Propõe-se três soluções analíticas para esta nova equação fundamentadas na sua contrapartida inteira, chamadas de solução de solução simétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária, solução assimétrica simples da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária e solução assimétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária. Utiliza-se estas soluções e a solução da equação de Richards clássica linear para interpolar dados experimentais de fluxo não saturado em colunas de solo monitoradas em tempo real. Além disto, propõe-se um esquema numérico inédito fundamentado no método *Cubic Interpolated Pseudo-particle* (CIP) e no método de Grünwald-Letnikov trasladado para resolver esta equação, que é validado usando as soluções analíticas propostas. Também se compara a abordagem numérica usando o método CIP com o método de diferenças finitas tradicional.

Palavras-chave: Solos Não Saturado; Cálculo Fracionário; Distribuições estáveis; Processos Estocásticos

FRACTIONAL MODELLING OF UNSATURATED WATER FLOW IN POROUS MEDIUM

ABSTRACT

The mathematical modelling of water unsaturated seepage through soils is based on the traditional concepts of continuum mechanics. More precisely, partial differential equations in the form of the Richards' equation. These equations can be difficult to apply to engineering studies due to many reasons: limitations regarding the number of experiments available, right choice of the fitting model for the soil properties. In this study, a mathematical model that allows the employ of analytical solutions with good precision. The fractional calculus is used to achieve this goal. Thus, this study proposes a new interpretation of the seepage phenomenon through the perspective of stochastic processes. This new perspective allows one to define a new unsaturated seepage equation with non-integer order: The fractional water unsaturated seepage equation. Three constructed analytical solution are given to the new equation. The three fractional solutions and the solution of the integer order Richards' equation are employed to fit experimental data of water seepage flow through soil columns monitored in real time. In addition, a new numerical scheme based on the Cubic Interpolated Pseudo-Particle Method (CIP) along with the shifted Grünwald-Letnikov method that solves the fractional water unsaturated seepage equation is proposed and validated using the analytical solutions proposed. A comparison between the new numerical scheme using the CIP method and the traditional numerical scheme using finite difference method is made.

Key words: Unsaturated Soils; Fractional Calculus; Stable Distributions; Stochastic Processes

Sumário

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	A Importância da Mecânica dos Solos Não Saturados.....	1
1.2	Motivação	2
1.3	Cálculo Fracionário	3
1.4	Objetivos.....	5
1.5	Estrutura da Dissertação	6
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	8
2.1	Fluxo em Meios Porosos Não Saturados	8
2.2	Processos estocásticos	15
2.3	Perspectiva estocástica acerca do movimento de água em meios porosos.....	20
2.4	Críticas ao modelo clássico	22
2.5	Distribuições estáveis e teorema do limite central generalizado	24
2.6	Cálculo Fracionário	32
2.7	Não-Localidade da Derivada Fracionária e Lei de Fick	34
2.8	Soluções Analíticas das Equações Simplificadas.....	38
2.9	Métodos Numéricos.....	40
3	MATERIAIS E MÉTODOS	43
3.1	Materiais	43
3.2	Métodos	45
3.2.1	Formulação do Novo Modelo	46
3.2.2	Solução Analítica do Modelo.....	47
3.2.3	Validação com Resultados Experimentais	47
3.2.4	Solução Numérica	49
4	RESULTADOS	51
4.1	Formulação do modelo	51
4.2	Soluções analíticas.....	54

4.3	Validação das soluções analíticas com dados da curva característica.....	56
4.3.1	Solução da equação de fluxo de água em solos não saturados clássica	57
4.3.2	Solução simétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária 62	
4.3.3	Solução assimétrica simples da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária.....	65
4.3.4	Solução assimétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária.....	67
4.4	Validação das soluções analíticas a partir dos parâmetros de fluxo.....	70
4.4.1	Solução da equação de fluxo de água em solos não saturados clássica	71
4.4.2	Solução simétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária 73	
4.4.3	Solução assimétrica simples da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária.....	76
4.4.4	Solução assimétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária.....	79
4.5	Estudo das soluções numéricas.....	82
4.5.1	Método de Grünwald-Letnikov Transladado e diferenças finitas.....	82
4.5.2	Método de Grünwald-Letnikov Transladado e CIP	87
4.5.3	Comparação dos métodos.....	92
5	CONCLUSÃO	100
5.1	Sugestão de estudos futuros.....	102
	REFERÊNCIAS	104
A.	APÊNDICE: TEOREMA CENTRAL DO LIMITE E MOVIMENTO BROWNIANO 109	
B.	APÊNDICE: DA EQUAÇÃO DE LANGEVIN PARA A EQUAÇÃO DE RICHARDS. 113	
C.	APÊNDICE: DEFINIÇÕES DE DERIVADAS FRACIONÁRIAS.....	117

D. APÊNDICE: DEDUÇÃO ESTOCÁSTICA DA EQUAÇÃO FRACIONÁRIA DE FLUXO NÃO SATURADO.	123
E. APÊNDICE: DEDUÇÃO DO CRITÉRIO DE ESTABILIDADE - EQ. (3.35).....	126

Lista de Figuras

Figura 2.1 – Volume diferencial tomado para o balanço de massa de fluxo no solo.....	8
Figura 2.2 – Exemplo de trajetórias na curva característica do solo.....	12
Figura 2.3 – Exemplo de curva de condutividade hidráulica não-saturada.	12
Figura 2.4 – Exemplo de <i>random walk</i> efetuado por 1000 partículas após 100 passo.	18
Figura 2.5 – Figuras ilustrando fluxo superficial pelo volume do elemento tomado na definição prática de divergente (modificado de Benson, 1998): (a) Fluxo total através da superfície; (b) Fluxo médio através da superfície.....	24
Figura 2.6 – Efeito do parâmetro α no formato da distribuição estável.	26
Figura 2.7 – Efeito do parâmetro β no formato da distribuição estável.	26
Figura 2.8 – Efeito do parâmetro σ no formato da distribuição estável.	27
Figura 2.9 – Efeito do parâmetro μ no formato da distribuição estável.	28
Figura 2.10 – Representação do fluxo limitado a células vizinhas causado pela dispersão fickiana.	35
Figura 2.11 – Esquema de fluxo não local.	36
Figura 2.12 – Ilustração do conceito de convolução das derivadas fracionárias.	38
Figura 3.1 – Aparato experimental do ensaio em coluna de grandes dimensões (120cm), desenho esquemático modificado de Azevedo (2016).....	43
Figura 3.2 – Curva característica do solo estudado.....	44
Figura 3.3 – Medições do avanço de frente de umidade obtidas da coluna de solo.	45
Figura 3.4 – Resumo dos passos da metodologia a ser executada durante a confecção da dissertação.	45
Figura 3.5 – Esquema da formulação do modelo fracionário de fluxo de água em meio poroso não saturado.....	46
Figura 3.6 – Esquema da formulação da solução analítica modelo fracionário de fluxo de água em meio poroso não saturado.....	47
Figura 3.7 – Esquema da formulação da solução analítica modelo fracionário de fluxo de água em meio poroso não saturado.....	48
Figura 3.8 – esquema do estudo dos métodos numéricos para os problemas fracionários.....	50
Figura 4.1 – Ajuste do modelo de curva caracterísitca de Cavalcante e Zornberg (2017a) para a curva característica ($\delta= 0,01939 Pa^{-1}$).....	58
Figura 4.2 – Curva de condutividade hidráulica não saturada do modelo de sucção de Cavalcante e Zornberg (2017a).	58

Figura 4.3 – Ajuste usando modelos de Cavalcante e Zornberg (2017a) para solução da equação de fluxo de água em solos não saturados clássica: (a) TDR 1; (b) TDR 2; (c) TDR 3; (d) TDR 4; (e) Todos os ajustes.....	60
Figura 4.4 – Resíduos dos ajustes usando modelos de Cavalcante e Zornberg (2017a) para solução da equação de fluxo de água em solos não saturados clássica: (a) TDR 1; (b) TDR 2; (c) TDR 3; (d) TDR 4.....	61
Figura 4.5 – Ajustes usando modelos de Cavalcante e Zornberg (2017a) para solução simétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária: (a) TDR 1; (b) TDR 2; (c) TDR 3; (d) TDR 4; (e) Todos os ajustes.	63
Figura 4.6 – Resíduos dos ajustes usando modelos de Cavalcante e Zornberg (2017a) para solução simétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária: (a) TDR 1; (b) TDR 2; (c) TDR 3; (d) TDR 4.....	64
Figura 4.7 – Ajustes usando modelos de Cavalcante e Zornberg (2017a) para solução assimétrica simples da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária: (a) TDR 1; (b) TDR 2; (c) TDR 3; (d) TDR 4; (e) Todos os ajustes.....	66
Figura 4.8 – Resíduos dos ajustes usando modelos de Cavalcante e Zornberg (2017a) para solução assimétrica simples da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária: (a) TDR 1; (b) TDR 2; (c) TDR 3; (d) TDR 4.	67
Figura 4.9 – Ajustes usando modelos de Cavalcante e Zornberg (2017a) para solução assimétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária: (a) TDR 1; (b) TDR 2; (c) TDR 3; (d) TDR 4; (e) Todos os ajustes.....	69
Figura 4.10 – Resíduos dos ajustes usando modelos de Cavalcante e Zornberg (2017a) para solução assimétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária: (a) TDR 1; (b) TDR 2; (c) TDR 3; (d) TDR 4.....	70
Figura 4.11 – Ajustes usando modelos com parâmetros hidráulicos determinados no próprio ajuste e solução da equação de fluxo de água em solos não saturados clássica: (a) TDR 1; (b) TDR 2; (c) TDR 3; (d) TDR 4; (e) Todos os ajustes.....	72
Figura 4.12 – Resíduos dos ajustes usando modelos com parâmetros hidráulicos determinados no próprio ajuste e solução da equação de fluxo de água em solos não saturados clássica: (a) TDR 1; (b) TDR 2; (c) TDR 3; (d) TDR 4.....	73
Figura 4.13 – Ajustes usando modelos com parâmetros hidráulicos determinados no próprio ajuste e solução simétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária: (a) TDR 1; (b) TDR 2; (c) TDR 3; (d) TDR 4; (e) Todos os ajustes.....	75

Figura 4.14 – Resíduos dos ajustes usando modelos com parâmetros hidráulicos determinados no próprio ajuste e solução simétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária: (a) TDR 1; (b) TDR 2; (c) TDR 3; (d) TDR 4.....	76
Figura 4.15 – Ajustes usando modelos com parâmetros hidráulicos determinados no próprio ajuste e solução assimétrica simples da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária: (a) TDR 1; (b) TDR 2; (c) TDR 3; (d) TDR 4; (e) Todos os ajustes.....	78
Figura 4.16 – Resíduos dos ajustes usando modelos com parâmetros hidráulicos determinados no próprio ajuste e solução assimétrica simples da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária: (a) TDR 1; (b) TDR 2; (c) TDR 3; (d) TDR 4.....	79
Figura 4.17 – Ajustes usando modelos com parâmetros hidráulicos determinados no próprio ajuste e solução assimétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária: (a) TDR 1; (b) TDR 2; (c) TDR 3; (d) TDR 4; (e) Todos os ajustes.	81
Figura 4.18 – Ajustes usando modelos com parâmetros hidráulicos determinados no próprio ajuste e solução assimétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária: (a) TDR 1; (b) TDR 2; (c) TDR 3; (d) TDR 4.	82
Figura 4.19 – Método diferenças finitas e Grünwald-Letnikov transladado com $\beta=0$; $\Delta z=0,5 m$ e $\Delta t=0,5$ dia: (a) $\alpha=1,9$; (b) $\alpha=1,7$; (c) $\alpha=1,5$; (d) $\alpha=1,3$;.....	84
Figura 4.20 – Método diferenças finitas e Grünwald-Letnikov transladado com $\alpha=1,7$; $\Delta z=0,5 m$ e $\Delta t=0,5$ dia: (a) $\beta=-1$; (b) $\beta=-0,5$; (c) $\beta=0$; (d) $\beta=0,5$; (e) $\beta=1$	86
Figura 4.21 – Método CIP e Grünwald-Letnikov transladado com $\beta=0$; $\Delta z=0,5 m$ e $\Delta t=0,5$ dia: (a) $\alpha=1,9$; (b) $\alpha=1,7$; (c) $\alpha=1,5$; (d) $\alpha=1,3$	90
Figura 4.22 – Método CIP e Grünwald-Letnikov transladado com $\alpha=1,7$; $\Delta z=0,5 m$ e $\Delta t=0,5$ dia: (a) $\beta=-1$; (b) $\beta=-0,5$; (c) $\beta=0$; (d) $\beta=0,5$; (e) $\beta=1$	91
Figura 4.23 – Método CIP e Grünwald-Letnikov transladado com $\alpha=1,1$; $\beta=0$; $\Delta z=0,25 m$ e $\Delta t=0,5$ dia.	96
Figura 4.24 – Método CIP e Grünwald-Letnikov transladado com $\alpha=1,1$; $\beta=0$; $\Delta z=0,45 m$ e $\Delta t=1$ dia.	97
Figura 4.25 – Método CIP e Grünwald-Letnikov transladado com $\alpha=1,1$; $\beta=0$; $\Delta z=0,5 m$ e $\Delta t=1$ dia. Coeficiente de dispersão aumentado para $0,455 m^2/dia$ temporariamente.....	98
Figura 4.26 – Método CIP e Grünwald-Letnikov transladado com $\alpha=1,5$; $\beta=-1$; $\Delta z=0,5 m$ e $\Delta t=1$ dia.	99
Figura 4.27 – Método CIP e Grünwald-Letnikov transladado com $\alpha=1,5$; $\beta=1$; $\Delta z=0,5 m$ e $\Delta t=1$ dia.	99

Figura C.1 – Comparação entre a evolução dos pesos de Grünwald e seu limite assintótico como uma função potência.....	120
---	-----

Lista de Tabelas

Tabela 4.1 – Parâmetros de ajuste usando o Modelo de Cavalcante e Zornberg (2017a) e solução da equação de fluxo de água em solos não saturados clássica.	59
Tabela 4.2 – Parâmetros de ajuste usando o Modelo de Cavalcante e Zornberg (2017a) e solução simétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária.	62
Tabela 4.3 – Parâmetros de ajuste usando o Modelo de Cavalcante e Zornberg (2017a) e solução assimétrica simples da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária.	65
Tabela 4.4 – Parâmetros de ajuste usando o Modelo de Cavalcante e Zornberg (2017a) e solução assimétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária.	68
Tabela 4.5 – Parâmetros de ajuste e solução da equação de fluxo de água em solos não saturados clássica.	71
Tabela 4.6 – Parâmetros de ajuste e solução simétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária com parâmetros hidráulicos a determinados diretamente no ajuste.	74
Tabela 4.7 – Parâmetros de ajuste e solução assimétrica simples da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária.	77
Tabela 4.8 – Parâmetros de ajuste e solução assimétrica da equação solução assimétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária.	80
Tabela 4.9 - Estabilidade do método de Grünwald-Letnikov associado a diferenças finitas para diferentes valores de α	83
Tabela 4.10 – Desvios máximos e médios para o método de diferenças finitas em atraso combinado com o método Grünwald-Letnikov transladado e diferentes valores de α	85
Tabela 4.11 - Estabilidade do método de Grünwald-Letnikov associado a diferenças finitas para diferentes valores de β	85
Tabela 4.12 – Desvios máximos e médios para o método de diferenças finitas em atraso combinado com o método Grünwald-Letnikov transladado e diferentes valores de β	87
Tabela 4.13 – Desvios máximos e médios para o método CIP combinado com o método Grünwald-Letnikov transladado e diferentes valores de α	89
Tabela 4.14 - Estabilidade do método de Grünwald-Letnikov associado ao CIP para diferentes valores de α	90
Tabela 4.15 – Desvios máximos e médios para o método CIP combinado com o método Grünwald-Letnikov transladado e diferentes valores de β	92
Tabela 4.16 - Estabilidade do método de Grünwald-Letnikov associado ao CIP para diferentes valores de β	92

Tabela 4.17 – Comparação entre os métodos CIP e diferenças finitas para diferentes valores de índice de estabilidade e mantendo o coeficiente de assimetria constante.	93
Tabela 4.18 – Comparação entre os métodos CIP e diferenças finitas para diferentes valores de coeficiente de assimetria e mantendo o índice de estabilidade constante.	95

Lista de Símbolos

Símbolo	Significado	Unidades
a_s	Velocidade advectiva	$[LT^{-1}]$
$B(t)$	Força aleatória dada por um ruído branco de média zero e desvio padrão unitário	$[MLT^{-2}]$
cor	fator de correção da velocidade	adimensional
$D_z(\theta)$	Coefficiente de dispersão da água no solo na direção z	$[L^2T^{-1}]$
D_z^*	D_z^* é o coeficiente de dispersão molecular no solo	$[L^2T^{-1}]$
${}^C D_z^\alpha$	Operador de derivada fracionária no sentido de Caputo à direita	[adimensional]
${}^C D_R^\alpha$	Operador de derivada fracionária no sentido de Caputo à esquerda	[adimensional]
${}^{RL} D_z^\alpha$	Operador de derivada fracionária no sentido de Riemann-Liouville à esquerda	[adimensional]
${}^{RL} D_R^\alpha$	Operador de derivada fracionária no sentido de Riemann-Liouville à esquerda	[adimensional]
$E[x]$	Momento ou valor esperado de x	adimensional
$f_z(z; \alpha, \beta, \sigma, \mu)$	Função de densidade de probabilidade estável com parâmetros $(\alpha, \beta, \sigma, \mu)$	adimensional
F_X	Função de distribuição acumulada de X	adimensional
\mathbf{i}	Vetor de gradiente hidráulico	adimensional
\mathbf{J}	Vetor de fluxo de densidade de massa	$[ML^{-2}T^{-1}]$
\mathbf{J}_{adv}	Parcela advectiva do vetor de fluxo de densidade de massa	$[ML^{-2}T^{-1}]$
\mathbf{J}_{dif}	Parcela difusiva do vetor de fluxo de densidade de massa	$[ML^{-2}T^{-1}]$
g	Aceleração da gravidade	$[MLT^{-2}]$
$H(z)$	Polinômio cúbico de Hermite	adimensional
\mathbf{k}	Tensor de permeabilidade	$[LT^{-1}]$
k_{ij}	componente (i, j) do tensor de permeabilidade	$[LT^{-1}]$

k_s	Condutividade hidráulica saturada	$[LT^{-1}]$
$L(t)$	força aleatória dada por uma distribuição estável padrão de Lévy com parâmetros $(\alpha, \beta, 0, \sigma^\alpha)$	$[MLT^{-2}]$
m	Massa	$[M]$
M_j	Massa de partículas contida em um volume j	$a[M]$
\mathbf{n}	Vetor normal a uma superfície	adimensional
p	Probabilidade de um passo na direção positiva do <i>random walk</i>	adimensional
$P[Z_j \leq z]$	Função de distribuição acumulada de Z	adimensional
q	Probabilidade de um passo na direção positiva do <i>random walk</i>	adimensional
S	Superfície	$[L^2]$
S_n	Soma de n variáveis aleatórias iid	adimensional
R	Taxa de saltos do <i>random walk</i>	$[T^{-1}]$
u_a	Poropressão do ar	$[MT^{-2}L^{-1}]$
u_w	Poropressão da água	$[MT^{-2}L^{-1}]$
\mathbf{v}_w	Vetor de velocidade instantânea da água	$[LT^{-1}]$
v_i	Componente de velocidade instantânea na direção i	$[LT^{-1}]$
V	Volume	$[L^3]$
w_j	Peso de Grünwald	adimensional
Z	Variável aleatória	adimensional
α	Índice de estabilidade da distribuição estável	adimensional
α_L	Coefficiente de tortuosidade do meio	$[L]$
β	Parâmetro de assimetria da distribuição estável	adimensional
δ	Parâmetro de ajuste do modelo de Cavalcante e ZornBerg (2017a)	$[M^{-1}T^2L^1]$
$\delta(z)$	Delta de Dirac	adimensional
$\partial^\alpha / \partial z^\alpha$	Operador de derivação fracionária de ordem α	adimensional
ϕ	Carga hidráulica da água	$[L]$

Φ_j	Função potência	adimensional
γ_w	Peso específico da água	$[MT^{-2}L^{-2}]$
$\Gamma(x)$	Função gama	adimensional
μ_i	Momento de ordem i de uma variável aleatória	adimensional
θ	Teor de umidade volumétrico	adimensional
θ_i	Teor de umidade volumétrico inicial	adimensional
θ_o	Teor de umidade volumétrico na fronteira	adimensional
θ_r	Teor de umidade volumétrico residual	adimensional
θ_s	Teor de umidade volumétrico na saturação	adimensional
ρ_w	Massa específica da água	$[ML^{-3}]$
σ	Desvio padrão	adimensional
σ^2	Variância	adimensional
ξ	Coefficiente de fricção	$[MT^{-1}]$
ψ	Sucção total	$[MT^{-2}L^{-1}]$

1 INTRODUÇÃO

1.1 A Importância da Mecânica dos Solos Não Saturados

O estudo da movimentação de fluidos em meios porosos ocorre frequentemente em grandes áreas da engenharia. Na geotecnia, alguns exemplos incluem estudar a movimentação de água para averiguar a eficiência do barramento em obras de contenção hidráulica e determinar como a resistência de um talude varia quando se altera o teor de umidade volumétrica nele contido. A percolação em meios porosos, no contexto geotécnico, diz respeito à movimentação de água no solo. Na maioria dos casos em que é necessário estudar a movimentação de água em meios porosos, assume-se que a água preenche totalmente os vazios do solo, configurando um transporte em condições saturadas. Não obstante, muitas são as situações em que o transporte de água no solo não ocorre nestas situações, sendo a presença de ar no solo um importante fator que afeta a velocidade e trajetória da água.

Existem situações em que considerar o meio saturado pode levar a inconsistências na engenharia. Nestes casos, as soluções são superdimensionadas ou simplesmente ineficazes no contexto em que se encontram. Portanto, a mecânica dos solos saturados fornece comportamentos incoerentes com o que é observado. Pode-se citar alguns exemplos práticos em que isto ocorre. A variação da permeabilidade dos materiais particulados sob diferentes teores volumétricos de água pode atrapalhar o desempenho de camadas drenantes formando barreira contra outros fluidos. O fenômeno da expansibilidade e colapsibilidade dos solos são altamente dependentes da variação do teor de umidade volumétrica do solo. Variações da resistência ao cisalhamento dos solos pela variação da sucção dependem da variação da quantidade de água no solo.

A movimentação da água nos solos e em situação não saturada ocorre frequentemente na natureza e os fenômenos listados são de grande interesse para a geotecnia. Por exemplo, a mudança da resistência dos materiais sob a variação do teor de umidade volumétrica é de interesse para averiguar como se comporta o fator de segurança de um talude. Isto é, inclusive, uma situação bastante frequente na região sudeste do Brasil, onde sazonalmente grandes massas de terra rompem com a chegada das chuvas e causam perdas materiais e humanas.

Deve-se enfatizar que a ocorrência de expansões ou colapsos de solos associados a movimentação de água é causa de grandes perdas materiais ao redor do mundo (Fredlund e Rahardjo, 1993). Neste sentido, torna-se de fundamental importância abandonar a hipótese de

meio saturado para que se possa, com precisão e eficácia, adotar soluções de engenharia mais precisas.

1.2 Motivação

Tradicionalmente, as teorias de fluidos envolvem a aplicação dos conceitos de mecânica dos meios contínuos para a descrição do movimento. O transporte em meio poroso não foge esta regra e seus conceitos dependem fortemente da hipótese de que as propriedades do fluido e meio variam continuamente ao longo do espaço (Aris, 1990).

Para que se possa aplicar esta hipótese, deve ser possível atribuir ao domínio de análise um volume elementar representativo (Aris, 1990). Este elemento, por definição, é pequeno o suficiente para que, relativo ao tamanho do domínio, possa ser tratado de forma diferencial. Isto permite supor a variação contínua das propriedades do meio e sua decomposição em um conjunto de volumes elementares representativos. Além disto, o elemento deve também ser grande o suficiente para que possa ser tratado como homogêneo. Em outras palavras, deve ser um tamanho estatisticamente representativo das propriedades do domínio em seu interior. Estas duas propriedades aparentemente paradoxais são fundamentais para que se possa aplicar os conceitos de mecânica dos meios contínuos. Esta hipótese tem sido muito bem-sucedida em suas aplicações de engenharia e explicação dos fenômenos físicos macroscópicos.

Além disso, a teoria usada atualmente é fortemente fundamentada em equações diferenciais parciais e no conceito tradicional de derivada e, por isto, apresenta algumas limitações (Wheatcraft e Meerschaert, 2008).

A modelagem da percolação de fluidos em meios porosos, bem como quaisquer outras modelagens usando mecânica dos meios contínuos, leva em conta quatro princípios físicos fundamentais: a equação de conservação de massa, conservação de momento linear, conservação de momento angular e conservação de energia (Fredlund e Rahardjo, 1993). Os modelos de percolação partem inicialmente da equação de conservação de massa e, posteriormente, introduz-se os outros princípios físicos nesta equação para que se tenha a equação diferencial que rege o fenômeno. Qualquer relação entre variáveis que não esteja estabelecida entre estes princípios e é necessária para se ter um sistema de equações determinado é dada por meio de relações constitutivas, usualmente postas na forma de equações diferenciais.

Uma das formas de se obter a equação de conservação de massa é por meio da consideração do balanço de uma função de densidade de fluxo em um volume elementar representativo. Esta

função de fluxo de densidade é escrita em um ponto da superfície deste volume e, no restante do volume, ela é obtida por meio do desenvolvimento de séries de Taylor parciais ao redor deste ponto inicial dado. Ao se tomar este procedimento, é usual assumir que, por se tratar de um elemento diferencial, qualquer termo de ordem 2 ou maior da série de Taylor pode ser seguramente desprezado. Este tratamento é essencial, porque manter termos de ordem superior tornaria o problema demasiadamente complexo para ser tratado de forma viável com as ferramentas numéricas e analíticas atuais (Wheatcraft e Meerschaert, 2008).

A solução das equações diferenciais parciais geradas é de difícil obtenção. Não pouco frequente, é necessário introduzir simplificações para resolvê-las, seja de forma numérica, com menos simplificações, ou analítica, com mais simplificações. A introdução destas simplificações aliadas às próprias propriedades dos operadores diferenciais delas muitas vezes geram resultados não condizentes com o observado em campo. A presença de caminhos preferenciais e barreiras no caminho do fluxo pode, por exemplo, não ser captada pela equação e gerar resultados práticos diferentes do esperado. Isto ocorre frequentemente em solos demasiadamente heterogêneos.

O conceito de heterogeneidades nesta dissertação é diferente daquele mais empregado no contexto de geotecnia. Por heterogeneidades geotécnicas, entende-se que o domínio pode ser dividido em regiões de solo que são homogêneas, mas heterogêneas entre si. Isto acontece em escalas de observação maiores. Quanto ao conceito de heterogeneidades aplicada a esta dissertação, supõe-se que a trajetória do fluido pelos caminhos percolados dentro do solo está submetida a variações em suas características. Em outras palavras, o conceito aqui aplicado diz respeito a uma escala de observação menor do que aquela usada no contexto geotécnico.

Portanto, torna-se conveniente abordar o problema de fluxo por outra perspectiva para solos heterogêneos. Para isto, busca-se obter equações com operadores diferenciais com algumas propriedades a mais. Estes operadores são objeto de estudo do cálculo fracionário.

1.3 Cálculo Fracionário

Cálculo Fracionário é a teoria matemática que trata de integrais e derivadas de ordem arbitrária, podendo esta ordem ser real ou até mesmo complexa (Podlubny, 1999). As origens do cálculo fracionário datam da mesma época do cálculo diferencial e integral tradicional.

Durante alguns séculos, este tema permaneceu pouco abordado por se mostrar aparentemente sem aplicações práticas. Todavia, novas pesquisas e resultados práticos mostram um crescente interesse na teoria como uma alternativa à modelagem de fenômenos em diversas áreas,

incluindo a engenharia. Desde 1974 (Machado *et al.*, 2011), uma série de congressos, revistas e livros sobre o tema surgiram e os resultados novos mostram que a ferramenta é promissora no entendimento de problemas clássicos e difíceis de serem abordados com o cálculo tradicional. Alguns problemas já resolvidos podem ser abordados de outra forma por meio desta teoria. Pode-se mostrar que problemas que envolvem a equação matemática de difusão, que são amplamente presentes no contexto de engenharia, podem ser modelados usando a abordagem do cálculo fracionário, por exemplo. Neste caso, a difusão normalmente estudada na engenharia se torna um caso particular do modelo fracionário (Podlubny, 1999). A equação obtida pode simular casos em que, por qualquer motivo, a difusão ocorre de forma acelerada ou atrasada. Algumas interpretações físicas dos processos definidos no cálculo fracionário tornam ele atraente para a modelagem do transporte em meio poroso. Do ponto de vista do tempo, derivadas fracionárias no tempo apresentam propriedade de "memória" (Cushman, 1993) das funções ao longo do domínio temporal, o que é útil para modelagem de fenômenos que apresentam dependência de estados passados do sistema. Do ponto de vista espacial, derivadas fracionárias apresentam melhor concordância com resultados experimentais de fenômenos que ocorrem em meios heterogêneos.

Além disto, há investigações científicas acerca da conexão entre operações de derivação e integração fracionária e derivação e integração clássicas efetuadas em meios fractais. Tal conexão é mencionada em trabalhos como o de Carpinteri e Mainardi (1997), Tarasov (2005), Moreles *et al.* (2012), Butera e Paola (2014). Vários autores já exploraram a relação entre o comportamento do solo e fractais, obtendo resultados importantes (Pachepsky *et al.*, 2000). Normalmente, fractais são estudados devido a suas propriedades de se obter modelos independentes da escala de estudo. Desta forma, alguns autores argumentam que o cálculo fracionário pode fornecer modelos que, de alguma forma, corrijam o efeito escala ou então o deixem explícito em suas equações (Wheatcraft *et al.*, 2008; Moraes e Cavalcante, 2015). A aplicação do cálculo fracionário facilita a futura integração com estes resultados já obtidos no campo dos fractais.

No que concerne o transporte em meios porosos, o transporte de contaminantes em meios porosos tem sido bastante abordado (Benson *et al.*, 2000; Schumer *et al.*, 2009 e Moraes e Cavalcante, 2014), porém o transporte de água em solo não saturado ainda carece de resultados mais fortes e convincentes que possam ser aplicados.

Dentre os trabalhos já realizados no escopo da dissertação, os trabalhos de Pachepsky (2000) e Kavvas (2017), fornecem abordagens interessantes ao tema, mas diferentes daquilo que se pretende atingir com este estudo. Nestes trabalhos, aplicou-se os conceitos de cálculo

fracionário no tempo, o que é útil para simular efeitos de memória no comportamento do solo (Cushman, 1993). Tais efeitos podem ser vistos, por exemplo, na histerese da curva característica do solo (Szymkiewicz, 2013). O interesse deste trabalho está em abordar casos onde a dispersão da água no solo pode ocorrer de forma mais acelerada ou mais atrasada com relação ao que é previsto pelas ferramentas matemáticas tradicionais, portanto não é dada continuidade direta a estes trabalhos que buscam aplicar os conceitos de derivadas fracionária no tempo.

A abordagem dada ao transporte de contaminantes por Benson *et al.* (2000) e Moraes (2013) possui ideias que podem ser estendidas ao transporte de água em meios porosos não saturados, principalmente depois do ponto de vista apresentado por Bhattacharya *et al.* (1976), Zoia (2010), Szymkiewicz (2013) e Cavalcante e Zornberg (2017a) sobre este tema.

A pesquisa feita constitui uma continuação da linha iniciada com o trabalho de Moraes (2013) e que teve continuidade nos trabalhos de Moraes e Cavalcante (2014); Moraes *et al.* (2014); Moraes e Cavalcante (2015) e Moraes (2017). Além disto, o tema se encaixa na linha de modelagem matemática avançada de fluxo em meios porosos do grupo GeoFluxo e, ainda, é uma ramificação dos trabalhos de Cavalcante e Zornberg (2017a) e Cavalcante e Zornberg (2017b).

1.4 Objetivos

Pretende-se formular um modelo de fluxo de água em meios porosos não saturados utilizando as formulações matemáticas do cálculo fracionário para simular a superdifusão ou subdifusão da frente de umidade dentro do solo. Também resolve-se o modelo de forma numérica e analítica para um caso unidimensional de fluxo.

Como objetivos específicos, busca-se:

1. Formular um modelo utilizando o conceito de derivada fracionária e obter uma nova interpretação física dos parâmetros da equação fundamentada no novo paradigma;
2. Resolver o modelo analiticamente, propor e validar uma formulação numérica nova para resolver o modelo;
3. Modelar um ensaio de fluxo não saturado unidimensional de água em coluna solo;
4. Analisar ganhos de precisão quanto à aplicação da teoria, principalmente no que diz respeito à modelagem de solos com comportamento heterogêneo.

1.5 Estrutura da Dissertação

Esta dissertação está organizada em capítulos, seções e subseções.

No Primeiro capítulo, foi introduzido o tema da dissertação, dada uma motivação para o estudo do tema e os objetivos pretendidos com a realização deste estudo.

No capítulo 2, aborda-se aspectos importantes teóricos para que seja possível dar continuidade ao tema estudado. Neste capítulo, é detalhado o estado da arte de interesse ao assunto da dissertação.

O capítulo 3 detalha os materiais usados e os métodos escolhidos para alcançar os objetivos propostos no primeiro capítulo.

Os resultados do estudo são mostrados no capítulo 4. Também se faz uma discussão à luz da teoria exposta anteriormente.

O capítulo 5 aborda as conclusões do estudo. Afere-se caso os objetivos tenham sido alcançados ou não, é feito um resumo dos resultados obtidos e novos estudos são sugeridos dando continuidade ao tema abordado.

Seguido do capítulo 5, listam-se as referências da dissertação.

Após citar as referências, apresenta-se os apêndices desta dissertação. Os apêndices apresentam discussões mais aprofundadas acerca de tópicos da dissertação e eles são citados no texto à medida que se tornam pertinentes para a compreensão do assunto discutido. Estes capítulos trazem informações fundamentais para o bom entendimento do que foi feito, por vezes mostrando resultados inéditos

O apêndice A mostra uma dedução do teorema central do limite, que governa o movimento browniano clássico. Além disto, discute-se brevemente a perspectiva do mecanismo de *random walk* por detrás do movimento browniano.

O apêndice B mostra como a equação de Langevin resulta na equação diferencial parcial que governa o movimento browniano, servindo de justificativa mecânica para a equação.

O apêndice C discute algumas definições de derivada fracionária e a propriedade fundamental que elas devem obedecer para serem aplicadas ao contexto desta dissertação.

O apêndice D é análogo ao apêndice B. Mostra-se como a equação de Langevin com um termo de força aleatória que segue uma distribuição estável pode resultar na equação diferencial parcial fracionária que constitui o modelo inédito de fluxo em solos não saturados desta dissertação.

O apêndice E traz a dedução do critério de estabilidade do método numérico Grünwald-Letnikov transladado associado ao método de diferenças finitas, que não foi encontrada na literatura e que é essencial para o estudo numérico desta dissertação.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Fluxo em Meios Porosos Não Saturados

A equação de fluxo de água em meios porosos não saturados (equação de Richards) é resultado da combinação de três equações que ilustram princípios físicos básicos de conservação: a equação de continuidade, a lei de Darcy-Buckingham e a equação de Bernoulli (Fredlund e Rahardjo, 1993).

A equação de continuidade ilustra o balanço de massa que entra e sai de um volume diferencial. Para fluxo de água incompressível e na ausência de sumidouro e fontes de água internos ao volume, obtém-se sua expressão tomando-se o balanço de um vetor de fluxo de densidade em um volume diferencial do solo (Bear, 1972). Suponha que em um dado ponto do solo, seja possível isolar um volume diferencial e que o vetor que ilustra a entrada e saída de massa de fluido seja chamado de vetor de densidade de fluxo e denotado por \mathbf{J} , tal que:

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) = \rho_w \mathbf{v}_w(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) \quad (2.1)$$

onde \mathbf{v}_w é o vetor de velocidade da água [LT^{-1}], onde ρ_w é a massa específica da água [ML^{-3}].

Na Figura 2.1 ilustra-se o esquema do balanço de massa em um volume diferencial de solo.

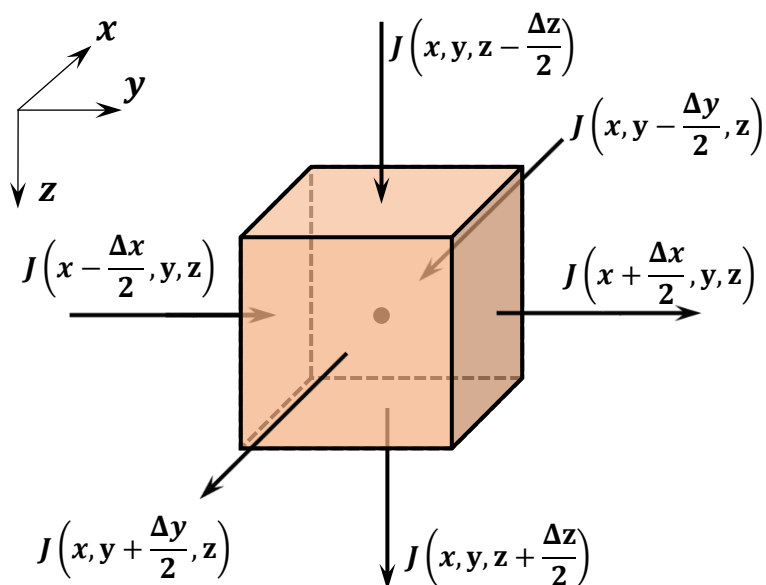


Figura 2.1 – Volume diferencial tomado para o balanço de massa de fluxo no solo.

Em um dado ponto (x, y, z) , o balanço de massa causado pela saída e entrada de fluido no volume em um dado intervalo de tempo é igual à variação de massa de fluxo armazenada dentro do volume:

$$\begin{aligned}
& [\Delta y \Delta z \mathbf{J}(\mathbf{x} - \Delta x / 2, \mathbf{y}, \mathbf{z}) - \Delta y \Delta z \mathbf{J}(\mathbf{x} + \Delta x / 2, \mathbf{y}, \mathbf{z})] + \\
& [\Delta x \Delta z \mathbf{J}(\mathbf{x}, \mathbf{y} - \Delta y / 2, \mathbf{z}) - \Delta x \Delta z \mathbf{J}(\mathbf{x}, \mathbf{y} + \Delta y / 2, \mathbf{z})] + \\
& [\Delta x \Delta y \mathbf{J}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z} - \Delta z / 2) - \Delta x \Delta y \mathbf{J}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z} + \Delta z / 2)] = -\frac{\partial}{\partial t} (\rho_w \theta \Delta x \Delta y \Delta z)
\end{aligned} \tag{2.2}$$

onde θ é o teor de umidade volumétrico [adimensional].

Utilizando a expansão de séries de Taylor truncada a partir do termo de segunda ordem, pode-se expressar o vetor de fluxo deslocado em termos de seu valor dado no centro do volume representativo em cada direção particular. Na direção z , tem-se:

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z} + \Delta z / 2) = \mathbf{J}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) + \frac{\Delta z}{2} \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{J}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) + O(\Delta z^2) \tag{2.3}$$

e

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z} - \Delta z / 2) = \mathbf{J}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) - \frac{\Delta z}{2} \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{J}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) + O(\Delta z^2) \tag{2.4}$$

$O(\Delta z^2)$ representa um termo que se aproxima de zero tão rapidamente quanto Δz^2 quando $\Delta z \rightarrow 0$. Analogamente, as Eqs. (2.3) e (2.4) podem ser igualmente escritas nas outras direções.

Desta forma, a Eq. (2.2) simplifica-se para:

$$\frac{\partial}{\partial x} \mathbf{J}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) + \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{J}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) + \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{J}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) = -\frac{\partial}{\partial t} (\rho_w \theta) \tag{2.5}$$

Substituindo a Eq. (2.1) na Eq. (2.5) e do fato de se tratar de uma análise na qual o fluido é incompressível, obtém-se:

$$-\nabla \cdot \mathbf{v}_w = \frac{\partial \theta}{\partial t} \tag{2.6}$$

A Eq. (2.6) foi primeiramente derivada de forma empírica por Darcy em 1856, recebendo o nome deste autor. Posteriormente, mostrou-se que ela pode ser deduzida a partir das Equações de Navier-Stokes (Whitaker, 1986). Ela é, portanto, o princípio de conservação de momento linear aplicado ao transporte de fluidos em meios porosos.

Para derivá-la a partir da equação de Navier-Stokes, considera-se que o fluxo é laminar, incompressível, predominantemente viscoso e que forças viscosas são linearmente relacionadas à velocidade (Szyemkiewicz, 2013). Desta forma, deriva-se a lei de Darcy:

$$\mathbf{v}_w = -\mathbf{k} \cdot \mathbf{I} \tag{2.7}$$

onde \mathbf{k} é o tensor de permeabilidade [LT^{-1}] e \mathbf{I} é o gradiente hidráulico [adimensional].

O gradiente hidráulico é, por definição, o gradiente espacial de uma medida de energia mecânica do fluido. Pode-se obter uma expressão para o estado de energia mecânica do fluido em um ponto por meio da equação de Bernoulli, que é o correspondente do princípio de

conservação de energia aplicado a fluidos (Aris, 1990). Seja ϕ a variável que denota uma medida de energia específica por unidade de peso de fluido $[L]$, denominada carga hidráulica. Então, tem-se da equação de Bernoulli:

$$\phi = \frac{\mathbf{v}_w \cdot \mathbf{v}_w}{2g} - z + \frac{u_w}{\gamma_w} \quad (2.8)$$

onde g é a aceleração gravitacional $[LT^{-2}]$, z é a altura a partir de um referencial em que a água no volume de controle se encontra $[L]$, u_w é a poropressão sob a qual a água está submetida $[MT^{-2}L^{-1}]$ e γ_w é o peso específico da água $[MT^{-2}L^{-2}]$. Deve-se ressaltar que a poropressão da água, por se tratar de uma análise tridimensional, é função das três coordenadas espaciais e do tempo.

Existem três parcelas que compõem o estado de energia do fluido na Eq. (2.8): uma parcela de energia potencial armazenada na forma de pressão de fluido (u_w/γ_w), uma devido à energia potencial armazenada na forma de energia potencial gravitacional z e uma devido à energia cinética do fluido $\mathbf{v}_w \cdot \mathbf{v}_w/2g$. Como o módulo da velocidade do fluido no solo é, no geral, muito pequeno, pode-se desprezar a parcela de energia cinética do fluido (Bear, 1973). Desta forma, o gradiente hidráulico da Eq. (2.7) pode ser escrito como:

$$\mathbf{I} = \nabla \left(-z + \frac{u_w}{\gamma_w} \right) \quad (2.9)$$

O fato de que a lei de Darcy estipula que o fluxo ocorrerá somente quando houver gradiente de energia é a ilustração do princípio de conservação de energia mecânica.

O tensor de permeabilidade é escrito como:

$$\mathbf{k} = \begin{bmatrix} k_{xx} & k_{xy} & k_{xz} \\ k_{yx} & k_{yy} & k_{yz} \\ k_{zx} & k_{zy} & k_{zz} \end{bmatrix} \quad (2.10)$$

Quando o fluxo puder ser considerado unidimensional:

$$\mathbf{k} = k_z \quad (2.11)$$

Mostrou-se que as Eqs. (2.6), (2.7) e (2.8) ilustram a conservação de massa, conservação de momento linear e conservação de energia. Como argumentado no Capítulo 1, ainda existe mais um princípio de conservação: a equação de conservação de momento angular. Todavia, é hipótese fundamental que o fluxo é irrotacional, portanto os tensores que causam o movimento da água são isotrópicos e não há como escrever uma equação para a conservação de momento angular.

As Eqs. (2.7), (2.9) e (2.10) definem a lei de Darcy, válida para solos saturados. Em se tratando de solos não saturados, recorre-se a uma extensão da lei de Darcy: a lei de Darcy-Buckingham (Szyemkiewicz, 2013).

A lei de Darcy-Buckingham possui o mesmo formato da Eq. (2.7), mas a permeabilidade passa a ser tratada como uma função da sucção total e a parcela de energia correspondente à poropressão do fluido também deve ser substituída pela sucção total. De forma mais explícita, reescreve-se a Eq. (2.7):

$$\mathbf{v}_w = -\mathbf{k}(\psi) \cdot \mathbf{I} \quad (2.12)$$

Reescrevendo a expressão da Eq. (2.8):

$$\phi = -z + \frac{\psi}{\gamma_w} \quad (2.13)$$

onde ψ denota a sucção total, $[MT^{-2}L^{-1}]$ que denota uma parcela de energia livre do solo. Assim como a poropressão, a sucção total é função das coordenadas espaciais e do tempo. Esta parcela de energia é medida pela umidade relativa do ar do solo com relação à pressão de vapor na saturação da água possuindo composição química não pura (Fredlund e Rahardjo, 1993). De forma mais simples, a sucção total possui uma parcela chamada de mátrica e uma chamada de osmótica. A parcela osmótica é pouco importante para a movimentação da água, podendo ser desprezada (Fredlund e Rahardjo, 1993). Mostra-se que a sucção mátrica pode ser dada pela diferença entre poropressão do ar e da água no solo. Então escreve-se:

$$\psi = u_a - u_w \quad (2.14)$$

sendo u_a a parcela de poropressão do ar no solo $[MT^{-2}L^{-1}]$.

Supondo que o tensor de permeabilidades esteja orientado de forma que suas direções principais coincidam com aquelas definidas pelos eixos x , y e z , o tensor da Eq. (2.12) torna-se diagonal. Substituindo a Eq. (2.10) e a Eq. (2.13) na Eq. (2.12), chega-se a lei de Darcy-Buckingham: um conjunto de três equações nas direções dos eixos x , y e z .

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

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

$$v_z = -k_z(\psi) \left(\frac{1}{\rho_w g} \frac{\partial \psi}{\partial z} - 1 \right) \quad (2.17)$$

Em mecânica dos solos não saturados, a sucção e a condutividade hidráulica dependem do teor de umidade volumétrica (Fredlund e Rahardjo, 1993). A relação da sucção com o teor de umidade volumétrica é representada pela curva característica (Figura 2.2).

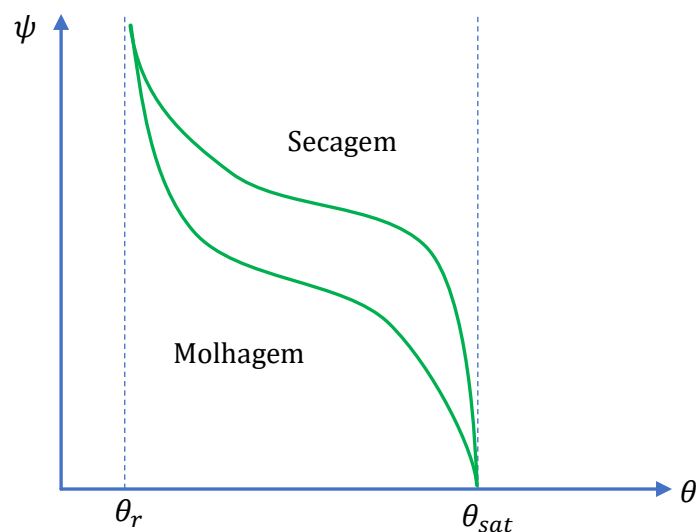


Figura 2.2 – Exemplo de trajetórias na curva característica do solo.

A relação entre a condutividade hidráulica e o teor de umidade volumétrica é representada pela curva de condutividade hidráulica não saturada (Figura 2.3):

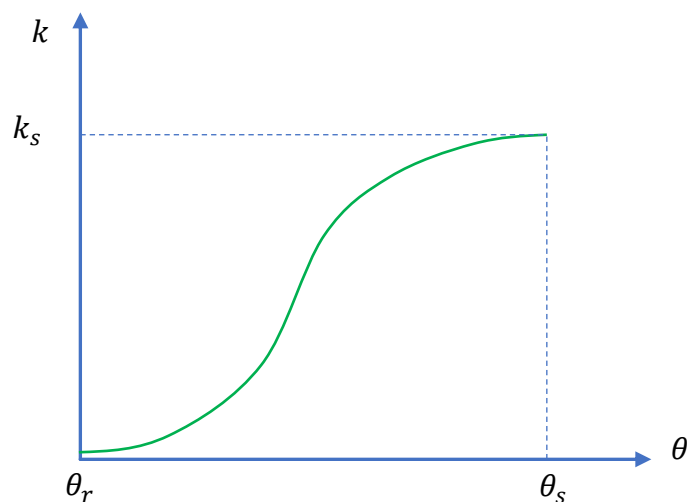


Figura 2.3 – Exemplo de curva de condutividade hidráulica não-saturada.

Pode-se utilizar o conjunto de equações que caracteriza cada lei de conservação para obter a equação de fluxo unidimensional em meio poroso. Partindo-se da equação de continuidade (Eq. (2.6)), substitui-se a expressão de velocidade da lei de Darcy, Eq. (2.17):

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{k_x(\psi)}{\rho_w g} \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{k_y(\psi)}{\rho_w g} \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{k_z(\psi)}{\rho_w g} \frac{\partial \psi}{\partial z} - k_z(\psi) \right) \quad (2.18)$$

Desenvolvendo-se a Eq. (2.18):

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{k_z(\psi)}{\rho_w g} \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial z} k_z(\psi) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{k_x(\psi)}{\rho_w g} \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{k_y(\psi)}{\rho_w g} \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) \quad (2.19)$$

A Eq. (2.19) é comumente chamada de equação de Richards, escrita em sua forma tridimensional. Ela descreve o fluxo de água em solos não saturados. Assume-se, em sua aplicação, que a fase fluida de ar está em contato com a atmosfera, que ela possui mobilidade muito superior à da água e que é uma fase contínua. Neste caso, a única equação de fluxo necessária para se descrever o transporte não saturado é a equação de fluxo de água, visto que a equação de transporte de ar resulta numa constante (Szyemkiewicz, 2013).

O exposto nesta dissertação trata da forma unidimensional da equação de Richards. Dito isto, a Eq. (2.19) em 1D pode ser escrita:

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

Dado que a sucção e a condutividade hidráulica podem ser escritas como funções do teor de umidade volumétrico, utiliza-se a regra da cadeia para escrever Eq. (2.20) na forma:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{k_z(\theta)}{\rho_w g} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial z} \right) - \frac{\partial \theta}{\partial z} \frac{\partial k_z}{\partial \theta} \quad (2.21)$$

Definindo:

$$D_z(\theta) = \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \frac{k_z(\theta)}{\rho_w g} \quad (2.22)$$

a Eq. (2.21) pode ser escrita na forma da equação de advecção e dispersão:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial z} \right) - \frac{\partial \theta}{\partial z} \frac{\partial k_z}{\partial \theta} \quad (2.23)$$

O termo $D_z(\theta)$ é chamado de coeficiente de difusividade da água no solo na direção z [$L^2 T^{-1}$]. O modelo de ajuste de Cavalcante e Zornberg (2017a) é obtido fazendo-se o termo de dispersividade hidráulica e a derivada da condutividade com relação ao teor de umidade volumétrico constantes. Assim sendo, a condutividade hidráulica não saturada e a sucção são dadas pelas relações:

$$k_z(\theta) = k_s \left(\frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right) \quad (2.24)$$

e

$$\psi(\theta) = \frac{1}{\delta} \ln \left(\frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right) \quad (2.25)$$

onde k_s é a condutividade hidráulica saturada do meio, θ_r é o teor de umidade volumétrico residual [adimensional] e θ_s é o teor de umidade volumétrico na saturação [adimensional] e δ é um parâmetro de ajuste do modelo [$M^{-1}L^{-1}T^{-2}$].

Os parâmetros hidráulicos de fluxo segundo este modelo são calculados por:

$$D_z = \frac{k_s}{\delta(\theta_s - \theta_r)\rho_w g} \quad (2.26)$$

e

$$\frac{\partial k_z}{\partial \theta} = \frac{k_s}{\theta_s - \theta_r} \quad (2.27)$$

A Eq. (2.23) tem o mesmo formato da equação de advecção e dispersão, muito comum na análise de transporte de contaminantes em meios porosos. Por isto, ela pode ser derivada partindo-se de argumentos semelhantes ao que é feito no caso da derivação da equação de contaminação (Cavalcante e Zornberg, 2017a). Neste caso, suponha novamente o volume de controle e vetor de fluxo mostrando o balanço de massa de fluido através de um volume de controle como dado na Figura 2.1. Considere, agora, que o vetor de fluxo possa ser dividido em duas parcelas que se somam para resultar no vetor de densidade de fluxo total do fluido:

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_{adv} + \mathbf{J}_{dif} \quad (2.28)$$

onde o termo \mathbf{J}_{adv} representa a parcela de fluxo advectivo do fluido. Esta parcela é resultado do transporte sob a ação da gravidade e representa um deslocamento por igual de todas as partes do fluido. O termo \mathbf{J}_{dif} representa a dispersão do fluido durante o transporte. A dispersão é causada pela tortuosidade do meio poroso em uma matriz que pode impor naturalmente grandes mudanças de trajetória e pela membrana na interface entre água e ar, que favorece o movimento em direção contrária ao gradiente de teor de umidade volumétrico e de acordo com o desbalanço energético da fronteira. Bhattacharya *et al.* (1976) define as parcelas de fluxo advectivo e dispersivo por:

$$\mathbf{J}_{adv} = k_z(\theta) \quad (2.29)$$

$$\mathbf{J}_{dif} = -D_z(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial z} \quad (2.30)$$

Então, por um processo semelhante ao adotado anteriormente, chega-se à Eq. (2.23).

É interessante realizar uma breve comparação acerca da forma do coeficiente de dispersão no contexto da equação de Richards e no contexto de transporte de contaminantes em meios

porosos. Quando se trata de transporte de solutos em meios porosos saturados, o coeficiente de dispersão assume uma parcela de difusão molecular e uma parcela de dispersão mecânica:

$$D_z = \alpha_L v_p + D_z^* \quad (2.31)$$

onde α_L é um coeficiente de dispersividade longitudinal do meio $[L]$, v_p é a velocidade de percolação $[LT^{-1}]$ e D_z^* é o coeficiente de difusão molecular no solo $[L^2 T^{-1}]$. O coeficiente α_L representa o nível ou grau de espalhamento que acontece no meio poroso.

Sabe-se que a permeabilidade de um meio poroso pode ser interpretada como a velocidade de Darcy sob um gradiente hidráulico unitário (Fredlund e Rahardjo, 1993). Desta forma, comparando-se a Eq. (2.31) e a Eq. (2.22), nota-se que o coeficiente de dispersão da equação de Richards apresenta apenas a parcela de dispersão. Tal resultado é esperado, porque a dispersão da umidade do solo é causada pela tortuosidade do meio em que percola e pela sucção em diferentes direções que, ora mais alta, ora mais baixa, desvia certa quantidade de água em várias direções com o movimento da frente de umidade.

É fato conhecido que a equação de advecção e dispersão pode ser obtida por meio de uma perspectiva estatística (Ibe, 2013). Considerando o movimento de uma única partícula que segue um padrão definido pelos mecanismos de movimento impostos no sistema, é possível derivar a distribuição de probabilidade de um conjunto de partículas que segue o mesmo mecanismo. Mostra-se que, por meio destes argumentos estatísticos, é possível derivar a equação de advecção e dispersão, que define de forma macroscópica o movimento do sistema. Assim, dado que a equação de Richards na forma do teor de umidade volumétrico possui o mesmo formato da equação de advecção e dispersão, também é possível deduzi-la a partir uma perspectiva acerca dos movimentos estatísticos em pequena escala da água.

2.2 Processos estocásticos

Processos estocásticos podem ser descritos como conjuntos de variáveis aleatórias que mapeiam eventos de espaços amostrais para números em diferentes instantes de tempos. A aplicação destes processos em modelagem física de sistemas dinâmicos que apresentam qualquer tipo de aleatoriedade é extensa, servindo como uma ferramenta capaz de gerar equações de conservação determinísticas. Alguns exemplos de aplicação de processos estocásticos podem ser encontrados na modelagem da movimentação de ações em bolsa de valores (Rathie e Ozelim, 2017) e fluxo de contaminantes em meios porosos (Moraes, 2017; Moraes e Cavalcante, 2015).

Para descrever o fenômeno físico de interesse, utiliza-se a ferramenta do *random walk*. O *random walk* é uma forma simples de descrever o movimento aleatório de uma partícula que executa movimentos erráticos. Considera-se aqui que a partícula efetua movimentos em uma só dimensão e que ela possui probabilidade p de efetuar um passo em um dado sentido e conseqüentemente $(1-p)$ no outro. Toma-se uma seqüência de variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas (iid) que representam a seqüência de passos que esta partícula efetua. A posição final desta partícula é a soma de todos os passos efetuados até o momento (Meerschaert e Sikoskii, 2012):

$$S_n = \sum_{j=1}^n Z_j \quad (2.32)$$

No presente estudo, como se modela partículas que possuem tamanho análogo a moléculas e que constituem um meio macroscopicamente contínuo, a ordem de grandeza do número de partículas a ser modelado é maior que 10^{23} e, além disto, qualquer deslocamento de partícula decorrente de movimentos microscópicos erráticos deve ser causado por uma seqüência muito grande de passos de cada partícula. Considere que cada partícula efetue um passo a cada intervalo de tempo Δt , então a partícula efetua $[t/\Delta t]$ passos totais até o instante t . O símbolo $[\]$ denota o maior inteiro menor ou igual a um dado número. Se Δt for muito pequeno, um número grande de passos será efetuado. Neste caso, é interessante saber como o conjunto de partículas e o deslocamento delas se comporta quando $n \rightarrow \infty$.

Os argumentos a respeito da quantidade de partículas e de saltos efetuados permite evocar dois teoremas estatísticos que tratam do limite de seqüências de números aleatórios e de soma de números aleatórios: a lei dos números grandes e o teorema central do limite (Ibe, 2013).

A lei dos números grandes propõe que, para uma seqüência de variáveis aleatórias com média μ_1 (por vezes, é escolhido omitir o sub-índice, de forma que μ também denote a média) e variância σ^2 finitas, sua soma deve respeitar o seguinte limite:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P \left[\left| \frac{S_n}{n} - \mu_1 \right| < \varepsilon \right] \rightarrow 1 \quad (2.33)$$

onde ε é um número positivo arbitrariamente pequeno e $P[Z_j \leq z]$ denota a função de distribuição acumulada de probabilidade de uma variável aleatória Z_j .

Em palavras, a média da soma das variáveis aleatórias tende a média de sua distribuição de probabilidade.

Já o teorema do limite central permite obter uma aproximação para o comportamento da soma das variáveis aleatórias à medida que o número de variáveis se torna arbitrariamente grande. O

teorema do limite central é válido para sequências de variáveis aleatórias com média e variância finitas e pode escrito como:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P \left[\frac{S_n - n\mu_1}{\sigma\sqrt{n}} \leq z \right] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^z e^{-u^2/2} du \quad (2.34)$$

onde σ é o desvio padrão da distribuição.

Assim, a soma de um número de variáveis aleatórias padronizadas pela média e desvio padrão tende à distribuição normal padrão $N(1,0)$ à medida que o número de variáveis somadas cresce. É interessante notar que este limite independe da distribuição de probabilidade inicial das variáveis aleatórias (desde que média e variância sejam finitas), mostrando o papel fundamental que a distribuição gaussiana tem no estudo de fenômenos que podem ser modelados por processos estocásticos.

Nas circunstâncias apresentadas, o *random walk* ocorre mediante incrementos infinitesimalmente pequenos Δz sob intervalos de tempo também infinitesimalmente pequenos Δt – o movimento é contínuo, e não discreto (Ibe, 2013). Particularmente, Δz^2 e Δt devem decrescer de forma que a razão entre eles seja constante e igual à variância da distribuição normal que define o movimento.

No Apêndice A, busca-se mostrar que o movimento browniano segue uma distribuição normal e que o limite de um *random walk* pode ser visto como um movimento browniano. Por último, mostra-se que este movimento fornece outra forma de se chegar à equação macroscópica do fluxo de água em solos não saturados. Neste apêndice, também se discute a derivação do teorema do limite central.

Na Figura 2.4, mostra-se um exemplo de *random walk* efetuado por 1000 partículas em uma dimensão após 100 passos. Note a semelhança do histograma de chegada das partículas com uma curva de distribuição normal.

O movimento browniano é um processo estocástico contínuo, no qual uma partícula efetua um passo em uma direção com certa probabilidade em intervalos de tempo infinitesimalmente pequenos. Este movimento, por ser caracterizado por uma média e variância finitas, está sujeito ao enunciado do teorema do limite central (Meerschaert e Sikoskii, 2012). Se o movimento browniano ocorre para uma quantidade muito grande de partículas, como é o caso do movimento da água, também pode-se dizer que vale o teorema dos grandes números.

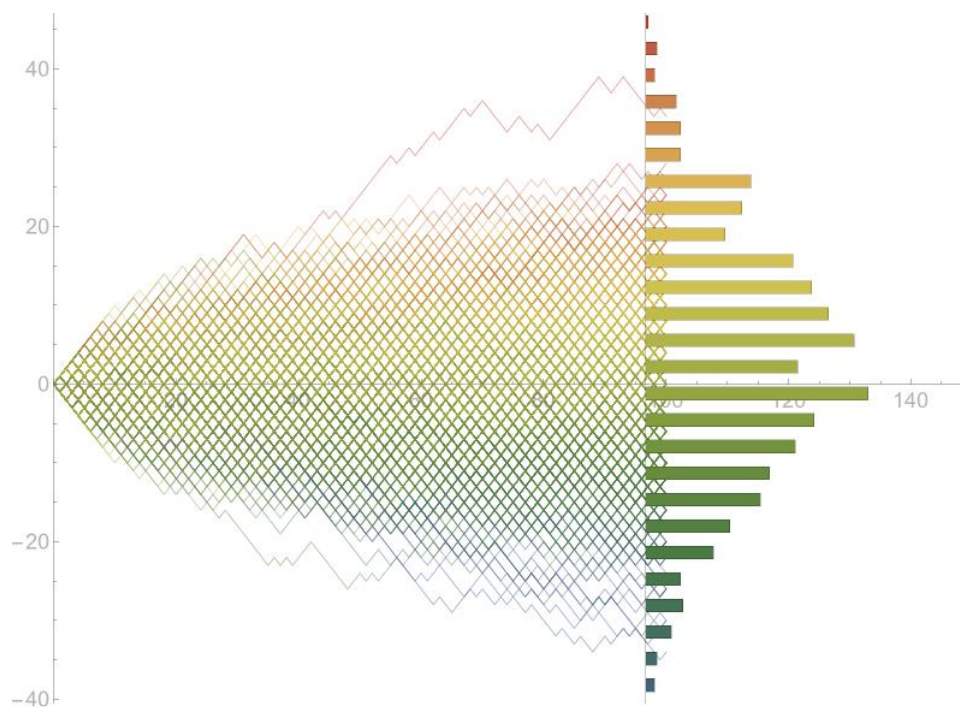


Figura 2.4 – Exemplo de *random walk* efetuado por 1000 partículas após 100 passo.

Algumas definições importantes para as deduções dos apêndices e para a discussão que segue durante todo o texto são dadas a seguir.

Os momentos de uma função de densidade de probabilidade são definidos por

$$E[z^n] = \int_{-\infty}^{+\infty} z^n \theta(z) dz = \mu_n \quad (2.35)$$

Define-se o par transformada de Fourier e inversa da transformada de Fourier de uma função θ respectivamente por:

$$\theta(k) = E[e^{-ikz}] = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikz} \theta(z) dz \quad (2.36)$$

$$\theta(z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikz} \theta(k) dk \quad (2.37)$$

A transformada de Fourier se relaciona com a função característica de uma função de densidade de probabilidade por:

$$E[e^{ikz}] = \hat{\theta}(-k) \quad (2.38)$$

Por vezes, também será utilizada a notação $F[\theta(z)]$ e $F^{-1}[\hat{\theta}(k)]$ para denotar a transformada e a inversa da transformada para que se mantenha a notação de forma mais compacta.

Uma propriedade importante da transformada de Fourier diz respeito a transformada de uma derivada na mesma variável em que se toma a transformada. Pode-se escrever:

$$F\left[\frac{\partial^n \theta}{\partial z^n}\right] = (-ik)^n \hat{\theta} \quad (2.39)$$

Suponhamos que, de fato, o movimento da água nos poros do solo pode ser descrito a partir de um movimento browniano. Neste caso, dado um número grande de partículas que efetua um número grande de passos, tem-se que o teor de umidade volumétrico segue uma distribuição normal:

$$\theta(z, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D_z t}} e^{-\frac{(z-a_s t)^2}{4D_z t}} \quad (2.40)$$

Na Eq. (2.40), a velocidade advectiva e o coeficiente de dispersão são consequências do limite do *random walk* em um movimento browniano e são definidos por:

$$a_s = \lim_{\Delta z, \Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta z}{\Delta t} \quad (2.41)$$

e

$$D_z = \lim_{\Delta z, \Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{2} \frac{\Delta z^2}{\Delta t} \quad (2.42)$$

A transformada de Fourier da Eq. (2.40) é

$$\hat{\theta}(k, t) = e^{-ika_s t - tD_z k^2} \quad (2.43)^{\wedge}$$

A Eq. (2.43) pode ser derivada no tempo para ver que:

$$\frac{\partial \hat{\theta}}{\partial t} = (-ika_s - D_z k^2) e^{-ika_s t - tD_z k^2} \quad (2.44)$$

ou

$$\frac{\partial \hat{\theta}}{\partial t} = (-ika_s + D_z (ik)^2) \hat{\theta} \quad (2.45)$$

Agora, utilizando a Eq. (2.39), pode-se inverter a transformada da Eq. (2.45) para ver que o teor de umidade volumétrico deve ser solução da seguinte equação:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = D_z \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} - a_s \frac{\partial \theta}{\partial z} \quad (2.46)$$

Submetida às condições:

$$P.V.I. \begin{cases} \theta(-\infty, t) \rightarrow 0 \\ \theta(z, 0) = \theta_i \\ \theta(+\infty, t) \rightarrow 0 \end{cases} \quad (2.47)$$

O conjunto de condições (2.47) em conjunto com a Eq. (2.46) é chamado de problema de valor inicial (Mainardi *et al.* 2001).

A Eq. (2.46) mostra que, se o movimento da água no solo puder ser descrito a partir da perspectiva do movimento browniano, pode-se chegar à mesma conclusão da descrição macroscópica normalmente dada ao movimento. Cabe, agora, analisar a validade desta descrição. Além disto, vale salientar que a Eq. (2.46) tem o mesmo formato da equação obtida a partir das funções hidráulicas proposta por Cavalcante e Zornberg (2017a).

2.3 Perspectiva estocástica acerca do movimento de água em meios porosos

Primeiramente, é importante ressaltar que a formulação dos modelos que descrevem determinado fenômeno físico é dependente da escala em que se trata. Algumas leis físicas assumem formas específicas em escalas menores e em escalas maiores alguns fenômenos microscópicos podem ser desprezados em virtude das grandes dimensões de análise.

Até o momento, as equações de fluxo apresentadas são escritas para a escala de Darcy (Szyemkiewicz, 2013). Na escala de Darcy, é possível associar cada ponto do espaço a um volume elementar representativo, que contém uma parcela suficientemente grande do domínio para ser estatisticamente representativa do que ela engloba.

A escala de Darcy é uma manifestação macroscópica do acúmulo de processos que ocorrem em escalas muito menores. Para que se possa aferir os efeitos físicos causados por estes efeitos microscópicos, uma descrição partindo de movimentos microscópicos e que resulta nestes efeitos macroscópicos pode ser útil para novas descrições do fenômeno em estudo. A partir desta seção, adota-se uma descrição estatística em uma escala de observação muito menor do que aquela percebida pela lei de Darcy.

A escala na qual uma tratativa estatística será atribuída será chamada de escala *quasi*-molecular. Desta forma, a análise concerne o movimento de *quasi*-moléculas de água (Bhattacharya *et al.* 1976).

Quasi-moléculas são utilizadas para que se possa descrever o movimento de partículas tendo em vista as equações da mecânica clássica ao invés da mecânica quântica. Uma *quasi*-molécula é constituída por um conjunto de moléculas de água que se encontram mais próximas entre si, portanto com interações intermoleculares mais intensas. Desta forma, cada grupo de moléculas é tratado como uma *quasi*-molécula individual, de forma que as interações entre agrupamentos são fracas e eles conseguem se mover independentemente no campo de forças médio criados

pelas moléculas. Esta hipótese é fundamental para que a descrição do movimento da água possa ser tomada na forma como será apresentada.

Parte-se para a descrição mecânica do movimento da água. Uma *quasi*-molécula de água, durante o processo de movimento, está sujeita a forças causadas pela interação desta com o meio em que se movimenta e pela gravidade (forças sistemáticas) e uma parcela de forças aleatórias causadas por colisões entre *quasi*-moléculas. As forças de interação entre a *quasi*-molécula e o sistema podem ser tratadas com uma força de fricção que atrasa o movimento da partícula. Com isto, pode-se escrever a segunda lei de Newton para uma *quasi*-molécula (Ibe, 2013):

$$m \frac{d^2 z}{dt^2} = -\xi(z, t) \left(\frac{dz}{dt} - \frac{mg}{\xi(z, t)} \right) + \frac{\sigma^2}{2} B(t) \quad (2.48)$$

onde m denota a massa da partícula [M], ξ é um coeficiente de fricção para o movimento da partícula [MT^{-1}] e $B(t)$ é a força aleatória proveniente de colisões que é dada por um ruído branco de média zero e desvio padrão unitário [MLT^{-2}]. O coeficiente de fricção e a força aleatória são funções do espaço e tempo. O termo $\sigma^2/2$ serve para controlar a intensidade de dispersão a força aleatória.

A Eq. (2.48) é notadamente utilizada para modelar movimentos de partículas de forma a gerar modelos baseados no movimento browniano e é chamada de equação de Langevin (Ibe, 2013). Mais precisamente, sabendo que a derivada da posição da partícula é a velocidade instantânea dela, pode-se reescrever a Eq. (2.48) como:

$$m \frac{dv(z)}{dt} = -\xi(z, t) \left(v(z) - \frac{mg}{\xi(z, t)} \right) + \frac{\sigma^2}{2} B(t) \quad (2.49)$$

A Eq. (2.49) é chamada de processo de Ornstein-Uhlenbeck (Nelson, 2001).

Nelson (2001) mostra um resultado importante acerca da Eq. (2.49) no caso de $\xi/m \rightarrow \infty$. Ele afirma que a posição da partícula converge para a solução de um problema com novas coordenadas tais que:

$$\frac{dz^*}{dt} = -mgz^* + \frac{\sigma^2}{2} B(t) \quad (2.50)$$

A dedução matemática da Eq. (2.50) é extensa e acrescentaria pouco valor à dissertação, por isto escolheu-se omiti-la.

A solução da Eq. (2.50) é um movimento browniano com desvio mg e variância σ^2 (Ibe, 2013). Em um caso prático, basta que a razão ξ/m atinja um valor alto para que se possa assumir a Eq. (2.50) válida, o que foi constatado experimentalmente (Bhattacharya *et al.*, 1976). A dedução

matemática de que a Eq. (2.50) é equivalente a um movimento browniano é mostrada no Apêndice B. Fazendo:

$$-mg = \mu \quad (2.51)$$

reescreve-se a Eq. (2.50):

$$\frac{dz^*}{dt} = -\mu z^* + \frac{\sigma^2}{2} B(t) \quad (2.52)$$

Neste caso, A Eq. (2.52) provê uma justificativa dinâmica que permite modelar o movimento das *quasi*-moléculas de água em um meio poroso utilizando as ferramentas apresentadas na Seção 2.2.

Assim, considere que uma *quasi*-molécula de água efetue um movimento browniano em um meio poroso que pode ser descrito por um *random walk*. Este argumento foi primeiro desenvolvido em (Bhattacharya *et al.*, 1976) e retomado posteriormente por (Zoia *et al.*, 2010). Sabendo que a interação entre partículas é fraca, é possível escrever a equação de movimento macroscópica para a água por:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} - \mu_1 \frac{\partial \theta}{\partial z} \quad (2.53)$$

Comparando-se a Eq. (2.53) com a Eq. (2.46), pode-se escrever:

$$\frac{\sigma^2}{2} = D_z(\theta) = \frac{k_z}{\gamma} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \quad (2.54)$$

e

$$\mu_1 = \frac{\partial k_z}{\partial \theta} \quad (2.55)$$

2.4 Críticas ao modelo clássico

Alguns autores discutiram problemas com o modelo apresentado pela Eq. (2.23) tanto no âmbito experimental quanto teórico. O objetivo desta seção é fazer uma síntese das críticas mais pertinentes ao modelo.

O modelo da equação de fluxo não saturado, quando posto na forma de advecção e dispersão, do ponto de vista da mecânica dos meios contínuos, é fundamentado na definição clássica do divergente de um campo vetorial:

$$\nabla \cdot \mathbf{J} \equiv \lim_{V \rightarrow 0} \frac{1}{V} \iint_S \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dS \quad (2.56)$$

onde \mathbf{J} é um campo vetorial, V é o volume arbitrário limitado por uma superfície S , \mathbf{n} é o vetor normal à superfície. Como a definição clássica de divergente tornaria a detecção de qualquer dispersão impossível, porque ela é visível somente quando a escala de observação cresce (Benson, 1998), adota-se uma definição adequada do limite da Eq. (2.56): o volume não tende a zero, mas ao chamado volume elementar representativo. Isto é:

$$\nabla \cdot \mathbf{J} \equiv \lim_{V \rightarrow V_{REV}} \frac{1}{V} \iint_S \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dS \quad (2.57)$$

Benson (1998) argumenta que adotar tal definição de divergente impõe que a razão do fluxo superficial pelo tamanho do volume é mantida constante. Isto ocorre porque adota-se os valores de fluxo do volume elementar representativo para definir o tensor de dispersão do fluxo. Em casos onde o solo é homogêneo quanto à trajetória percorrida pela água, uma mudança de escala implica que a taxa de fluxo que entra para o tamanho do volume é mantida constante, e a definição é boa. Contudo, solos heterogêneos apresentam mudança na taxa de influxo/volume quando se muda o tamanho do volume da definição apresentada na Eq. (2.57), o que gera, inclusive, valores diferentes de dispersão em escalas de observação diferentes (efeito escala). De fato, é sabido que o tamanho do volume elementar representativo para as leis de fluxo clássicas é função da escala (Ozelim e Cavalcante, 2018). Na Figura 2.5 ilustra-se o argumento exposto. Linhas contínuas mostram situação de meio heterogêneo contínuo. Linhas tracejadas ilustram os valores do divergente supondo o elemento homogêneo. Vale lembrar que homogeneidade e heterogeneidade são tratadas no sentido apresentado na introdução da dissertação, tomadas em uma escala muito menor que aquela usualmente adotada na geotecnia. Portanto, a equação de fluxo não saturado apresenta uma simplificação do ponto de vista de modelagem do fenômeno físico da perspectiva de mecânica dos meios contínuos que pode não satisfazer certos contextos.

Do ponto de vista estatístico, o teorema do limite central sugere que a dispersão de *quasi*-moléculas de água pode ser adotada como fickiana. Neste caso, o espalhamento de partículas é limitado a um determinado valor a cada instante de tempo igual à metade desvio padrão da distribuição, $\Delta z^2/(2\Delta t)$ (Schumer *et al.* 2009). Além disto, a imposição de variância finita e tempos de intervalo entre saltos fixo é restritiva: é possível que a água encontre caminhos preferenciais ou barreiras que só podem ser transpostas dada certa quantidade de energia e, por isso, varia-se o espalhamento da umidade para mais ou para menos.

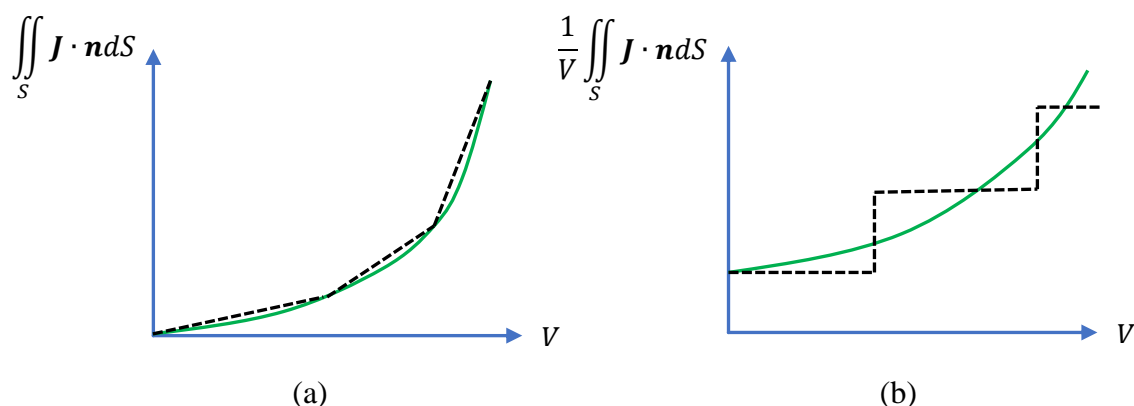


Figura 2.5 – Figuras ilustrando fluxo superficial pelo volume do elemento tomado na definição prática de divergente (modificado de Benson, 1998): (a) Fluxo total através da superfície; (b) Fluxo médio através da superfície.

Experimentalmente, alguns autores notaram divergências entre a progressão da frente de umidade se comparada à evolução da variável de Boltzmann (z^2/t) e propuseram modelos novos. A maior parte destes modelos trataram sobre a subdifusão da umidade, mas os autores mencionam a possibilidade de superdifusão também (Pachepsky *et al.*, 2003; Hall, 2007, Sun *et al.*, 2013).

2.5 Distribuições estáveis e teorema do limite central generalizado

A Aplicação do teorema central do limite e, portanto, toda a fundamentação dos modelos utilizados que foram descritos anteriormente necessita que três pontos sejam respeitados (Ibe, 2013):

1. As variáveis somadas devem ser independentes;
2. As variáveis aleatórias devem ter média e variância finitos;
3. Não pode haver variáveis aleatórias que contribuam de forma muito maior do que as outras para a soma.

Contudo, estes três pontos restringem as funções de probabilidade que podem ser aplicadas para descrever o movimento de uma partícula individual. É possível, por exemplo, que uma determinada partícula efetue um salto de valor muito grande entre um instante e outro, de tal forma que a contribuição deste valor à soma seja excessiva.

Da mesma forma que as distribuições de probabilidade com as três características mencionadas convergem para uma distribuição gaussiana, as outras distribuições convergem para uma classe de distribuições mais geral, chamada de distribuições estáveis (α -estável ou distribuição estável de Levy). Uma distribuição estável é definida se existirem constantes c_n e d_n para cada n tais que (Ibe, 2013):

$$\sum_{j=1}^n Z_j = c_n Z + d_n \quad (2.58)$$

onde as variáveis Z_i são cópias independentes de Z , isto é, possuem a mesma distribuição de Z exceto por uma translação e um fator de escala. Note que, dada a definição (2.58), é sempre possível escrever uma variável aleatória que siga uma distribuição estável como a combinação linear de outras variáveis aleatórias de mesma distribuição.

Existe uma forma de representar analiticamente as distribuições estáveis em termos da função H de Fox, como proposto por Schneider (1986). Por outro lado, a função H de Fox torna a percepção do processo físico resultante das distribuições estáveis complicada. Por não acrescentar valor significativo aos resultados desta dissertação, evita-se seu emprego. Limita-se a apenas mencionar este resultado para fins de completude da revisão bibliográfica do assunto.

A distribuição de probabilidade de uma distribuição estável, sempre que necessário se referir a ela, será denotada por $f_Z(z; \alpha, \beta, \mu, \sigma)$. As distribuições estáveis são compostas por quatro parâmetros que possuem interpretações bem definidas quanto ao comportamento das funções (Ibe, 2013).

O índice de estabilidade, $\alpha \in [0,2]$, também chamado de índice de cauda, expoente de cauda ou expoente característico determina o quão pesado é a cauda da distribuição. Na Figura 2.6, mostra-se o efeito da variação do índice de estabilidade no comportamento da distribuição. Quanto menor o valor do índice, maior o pico da curva e haverá maior número de dados concentrado na cauda.

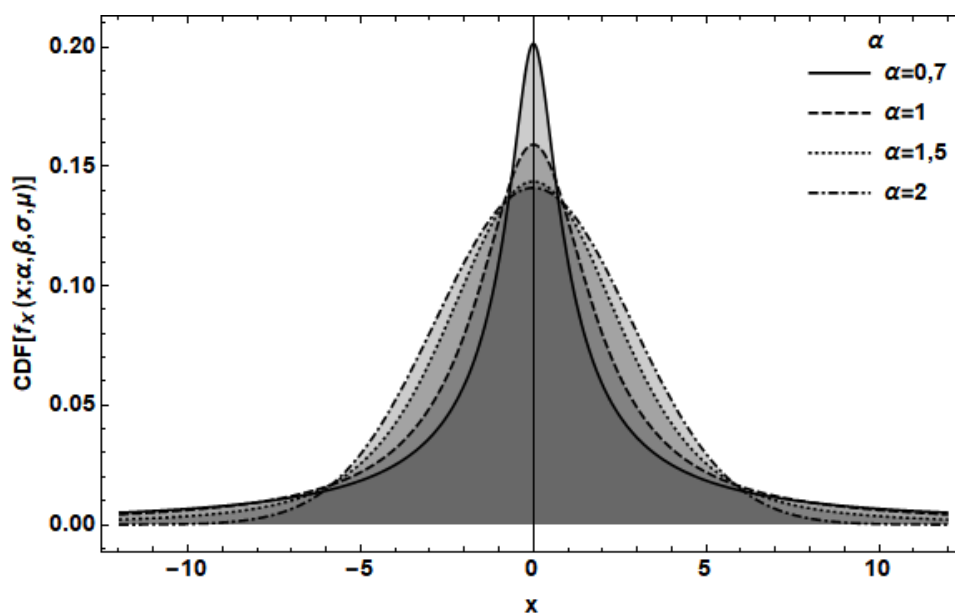


Figura 2.6 – Efeito do parâmetro α no formato da distribuição estável.

O parâmetro de assimetria, $\beta \in [-1,1]$, determina o quanto a distribuição é distorcida para a direita (mais próximo de 1) ou esquerda (mais próximo de -1). O parâmetro perde efeito à medida que α aproxima-se de 2 e quando seu valor é 0. Neste caso a distribuição é simétrica. Na Figura 2.7 afere-se o efeito do parâmetro de assimetria no comportamento da distribuição estável.

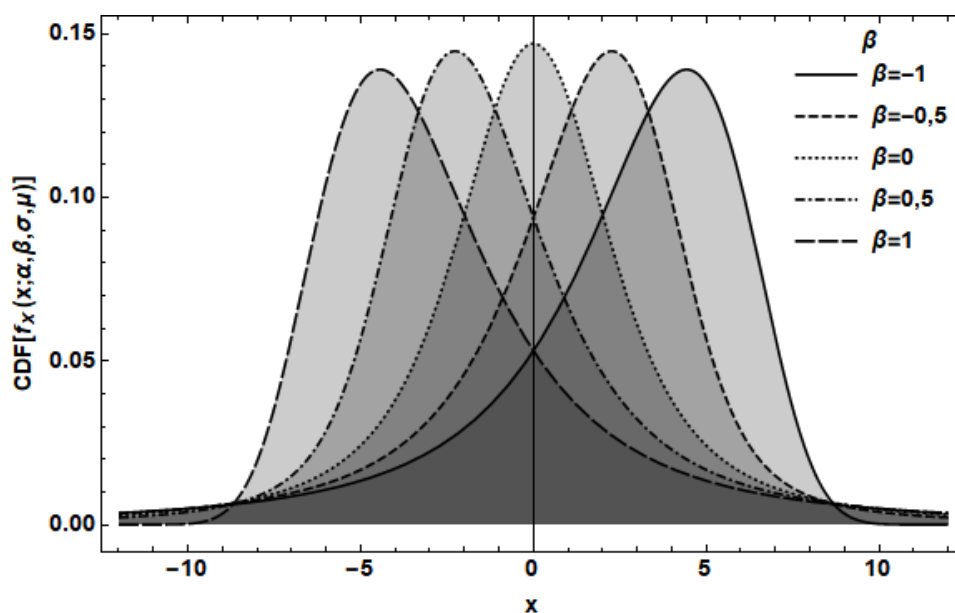


Figura 2.7 – Efeito do parâmetro β no formato da distribuição estável.

O parâmetro $\sigma > 0$ é um parâmetro de escala, que determina a largura e, conseqüentemente, dispersão da distribuição. Maiores valores deste parâmetro resultam em efeito similar ao que o desvio padrão causa na distribuição gaussiana: a curva de distribuição de probabilidade tem seu pico mais achatado e cauda mais acentuada para maiores valores de σ . O aspecto da curva passa a ser mais suave com maiores valores de σ . Pode-se constatar o exposto por meio de observação da Figura 2.8, na qual diferentes valores de σ são atribuídos à distribuição estável.

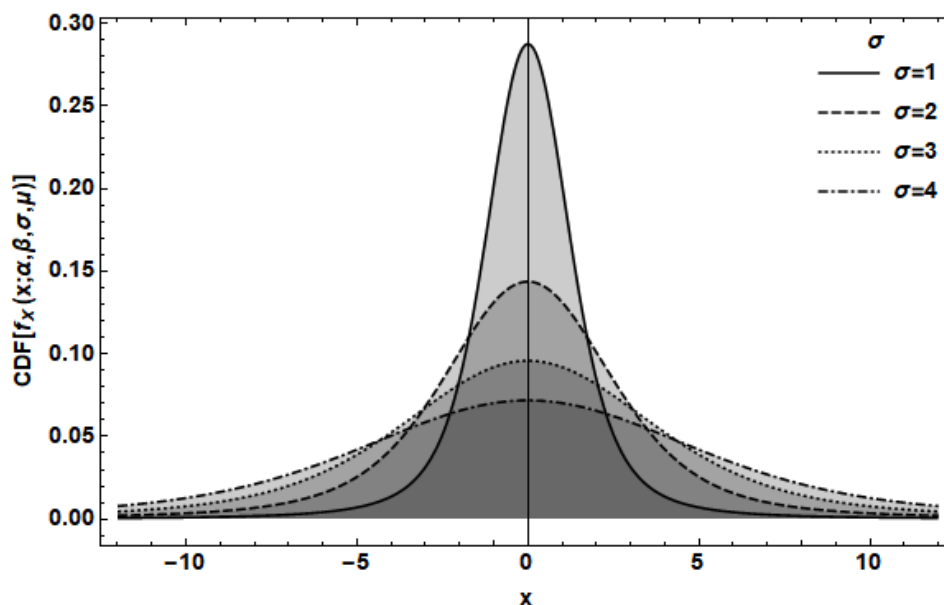


Figura 2.8 – Efeito do parâmetro σ no formato da distribuição estável.

$\mu \in \mathbb{R}$ é um parâmetro de locação que tem função idêntica à da média na distribuição normal e determina a posição do pico da curva. Na Figura 2.9, mostra-se que um aumento do valor de μ causa o deslocamento da curva para a direita. Diminuir o valor de μ , analogamente, movimentará a curva para a esquerda.

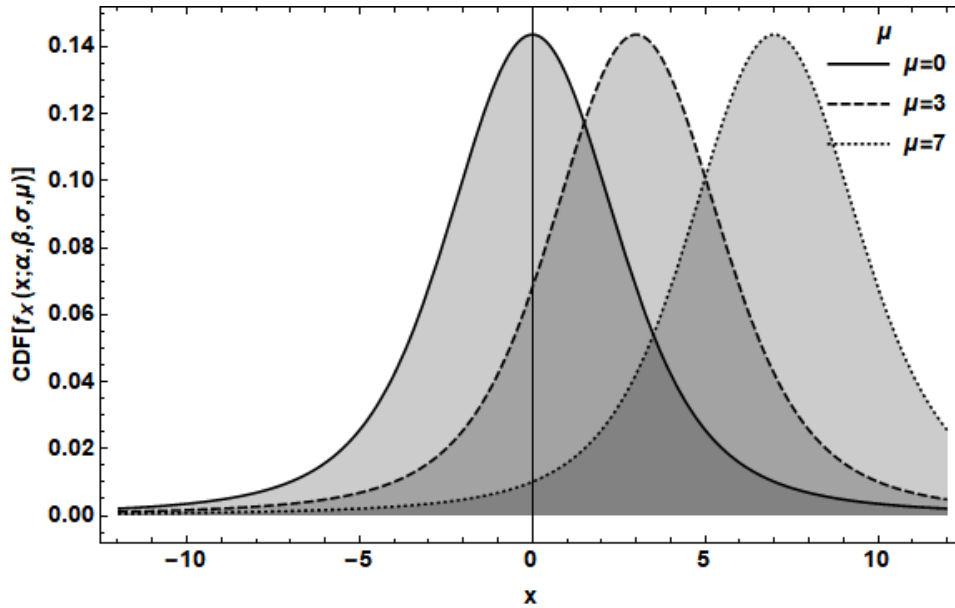


Figura 2.9 – Efeito do parâmetro μ no formato da distribuição estável.

Normalmente, expressa-se as distribuições estáveis por meio de suas funções características (Nolan, 2016). Seja Z uma variável aleatória com distribuição estável, sua função característica é dada por:

$$\hat{f}_Z(-k) = E[e^{ikZ}] = \begin{cases} \exp\left(-\sigma^\alpha |k|^\alpha \left[1 - i\beta \operatorname{sign}(k) \tan \frac{\pi\alpha}{2}\right] + i\mu k\right), & \alpha \neq 1 \\ \exp\left(-\sigma^\alpha |k|^\alpha \left[1 - i\beta \frac{2}{\pi} \operatorname{sign}(k) \ln |k|\right] + i\mu k\right), & \alpha = 1 \end{cases} \quad (2.59)$$

Para $\alpha = 2$, a distribuição estável reduz a uma distribuição normal com média μ e desvio padrão $\sigma/\sqrt{2}$. Como pode ser constatado por meio da substituição na Eq. (2.59) e da unicidade da transformada de Fourier:

$$\hat{f}_Z(k) = E[e^{ikZ}] = \left[\exp(-\sigma^2 k^2 + i\mu k) \right]_{\alpha=2} \quad (2.60)$$

Definido estes aspectos acerca da distribuição estável, o próximo passo é mostrar como a distribuição estável generaliza os processos estocásticos descritos na Seção 2.2.

Suponha que se tenha um processo de soma de variáveis aleatórias que denotam passos de uma partícula. A soma das variáveis resulta na posição final da partícula, como descrito anteriormente. Neste caso, deseja-se saber o limite da soma de variáveis aleatórias cuja dispersão não é necessariamente finita. Aqui, a abordagem seguida é dada por Benson (1998). Uma demonstração matematicamente rigorosa pode ser encontrada em Meerschaert e Sikoskii (2012).

A soma deslocada e normalizada das variáveis aleatórias é dada por:

$$S_n = \frac{\sum_{j=1}^n Z_j - n\mu}{c_n} \quad (2.61)$$

Fazendo:

$$\theta(k) = E\left[e^{-c_n(Z_j - \mu)ki}\right] \quad (2.62)$$

Utilizando a Eq. (2.58), a Eq. (2.62) e o resultado acerca transformada de Fourier da soma de variáveis iid, Eq. (A.7), Pode-se manipular a Eq. (2.61) para obter:

$$\theta(k)^n = E\left[e^{-c_n S_n ki}\right] = \theta_{S_n}(c_n k) \quad (2.63)$$

A transformada da soma normalizada e das variáveis individuais deve ser a mesma. Usando isto e aplicando o logaritmo a (2.63)

$$n \ln[\theta(k)] = \ln[\theta_{S_n}(c_n k)] \quad (2.64)$$

A Eq. (2.64) é resolvida por Benson (1998) usando a lei de potência:

$$\ln[\theta(k)] = Ak^\alpha \quad (2.65)$$

onde $\alpha \in [0,2]$.

A Eq. (2.61) só é verdadeira se $c_n = n^\alpha$ e o teorema do limite central generalizado pode ser escrito:

$$S_n = \frac{\sum_{j=1}^n Z_j - n\mu}{n^\alpha} \quad (2.66)$$

Além disto, pode-se mostrar que a soma deslocada e normalizada converge para uma distribuição estável com os seguintes parâmetros:

$$\frac{\sum_{j=1}^n Z_j - n\mu}{n^\alpha} = f_Z(z; \alpha, \beta, 0, 1) \quad (2.67)$$

No caso de uma soma não normalizada e descentralizada, mostra-se que o estudo de distribuições estáveis faz surgir naturalmente o conceito de derivada fracionária e dispersão anômala. Para exemplificar como, considere um *random walk* cujos saltos seguem uma distribuição bilateral de Pareto (Meerschaert e Sikoskii, 2012). Isto é, $P[Z > z] = pCz^{-\alpha}$ e $P[Z < -z] = qCz^{-\alpha}$ para $1 < \alpha < 2$, $0 \leq p, q \leq 1$ e $p + q = 1$. A transformada de Fourier da distribuição de Pareto é

$$E\left[e^{-ikz}\right] = p \int_{C^{1/\alpha}}^{\infty} e^{-ikz} C\alpha z^{-\alpha-1} dz + q \int_{-\infty}^{-C^{1/\alpha}} e^{-ikz} C\alpha(-z)^{-\alpha-1} dz \quad (2.68)$$

A primeira integral é avaliada primeiro:

$$p \int_{C^{1/\alpha}}^{\infty} e^{-ikz} C\alpha z^{-\alpha-1} dz = p \int_{C^{1/\alpha}}^{\infty} \left[1 - ikz + (e^{-ikz} - 1 + ikz)\right] C\alpha z^{-\alpha-1} dz \quad (2.69)$$

ou ainda

$$\begin{aligned} p \int_{C^{1/\alpha}}^{\infty} e^{-ikz} C\alpha z^{-\alpha-1} dz &= p - pik\mu_1 + p \int_0^{\infty} (e^{-ikz} - 1 + ikz) C\alpha z^{-\alpha-1} dz \\ &- p \int_0^{C^{1/\alpha}} \left[1 - ikz + (e^{-ikz} - 1 + ikz)\right] C\alpha z^{-\alpha-1} dz \end{aligned} \quad (2.70)$$

A primeira integral da Eq. (2.70) é calculada por:

$$p \int_0^{\infty} (e^{-ikz} - 1 + ikz) C\alpha z^{-\alpha-1} dz = pC \frac{\Gamma(2-\alpha)}{\alpha-1} (ik)^\alpha \quad (2.71)$$

A segunda integral da Eq. (2.70) tem o seu integrando limitado da seguinte forma:

$$\left|e^{-ikz} - 1 + ikz\right| \leq \frac{(kz)^2}{2!} \quad (2.72)$$

Multiplicando a Eq. (2.72) por $C\alpha z^{-\alpha-1}$ e integrando:

$$p \int_0^{C^{1/\alpha}} \left|e^{-ikz} - 1 + ikz\right| C\alpha z^{-\alpha-1} dz \leq p \frac{k^2}{2} \frac{\alpha}{2-\alpha} C^{2/\alpha} \quad (2.73)$$

Assim, a primeira integral da Eq. (2.68) pode ser reescrita por:

$$p \int_{C^{1/\alpha}}^{\infty} e^{-ikz} C\alpha z^{-\alpha-1} dz = p - pik\mu_1 + pD_z (ik)^\alpha + O(k^2) \quad (2.74)$$

onde fez-se:

$$D_z = C \frac{\Gamma(2-\alpha)}{\alpha-1} \quad (2.75)$$

No caso da segunda integral da Eq. (2.68), uma simples substituição de variáveis $u = -z$ permite encontrar:

$$q \int_{-\infty}^{-C^{1/\alpha}} e^{-ikz} C\alpha(-z)^{-\alpha-1} dz = q + qik\mu_1 + qD_z (-ik)^\alpha + O(k^\alpha) \quad (2.76)$$

Portanto, a transformada de Fourier da distribuição bilateral de Pareto é:

$$1 - (p - q)ik\mu_1 + pD_z (ik)^\alpha + qD_z (-ik)^\alpha + O(k^2) \quad (2.77)$$

Tomando o somatório de variáveis aleatórias de Pareto, $S_n = \sum_{j=1}^n Z_j$, a transformada de Fourier do somatório normalizado, mas não deslocado para a origem é:

$$E\left[e^{-ike^{1/\alpha} S_n}\right] = \left(1 - (p-q)ik\mu_1 + pD_z(ik)^\alpha + qD_z(-ik)^\alpha + O(k^2)\right)^n \quad (2.78)$$

Fazendo $n=t/\Delta t$ com $\Delta t \rightarrow 0$:

$$E\left[e^{-ike^{1/\alpha} S_n}\right] \rightarrow e^{t[-ik\mu_1 + pD_z(ik)^\alpha + qD_z(-ik)^\alpha]} \quad (2.79)$$

Pode-se ver por diferenciação simples com relação ao tempo, que a função característica da distribuição bilateral de Pareto é solução da equação diferencial ordinária:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \left[-ik\mu_1 + pD_z(ik)^\alpha + qD_z(-ik)^\alpha\right] \theta \quad (2.80)$$

Caso $\alpha=2$, a Eq. (2.80) se reduz à forma de advecção-dispersão, como já mostrado. No presente caso, contudo, $\alpha \neq 2$ e a inversa da transformada de Fourier aplicada à Eq. (2.80) não gera uma derivada parcial de segunda ordem no espaço. Buscando reduzir a equação a uma forma semelhante à da advecção-dispersão, pode-se utilizar a propriedade da transformada de Fourier aplicada a derivadas:

$$E\left[e^{-ikz} \frac{\partial^n}{\partial z^n}\right] = (ik)^n \theta \quad (2.81)$$

A Eq. (2.81) representa uma propriedade das transformadas de Fourier de derivadas que deve ser estendida. A forma de se fazer isto é definir uma operação na forma de uma convolução cuja transformada seja dada pela Eq. (2.81). Por analogia, chama-se esta operação de derivação fracionária.

Define-se a derivada fracionária à direita de uma função θ como a operação cuja transformada de Fourier resulte em:

$$E\left[e^{-ikz} \frac{\partial^\alpha}{\partial z^\alpha}\right] = (ik)^\alpha \theta \quad (2.82)$$

De forma semelhante, define-se a derivada fracionária à esquerda de uma função f a operação cuja transformada de Fourier resulte em:

$$E\left[e^{-ikz} \frac{\partial^\alpha}{\partial (z-)^{\alpha}}\right] = (-ik)^\alpha \theta \quad (2.83)$$

Usando as definições (2.82) e (2.83) pode-se tomar a transformada inversa da Eq. (2.80) e escrever:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\mu_1 \frac{\partial \theta}{\partial z} + pD_z \frac{\partial^\alpha \theta}{\partial z^\alpha} + qD_z \frac{\partial^\alpha \theta}{\partial (z-)^{\alpha}} \quad (2.84)$$

Fazendo $\mu_1 = a_s$, tem-se:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -a_s \frac{\partial \theta}{\partial z} + p D_z \frac{\partial^\alpha \theta}{\partial z^\alpha} + q D_z \frac{\partial^\alpha \theta}{\partial (z-)^{\alpha}} \quad (2.85)$$

A Eq. (2.84) é chamada de equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária.

De fato, o parâmetro de assimetria das distribuições estáveis se relaciona às probabilidades p e q da seguinte maneira:

$$p = \frac{1}{2}(1 + \beta) \quad (2.86)$$

e

$$q = \frac{1}{2}(1 - \beta) \quad (2.87)$$

De forma que quando $\beta=1$, a distribuição é inclinada para a direita e quando $\beta=-1$, a distribuição é inclinada para a esquerda.

O estudo das operações capazes de gerar as propriedades descritas nas Equações (2.82) e (2.83) é objeto de estudo do Cálculo Fracionário.

2.6 Cálculo Fracionário

O cálculo fracionário é a teoria que estende e interpola as operações de integração e derivação de ordem inteira para operações que podem ter ordem real ou até mesmo complexa. Não existe um consenso acerca de qual a definição correta de derivada fracionária. Diversos pesquisadores propuseram novas definições de derivadas fracionárias, cada qual com suas características e dentro de contextos específicos (Oliveira e Machado, 2014). Atualmente, as três definições mais comuns são a de Riemann-Liouville, Grünwald-Letnikov e Caputo (Diethelm, 2004), mas as definições de Riemann-Liouville e Caputo são mais aplicadas amplamente no contexto de modelagem. Por este motivo, a definição de derivada fracionária foi feita neste trabalho como a operação que satisfaz as condições que fazem as funções de densidade de probabilidade de distribuições estáveis respeitar a equação fluxo fracionário fracionária.

A definição de derivada fracionária é, dado este argumento, qualquer operação de pseudo-diferenciação que esteja em consonância com a Eq. (2.82) e a Eq. (2.83). Assim, nesta dissertação, evita-se tratar apenas uma definição de derivada fracionária como a correta. No que segue, mostra-se algumas definições de derivadas fracionária que, no âmbito deste estudo, são equivalentes. O emprego é utilizado de acordo com a finalidade para a qual se usa a definição, a depender de qual for mais conveniente. A motivação das definições, propriedades

que serão exploradas para obter os resultados desta dissertação e discussão acerca delas são dados no Apêndice C. A Eq. (2.82) é usada para definir a operação chamadas de derivada fracionária à direita e a Eq. (2.83) para definir a derivada fracionária à esquerda.

A derivada fracionária à direita de Grünwald-Letnikov é dada por:

$$\frac{d^\alpha \theta}{dz^\alpha} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^\alpha} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(\alpha-j+1)\Gamma(j+1)} (-1)^j \theta(z-jh) \quad (2.88)$$

A derivada fracionária à esquerda de Grünwald-Letnikov é dada por:

$$\frac{d^\alpha \theta}{d(z-)^\alpha} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^\alpha} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(\alpha-j+1)\Gamma(j+1)} (-1)^j \theta(z+jh) \quad (2.89)$$

A derivada fracionária à direita de Riemann-Liouville é definida por:

$${}^L D_z^\alpha \theta(z) = \frac{1}{\Gamma(N-\alpha)} \frac{d^N}{dz^N} \int_L^z \frac{\theta(\zeta)}{(z-\zeta)^{\alpha+1-N}} d\zeta \quad (2.90)$$

A derivada fracionária à esquerda de Riemann-Liouville é definida por:

$${}^R D_z^\alpha \theta(z) = \frac{(-1)^N}{\Gamma(N-\alpha)} \frac{d^N}{dz^N} \int_z^R \frac{\theta(\xi)}{(\xi-z)^{\alpha+1-N}} d\xi \quad (2.91)$$

A derivada fracionária à direita de Caputo é definida por:

$${}^C D_z^\alpha \theta(z) = \frac{1}{\Gamma(N-\alpha)} \int_L^z \frac{\theta^{(N)}(\zeta)}{(z-\zeta)^{\alpha+1-N}} d\zeta \quad (2.92)$$

A derivada fracionária à esquerda de Caputo é definida por:

$${}^C D_R^\alpha \theta(z) = \frac{(-1)^N}{\Gamma(N-\alpha)} \int_z^R \frac{f^{(N)}(\zeta)}{(\zeta-z)^{\alpha+1-N}} d\zeta \quad (2.93)$$

Na Eq. (2.88) até a Eq. (2.93), R e L são números reais e ilustram os limites do domínio, N é o maior inteiro menor do que α (i.e. $N = [\alpha]$, onde $[\]$ denota o menor inteiro maior que dado número).

Devido à diferença de ordem das operações na definição destas derivadas, mostra-se que as duas definições são equivalentes apenas em situações específicas (Ishteva, 2005). É necessário que o valor da função se anule nos limites inferior ou superior da derivada ou que estes limites sejam infinitos. Nestas circunstâncias, as duas definições podem ser usadas indistintamente. Pode-se, também, mostrar que as definições de Grünwald-Letnikov são sempre equivalentes à de Riemann-Liouville (Podlubny, 1999).

Na aplicação das derivadas de Riemann-Liouville e Caputo a equações diferenciais fracionárias, alguns pontos importantes devem ser ressaltados quanto à escolha da definição para modelagem física. A derivada de Caputo exige que condições de contorno sejam dadas em

termos de derivadas inteiras e a derivada de Riemann-Liouville exige que sejam dadas em termos de derivadas fracionárias. Antigamente, não havia uma interpretação física para condições em termos de derivadas fracionárias. Hoje, uma interpretação sólida já é possível (Heymans e Podlubny, 2006) em termos da relação entre variáveis de estado por meio dos modelos constitutivos adotados. Além disto, existem mais resultados matemáticos acerca da derivada de Riemann-Liouville já provados (Diethelm, 2004), o que permite sua aplicação para modelagem mais facilmente.

É precisamente na situação de limites de integração infinitos que se deseja utilizar as derivadas fracionárias de Riemann-Liouville e Caputo. Como nestas circunstâncias, as três definições coincidem, suas transformadas de Fourier também devem coincidir. Assim, utiliza-se da notação $\partial^\alpha / \partial z^\alpha$ para se referir indistintamente a qualquer umas das três definições.

Nota-se que a Eq. (2.84) apresenta ambas as derivadas à esquerda e à direita. Além disto, estas derivadas têm seu limite inferior e superior sendo menos infinito e infinito respectivamente para que as propriedades procuradas sejam alcançadas. Chama-se estas derivadas com limites infinitos de derivadas à esquerda e à direita de Weyl.

2.7 Não-Localidade da Derivada Fracionária e Lei de Fick

Esta seção dedica-se a encontrar uma forma macroscópica do vetor de fluxo que englobe a lei de Fick a partir de um argumento fundamentado em uma expansão em diferenças finitas e a mostrar propriedades ganhas pelo modelo quando se introduz a derivada fracionária.

Considere o domínio espacial dividido em volumes discretos e que haja uma concentração de partículas em um determinado volume. Considere que o referencial do sistema é fixo no centro de massa do conjunto de partículas, tomadas como *quasi*-moléculas de água, de forma que qualquer movimento advectivo pode ser desconsiderado na análise a seguir. O teor de umidade volumétrico, em um determinado volume j é:

$$\theta_j = \frac{M_j}{\Delta V} \quad (2.94)$$

onde, M_j é a massa de partículas em determinado volume $[M]$ e θ_j o teor de umidade volumétrico de partículas $[ML^{-3}]$.

Considere que cada partícula efetue um *random walk* simétrico com taxa $1 / \Delta t$, que denota o número de passos por intervalo de tempo $[T^{-1}]$ efetuado a cada instante Δt . O fluxo dispersivo de partículas por unidade de área entre j e $(j + 1)$ é:

$$J_{dif} = \frac{\left(\frac{1}{2}M_j - \frac{1}{2}M_{j+1}\right)}{A} \frac{1}{\Delta t} = \frac{1}{2}(\theta_j - \theta_{j+1}) \frac{1}{\Delta t} \Delta V \quad (2.95)$$

Da expansão da série de Taylor para o teor de umidade volumétrico:

$$J_{dif} = \frac{1}{2} \left(-\frac{\partial \theta}{\partial z} (\Delta z) + O(\Delta z^2) \right) \frac{1}{\Delta t} \Delta z \quad (2.96)$$

Para que o *random walk* ilustre o movimento das partículas, $\Delta x \rightarrow 0$ de forma que $\Delta x^2/(2\Delta t) \rightarrow D_z$ e chega-se à lei de Fick:

$$J_{dif} = -D_z \frac{\partial \theta}{\partial z} \quad (2.97)$$

Da forma que a lei de Fick foi derivada, o teor de umidade volumétrico em um dado volume depende apenas dos volumes imediatamente vizinhos e o salto das partículas é limitado à vizinhança imediata de sua localização (Schumer *et al.*, 2001). A Figura 2.10 mostra uma representação do balanço em diferenças finitas de acordo com o fluxo fickiano adotado.

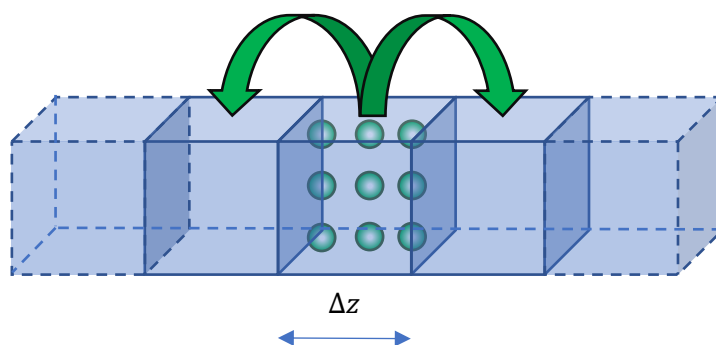


Figura 2.10 – Representação do fluxo limitado a células vizinhas causado pela dispersão fickiana.

A lei de Fick, portanto, é uma manifestação macroscópica do movimento browniano clássico, regido pelo teorema central do limite. É interessante procurar uma forma para a lei de Fick que permita as partículas percorrerem mais de um volume em um intervalo de tempo. A lei deve ser capaz de retratar o movimento de fluxo de água que percorra mais rapidamente em direção ao gradiente de forças de campo ou o movimento que ocorra de forma mais lenta adicionando partículas que dão grandes saltos contrários ao gradiente de forças. Para isto, pode-se utilizar a série de Taylor generalizada apresentada na Eq. (C.29). A Figura 2.11 mostra uma ilustração do fluxo não fickiano descrito.

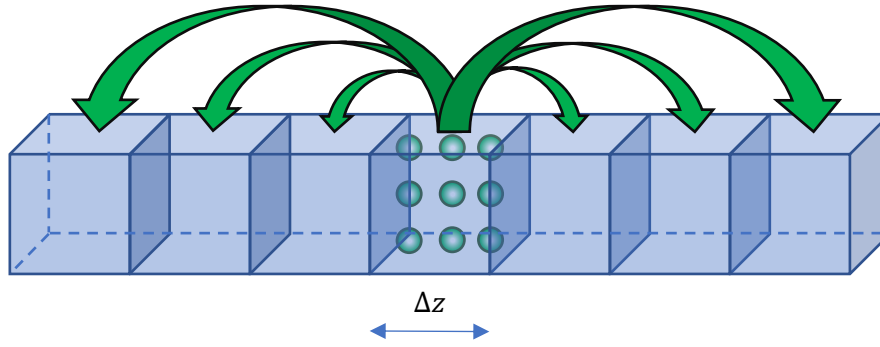


Figura 2.11 – Esquema de fluxo não local.

Aplicando a Eq. (C.29) à Eq. (2.95), pode-se escrever (Schumer *et al.*, 2001; Ochoa-Tapia, *et al.*, 2007):

$$J_{dif} = \frac{1}{2} \left\{ - \left[\frac{1}{2}(1+\beta) \frac{\partial^\alpha}{\partial z^\alpha} + \frac{1}{2}(1-\beta) \frac{\partial^\alpha}{\partial (z-)^{\alpha}} \right] \theta \frac{\Delta z^\alpha}{\Gamma(\alpha+1)} + O(\Delta z^{\alpha+1}) \right\} \frac{1}{\Delta t} \Delta z \quad (2.98)$$

No limite $\Delta x \rightarrow 0$, tem-se a lei de Fick fracionária:

$$J_{dif} = -D_z \left[\frac{1}{2}(1+\beta) \frac{\partial^\alpha \theta}{\partial z^\alpha} + \frac{1}{2}(1-\beta) \frac{\partial^\alpha \theta}{\partial (z-)^{\alpha}} \right] \quad (2.99)$$

Na nova perspectiva, é necessário que os seguintes limites ocorram:

$$\frac{1}{2} \frac{\Delta z^\alpha}{\Gamma(\alpha+1)} \frac{1}{\Delta t} \rightarrow D_z \quad (2.100)$$

e

$$\frac{1}{2} O(\Delta z^{1+\alpha}) \frac{1}{\Delta t} \rightarrow 0 \quad (2.101)$$

Note que, da Eq. (2.100), o coeficiente de dispersão depende agora de uma potência de ordem $\alpha + 1$ de Δz .

Se aplicada a definição de Grünwald-Letnikov para à (2.99), pode-se ver que a lei de Fick fracionária define um vetor de fluxo que leva em conta todo o domínio espacial ponderados pelos pesos de Grünwald. Os pontos mais próximos ao ponto onde se calcula a derivada possuem maior importância do que os pontos mais afastados, já que os pesos de Grünwald decaem assintoticamente de forma exponencial, de acordo com a Eq. (C.20). Desta forma, a lei não limita o movimento de partículas à vizinhança dos pontos, mas permite que existam um pequeno número de partículas que se movam até grandes distâncias do ponto de partida (Benson *et al.*, 2000; Schumer, 2009; Ibe, 2013). Desta forma, o fato de levar em conta todo o domínio para o cálculo da derivada fracionária torna ela e a lei de Fick decorrente dela operações não-locais. Pode-se fazer uma discussão mais rebuscada usando o argumento matemático a seguir.

Considere uma derivada ordinária de primeira ordem. A definição da derivada ordinária pode ser posta em uma forma integral usando a função especial delta de Dirac (Herrmann, 2014):

$$\frac{d\theta}{dz} = \begin{cases} 2 \int_{-\infty}^{\infty} dh \delta(h) \theta(z-h), & \text{definição em atraso} \\ 2 \int_{-\infty}^{\infty} dh \delta(h) \frac{\theta(z-h) + \theta(z+h)}{2}, & \text{definição simétrica} \\ 2 \int_{-\infty}^{\infty} dh \delta(h) \theta(z+h), & \text{definição em avanço} \end{cases} \quad (2.102)$$

A função delta de Dirac é definida como uma classe de todas as sequências regulares de boas funções $w(a, x)$, com $a \geq 0$ tal que

$$\delta(x) = \lim_{a \rightarrow 0} w(a, x) \quad (2.103)$$

De forma que a seguinte propriedade é sempre respeitada

$$\theta(0) = \int_{-\infty}^{\infty} dh \delta(h) \theta(h) \quad (2.104)$$

Funções boas são aquelas diferenciáveis em qualquer ponto e um número de vezes arbitrário e cuja ordem dela e suas derivadas é $O(|z|^{-N})$ quando $z \rightarrow \pm\infty$ para qualquer N . Uma sequência de funções $w(a, z)$ é regular se, para qualquer boa função $\theta(z)$:

$$\lim_{a \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} w(a, z) \theta(z) dz \quad (2.105)$$

existe.

Se a for próximo de zero, vale:

$$\lim_{a \rightarrow 0} 2 \int_{-\infty}^{\infty} dh w(a, h) \theta(z \pm h) \approx \lim_{a \rightarrow 0} 2 \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} dh w(a, h) \theta(z \pm h) = \theta(z) \quad (2.106)$$

Neste caso, as definições integrais de derivadas locais, Equações (2.102) são equivalentes à definição tradicional de derivada. A derivada utiliza todos os valores da função em uma vizinhança de raio ε arbitrariamente pequeno. Assim, enquanto a derivada fracionária toma uma convolução com a função potência ao longo de todo o domínio da função, a derivada convencional pode ser vista como uma convolução com uma função regular $w(a, t)$ ao longo apenas da vizinhança imediata de um ponto. Na Figura 2.12, ilustra-se o conceito de convolução das derivadas fracionárias ao longo de todo o domínio espacial de forma visual.

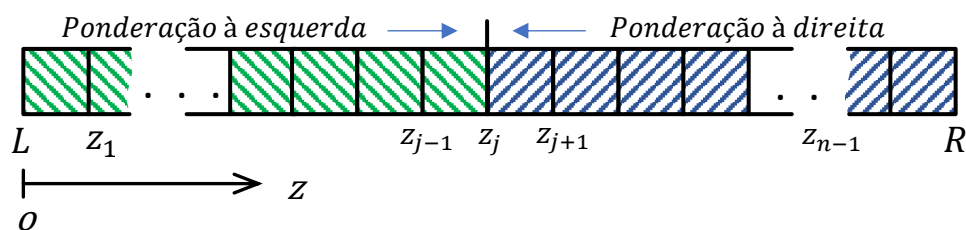


Figura 2.12 – Ilustração do conceito de convolução das derivadas fracionárias.

Quando a variável em que se opera a derivada fracionária é o tempo, diz-se que a equação apresenta memória do fenômeno.

2.8 Soluções Analíticas das Equações Simplificadas.

A Eq. (2.84) é uma equação diferencial parcial fracionária. Tal como as conhecidas equações diferenciais parciais, a existência e unicidade da solução de tais equações está condicionada às condições de contorno escolhidas para o estudo.

Para o problema de fluxo, dois problemas são de maior interesse: o problema de valor inicial (P.V.I.) e o problema de valor de contorno (P.V.C.) (Mainardi *et al.*, 2001).

Para o problema de condições iniciais, as condições de contorno e inicial são:

$$P.V.I. \begin{cases} \theta(-\infty, t) \rightarrow \theta_o \\ \theta(z, 0) = \theta_i \\ \theta(+\infty, t) \rightarrow \theta_o \end{cases} \quad (2.107)$$

$$P.V.C. \begin{cases} \theta(0+, t) \rightarrow \theta_o \\ \theta(z, 0) = \theta_i \\ \theta(+\infty, t) \rightarrow \theta_i \end{cases} \quad (2.108)$$

Para o problema de valor inicial, a solução é dada por meio da técnica de transformada de Fourier (Benson, 1998; Moraes, 2013; Moraes, 2017). Como já se partiu do argumento de uma partícula que se espalha no tempo de acordo com a distribuição estável para se chegar à equação que se procura resolver, esta distribuição já é a solução da equação dadas as condições (2.107):

$$\theta(z, t) = \theta_o + (\theta_o - \theta_i) f_z \left(z; \alpha, \beta, a, t, (D_z t)^{1/\alpha} \right) \quad (2.109)$$

Quando $\alpha = 2$, retoma-se a distribuição gaussiana.

Para o problema de valores de contorno (Eq. (2.108)), que são de maior interesse para ajustes experimentais, ainda não há métodos de soluções analíticas dadas as ferramentas matemáticas

existentes atualmente, sendo soluções analítica do problema obtidas como novos resultados desta dissertação por meio de artifício de construção fundamentada nas soluções do caso inteiro. A solução da equação no caso clássico foi obtida em Cavalcante e Zornberg (2017a). A solução pode ser obtida por uma mudança de variáveis que leva a equação de Richards a uma equação do formato da equação de difusão, solução da nova equação com condições de contorno e inicial alteradas e posterior retrossubstituição para as variáveis originais.

Primeiro, efetua-se uma substituição para tornar as condições de contorno nulas:

$$\theta^* = \theta_o - \theta \quad (2.110)$$

De forma que o problema pode ser tomado por:

$$\frac{\partial \theta^*}{\partial t} = -a_s \frac{\partial \theta^*}{\partial z} + D_z \frac{\partial^2 \theta^*}{\partial z^2} \quad (2.111)$$

Submetido às condições:

$$P.V.C. \begin{cases} \theta(0+, t) \rightarrow \theta_o - \theta_i \\ \theta(z, 0) = 0 \\ \theta(+\infty, t) \rightarrow 0 \end{cases} \quad (2.112)$$

sujeita às condições (2.108). Efetua-se a transformação:

$$\theta(z, t) = g(z, t) \exp\left(\frac{a_s z}{2D_z} - \frac{a_s^2 t}{4D_z}\right) \quad (2.113)$$

Tal substituição transforma o problema em uma difusão simples

$$\frac{\partial g}{\partial t} = D_z \frac{\partial^2 g}{\partial z^2} \quad (2.114)$$

submetida às novas condições:

$$P.V.C. = \begin{cases} g(0+, t) \rightarrow (\theta_o - \theta_i) \exp(a_s t / 4D_z) \\ g(z, 0) = 0 \\ g(+\infty, t) \rightarrow 0 \end{cases} \quad (2.115)$$

O novo problema pode ser resolvido trocando-se a condição não nula na Eq. (2.115) por um delta de Dirac da forma $\delta(t)$, o que resulta no problema de determinar a função de Green para o problema. Em seguida, resolve-se a equação por meio da transformada de Laplace e toma-se a convolução da solução com a condição de contorno antiga. Por fim, a solução em termos de θ é obtida por substituição reversa. A solução Cavalcante e Zornberg (2017a) é, portanto:

$$\theta = \theta_i + \frac{(\theta_o - \theta_i)}{2} \left[\operatorname{erfc}\left(\frac{z - a_s t}{2\sqrt{D_z t}}\right) + \exp\left[\frac{a_s z}{D_z}\right] \operatorname{erfc}\left(\frac{z + a_s t}{2\sqrt{D_z t}}\right) \right] \quad (2.116)$$

onde $erfc(z)$ é a função complementar da função erro.

O termo que envolve a multiplicação da função erro complementar por uma função exponencial adiciona uma assimetria à solução da equação. Quando o valor de $a_s z / D_z$ se torna grande, a distribuição se torna mais próxima de uma curva simétrica e o segundo termo pode ser desprezado sem adicionar grandes erros (Ogata e Banks, 1961). A curva resultante tem um formato sigmoidal e é simétrica.

$$\frac{\theta}{\theta_0} \approx \theta_i + \frac{(\theta_o - \theta_i)}{2} \left[erfc \left(\frac{z - a_s t}{2\sqrt{D_z t}} \right) \right] \quad (2.117)$$

2.9 Métodos Numéricos

A solução de equações diferenciais parciais do tipo advecção e dispersão pode ser feita por diversos métodos. Um dos métodos mais simples e usuais e que mantém os resultados acurados é o método das diferenças finitas. Estudos de equações de fluxo são frequentemente feitos utilizando este método (Cavalcante e Zornberg, 2017b).

Embora seja bastante usual, o método de diferenças finitas apresenta resultados com dispersão numérica no caso da equação de fluxo não saturado. Estes resultados são causados na combinação entre o desenvolvimento do termo advectivo e o termo dispersivo. Uma das formas de se resolver o problema da dispersão numérica é aplicar o algoritmo CIP (*Cubic-interpolated pseudo particle*) para ajustar a parcela advectiva do transporte e manter a parcela dispersiva com desenvolvimento em diferenças finitas (Cavalcante e Zornberg, 2017b).

A solução numérica de equações diferenciais fracionárias possui alguns métodos numéricos já consolidados. Os métodos mais tradicionais utilizam desenvolvimento das derivadas fracionárias em sua forma integral por meio da combinação entre integração numérica e o método das diferenças finitas ou encontrando-se a relação entre a definição de derivada utilizada e a definição de Grünwald-Letnikov e usando esta última para aproximação numérica (Li e Zeng, 2012).

O modelo de Grünwald-Letnikov transladado aproxima as derivadas fracionárias utilizando um truncamento no somatório infinito que define a derivada fracionária (Meerschaert e Tadjeran, 2004; Meerschaert e Tadjeran, 2006). O método é chamado de transladado porque o somatório não é efetuado até o ponto em que se deseja calcular a derivada, mas até o ponto seguinte (ou anterior, no caso de derivada à direita). Isto é feito porque aproximar a derivada fracionária da

equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária usando o somatório até o ponto exato gera um método que não converge.

No que segue, introduz-se o método CIP (Takewaki *et al.*, 1985; Takewaki *et al.*, 1987) e o método de Grünwald-Letnikov transladado (Meerschaert e Tadjeran, 2004; Meerschaert e Tadjeran, 2006). As equações de transporte em meios porosos possuem dois termos distintos no aspecto físico do movimento: a parcela advectiva – ilustrada pelo termo de derivada primeira – e a parcela dispersiva – ilustrada pelo termo de segunda ordem. Para a aplicar o CIP à advecção-dispersão, deve-se dividir as parcelas de transporte por meio da técnica numérica da separação no tempo (Cavalcante e Zornberg, 2017b).

O método CIP resolve equações de transporte advectivo dada na forma:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -a_s \frac{\partial \theta}{\partial z} \quad (2.118)$$

Realiza-se uma discretização da Eq. (2.118) e aproxima-se a solução usando-se um polinômio cúbico de Hermite. A evolução de θ é obtida do fato de que, no transporte advectivo, a função em dado ponto do espaço e instante de tempo deve ser igual ao valor da célula vizinha imediatamente anterior no instante de tempo imediatamente anterior. O método CIP será desenvolvido em equações para o caso específico do resultado desta dissertação. a Eq. (2.118) Para que o método CIP seja estável e convergente, o processo iterativo correspondente ao avanço devido à dispersão e o processo correspondente ao avanço em advecção devem ser estáveis separadamente. O critério de estabilidade para o transporte advectivo individualmente é (Cavalcante e Zornberg, 2017b):

$$\left(\frac{a_s \Delta t}{\Delta z} \right) \leq 1 \quad (2.119)$$

Para desenvolver o método de Grünwald-Letnikov transladado, retoma-se a definição de derivada de Grünwald-Letnikov, Equações (C.3) e (C.4):

$$\frac{d^\alpha \theta}{dz^\alpha} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^\alpha} \sum_{j=0}^{(R-L)/h} \frac{\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(\alpha-j+1)\Gamma(j+1)} (-1)^j \theta(z-jh) \quad (2.120)$$

$$\frac{\partial^\alpha \theta}{\partial^\alpha (z-)} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^\alpha} \sum_{j=0}^{(R-L)h} \frac{\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(\alpha-j+1)\Gamma(j+1)} (-1)^j \theta(z+jh) \quad (2.121)$$

onde R e L são os limites superior e inferior do domínio. As definições (2.120) e (2.121) são definições discretas da derivada de Grünwald-Letnikov. Note que, caso os limites do domínio sejam infinitos, o limite superior do somatório apenas se reduz a infinito, voltando às definições (C.3) e (C.4). Para se aproximar uma derivada fracionária, basta truncar as definições retirando

o limite $h \rightarrow 0$. Desde que se utiliza um número adequado de termos, a aproximação se mantém boa:

$$\frac{d^\alpha \theta}{dz^\alpha} \approx \frac{1}{h^\alpha} \sum_{j=0}^{(R-L)/h} \frac{\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(\alpha-j+1)\Gamma(j+1)} (-1)^j \theta(z-jh) \quad (2.122)$$

$$\frac{\partial^\alpha \theta}{\partial z^\alpha(z-)} \approx \frac{1}{h^\alpha} \sum_{j=0}^{(R-L)/h} \frac{\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(\alpha-j+1)\Gamma(j+1)} (-1)^j \theta(z+jh) \quad (2.123)$$

Meerschaert e Tadjeran (2004) mostraram que o refino da malha espacial h gera soluções numéricas que não convergem quando se aproxima as derivadas fracionárias usando a Eq. (2.122) e a Eq. (2.123) para a advecção-dispersão fracionária. Para resolver este problema mantém-se a aproximação por meio da Derivada de Grünwald-Letnikov, mas transladas em uma célula para a direita na derivada à esquerda e uma célula para a esquerda na derivada a esquerda. Com isto, a aproximação mantém o erro com mesma ordem de grandeza e torna a aproximação convergente. Assim, tem-se o método de Grünwald-Letnikov transladado:

$$\frac{d^\alpha \theta}{dz^\alpha} \approx \frac{1}{h^\alpha} \sum_{j=0}^{(R-L)/h} \frac{\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(\alpha-j+1)\Gamma(j+1)} (-1)^j \theta(z-(j-1)h) \quad (2.124)$$

$$\frac{\partial^\alpha \theta}{\partial z^\alpha(z-)} \approx \frac{1}{h^\alpha} \sum_{j=0}^{(R-L)/h} \frac{\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(\alpha-j+1)\Gamma(j+1)} (-1)^j \theta(z+(j-1)h) \quad (2.125)$$

Para a derivada de primeira ordem no tempo, pode-se usar diferenças finitas em avanço (método explícito) ou em atraso (método implícito). Os métodos implícitos têm vantagem de serem incondicionalmente convergentes, mas são computacionalmente mais custosos do que os métodos explícitos (Celia e Bouloutas, 1990; Bouloutas, 1989).

Para resolver a Eq. (3.32) por meio do método das diferenças finitas, basta aplicar o desenvolvimento da Eq. (2.118) em atraso no espaço para o termo advectivo e usar as Equações (2.124) e (2.125) para desenvolver o termo difusivo. A equação resultante é resolvida iterativamente em um único passo por iteração.

O método de Grünwald-Letnikov transladado foi demonstrado originalmente apenas para o caso de uma difusão pura e seu critério de estabilidade, neste caso, é dado por (Meerschaert e Tadjeran, 2004; Meerschaert e Tadjeran, 2006):

$$\left(\frac{\Delta t \alpha D_z}{\Delta z^\alpha} \right) \leq 1 \quad (2.126)$$

3 MATERIAIS E MÉTODOS

3.1 Materiais

Para validação do modelo proposto nesta dissertação, foram utilizados dados provenientes da tese de doutorado de Azevedo (2016), defendida na Universidade de Austin, Texas. Os dados foram obtidos de uma coluna de solo de grandes dimensões com 120cm de altura de solo totalmente instrumentada com aferição de dados em tempo real. O aparato experimental é mostrado na Figura 3.1.

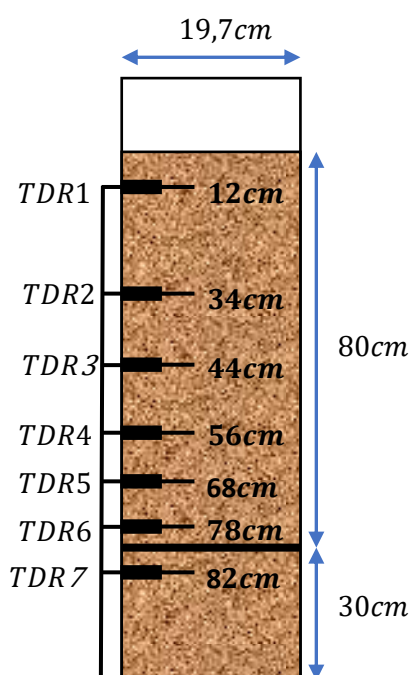


Figura 3.1 – Aparato experimental do ensaio em coluna de grandes dimensões (120cm), desenho esquemático modificado de Azevedo (2016).

A coluna mostrada no esquema da Figura 3.1 possui diâmetro de 19,7 cm e é feita de acrílico. A leitura do teor de umidade foi feita utilizando-se TDRs nas alturas indicadas da figura. A enumeração dos TDRs é feita de cima para baixo e apenas os TDRs 1, 2, 3 e 4 foram utilizados para o ajuste das curvas do modelo. A precisão dos TDRs é de $\pm 1\%$.

O solo utilizado foi classificado como argila. Foi feita uma compactação em camadas de 5 cm até 80% do peso específico seco máximo de acordo com o ensaio Proctor Normal. O topo de toda camada compactada foi escarificado para melhorar a conexão hidráulica com a camada

seguinte. O topo da coluna foi coberto com papel plástico para minimizar a evaporação. O teor de umidade volumétrico de água alvo era de 0,15. A condutividade hidráulica na condição saturada do solo é de $8,2 \times 10^{-5} \text{ cm/s}$. A bomba foi calibrada para manter uma velocidade de Darcy de $2,14 \times 10^{-5} \text{ cm/s}$. O teor de umidade volumétrico ao qual corresponde este fluxo em condições estacionárias é de 0,30. O teor de umidade volumétrico residual medido é de 0,04 e o teor de umidade volumétrico na situação saturada é de 0,42.

A curva característica é mostrada na Figura 3.2.

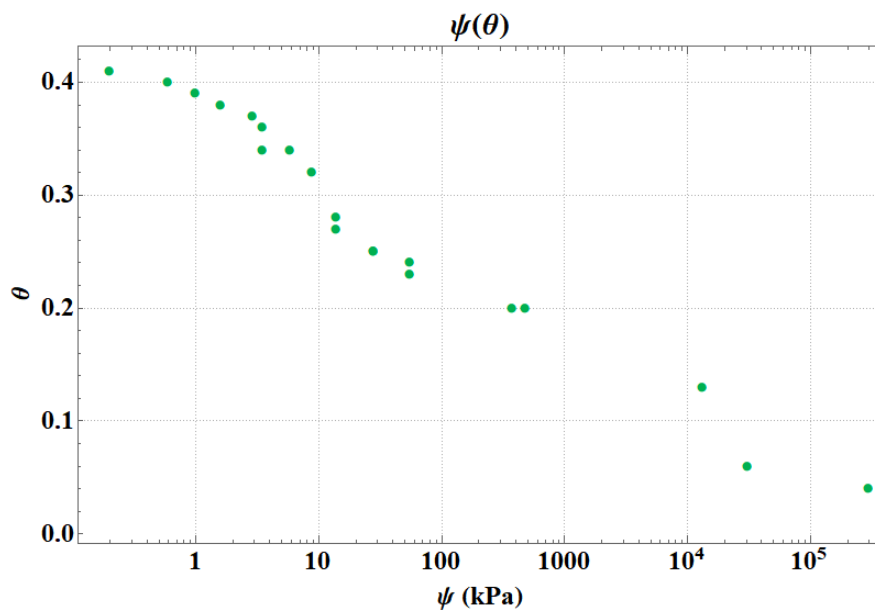


Figura 3.2 – Curva característica do solo estudado.

Além disto, as curvas de frente de umidade obtidas dos TDRs são mostradas na Figura 3.3.

No que concerne à parte computacional do trabalho, foi utilizado o software *Mathematica Wolfram*, versão 11 (Wolfram Research, 2018). As rotinas numéricas foram implementadas e as funções estáveis foram obtidas usando o comando *StableFuncion* e os ajustes feitos usando a função *NonLinearModelFit*, intrínseco ao programa.

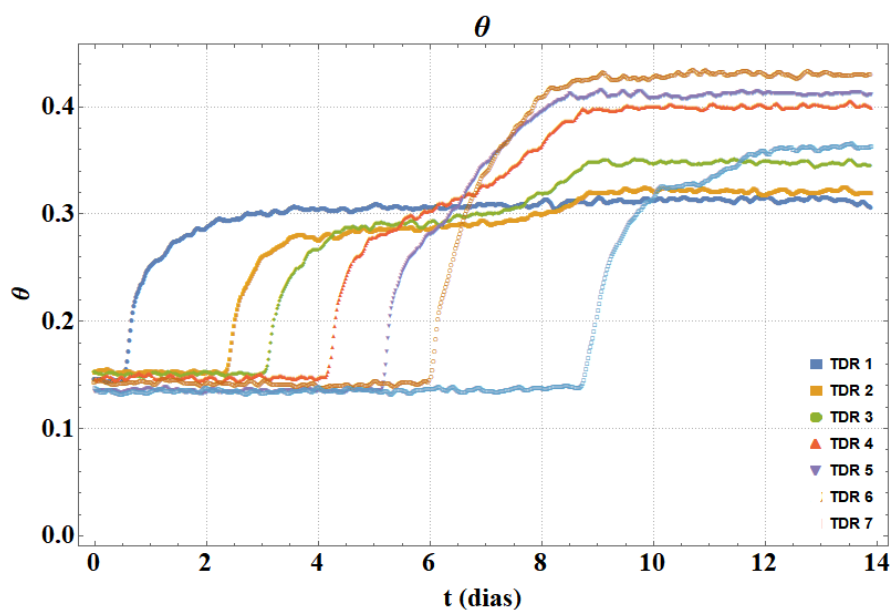


Figura 3.3 – Medições do avanço de frente de umidade obtidas da coluna de solo.

3.2 Métodos

Os métodos adotados podem ser divididos em quatro etapas principais: formulação do novo modelo, solução analítica do modelo, solução numérica do modelo, validação com resultados experimentais (Figura 3.4). Adota-se a definição de derivada fracionária de Weyl (Oliveira e Machado, 2014), porque esta definição decorre naturalmente dos argumentos estatísticos que fazem surgir os modelos de descrição fracionária.

O modelo final obtido é unidimensional e busca-se adequar seus dados a ensaios de infiltração em coluna, com condições de contorno específicas.

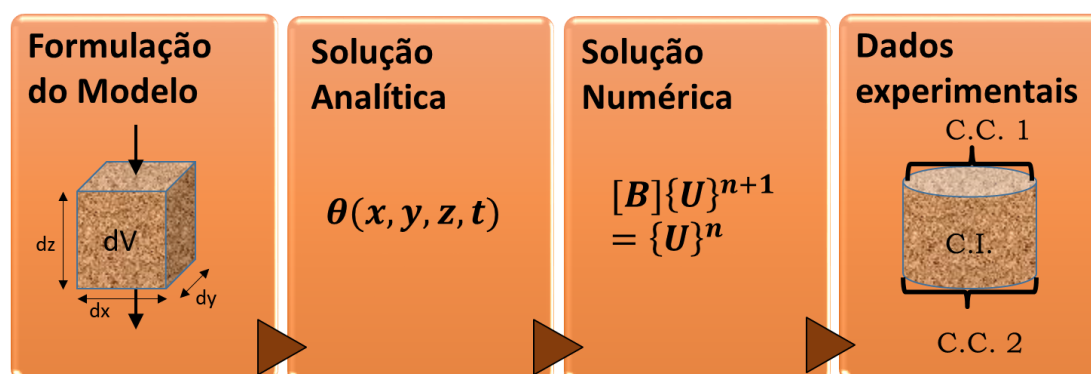


Figura 3.4 – Resumo dos passos da metodologia a ser executada durante a confecção da dissertação.

3.2.1 Formulação do Novo Modelo

A formulação do modelo foi fundamentada na linha desenvolvida por Bhattacharya *et al.* (1976), Yanovsky *et al.* (2000), Zoia *et al.* (2010), Moraes e Cavalcante (2014), Moraes e Cavalcante (2015) e Cavalcante e Zornberg (2017a).

O modelo é, primeiramente, formulado utilizando argumentos estatísticos acerca do movimento de *quasi*-moléculas de água, introduzindo-se as funções de distribuição estáveis em sua formulação de forma conveniente. Esta primeira abordagem dá uma justificativa microscópica ao argumento. Em seguida, o modelo é desenvolvido a partir de argumentos macroscópicos acerca da movimentação da água em um volume de controle.

Toma-se um vetor de fluxo constituído com partes advectiva e dispersiva, todavia, utiliza-se a parcela dispersiva em sua forma fracionária. Na equação clássica de advecção-dispersão, a lei de Fick apresenta derivada de primeira ordem da concentração e a equação final tem um termo de primeira ordem espacial, um de segunda ordem espacial e um de primeira ordem temporal. Como a nova lei de Fick tem ordem entre 0 e 1, o modelo obtido deverá ter um termo de primeira ordem espacial, um de ordem entre 1 e 2 espacial e um de primeira ordem temporal. A parcela dispersiva, por conter a derivada espacial fracionária, será responsável por carregar as propriedades de interesse do cálculo fracionário que serão estudadas no decorrer da dissertação. A Figura 3.5 mostra um esquema dos procedimentos adotados na formulação.

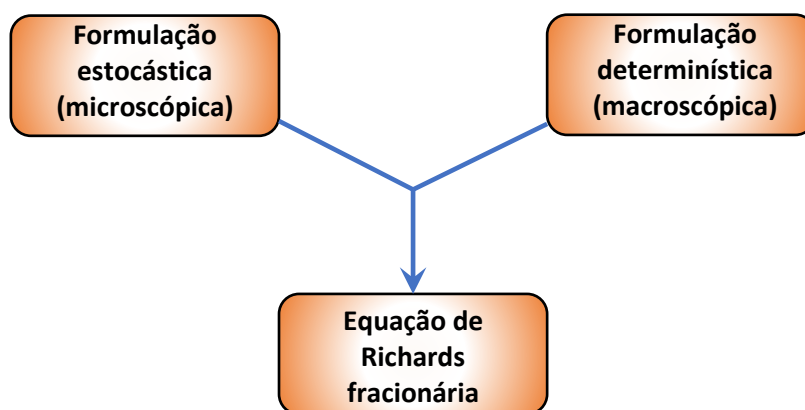


Figura 3.5 – Esquema da formulação do modelo fracionário de fluxo de água em meio poroso não saturado.

3.2.2 Solução Analítica do Modelo

Após a definição do modelo, busca-se sua solução analítica. Propõe-se novas soluções analíticas construídas por analogia às soluções dos modelos de Benson (1998), Moraes (2013) e Moraes (2017). Nesta seção, são propostas três soluções diferentes que, posteriormente, serão testadas quanto sua eficácia no ajuste de dados experimentais. As construções são formuladas partindo-se da solução simplificada da equação de fluxo em sua forma clássica, isto é, são generalizações da Eq. (2.117). A Figura 3.6 mostra um esquema dos procedimentos adotados na formulação da solução analítica.

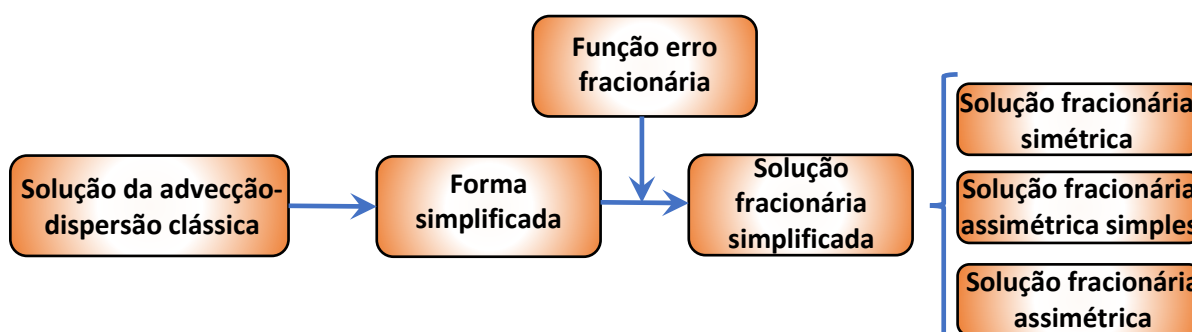


Figura 3.6 – Esquema da formulação da solução analítica modelo fracionário de fluxo de água em meio poroso não saturado.

3.2.3 Validação com Resultados Experimentais

A validação da equação analítica será realizada mediante ajuste de dados experimentais retirados da tese de doutorado de Azevedo (2016). Os dados serão retirados de ensaios de infiltração em coluna. Os dados são apresentados em um gráfico de teor de umidade volumétrica versus tempo para diversas profundidades no corpo de prova.

As soluções analíticas (solução de Cavalcante e Zornberg (2017a) e as três novas soluções fracionárias de fluxo propostas nesta dissertação) serão ajustadas aos resultados, derivando na validação do modelo analítico para o caso estudado. Como resultado do ajuste, serão obtidas ordens de derivada fracionária, coeficientes de velocidade advectiva e dispersão hidráulica. Os ajustes serão realizados de duas formas distintas.

A primeira consiste em ajustar a curva característica e plotar a curva de condutividade hidráulica não saturada dos solos de acordo com o modelo de Cavalcante e Zornberg (2017a). Com os parâmetros de fluxo (k_s , θ_r , θ_s , coeficientes de ajuste δ), calcula-se a velocidade

advectiva e coeficiente de dispersão do modelo e obtém-se as curvas de ajuste. Como a velocidade imposta pelo modelo de Cavalcante e Zornberg (2017a) é mais rápida do que a prevista em ensaios, acrescenta-se ao ajuste um parâmetro de correção de velocidade (*cor*) para melhor ajustar os dados.

A segunda forma de ajuste consiste em ajustar a solução de Cavalcante e Zornberg (2017a) para encontrar os parâmetros de velocidade advectiva e de dispersão hidráulica sem utilizar dados das curvas de condutividade hidráulica não-saturada e curva característica. Ajuste-se a solução analítica da equação de fluxo fracionária diretamente com o código do *Mathematica*, gerando valores de velocidade advectiva e coeficiente de dispersão como resultados. Para as curvas de solução fracionária, supõe-se que os parâmetros ajustados com a solução de ordem inteira fornecem os parâmetros de fluxo para o caso fracionário. Deve-se corrigir o coeficiente de dispersão com um termo que mantém a coerência de unidades, desenvolvido junto com o modelo fracionário. Para estas curvas fracionárias, ajusta-se as soluções analíticas de forma que se obtenha valores de índices de estabilidade e coeficientes de assimetria como resultados dos ajustes.

Os dados são provenientes de ensaios em coluna unidimensional que foram originalmente concebidos para testar o efeito de barreiras capilares nos geossintéticos. É possível estudar o fluxo no solo por meio dos dados de umidade em posições anteriores àquela em que se forma a barreira capilar.

O efeito da barreira capilar faz-se sentir em torno do sexto dia de medições. Para evitar seu efeito na modelagem e ainda ter dados suficientes para executar as rotinas de ajuste, a Figura 3.3 será estudada até o sétimo dia. A Figura 3.7 mostra um esquema dos procedimentos adotados na formulação da solução analítica.

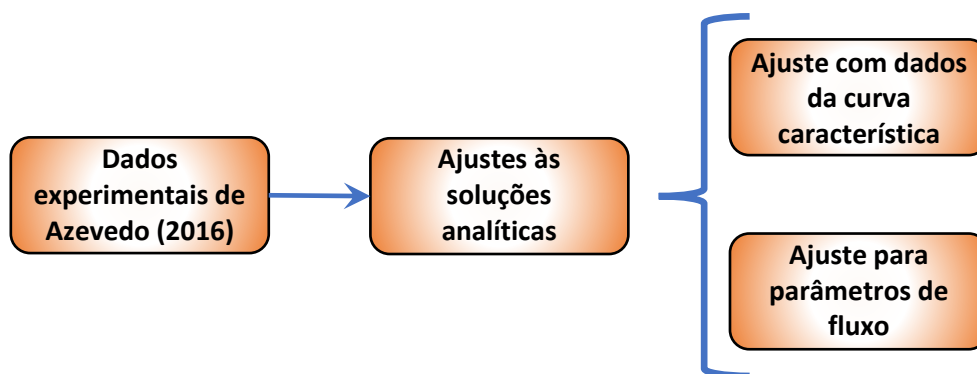


Figura 3.7 – Esquema da formulação da solução analítica modelo fracionário de fluxo de água em meio poroso não saturado.

3.2.4 Solução Numérica

Para resolver a equação numericamente, adota-se um método de diferenças finitas fracionário para a parcela difusiva combinado com o método “Cubic interpolated Pseudo-Particle (CIP)” para a parcela advectiva. O tipo de formulação de diferenças finitas fracionário adotado é o método Grünwald-Letnikov transladado. A combinação entre CIP e diferenças finitas seguirá a técnica de separação no tempo das parcelas de transporte. Além disto, emprega-se o modelo de diferenças finitas em atraso tradicional à parcela advectiva para que se possa realizar uma comparação entre o novo método numérico e um método tradicional do cálculo fracionário.

Dentre as soluções construídas, adota-se a que apresenta menores desvios para testar as soluções analíticas.

A aplicação do método CIP em conjunto com o método de Grünwald-Letnikov transladado é inédita. Por isto, um estudo do comportamento do método é realizado para que se possa aferir as características de precisão, estabilidade e convergência. Neste estudo, os valores de desvio médio e máximo com relação à solução analítica são fornecidos. Adota-se $a_s = 0,5$ m/dia e utiliza-se diferentes valores de α e β . O estudo do método é feito durante o intervalo de 40 dias e os dados de erro são retirados das curvas de 10 dias, 20 dias, 30 dias, 40 dias.

Com a finalidade de fazer um estudo comparativo da precisão dos métodos, analisa-se o valor máximo e médio dos desvios absolutos e relativos com relação à solução analítica. A análise é com relação a dois parâmetros. Primeiro é feito um estudo variando o índice de estabilidade e mantendo os outros parâmetros fixos. Depois realiza-se um estudo variando o parâmetro de assimetria mantendo-se os outros parâmetros. O refino da malha espacial e o tamanho do passo no tempo são mantidos fixos em todas as análises. A velocidade advectiva é adotada como constante para todos os estudos e arbitrada em $a_s = 0,5$ m/dia. Os estudos do método aferem o movimento da água durante o intervalo de 40 dias e os dados de erro são retirados das curvas de 10 dias, 20 dias, 30 dias, 40 dias.

Para a análise de como as soluções se comportam sob diferentes assimetrias, arbitra-se $D_z=0,07$ $m^{1,7}/dia$; $\alpha=1,8$; $\Delta t = \Delta x = 0,5$ m e β indo de -1 a 1 assumindo os valores -1 ; $-0,5$; 0 ; $0,5$; 1 .

Para a análise de como as soluções se comportam sob diferentes índices de estabilidade, arbitra-se $D_z=0,07$ $m^{1,7}/dia$; $\beta=0$; $\Delta t = \Delta x = 0,5$ m e α assumindo os valores $1,3$; $-1,5$; $1,7$; $1,9$. A Figura 3.8 mostra um esquema que resume o que foi citado nesta subseção.

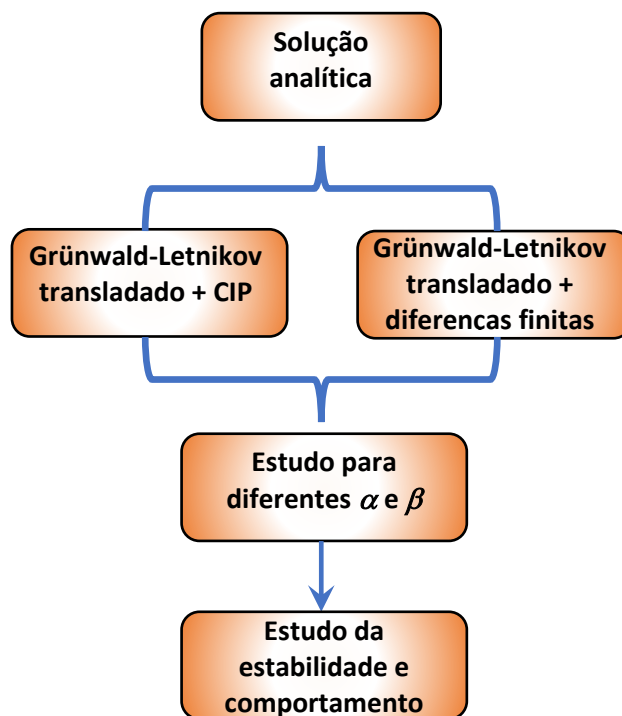


Figura 3.8 – esquema do estudo dos métodos numéricos para os problemas fracionários.

4 RESULTADOS

4.1 Formulação do modelo

Nesta seção, o modelo de fluxo em meios porosos que utiliza as ferramentas do cálculo fracionário é formulado. Há duas formas de se obter a mesma equação: uma partindo da perspectiva de movimento de *quasi*-moléculas de água no meio e outra supondo um vetor de fluxo com parcelas advectiva e dispersiva fracionária. O argumento microscópico acerca do movimento da água é utilizado para fundamentar o macroscópico. Ao final da formulação, obtém-se uma equação de fluxo análoga à clássica equação de Richards, com termos de derivadas fracionárias substituindo os termos clássicos de derivada segunda da equação original. Por estes motivos, chama-se esta equação de equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária ou equação de Richards fracionária.

Considere que a água no solo poder ser dividida em *quasi*-moléculas. Cada *quasi*-molécula efetua um movimento aleatório em um dado sentido e o conjunto se movimenta globalmente em direção ao gradiente do campo de forças. O movimento aleatório de cada *quasi*-molécula é descrito de forma geral como um ruído que segue não uma distribuição gaussiana, mas uma distribuição α -estável de Lévy. A equação de movimento para estas moléculas é, baseado na Eq. (2.50):

$$\frac{dz}{dt} = -\mu z + \sigma^\alpha L(t) \quad (3.1)$$

onde $L(t)$ representa esta distribuição α -estável padrão (normalizada) de Levy com parâmetros $(\alpha, \beta, 0, 1)$, μ representa um desvio do movimento na direção do campo de forças imposto pelo e σ^α é a intensidade da dispersão. A Eq. (3.1) leva em conta a possibilidade dos movimentos aleatórios serem de grande tamanho, representando o escoamento das moléculas de água com algum canal que constitua um caminho preferencial no solo ou a possibilidade de retenção da *quasi*-molécula em alguma região que impeça o escoamento imediatamente. Da mesma forma que a Eq. (2.50) reduz-se à equação de Richards linear em termos do teor volumétrico de água, também é possível mostrar que a Eq. (3.1) enseja a descrição do movimento a partir da Eq. (2.85), isto é, a Eq. (2.50) fornece uma justificativa mecânica para o emprego da equação de Richards fracionária. A dedução matemática é similar àquela feita para o caso clássico, e pode ser vista no Apêndice D. A formulação presente neste apêndice para o movimento da água em solos não saturados constitui um resultado inédito desta dissertação.

Nesta seção, mostra-se de forma completa a dedução macroscópica da equação de equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária.

Considere que a equação de Richards possa ser obtida da perspectiva de transporte difusivo e advectivo. Considere que a parcela difusiva do transporte não saturado de água seja dada pela lei de Fick fracionária, exposta na Eq. (2.99):

$$\mathbf{J}_{adv} = k(\theta) \quad (3.2)$$

$$\mathbf{J}_{dif} = -D_z(\theta) \left[\frac{(1+\beta)}{2} \frac{\partial^{\alpha-1}\theta}{\partial z^{\alpha-1}} + \frac{(1-\beta)}{2} \frac{\partial^{\alpha-1}\theta}{\partial(z-)^{\alpha-1}} \right] \quad (3.3)$$

O balanço do fluxo dado pela soma das parcela (3.2) e (3.3) resulta imediatamente em:

$$-\frac{\partial}{\partial z} \left\{ k(\theta) - D_z(\theta) \left[\frac{(1+\beta)}{2} \frac{\partial^\alpha \theta}{\partial z^\alpha} + \frac{(1-\beta)}{2} \frac{\partial^\alpha \theta}{\partial(z-)^{\alpha}} \right] \right\} = \frac{\partial \theta}{\partial t} \quad (3.4)$$

Da regra da cadeia e, considerando o coeficiente de dispersão constante:

$$-\frac{\partial \theta}{\partial z} \frac{\partial k}{\partial \theta} + D_z(\theta) \left[\frac{(1+\beta)}{2} \frac{\partial^\alpha \theta}{\partial z^\alpha} + \frac{(1-\beta)}{2} \frac{\partial^\alpha \theta}{\partial(z-)^{\alpha}} \right] = \frac{\partial \theta}{\partial t} \quad (3.5)$$

Na perspectiva clássica, o coeficiente de dispersão era dado pela Eq. (2.22):

$$D_z(\theta) = \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \frac{k_z(\theta)}{\rho_w g} \quad (3.6)$$

e a velocidade advectiva é dada por:

$$a_s = \frac{\partial k_z}{\partial z} \quad (3.7)$$

Todavia, manter a definição original da dispersão causa inconsistência na análise de unidade da Eq. (3.5). Além disto, o coeficiente de dispersão clássico é dado pelo limite apresentado na Eq. (2.26), que diverge na situação fracionária. Portanto ele não pode mantido para o caso fracionário. A solução é relacionar a Eq. (2.100) à definição fracionária do coeficiente de dispersão, dada pela Eq. (2.100).

É possível relacionar uma incremento inteiro Δz com uma potência real entre 0 e 1 dele por meio da Eq. (C.30) (Kavvas *et al.*, 2017). Adote $f(z) = z$; $a = (z - \Delta z)$ e $\xi = z$ na Eq. (C.30) para ver que:

$$z \approx z - \Delta z + \frac{(\Delta z)^{\alpha-1}}{\Gamma(\alpha)} {}_{z-\Delta z}^c D_z^{\alpha-1} z \quad (3.8)$$

Calculando a derivada de Caputo da Eq. (3.8) e rearranjando-a, tem-se:

$$(\Delta z)^{\alpha-1} \approx \frac{\Gamma(\alpha)\Gamma(3-\alpha)}{z^{2-\alpha}} (\Delta z) \quad (3.9)$$

A Eq. (3.9) fornece uma relação útil entre uma potência de um incremento e o próprio incremento.

Usando a Eq. (3.9), manipula-se o coeficiente de dispersão fracionário:

$$\frac{1}{2\Gamma(\alpha)} \frac{\Delta z^\alpha}{\Delta t} \approx \frac{\Gamma(3-\alpha)}{z^{2-\alpha}} \frac{1}{2} \frac{\Delta z^2}{\Delta t} \quad (3.10)$$

Na Eq. (3.10), no limite $\Delta z \rightarrow 0$, a Eq. (3.10) se torna exata. Substituindo as expressões correspondentes aos coeficientes de dispersão:

$$D_z^\alpha = \frac{\Gamma(3-\alpha)}{z^{2-\alpha}} D_z \quad (3.11)$$

Tal expressão fornece uma correspondência ponto a ponto entre os coeficientes de dispersão. Por outro lado, medidas experimentais de teor de umidade pelo tempo não são calculadas para valores instantâneos de parâmetros, mas de médias ao longo da extensão dos corpos de prova. A extensão do corpo de prova é o comprimento efetivo do domínio espacial em situação real, que é adotado na teoria como infinito. A expressão que se busca é a comparação entre os valores médios dos coeficientes de dispersão. Pode-se obter tal expressão integrando a Eq. (3.11) ao longo da extensão do corpo de prova e dividindo o resultado pela própria extensão. Suponha um corpo de prova de comprimento L , tem-se:

$$\bar{D}_z^\alpha = \frac{1}{L} \int_0^L \frac{\Gamma(3-\alpha)}{z^{2-\alpha}} dz \bar{D}_z \quad (3.12)$$

$$\bar{D}_z^\alpha = \frac{\Gamma(3-\alpha)}{\alpha-1} L^{\alpha-2} \bar{D}_z \quad (3.13)$$

Substituindo a Eq. (2.22) na Eq. (3.13)

$$\bar{D}_z^\alpha = \frac{\Gamma(3-\alpha)}{\alpha-1} L^{\alpha-2} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \frac{k_z(\theta)}{\rho_w g} \quad (3.14)$$

A expressão (3.14) fornece uma forma de calcular o coeficiente de dispersão fracionário mantendo os métodos já conhecidos de determinação dos parâmetros hidráulicos do solo. Desta forma, de posse de ensaios para determinação da curva característica e condutividade hidráulica não saturada, é possível obter o coeficiente de dispersão hidráulico fracionário por meio do ajuste escolhido corrigido com um termo que depende apenas da dimensão do corpo de prova ensaiado.

O termo de dependência da dimensão do corpo de prova é da forma de uma lei de potência e simboliza a correção do efeito escala no coeficiente de dispersão clássico. As unidades do coeficiente [$L^\alpha T^{-1}$] agora são coerentes com a equação.

4.2 Soluções analíticas

As soluções fracionárias são obtidas por construções a partir da solução proposta por Cavalcante e Zornberg (2017a) do problema de valores de contorno, substituindo a função erro por sua versão fracionária. Para introduzi-las, é preciso definir primeiramente uma extensão fracionária da função erro.

Como mostrado na Seção 2.8, a equação de Richards, as condições de contorno e inicial original do trabalho de Cavalcante e Zornberg (2017a) são:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\frac{\partial \theta}{\partial z} a_s + D_z \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} \quad (3.15)$$

$$P.V.C. \begin{cases} \theta(0+, t) \rightarrow \theta_o \\ \theta(z, 0) = \theta_i \\ \theta(+\infty, t) \rightarrow \theta_i \end{cases} \quad (3.16)$$

A solução da Eq. (3.15), submetida às condições da Eq. (3.16) é dada pela Eq. (2.116):

$$\theta = \theta_i + \frac{(\theta_o - \theta_i)}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{z - a_s t}{2\sqrt{D_z t}} \right) + \exp \left[\frac{a_s z}{D_z} \right] \operatorname{erfc} \left(\frac{z + a_s t}{2\sqrt{D_z t}} \right) \right] \quad (3.17)$$

Retomando-se a solução simplificada da equação de fluxo, a Eq. (2.117)

$$\theta = \theta_i + \frac{(\theta_o - \theta_i)}{2} \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{z - a_s t}{2\sqrt{D_z t}} \right) \right] \quad (3.18)$$

Lembrando que a troca da Eq. (3.17) pela Eq. (3.18) é lícita quando o termo adimensional duz/D_z for grande (Ogata e Banks, 1961).

A função erro é, por sua vez, duas vezes a metade positiva da curva gaussiana com variância 1/2 e desvio padrão $\sqrt{2}/2$.

$$\frac{\operatorname{erf}(z)}{2} = \int_0^z \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp(-\zeta^2) d\zeta \quad (3.19)$$

onde $\operatorname{erf}(z)$ é a função erro.

Define-se a função erro fracionária, denotada por $\operatorname{serf}_\alpha(z)$ (Benson, 1998):

$$\operatorname{serf}_\alpha(z) = 2 \int_0^z f_z(\zeta; \alpha, 0, a_s t, (D_z t)^{1/\alpha}) d\zeta \quad (3.20)$$

Note que a função erro fracionária mantém a característica de ser simétrica, o que é percebido por $\beta = 0$.

Por analogia, então, a solução do modelo fracionário para as condições de contorno (2.108) é:

$$\theta(z,t) = \theta_i + \frac{(\theta_o - \theta_i)}{2} \left[1 - \operatorname{serf}_\alpha \left(\frac{z - a_s t}{2\sqrt{D_z t}} \right) \right] \quad (3.21)$$

Note que a Eq. (3.21) mantém a simetria da solução clássica da qual se parte. A Eq. (3.21) é a primeira construção de solução proposta nesta dissertação. A Eq. (3.21) será denominada de solução simétrica da equação do fluxo de água em solos não saturado fracionária

O fato da solução proposta na Eq. (3.21) ser simétrica retira um importante parâmetro que poderia melhorar o ajuste das curvas experimentais: o parâmetro de assimetria. Seria, do ponto de vista de ajuste, interessante propor uma solução que leve em conta este parâmetro visando ajustar melhor fluxos que apresentem algum desbalanço em qual direção é mais solicitada para a dispersão. Neste sentido, é natural propor outra solução, partindo-se da Eq. (3.21), que permita à função erro fracionária tomar parâmetros de assimetria não nulos.

Usando a Eq. (3.20) e a Eq. (3.21) e permitindo ao parâmetro de assimetria assumir outros valores, propõe-se outra solução para a equação de Richards fracionária:

$$\theta(z,t) = \theta_i + \frac{(\theta_o - \theta_i)}{2} \left[1 - 2 \int_0^z f_z(\zeta; \alpha, \beta, a_s t, (D_z t)^{1/\alpha}) d\zeta \right] \quad (3.22)$$

A Eq. (3.22) é mais geral do que a Eq. (3.21) e constitui uma solução construída da equação de fluxo fracionária que leva em conta a assimetria da dispersão do fluxo. A Eq. (3.22) é chamada de solução assimétrica simples da equação do fluxo de água em solos não saturado fracionária. Por fim, é possível propor uma solução que leva em conta a assimetria tal qual a Eq. (3.22) a partir de uma perspectiva diferente da apresentada. A última solução proposta é análoga àquela proposta por Moraes (2017) no estudo de contaminação do solo. Usando a solução completa (Eq. (3.17)) da equação de Richards clássica, vale:

$$\theta_o - \theta_i = \frac{(\theta_o - \theta_i)}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{z - a_s t}{2\sqrt{D_z t}} \right) + \exp \left[\frac{a_s z}{D_z} \right] \operatorname{erfc} \left(\frac{z + a_s t}{2\sqrt{D_z t}} \right) \right]_{z=0} \quad (3.23)$$

Assim, a Eq. (2.116) pode ser enxergada como a razão entre as soluções da equação de fluxo clássica calculadas em posições diferentes:

$$\frac{\theta - \theta_i}{\theta_o - \theta_i} = \frac{\left[\operatorname{erfc} \left(\frac{z - a_s t}{2\sqrt{D_z t}} \right) + \exp \left[\frac{a_s z}{D_z} \right] \operatorname{erfc} \left(\frac{z + a_s t}{2\sqrt{D_z t}} \right) \right]}{\left[\operatorname{erfc} \left(\frac{z - a_s t}{2\sqrt{D_z t}} \right) + \exp \left[\frac{a_s z}{D_z} \right] \operatorname{erfc} \left(\frac{z + a_s t}{2\sqrt{D_z t}} \right) \right]_{z=0}} \quad (3.24)$$

Supondo que seja possível trocar a solução completa pela forma simplificada:

$$\frac{\theta - \theta_i}{\theta_o - \theta_i} = \frac{\left[\operatorname{erfc} \left(\frac{z - a_s t}{2\sqrt{D_z t}} \right) \right]}{\left[\operatorname{erfc} \left(\frac{-a_s t}{2\sqrt{D_z t}} \right) \right]} \quad (3.25)$$

Sabe-se que a função erro complementar pode ser escrita por:

$$\operatorname{erfc} \left(\frac{z - a_s t}{2\sqrt{D_z t}} \right) = 2 - 2F_N(z; 1, 0) \quad (3.26)$$

onde $F_N(z; \mu, \sigma)$ a função de distribuição acumulada normal.

Substituindo a Eq. (3.25) na Eq. (3.25), tem-se:

$$\frac{\theta - \theta_i}{\theta_o - \theta_i} = \frac{1 - F_N(z; a_s t, \sqrt{D_z t})}{1 - F_N(0; a_s t, \sqrt{D_z t})} \quad (3.27)$$

Substituindo a função de distribuição acumulada da distribuição normal pela função de distribuição acumulada da função estável, constrói-se a última solução fracionária estudada neste trabalho:

$$\frac{\theta - \theta_i}{\theta_o - \theta_i} = \frac{1 - F_Z(z; \alpha, \beta, a_s t, (D_z t)^{1/\alpha})}{1 - F_Z(0; \alpha, \beta, a_s t, (D_z t)^{1/\alpha})} \quad (3.28)$$

ou

$$\theta(z, t) = \theta_i + (\theta_o - \theta_i) \left(\frac{1 - F_Z(z; \alpha, \beta, a_s t, (D_z t)^{1/\alpha})}{1 - F_Z(0; \alpha, \beta, a_s t, (D_z t)^{1/\alpha})} \right) \quad (3.29)$$

onde $F_Z(z; \alpha, \beta, \mu, \sigma)$ denota a função de distribuição acumulada da função de distribuição estável.

A Eq. (3.29) é outra solução da equação de fluxo não saturado fracionária que leva em conta a assimetria da dispersão do problema. A Eq. (3.29) é chamada de solução assimétrica da equação do fluxo de água em solos não saturado fracionária.

4.3 Validação das soluções analíticas com dados da curva característica

Para ajustar os dados experimentais, considerou-se que o teor de umidade volumétrico inicial é de 0,15 em acordo com os dados experimentais. Além disto, para uma vazão constante da

bomba, é possível encontrar um teor de umidade volumétrico constante de entrada no corpo de prova. Este teor de entrada que permanece fixo é de 0,3. As condições de contorno e inicial adotadas equivalem a um problema de valor de contorno dado por:

$$P.V.C. \begin{cases} \theta(0+, t) \rightarrow 0,3 \\ \theta(z, 0) = 0,15 \\ \theta(+\infty, t) \rightarrow 0,15 \end{cases} \quad (3.30)$$

Ajusta-se as soluções apresentadas na Seção 4.1 e submetida a estas condições de contorno e inicial aos dados experimentais coletados. Mais especificamente, as soluções ajustadas são a Eq. (3.18), Eq. (3.21), Eq. (3.22) e Eq.(3.29).

4.3.1 Solução da equação de fluxo de água em solos não saturados clássica

O ajuste usando a solução da equação de fluxo de água em solos não saturados clássica é obtido diretamente com os valores de velocidade advectiva e coeficiente de dispersão ajustados da curva característica com o modelo de Cavalcante e Zornberg (2017a) substituídos na Eq. (3.18), sendo necessário corrigir a velocidade para que as curvas coincidam. A barreira capilar não afeta somente o espalhamento da frente de umidade, mas também o avanço do seu centro de massa. Por este mesmo motivo que escolheu-se impor um fator de correção à velocidade advectiva de Cavalcante e Zornberg (2017a).

De acordo com o modelo de Cavalcante e Zornberg (2017a), a velocidade advectiva é calculada pela Eq. (2.27) e o coeficiente de dispersão é calculado por (2.26), acrescentando a correção dada por (3.13) quando a solução ajustada for fracionária.

O fator de correção imposto para a velocidade é multiplicativo, seguindo a forma:

$$a_{s,ajuste} = a_{s,modelo} \times cor \quad (3.31)$$

Da Eq. (3.31), percebe-se que o fator de correção multiplicativo implica que quando mais próximo o valor de *cor* for da unidade, menor é a correção que foi aplicada à velocidade advectiva do ajuste.

Primeiramente, a curva característica é ajustada com o modelo de Cavalcante e Zornberg (2017a) a partir dos dados de Azevedo (2016). Em seguida, obtém-se a curva de condutividade hidráulica não saturada a partir da curva característica. O resultado é mostrado na Figura 4.1 e na Figura 4.2.

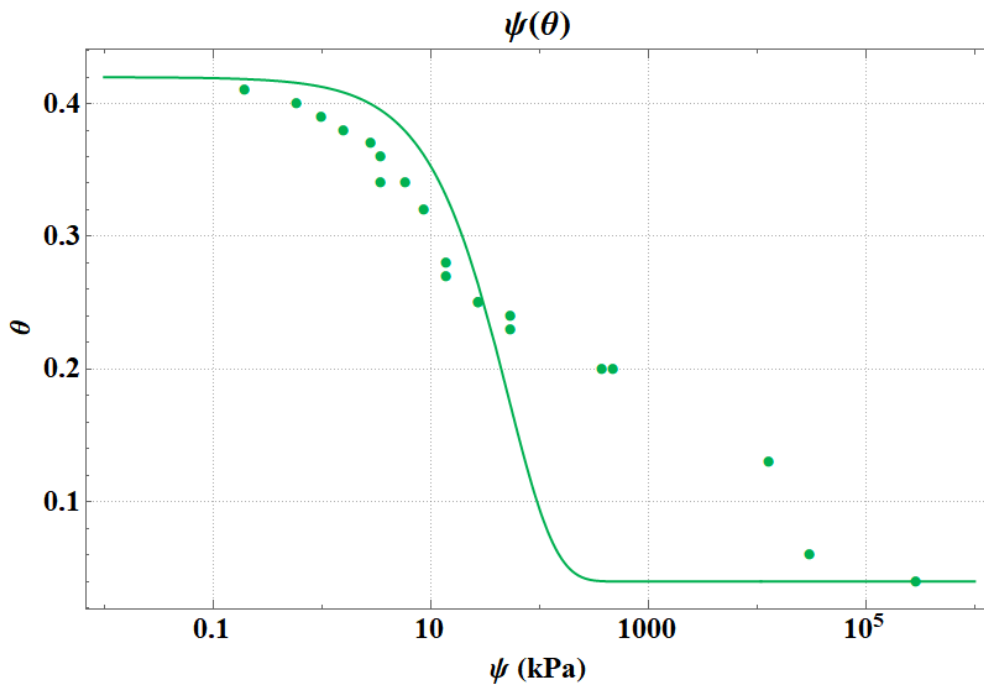


Figura 4.1 – Ajuste do modelo de curva característica de Cavalcante e Zornberg (2017a) para a curva característica ($\delta = 0,01939 Pa^{-1}$).

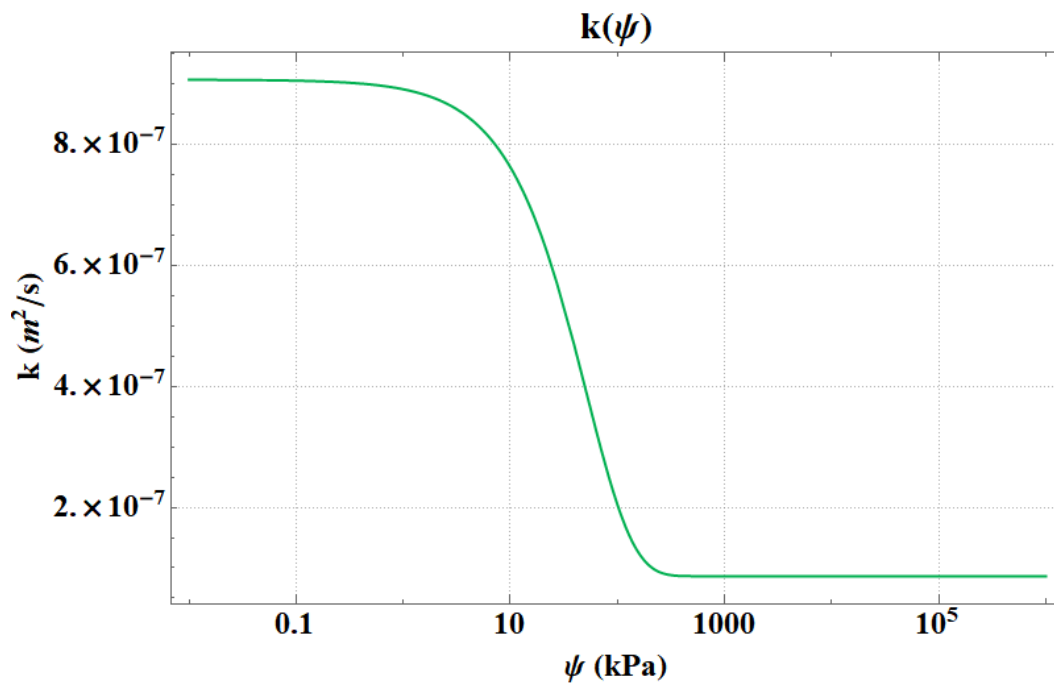


Figura 4.2 – Curva de condutividade hidráulica não saturada do modelo de sucção de Cavalcante e Zornberg (2017a).

O ajuste adotado resulta num coeficiente de velocidade advectiva de $2,158 \times 10^{-6} m/s$ e um coeficiente de ajuste de $\delta = 0,01939 Pa^{-1}$. Para este valor de delta, o coeficiente de dispersão hidráulica da água clássico é de $1,113 \times 10^{-8} m^2/s$.

Para realizar os ajustes usando as soluções fracionárias, deve-se escolher um valor adequado para o termo $L^{\alpha-2}$. Como as curvas de teor de umidade volumétrico no tempo de Azevedo (2016) são obtidas por TDRs para profundidades fixas no corpo de prova, utiliza-se uma abstração para resolver este impasse. É suposto que a altura de solo até onde a leitura é feita corresponde a uma coluna de solo análoga a uma coluna de um ensaio de coluna. Seguindo este raciocínio, adota-se o valor de L como sendo a profundidade dos TDRs lidas a partir da superfície da coluna.

Os ajustes para a solução da equação clássica de Richards são mostrados na Figura 4.3. Os fatores de correção da velocidade são mostrados na Tabela 4.1.

Tabela 4.1 – Parâmetros de ajuste usando o Modelo de Cavalcante e Zornberg (2017a) e solução da equação de fluxo de água em solos não saturados clássica.

<i>TDR</i>	<i>Fator de correção (cor)</i>
1	0,68
2	0,64
3	0,66
4	0,66

Percebe-se que o valor do fator de correção permanece essencialmente o mesmo ao longo das curvas de ajuste, o que indica uma desaceleração que age de forma a decrescer a velocidade de maneira uniforme da curva de chegada comparada ao modelo clássico com coeficientes constantes. O valor do coeficiente de correção ajusta é diferente para o TDR 2 provavelmente devido a aspectos numéricos no método de ajuste aplicado. O TDR 1, por se encontrar mais distante da barreira capilar, necessitou de uma correção pouco menor que os outros.

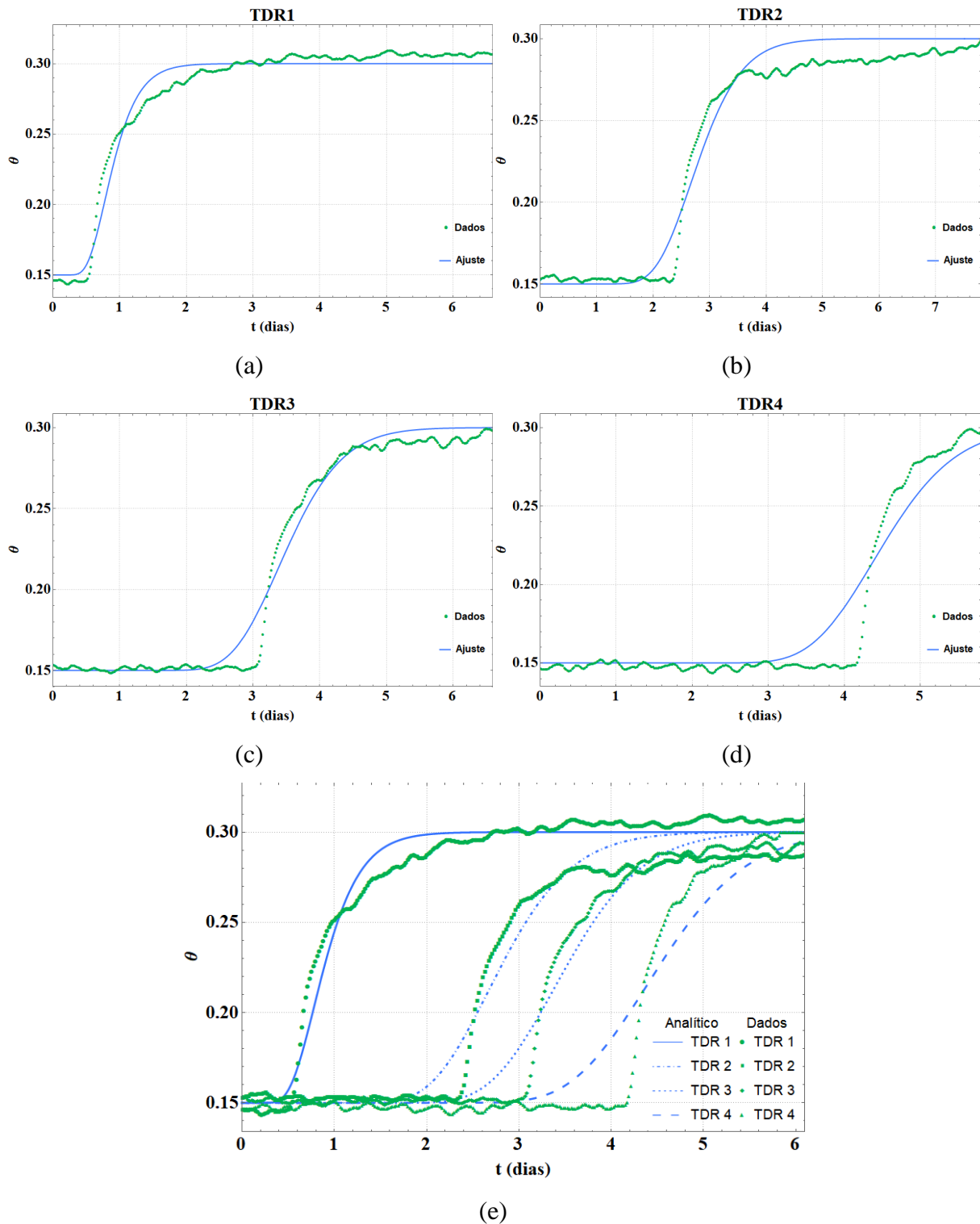


Figura 4.3 – Ajuste usando modelos de Cavalcante e Zornberg (2017a) para solução da equação de fluxo de água em solos não saturados clássica: (a) TDR 1; (b) TDR 2; (c) TDR 3; (d) TDR 4; (e) Todos os ajustes.

É possível perceber que o ajuste para a primeira curva é visualmente melhor do que os outros, sendo que a qualidade do ajuste piora para TDRs mais próximos do ponto de formação da

barreira capilar. Isto ocorre, essencialmente, pela presença da barreira capilar: a umidade registrada pelos TDRs, além de avançar mais lentamente, possui dispersão mais lenta.

A Figura 4.4 mostra os desvios dos ajustes. Os maiores resíduos ocorrem nas regiões de mudança de curvatura das núvens de pontos. O aspecto oscilatório dos gráficos dos resíduos está em concordância com o exposto: as oscilações nos valores medidos de avanço de frente de umidade subtraído da curva suave gerada pelo modelo implica em gráficos com oscilações semelhantes ao dos dados medidos. As regiões de mudança de curvatura são as que apresentam maiores resíduos, principalmente a primeira mudança de curvatura. O maior erro ocorre mais próximo à barreira e possui módulo de 0,05.

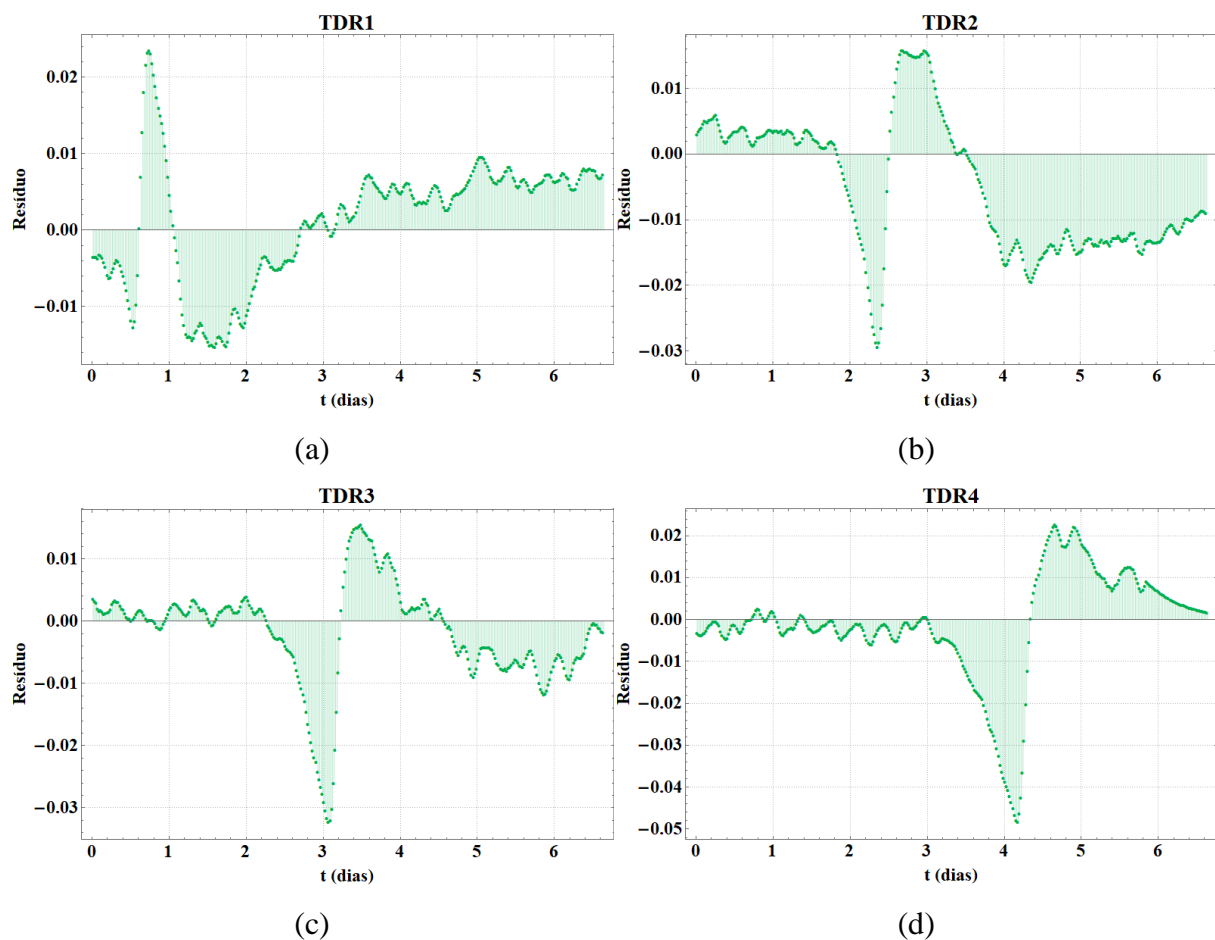


Figura 4.4 – Resíduos dos ajustes usando modelos de Cavalcante e Zornberg (2017a) para solução da equação de fluxo de água em solos não saturados clássica: (a) TDR 1; (b) TDR 2; (c) TDR 3; (d) TDR 4.

4.3.2 Solução simétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária

Os ajustes para a solução simétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária proposta na Eq. (3.21) são mostrados na Figura 4.5. Há uma melhora perceptível no ajuste comparado à solução da equação de fluxo de água em solos não saturados clássica, principalmente no que diz respeito à concordância de curvatura entre dados e ajuste. Por outro lado, ainda há espaço para melhora neste aspecto. Os valores dos parâmetros ajustados seguem na Tabela 4.2.

Os valores de correção da velocidade ficaram mais próximos da unidade com a mudança da solução. O índice de estabilidade ajustado para o TDR 1 foi próximo de 2: neste TDR, a barreira capilar se faz pouco sentida para causar efeito significativo no fluxo. Na prática, pode-se aceitar que a equação de fluxo de água em solos não saturados clássica é o resultado mais adequado para ilustrar as medidas deste TDR. Quando um elemento que influencia no comportamento do fluxo de água se encontra suficientemente distante, mesmo que haja influência global, seu efeito no fluxo decai à medida que se distancia de sua localização. Este comportamento é simulado pelo decaimento exponencial com a distância da solução simétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária. Para os outros TDRs, o índice de estabilidade não apresenta algum padrão perceptível. O TDR 2, apresentou índice de estabilidade mais baixo em 1,282; o que era esperado devido ao aspecto dos dados lidos: há um patamar que não se estabiliza rapidamente, mas cresce lentamente até o valor mais ou menos estável.

Tabela 4.2 – Parâmetros de ajuste usando o Modelo de Cavalcante e Zornberg (2017a) e solução simétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária.

<i>TDR</i>	<i>Fator de correção (cor)</i>	α
1	0,72	1,990
2	0,66	1,282
3	0,68	1,463
4	0,67	1,525

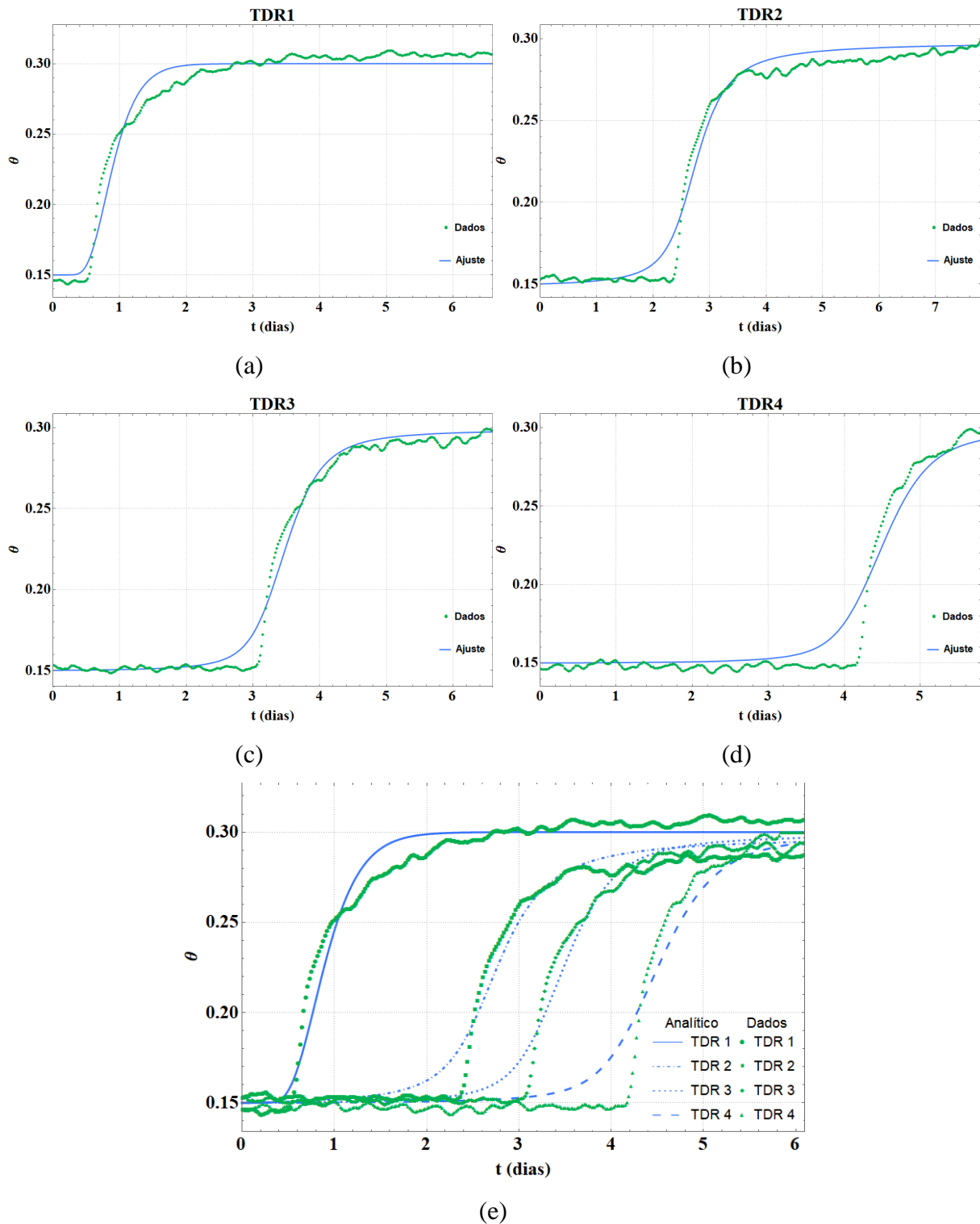


Figura 4.5 – Ajustes usando modelos de Cavalcante e Zornberg (2017a) para solução simétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária: (a) TDR 1; (b) TDR 2; (c) TDR 3; (d) TDR 4; (e) Todos os ajustes.

A Figura 4.6 mostra os desvios dos ajustes. Assim como na solução da equação de fluxo de água em solos não saturados clássica, os maiores resíduos ocorrem nas regiões de mudança de

curvatura das núvens de pontos. Os gráficos corroboram para a afirmação feita com relação ao ganho de precisão. Novamente, os maiores resíduos foram encontrados nas regiões de mudança de curvatura dos modelos. Ainda assim, a solução simétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária apresenta resíduos menores que a solução da equação de fluxo de água em solos não saturados clássica. O maior valor de resíduo encontrado está no TDR 4, ainda próximo à barreira capilar, e seu módulo está em torno de 0,04.

O gráfico de resíduos do TDR 1 é idêntico nas duas soluções, o que indica que a equação de fluxo de água em solos não saturados clássica é adequada para estudar o avanço de umidade a distâncias pouco maiores do ponto de formação da barreira capilar

Também é possível notar que a área hachurada, que ilustra o quanto os resíduos são globalmente grandes – no sentido de que uma área maior implica num ajuste pior –, diminuiu com relação à solução do modelo clássico.

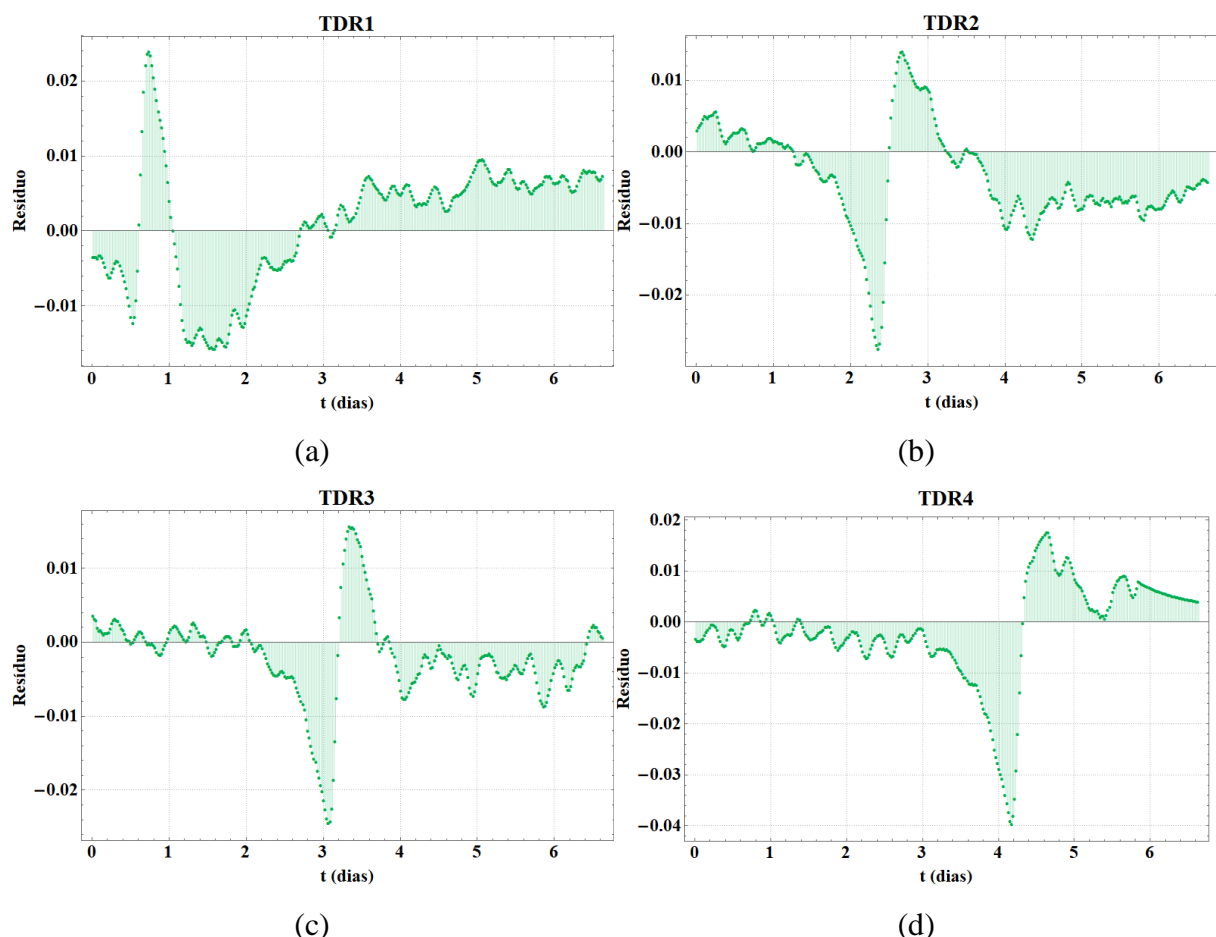


Figura 4.6 – Resíduos dos ajustes usando modelos de Cavalcante e Zornberg (2017a) para solução simétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária: (a) TDR 1; (b) TDR 2; (c) TDR 3; (d) TDR 4.

4.3.3 Solução assimétrica simples da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária

Os ajustes para a solução assimétrica simples da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária são mostrados na Figura 4.7. Os gráficos mostram a melhora nos ajustes quando se acrescenta o efeito da assimetria na solução é significativa para os TDRs 2 e 3. Os valores dos parâmetros ajustados seguem na Tabela 4.3.

Tabela 4.3 – Parâmetros de ajuste usando o Modelo de Cavalcante e Zornberg (2017a) e solução assimétrica simples da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária.

<i>TDR</i>	<i>Fator de correção</i> (<i>cor</i>)	α	β
1	0,72	1,910	-0,990
2	0,59	1,416	-0,972
3	0,65	1,535	-0,648
4	0,66	1,527	-0,145

Os valores dos fatores de correção da velocidade permanecem próximos àqueles da Tabela 4.2. Os coeficientes de estabilidade para os TDRs 3 e 4 aproximaram-se de 1,5; sendo este valor o provável índice de estabilidade do fluxo anômalo apresentado por esta amostra. O valor do índice, para o TDR 1, mantém-se próximo de 2.

Quanto aos parâmetros de assimetria, foi constatado que os valores se tornam mais próximos de zero à medida que o TDR se aproxima da barreira capilar. É importante ressaltar que o parâmetro de assimetria para o TDR 1 tem pouco significado, já que o parâmetro de assimetria perde seu efeito quando o índice de estabilidade se aproxima de 2. Neste sentido, um parâmetro de assimetria próximo de 1 ou -1 pouco muda o ajuste quando o índice de estabilidade está próximo de 2, como é o caso do TDR 1.

Para o TDR 4, o ajuste mostrou-se visualmente muito similar ao apresentado na solução simétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária; apresentando, ainda, um coeficiente de assimetria com valor pouco distante da situação simétrica.

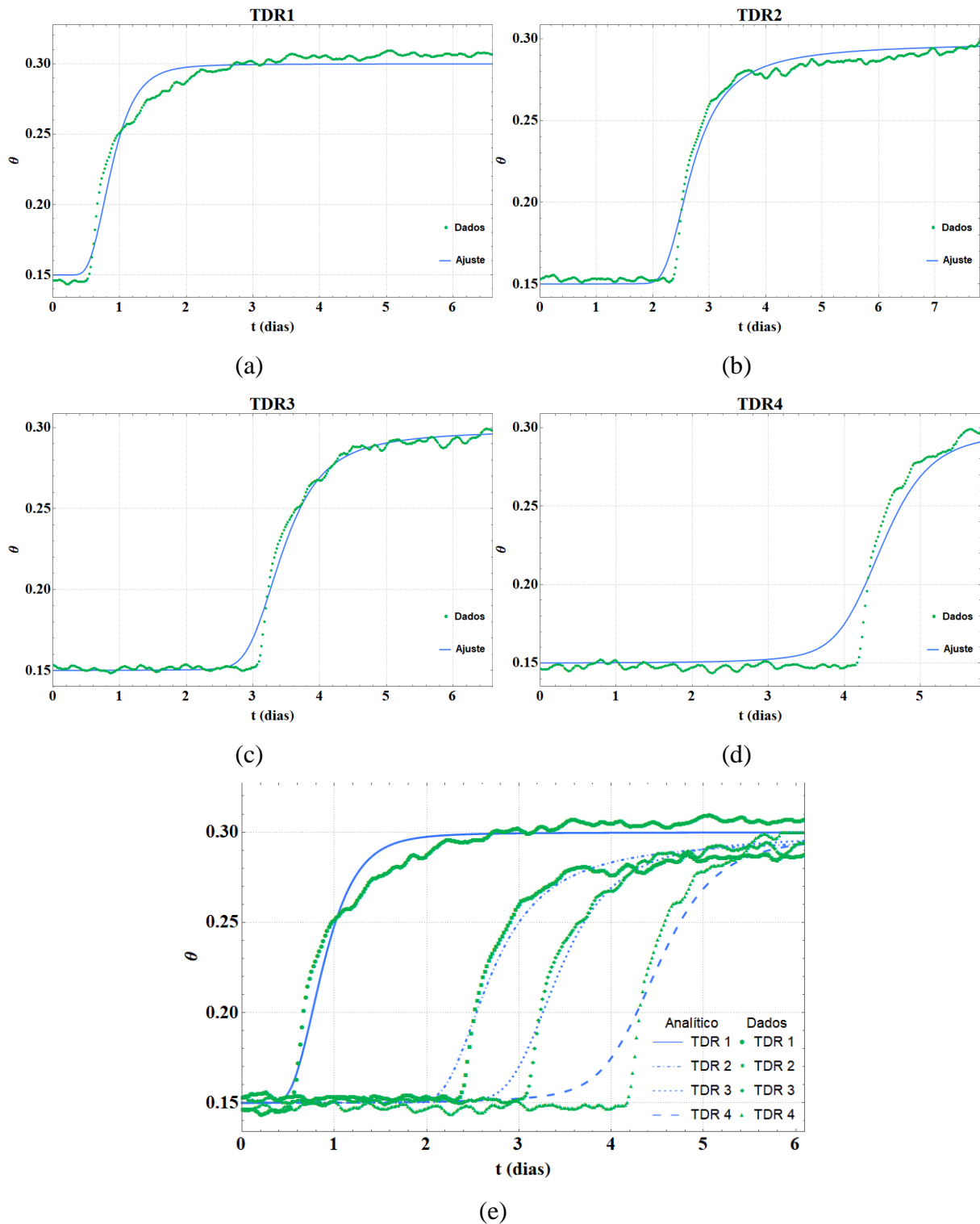


Figura 4.7 – Ajustes usando modelos de Cavalcante e Zornberg (2017a) para solução assimétrica simples da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária: (a) TDR 1; (b) TDR 2; (c) TDR 3; (d) TDR 4; (e) Todos os ajustes.

A Figura 4.8 mostra os desvios dos ajustes. Assim como na solução simétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária, a tendência dos maiores resíduos ocorrerem

nas regiões de mudança de curvatura das núvens de pontos permanece. Não há ganho de precisão significativo. As curvas de resíduos para os TDRs 1 e 4 são idênticas àquelas feitas com a solução simétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária. Para os TDRs 2 e 3, houve ligeiro ganho de precisão: a área hachurada destes resíduos diminuiu se comparada com a solução anterior. Por outro lado, os valores de pico dos resíduos do TDR 3 não diminuíram. Os valores de pico do TDR 2 mostraram-se menores que os valores da solução anterior.

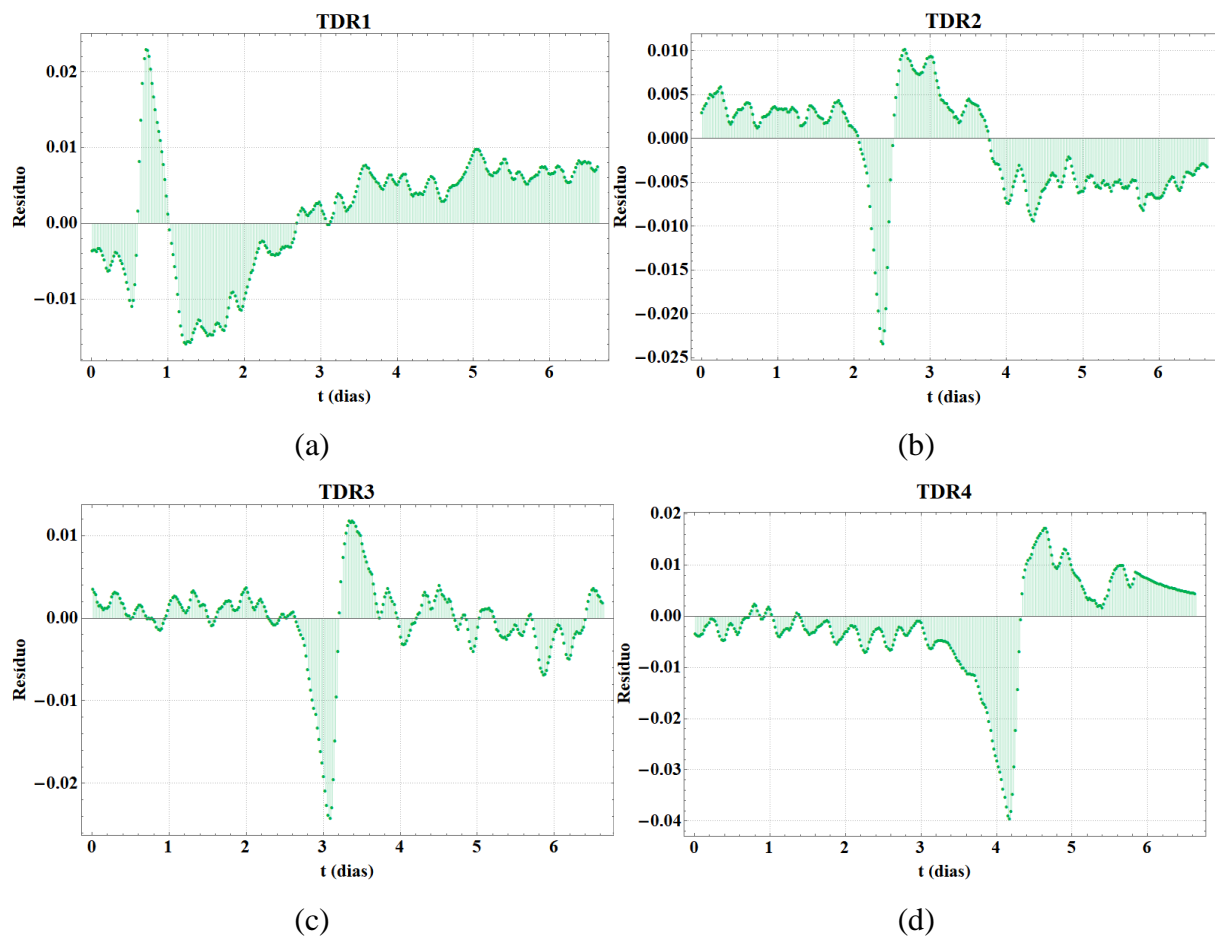


Figura 4.8 – Resíduos dos ajustes usando modelos de Cavalcante e Zornberg (2017a) para solução assimétrica simples da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária:

(a) TDR 1; (b) TDR 2; (c) TDR 3; (d) TDR 4.

4.3.4 Solução assimétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária

Os ajustes para a solução assimétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária (Eq.(3.29)) são mostrados na Figura 4.9. A Tabela 4.4 mostra os valores dos

parâmetros ajustados. Os ajustes obtidos com esta solução diferem imperceptivelmente da solução assimétrica simples da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária. Não há um padrão claro a respeito da variação do índice de estabilidade e do coeficiente de assimetria das soluções. Mesmo assim, os valores dos parâmetros de ajuste obtidos não são iguais àqueles apresentados na solução assimétrica simples da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária.

O índice de estabilidade do TDR 1, desta vez, se distancia um pouco do valor 2, diferente das soluções anteriores, o que indica um maior grau de efeitos anômalos quando o problema é estudado por esta solução. O índice de estabilidade do TDR 2 é 1,317; o menor dos valores obtidos.

Os valores do coeficiente de assimetria tendem a ficar cada vez mais positivos com a proximidade da barreira capilar. Valores negativos do coeficiente de assimetria indicam dispersão atrasada das moléculas de água, enquanto valores positivos indicam fluxo adiantado.

Tabela 4.4 – Parâmetros de ajuste usando o Modelo de Cavalcante e Zornberg (2017a) e solução assimétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária.

<i>TDR</i>	<i>Fator de correção</i> (<i>cor</i>)	α	β
1	0,67	1,586	-0,990
2	0,54	1,317	-0,986
3	0,63	1,465	-0,634
4	0,66	1,502	0,656

A Figura 4.10 mostra os desvios dos ajustes. O aspecto dos gráficos de resíduos é muito similar ao apresentado pela solução assimétrica simples da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária.

Não obstante a similaridade em aspecto dos ajustes e das curvas de resíduos, há sim um ganho mínimo de precisão com o emprego da solução assimétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária, que pode ser aferido pela constatação de que os valores de pico dos resíduos desta solução são ligeiramente menores do que os valores apresentados na solução assimétrica simples da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária. Isto ocorre, inclusive, para o TDR 1, cujo ajuste mostrou-se similar até então para todas as soluções.

O termo no denominador desta solução torna este ganho de precisão pouco se comparado ao aumento do tempo de cálculo para se realizar o ajuste.

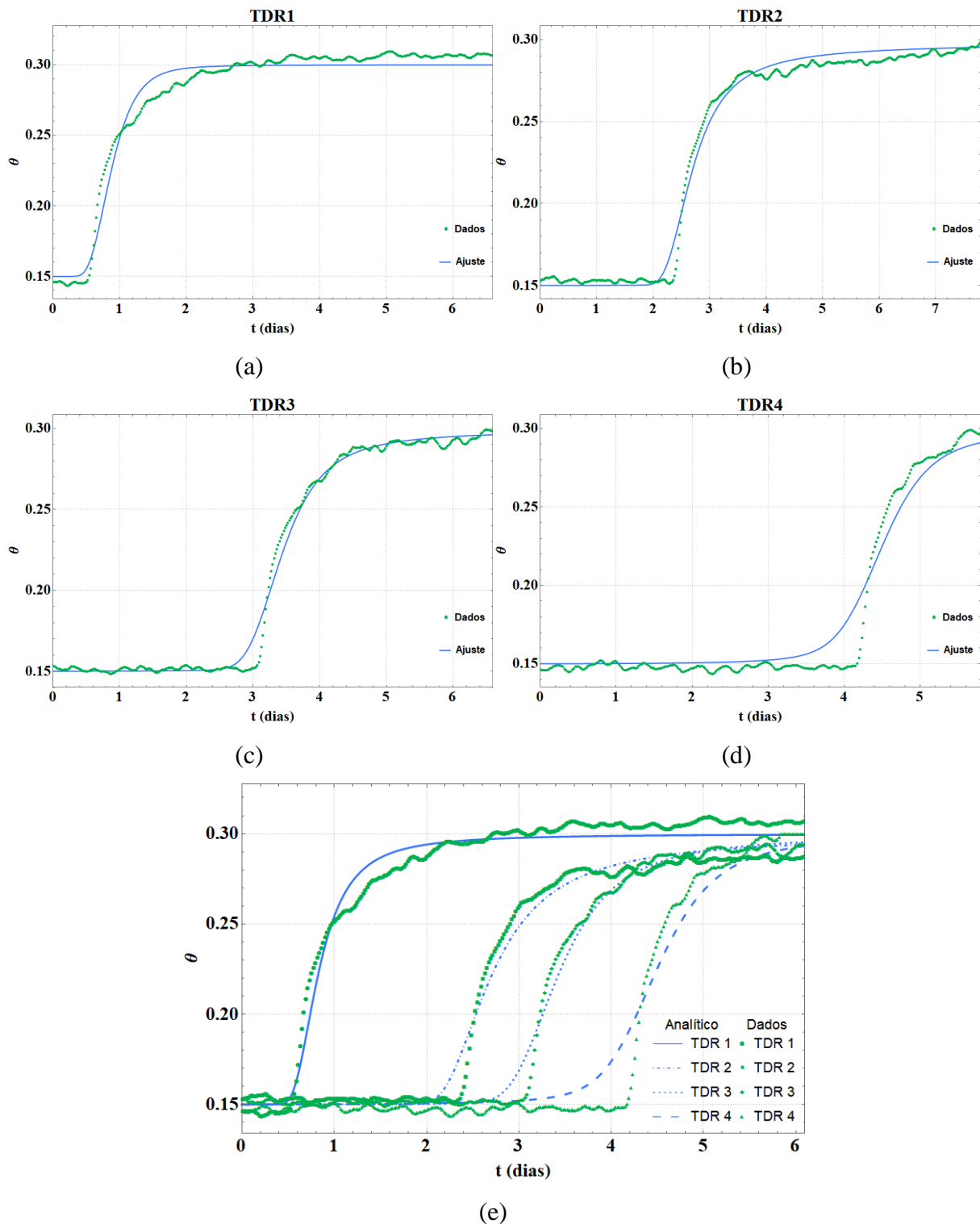


Figura 4.9 – Ajustes usando modelos de Cavalcante e Zornberg (2017a) para solução assimétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária: (a) TDR 1; (b) TDR 2; (c) TDR 3; (d) TDR 4; (e) Todos os ajustes.

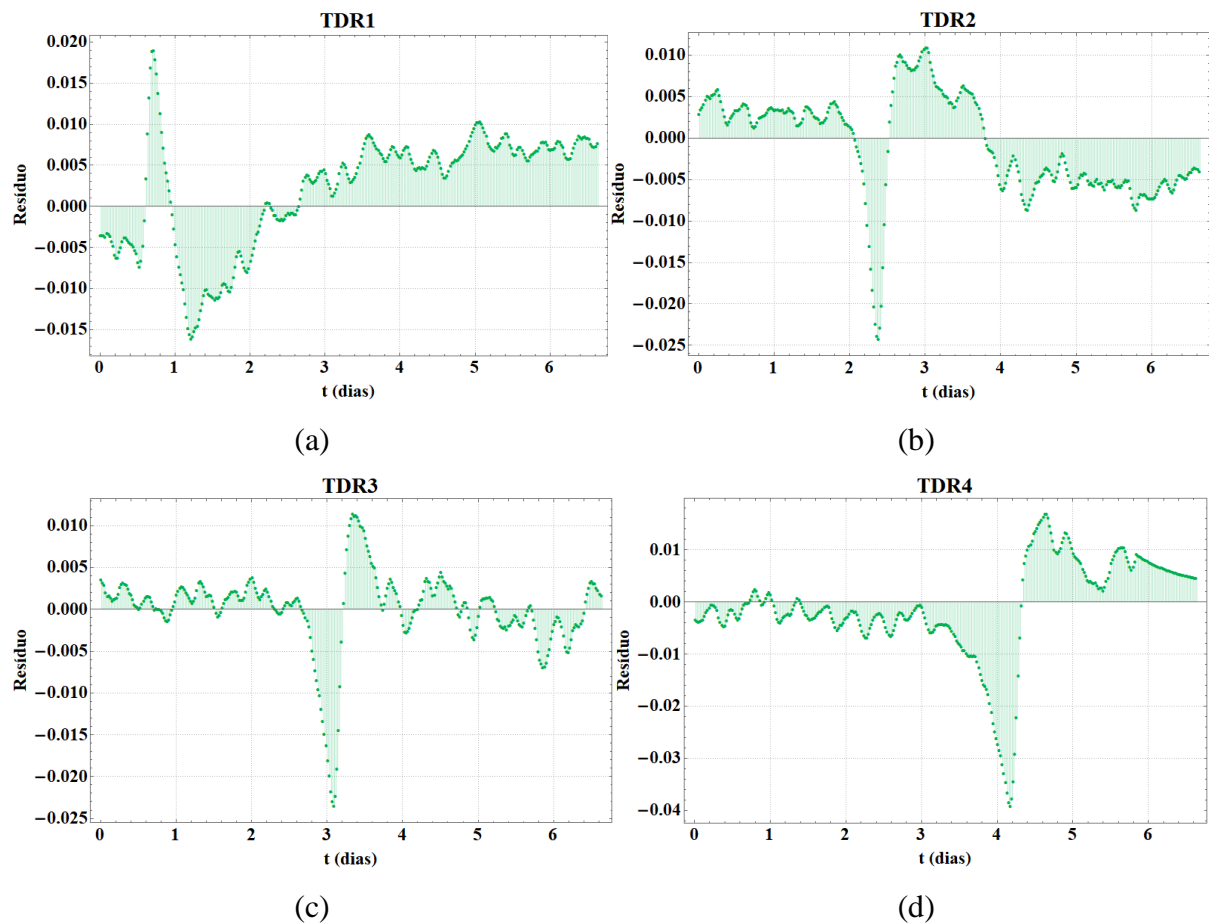


Figura 4.10 – Resíduos dos ajustes usando modelos de Cavalcante e Zornberg (2017a) para solução assimétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária: (a) TDR 1; (b) TDR 2; (c) TDR 3; (d) TDR 4.

4.4 Validação das soluções analíticas a partir dos parâmetros de fluxo

Nos ajustes desta seção, as curvas são ajustadas diretamente para a Eq. (3.18), Eq. (3.21), Eq. (3.29) e condições (3.30). Estes ajustes obtêm os valores de velocidade advectiva e dispersão hidráulica de um ajuste prévio da solução da equação de fluxo de água em solos não saturados clássica. Como uma forma de explorar o potencial destes modelos e com a finalidade de propor uma perspectiva diferente acerca dos parâmetros hidráulicos do solo, os coeficientes de velocidade advectiva e dispersão hidráulica da solução da equação de fluxo de água em solos não saturados clássica ajustada que foram obtidos previamente são aplicados às curvas fracionárias. Matem-se, portanto, o coeficiente de velocidade advectiva clássico e utiliza-se a versão fracionária do coeficiente de dispersão hidráulico que depende do índice de estabilidade e da posição do TDR, como mostra a Eq. (3.14).

Devido à Eq. (3.14), portanto, os valores da velocidade advectiva serão sempre os mesmo para os ajustes, mas os valores de coeficiente de dispersão não. O termo da Eq. (3.14) $\alpha-2$ é sempre negativo e o termo L é sempre menor do que 1. Assim, à medida que se progride para TDRs em maiores profundidades, o termo de correção fracionário aumenta o coeficiente de dispersão e este aumento depende do índice de estabilidade ajustado.

4.4.1 Solução da equação de fluxo de água em solos não saturados clássica

Os ajustes para a solução da equação de fluxo de água em solos não saturados clássica são mostrados na Figura 4.11. Os parâmetros de transporte são mostrados na Tabela 4.5. As soluções são melhores do aquelas obtidas com o modelo de Cavalcante e Zornberg (2017a), podendo ser usadas para fins práticos com desempenho bastante satisfatório

Tabela 4.5 – Parâmetros de ajuste e solução da equação de fluxo de água em solos não saturados clássica.

<i>TDR</i>	<i>a_s (m/s)</i>	<i>D_z (m²/s)</i>
1	$1,41 \times 10^{-6}$	$2,09 \times 10^{-8}$
2	$1,38 \times 10^{-6}$	$1,01 \times 10^{-8}$
3	$1,44 \times 10^{-6}$	$6,62 \times 10^{-9}$
4	$1,44 \times 10^{-6}$	$2,18 \times 10^{-9}$

A velocidade advectiva ajustada segue abaixo daquela prevista no modelo de Cavalcante e Zornberg (2017a), seguindo a tendência dos fatores de correção da Tabela 4.1. A velocidade advectiva tem a tendência de se manter mais ou menos constante, o valor do TDR 2 destoa desta tendência. Os coeficientes de dispersão hidráulica seguem uma tendência decrescente, o que pode ter origem na redução do espalhamento da umidade à medida que a frente úmida se aproxima da barreira capilar.

A Figura 4.12 mostra os desvios dos ajustes. Os maiores resíduos ainda ocorrem nas regiões de mudança de curvatura das núvens de pontos.

O TDR 1 apresentou resíduos globalmente menores que os da Figura 4.4 (menor área hachurada), mas o pico negativo teve magnitude igual ao do pico positivo da Figura 4.4 (0,02). Para os TDRs 2 a 4, nota-se que os desvios, de forma global e nos picos, são consideravelmente menores.

Os ajustes ainda apresentam espaço para melhora, como será visto nas soluções dos modelos de equação fracionária.

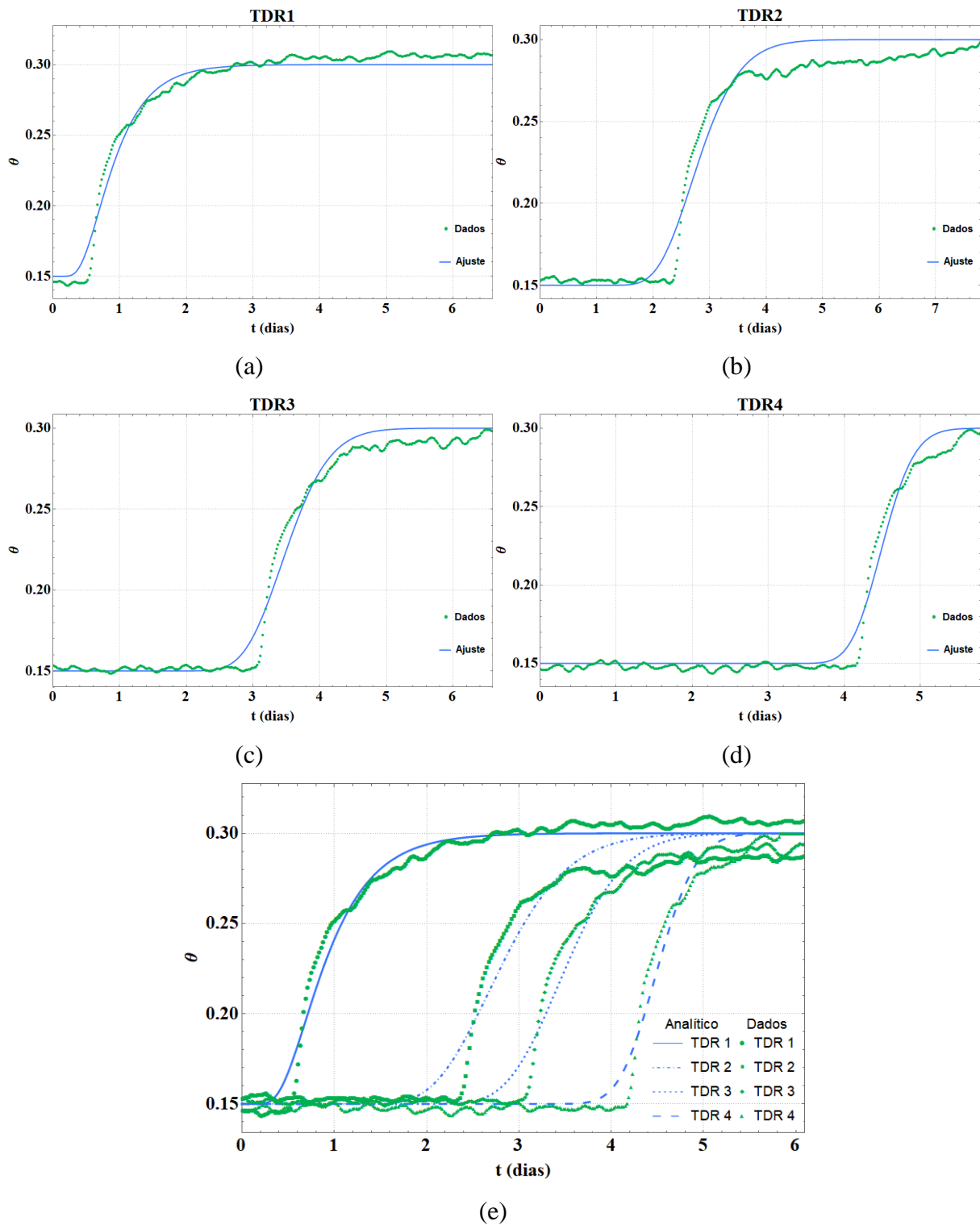


Figura 4.11 – Ajustes usando modelos com parâmetros hidráulicos determinados no próprio ajuste e solução da equação de fluxo de água em solos não saturados clássica: (a) TDR 1; (b) TDR 2; (c) TDR 3; (d) TDR 4; (e) Todos os ajustes.

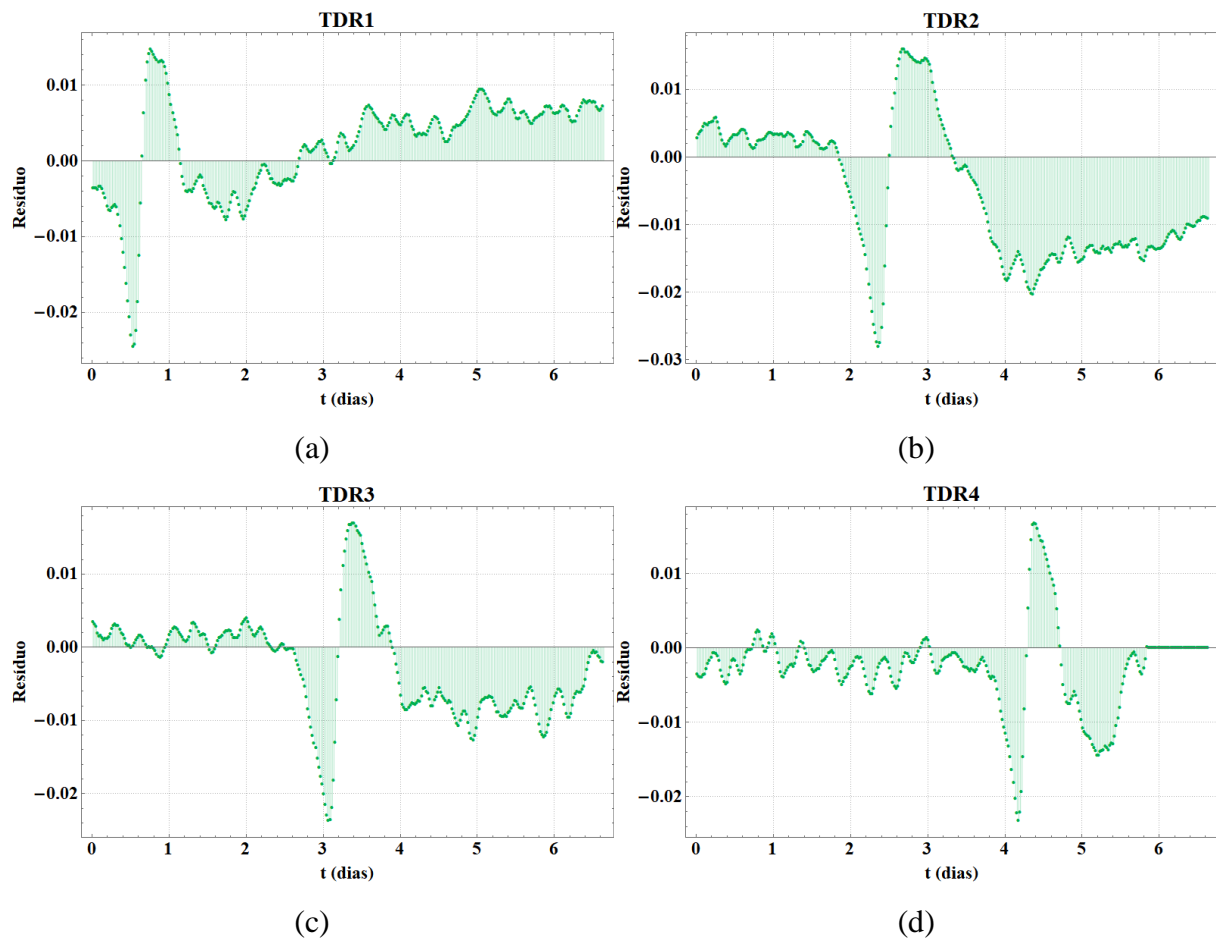


Figura 4.12 – Resíduos dos ajustes usando modelos com parâmetros hidráulicos determinados no próprio ajuste e solução da equação de fluxo de água em solos não saturados clássica: (a) TDR 1; (b) TDR 2; (c) TDR 3; (d) TDR 4.

4.4.2 Solução simétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária

Os ajustes para a solução simétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária são mostrados na Figura 4.13. Os valores dos parâmetros ajustados seguem na Tabela 4.6.

Tabela 4.6 – Parâmetros de ajuste e solução simétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária com parâmetros hidráulicos a determinados diretamente no ajuste.

<i>TDR</i>	a_s (m/s)	D_z (m ² /s)	α
1	$1,41 \times 10^{-6}$	$2,15 \times 10^{-8}$	1,990
2	$1,38 \times 10^{-6}$	$7,80 \times 10^{-8}$	1,263
3	$1,44 \times 10^{-6}$	$7,57 \times 10^{-9}$	1,902
4	$1,44 \times 10^{-6}$	$2,22 \times 10^{-9}$	1,984

Mantendo-se os parâmetros de velocidade advectiva e dispersão hidráulica da solução da equação de fluxo de água em solos não saturados clássica, os ajustes com a versão fracionária da equação mostram que a solução da equação de fluxo de água em solos não saturados clássica é suficientemente boa para os TDRs 1, 3 e 4, pois o índice de estabilidade ajustado aproxima-se de 2 nestes casos. O valor do índice de estabilidade para o TDR 2 apresentou-se em valor baixo para se ajustar aos dados provavelmente por aspectos técnicos relacionados à leitura deste TDR especificamente. Porém, é interessante notar que este índice de estabilidade é muito próximo daquele previsto pelo modelo de Cavalcante e Zornberg (2017a), na Tabela 4.2. Diferentemente do que ocorre na Tabela 4.5, O coeficiente de dispersão cresce para o TDR 2 para depois voltar a decrescer.

A Figura 4.14 mostra os desvios dos ajustes. No TDR, o pico positivo dos resíduos é mais alto que o pico positivo da solução da equação de fluxo de água em solos não saturados clássica, mas o maior módulo dos resíduos ainda é menor. Para os outros sensores, há um claro ganho de precisão com valores de resíduos mais baixos.

Quanto à comparação com o modelo de cavalcante e Zornberg (2017a), os gráficos apresentam comportamento mais preciso em geral de comparado à solução da equação de fluxo de água em solos não saturados clássica. O TDR 2 apresentou ligeira piora nos seus resíduos.

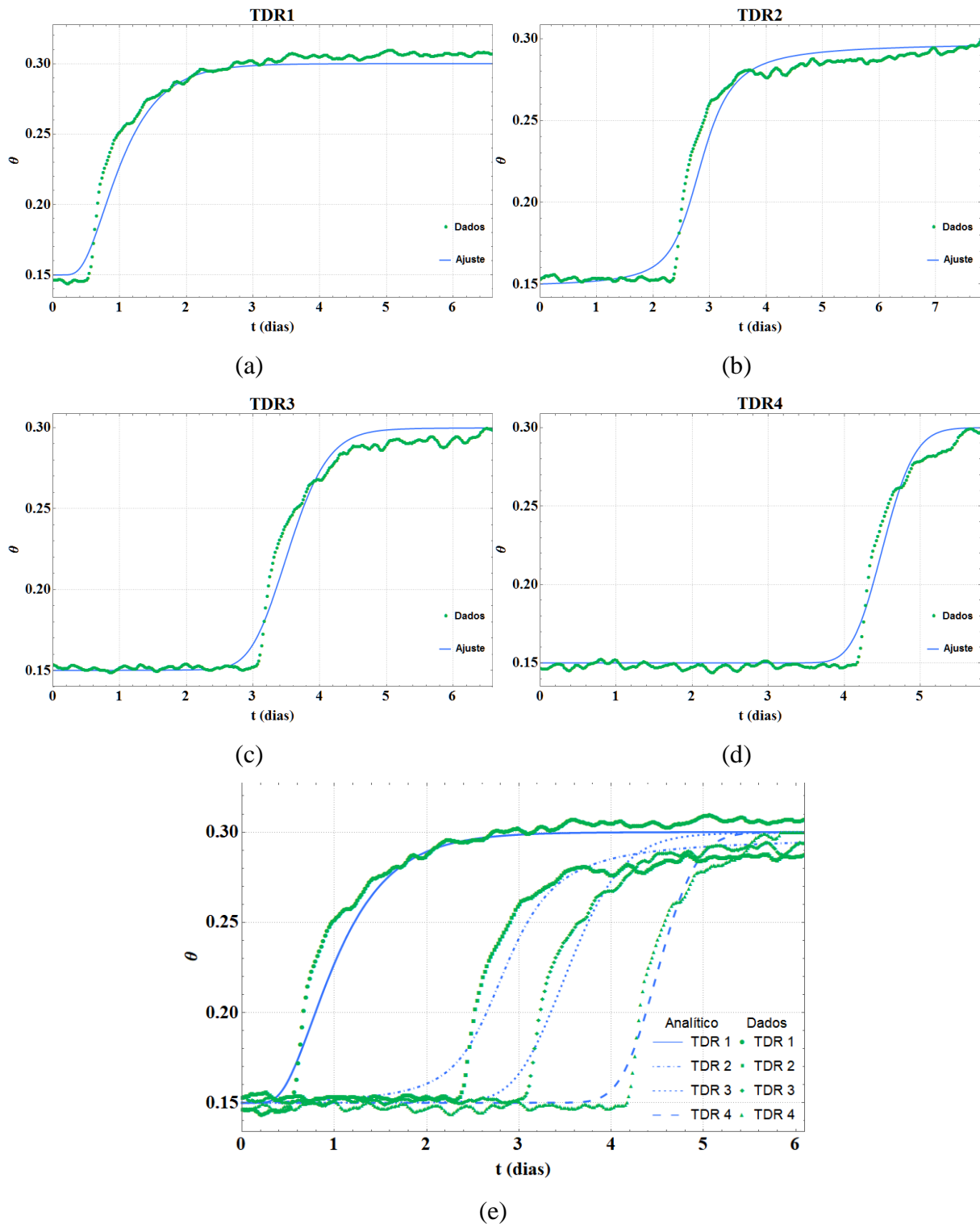


Figura 4.13 – Ajustes usando modelos com parâmetros hidráulicos determinados no próprio ajuste e solução simétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária: (a) TDR 1; (b) TDR 2; (c) TDR 3; (d) TDR 4; (e) Todos os ajustes.

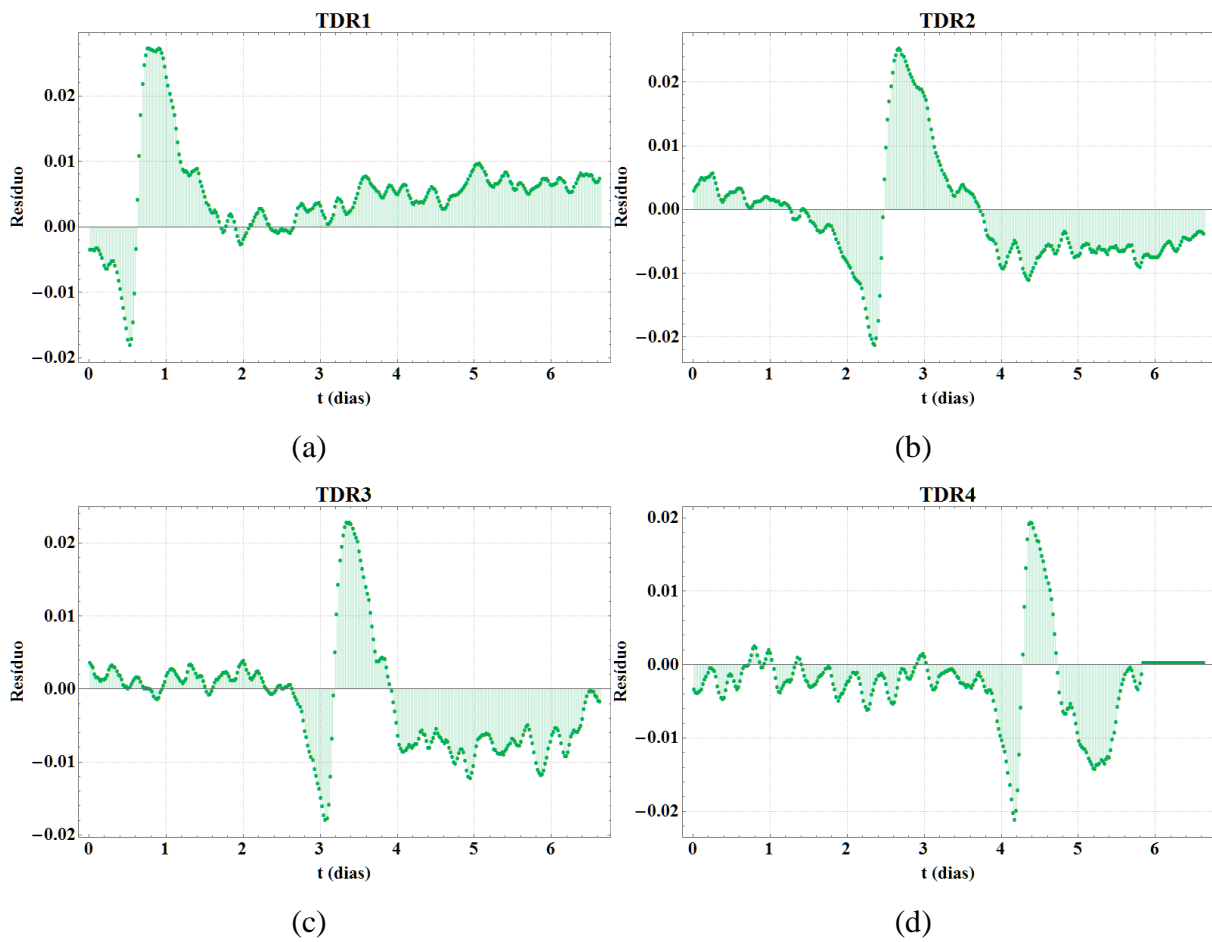


Figura 4.14 – Resíduos dos ajustes usando modelos com parâmetros hidráulicos determinados no próprio ajuste e solução simétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária: (a) TDR 1; (b) TDR 2; (c) TDR 3; (d) TDR 4.

4.4.3 Solução assimétrica simples da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária

Os ajustes para a solução assimétrica simples da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária são mostrados na Figura 4.15. Os gráficos mostram a melhora nos ajustes quando se acrescenta o efeito da assimetria é pouca para os TDRs 1 e 4 e mais significativa para os TDRs 2 e 3. Os valores dos parâmetros ajustados seguem na Tabela 4.3.

Tabela 4.7 – Parâmetros de ajuste e solução assimétrica simples da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária.

<i>TDR</i>	a_s (m/s)	D_z (m ² /s)	α	β
1	$1,41 \times 10^{-6}$	$2,23 \times 10^{-8}$	1,976	-0,990
2	$1,38 \times 10^{-6}$	$6,04 \times 10^{-8}$	1,317	-0,280
3	$1,44 \times 10^{-6}$	$1,38 \times 10^{-9}$	1,595	-0,990
4	$1,44 \times 10^{-6}$	$3,13 \times 10^{-9}$	1,734	-0,990

Não há tendência no comportamento do índice de estabilidade, o TDR 1 ainda mostra índice de estabilidade mais próxima de 2 e o TDR 2 apresenta o menor índice de estabilidade.

O parâmetro de assimetria, a não ser pelo TDR 2, mostrou valor próximo de -1 , indicando dispersão de umidade em direção contrária ao movimento advectivo, o que ilustra de forma correta o que ocorre no ensaio, com a barreira capilar atrasando o movimento da água.

O comportamento da variação do coeficiente de dispersão diferente ao que ocorre na Tabela 4.6, sendo a distância entre os valores de coeficiente mais distante que no modelo anterior. Além disto, o coeficiente de dispersão cresce na mudança do TDR 1 para o 2 e do TDR 3 para o 4 e decresce na mudança do TDR 2 para o 3.

A Figura 4.16 mostra os desvios dos ajustes. Com relação à solução assimétrica simples da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária com o modelo de Cavalcante e Zornberg (2017a), a seguinte comparação pode ser traçada: o TDR 1 apresenta, a exemplo da solução simétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária, valores de resíduos maiores do que a solução com o modelo de Cavalcante e Zornberg (2017a). O pico dos TDRs 2 e 3 são menos acentuados na solução atual, mas a área hachurada é maior que na solução assimétrica simples da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária com modelo de Cavalcante e Zornberg (2017a). O TDR 4 apresenta melhores resultados neste modelo.

Com relação à comparação com a solução assimétrica simples da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária, O TDR 1 apresenta resultados similares. O TDR 2 apresenta menor área hachurada, mas pico de resíduos maior. Para o TDR 3 e o TDR 4, a solução atual apresenta resultados mais precisos.

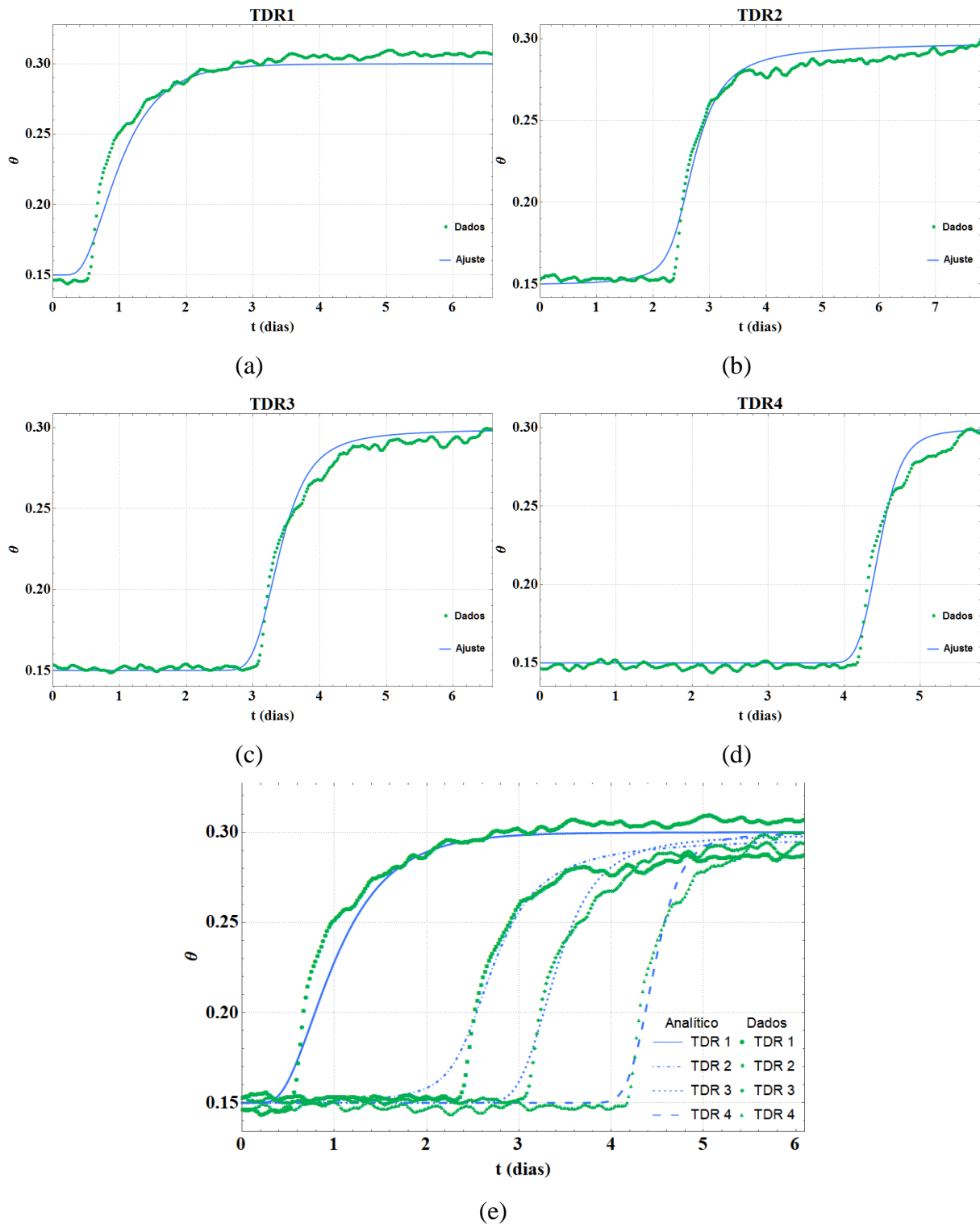


Figura 4.15 – Ajustes usando modelos com parâmetros hidráulicos determinados no próprio ajuste e solução assimétrica simples da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária: (a) TDR 1; (b) TDR 2; (c) TDR 3; (d) TDR 4; (e) Todos os ajustes.

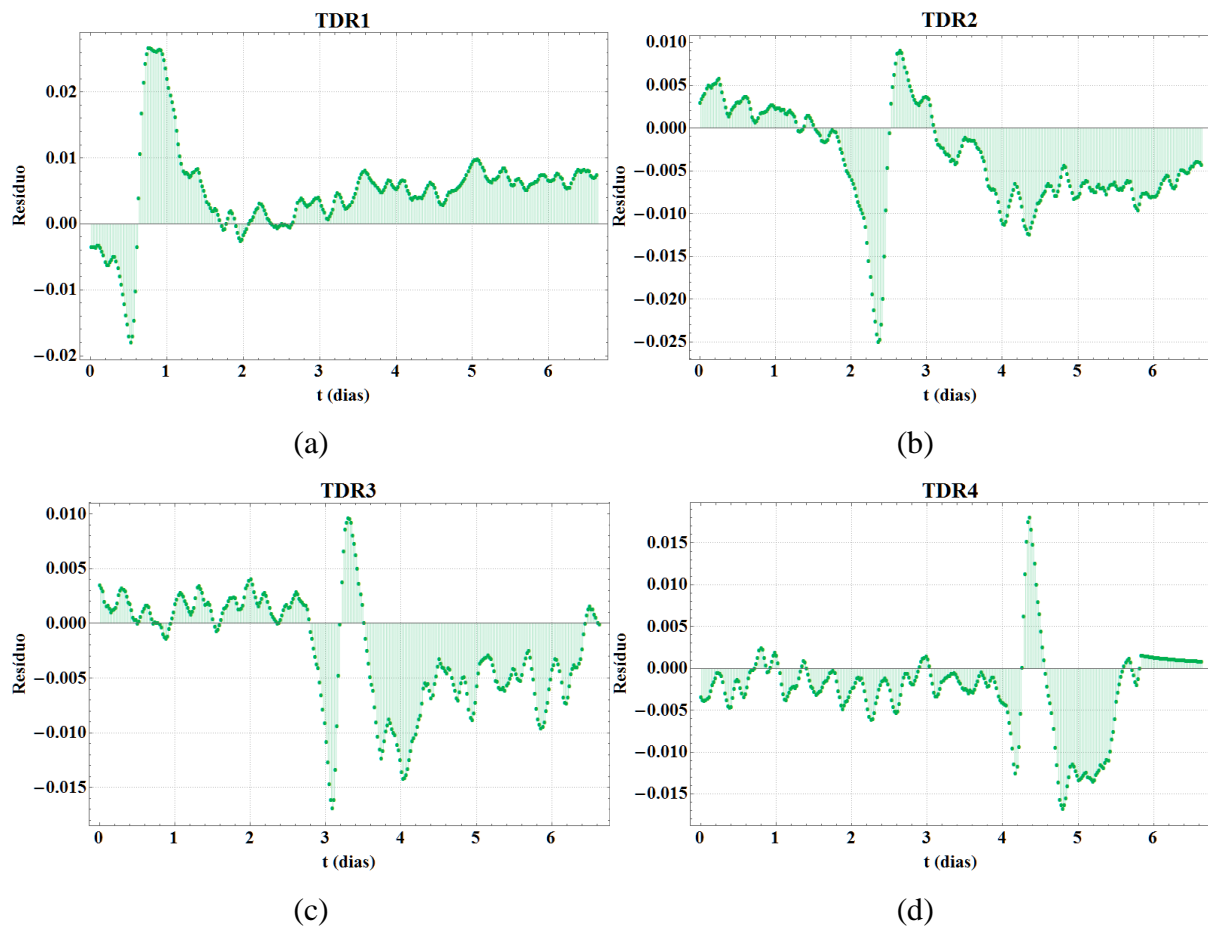


Figura 4.16 – Resíduos dos ajustes usando modelos com parâmetros hidráulicos determinados no próprio ajuste e solução assimétrica simples da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária: (a) TDR 1; (b) TDR 2; (c) TDR 3; (d) TDR 4.

4.4.4 Solução assimétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária

Os ajustes para a solução assimétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária são mostrados no gráfico da Figura 4.17. Os gráficos mostram a melhora nos ajustes quando se leva em conta a solução assimétrica simples da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária e a solução assimétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária, a melhora nas soluções com relação aos ajustes anteriores é imperceptível. Os valores dos parâmetros ajustados seguem na Tabela 4.8.

Tabela 4.8 – Parâmetros de ajuste e solução assimétrica da equação solução assimétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária.

<i>TDR</i>	a_s (m/dias)	D_z (m ² /s)	α	β
1	$1,41 \times 10^{-6}$	$4,26 \times 10^{-8}$	1,753	-0,990
2	$1,38 \times 10^{-6}$	$8,05 \times 10^{-8}$	1,257	-0,157
3	$1,44 \times 10^{-6}$	$1,31 \times 10^{-9}$	1,614	-0,990
4	$1,44 \times 10^{-6}$	$3,09 \times 10^{-9}$	1,742	-0,990

Novamente, não há tendência nos valores do índice de estabilidade. A exemplo de quando a solução assimétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária foi estudada para o modelo de Cavalcante e Zornberg (2017a), não há índice de estabilidade próximo de 2 suficiente para caracterizar a solução como próxima da gaussiana.

O coeficiente de assimetria segue a mesma tendência da solução assimétrica simples da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária: seus valores aproximam-se de -1 para indicar fluxo contrário ao da velocidade advectiva, porém o valor do coeficiente para o TDR 2 destoa dos outros, sendo mais próximo de uma solução simétrica do que as outras soluções.

O coeficiente de dispersão aumenta entre os TDRs 1 e 2 e entre os TDRs 3 e 4 e decresce entre os TDRs 2 e 3.

A Figura 4.18 mostra os desvios dos ajustes. Assim como na solução simétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária, a tendência dos maiores resíduos ocorrerem nas regiões de mudança de curvatura das núvens de pontos permanece neste e em todos os outros ajustes.

Comparando com a solução assimétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária usando o modelo de Cavalcante e Zornberg (2017a), houve melhora de precisão para o ajuste do TDR 1 e do TDR 2. O pico de resíduos do TDR 3 decresceu, mas a área haurada aumentou ligeiramente. Houve melhora de precisão em todos os aspectos para a curva de resíduos do TDR 4.

Não há ganho de precisão com relação a solução assimétrica simples da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária. Portanto, as curvas de resíduos são semelhantes às apresentadas para a solução de Benson, apresentando ganhos insignificantes quanto aos resíduos.

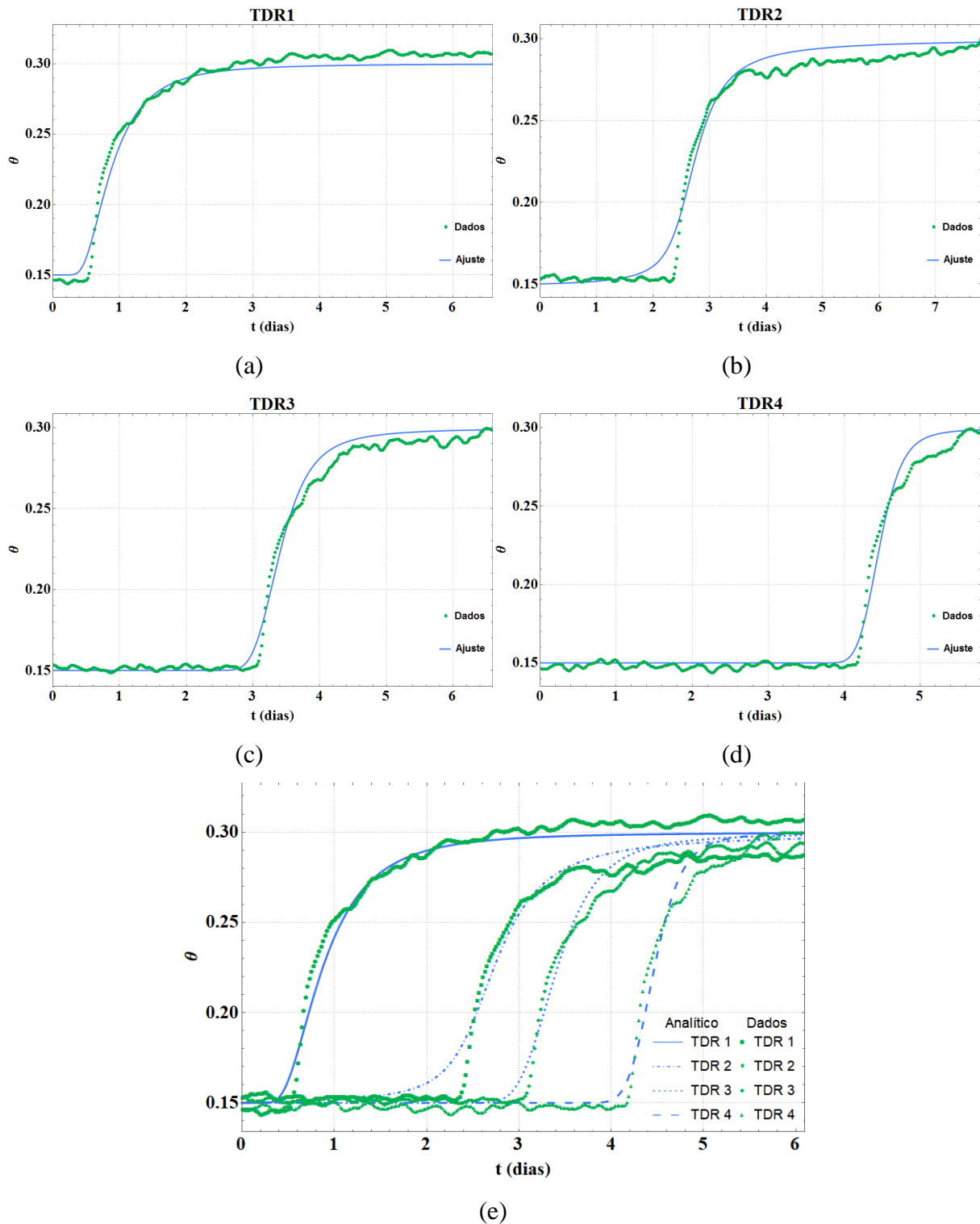


Figura 4.17 – Ajustes usando modelos com parâmetros hidráulicos determinados no próprio ajuste e solução assimétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária:
 (a) TDR 1; (b) TDR 2; (c) TDR 3; (d) TDR 4; (e) Todos os ajustes.

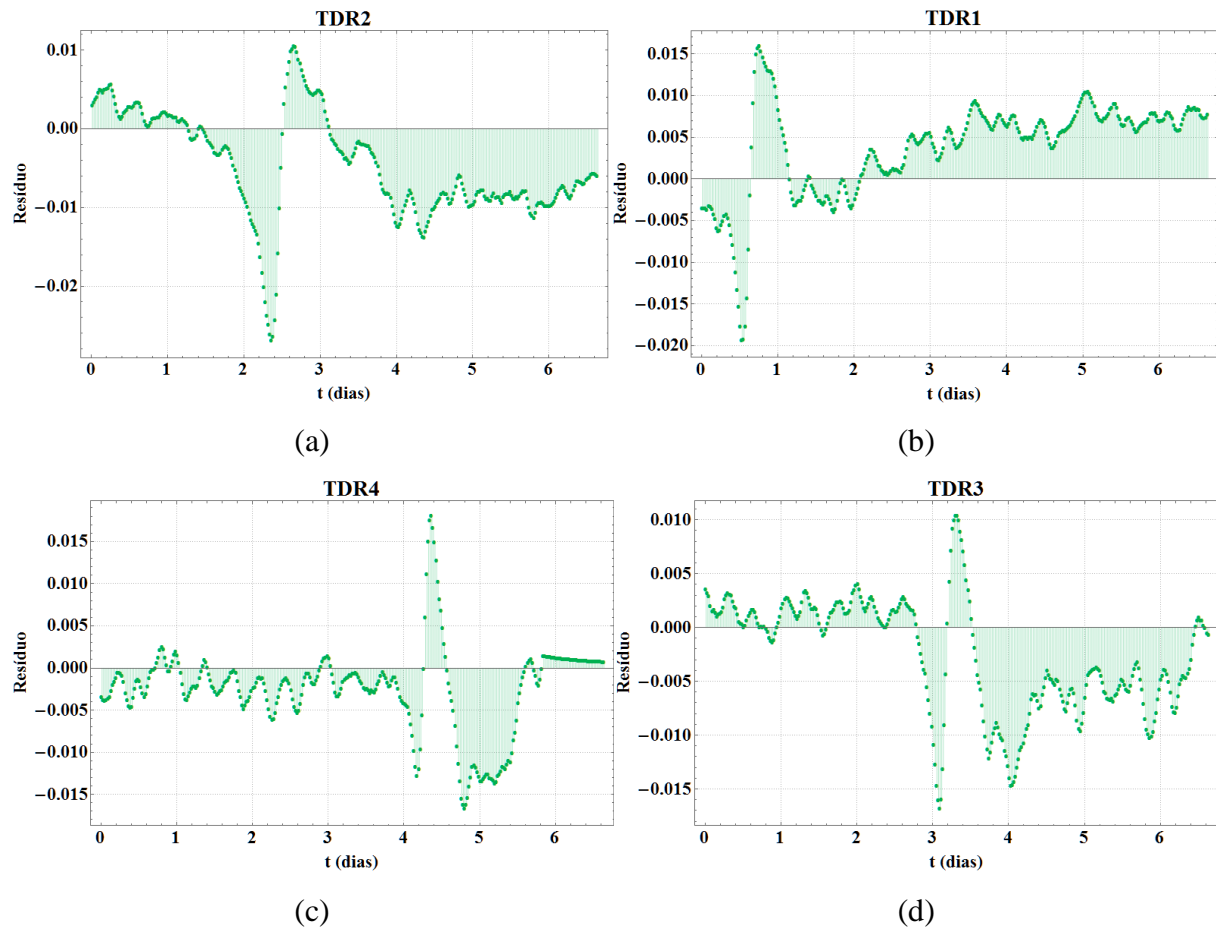


Figura 4.18 – Ajustes usando modelos com parâmetros hidráulicos determinados no próprio ajuste e solução assimétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária:

(a) TDR 1; (b) TDR 2; (c) TDR 3; (d) TDR 4.

4.5 Estudo das soluções numéricas

Nesta seção, aborda-se os métodos numéricos citados na Seção 3.2 para resolver a equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária.

4.5.1 Método de Grünwald-Letnikov Transladado e diferenças finitas

Retomando a Eq. (3.5), que descreve o movimento da água em solos não saturados:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -a_s \frac{\partial \theta}{\partial z} + D_z \left(\frac{1+\beta}{2} \right) \frac{\partial^\alpha \theta}{\partial z^\alpha} + D_z \left(\frac{1-\beta}{2} \right) \frac{\partial^\alpha \theta}{\partial (z-)^\alpha} \quad (3.32)$$

A Eq. (3.32) pode ser desenvolvida em diferenças finitas e o método de Grünwald-Letnikov transladado utilizando o exposto na Seção 2.9. Desta forma, utilizando-se as equações (2.124)

e (2.125). e o desenvolvimento em diferenças finitas em avanço para o tempo, em conjunto com o desenvolvimento em diferenças finitas em atraso do termo advectivo:

$$\frac{\theta_j^{n+1} - \theta_j^n}{\Delta t} = -a_s \frac{(\theta_j^n - \theta_{j-1}^n)}{h} + D_z \frac{(1+\beta)}{2} \frac{1}{h^\alpha} \sum_{l=0}^N w_l \theta_{j-l+1}^n + D_z \frac{(1-\beta)}{2} \frac{1}{h^\alpha} \sum_{l=0}^N w_l \theta_{j+l-1}^n \quad (3.33)$$

ou

$$\begin{aligned} \theta_j^{n+1} = & -a_s \frac{\Delta t (\theta_j^n - \theta_{j-1}^n)}{h} + D_z \frac{(1+\beta)}{2} \frac{\Delta t}{h^\alpha} \sum_{l=0}^N w_l \theta_{j-l+1}^n + \\ & D_z \frac{(1-\beta)}{2} \frac{\Delta t}{h^\alpha} \sum_{l=0}^N w_l \theta_{j+l-1}^n + \theta_j^n \end{aligned} \quad (3.34)$$

onde $N = (R-L)/h$ é o número de pontos da malha espacial. Os índices subscritos denotam posição no espaço e os índices sobrescritos denotam intervalos de tempo.

O critério de estabilidade para a Eq. (3.34) é

$$\left[\frac{a_s \Delta t}{\Delta z} + \left(\frac{\Delta t \alpha D_z}{\Delta z^\alpha} \right) \right] \leq 1 \quad (3.35)$$

Os autores que desenvolveram o método de Grünwald-Letnikov transladado estudaram a convergência da solução da difusão pura somente, portanto a Eq. (3.35) não foi provada por eles. A demonstração do critério é mostrada no Apêndice A desta dissertação.

Por meio de um processo iterativo, a Eq. (3.34) resolve a equação de Richards fracionária.

A Figura 4.19 mostra a comparação do método com a solução fracionária assimétrica com diferentes índices de estabilidade. A Tabela 4.10 resume os valores máximos e médios de desvio e a Tabela 4.9 mostra os valores do número de estabilidade.

Tabela 4.9 - Estabilidade do método de Grünwald-Letnikov associado a diferenças finitas para diferentes valores de α .

α	<i>Estabilidade</i>
1,9	0,748
1,7	0,693
1,5	0,648
1,3	0,612

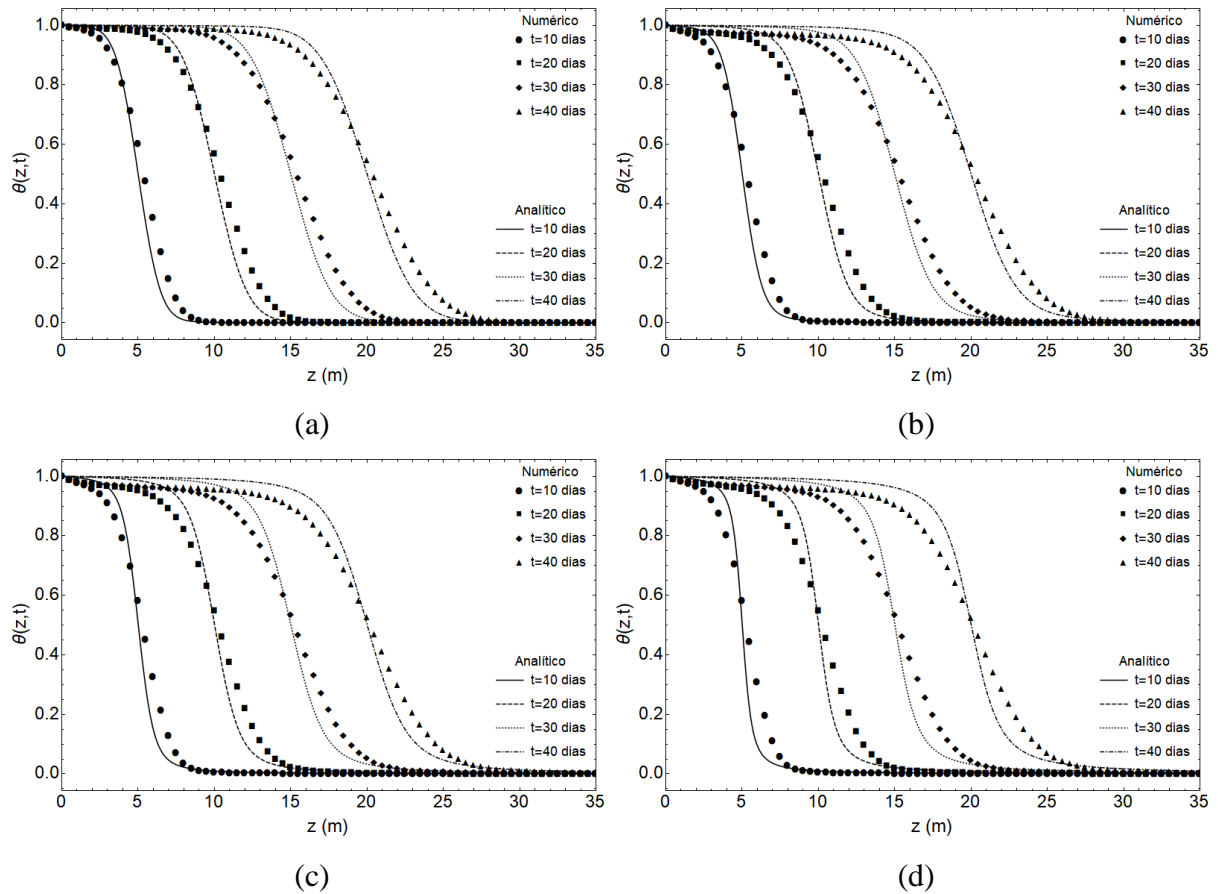


Figura 4.19 – Método diferenças finitas e Grünwald-Letnikov transladado com $\beta=0$; $\Delta z=0,5 m$ e $\Delta t=0,5$ dia: (a) $\alpha=1,9$; (b) $\alpha=1,7$; (c) $\alpha=1,5$; (d) $\alpha=1,3$;

Tabela 4.10 – Desvios máximos e médios para o método de diferenças finitas em atraso combinado com o método Grünwald-Letnikov transladado e diferentes valores de α .

<i>Desvio Máximo</i>				
α	Curva 10 dias	Curva 20 dias	Curva 30 dias	Curva 40 dias
1,9	0,155	0,127	0,115	0,107
1,7	0,157	0,124	0,108	0,0989
1,5	0,177	0,135	0,116	0,104
1,3	0,232	0,184	0,155	0,138
<i>Desvio Médio</i>				
α	Curva 10 dias	Curva 20 dias	Curva 30 dias	Curva 40 dias
1,9	0,00757	0,0102	0,0126	0,0148
1,7	0,00808	0,0117	0,0150	0,0182
1,5	0,00926	0,0134	0,0173	0,0211
1,3	0,0113	0,0160	0,0200	0,0238

As Figura 4.20 mostram a comparação do método para diferentes valores do coeficiente de assimetria e a solução analítica. Os valores de desvio estão resumidos na Tabela 4.12 e os números de estabilidade encontram-se na Tabela 4.11.

Tabela 4.11 - Estabilidade do método de Grünwald-Letnikov associado a diferenças finitas para diferentes valores de β .

β	<i>Estabilidade</i>
-1	0,693
-0,5	0,693
0	0,693
0,5	0,693
1	0,693

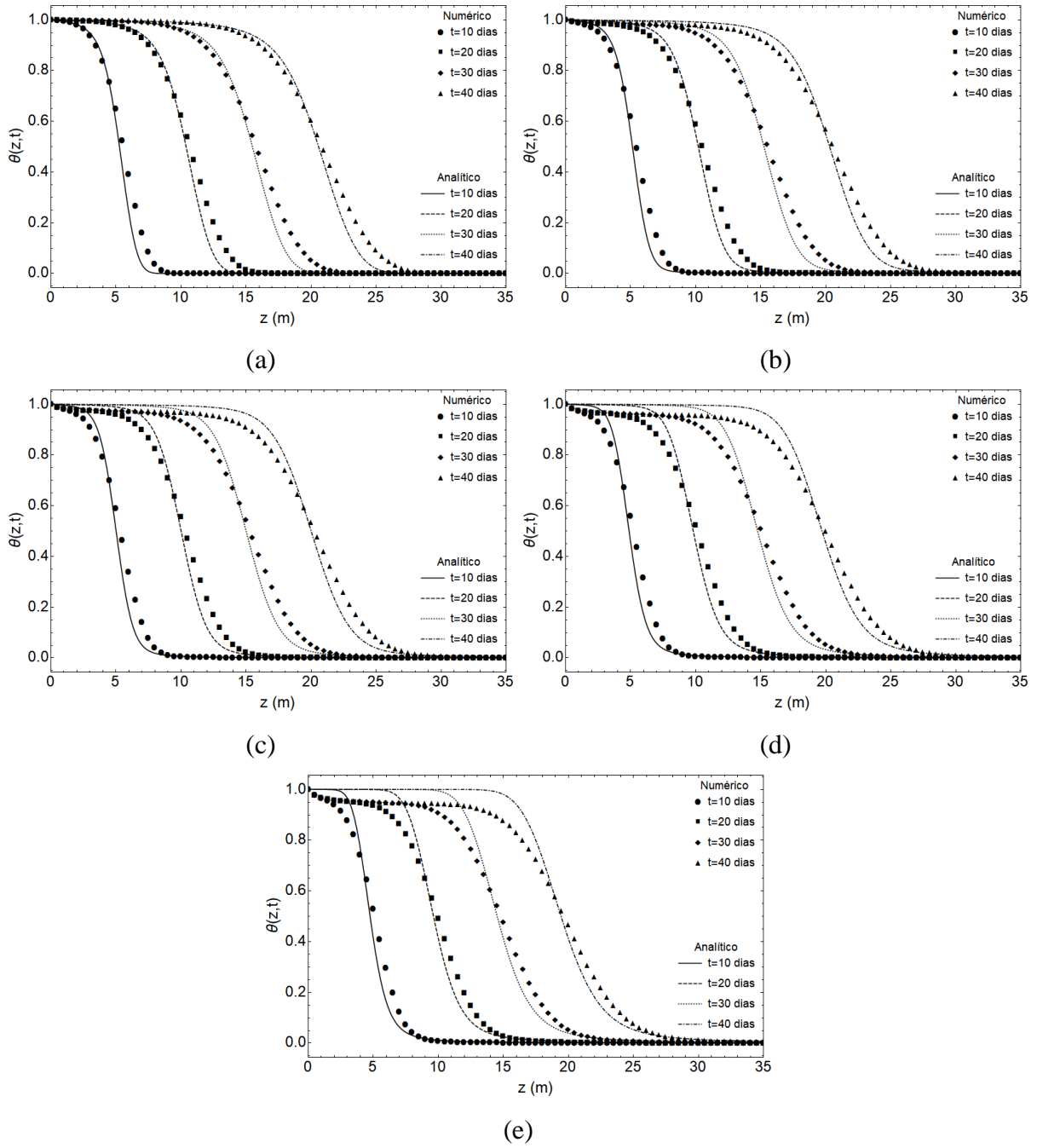


Figura 4.20 – Método diferenças finitas e Grünwald-Letnikov transladado com $\alpha=1,7$; $\Delta z=0,5$ m e $\Delta t=0,5$ dia: (a) $\beta=-1$; (b) $\beta=-0,5$; (c) $\beta=0$; (d) $\beta=0,5$; (e) $\beta=1$.

Tabela 4.12 – Desvios máximos e médios para o método de diferenças finitas em atraso combinado com o método Grünwald-Letnikov transladado e diferentes valores de β .

<i>Desvio Máximo</i>				
β	Curva 10 dias	Curva 20 dias	Curva 30 dias	Curva 40 dias
-1	0,161	0,135	0,121	0,113
-0,5	0,161	0,128	0,115	0,107
0	0,157	0,124	0,108	0,0989
0,5	0,146	0,115	0,100	0,0905
1	0,144	0,107	0,107	0,110
<i>Desvio Médio</i>				
β	Curva 10 dias	Curva 20 dias	Curva 30 dias	Curva 40 dias
-1	0,00649	0,00812	0,00944	0,0106
-0,5	0,00725	0,00982	0,0121	0,0143
0	0,00808	0,0117	0,0150	0,0182
0,5	0,00890	0,0134	0,0178	0,0220
1	0,00961	0,0150	0,0204	0,0257

4.5.2 Método de Grünwald-Letnikov Transladado e CIP

A técnica de divisão no tempo consistem em escrever o termo temporal da Eq. (3.32) em diferenças finitas da seguinte forma:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\theta_j^{n+1} - \theta_j^{(n+1)*}}{\Delta t} + \frac{\theta_j^{(n+1)*} - \theta_j^n}{\Delta t} \quad (3.36)$$

Os termos que contém um asterisco referem-se a um instante de tempo intermediário entre um passo no tempo e outro no qual somente o fluxo dispersivo ocorre. Em outras palavras, a Eq. (3.36) divide o processo em resolver numericamente o fluxo de dispersiva e em seguida o fluxo advectivo. Desta forma, pode-se aplicar o método CIP combinado com o método de Grünwald-Letnikov transladado para gerar um esquema inédito de solução numérica da advecção-dispersão fracionária.

A resolução da Eq. (3.5) deve ser feita de forma iterativa e seguindo os passos descritos:

1. A equação de dispersão fracionária pura é resolvida até o tempo intermediário $(n+1)^*$

$$\theta_j^{(n+1)*} = D_z \frac{(1+\beta)}{2} \frac{\Delta t}{h^\alpha} \sum_{l=0}^N w_l \theta_{j-l+1}^n + D_z \frac{(1-\beta)}{2} \frac{\Delta t}{h^\alpha} \sum_{l=0}^N w_l \theta_{j+l-1}^n + \theta_j^n \quad (3.37)$$

2. Em seguida, resolve-se a equação de advecção pura usando o polinômio cúbico de Hermite. A Eq. (2.118) pode ser derivada com relação a z :

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \theta}{\partial t} \right) = - \frac{\partial}{\partial z} \left(a_s \frac{\partial \theta}{\partial z} \right) \quad (3.38)$$

Da regra da cadeia:

$$\frac{\partial}{\partial t} q + a_s \frac{\partial}{\partial z} q = -q \frac{\partial v}{\partial z} \quad (3.39)$$

onde,

$$q = \frac{\partial \theta}{\partial z} \quad (3.40)$$

Como $v > 0$, pode-se escrever a função para a qual se resolve a equação por meio de um polinômio cúbico de Hermite:

$$H_j^n(z) = \alpha_j^n (z - z_j^n)^3 + \zeta_j^n (z - z_j^n)^2 + \chi_j^n (z - z_j^n) + \eta_j^n \quad (3.41)$$

onde os termos α_j^n , ζ_j^n , χ_j^n e η_j^n são dados por:

$$\alpha_j^n = \frac{q_j^n + q_{j-1}^n}{\Delta z^2} - \frac{2(\theta_j^{n*} - \theta_{j-1}^{n*})}{\Delta z^3} \quad (3.42)$$

$$\zeta_j^n = \frac{2q_j^n + q_{j-1}^n}{\Delta z} - \frac{3[\theta_j^{(n+1)*} - \theta_{j-1}^{n*}]}{\Delta z^3} \quad (3.43)$$

$$\chi_j^n = q_j^n \quad (3.44)$$

$$\eta_j^n = \theta_j^{(n+1)*} \quad (3.45)$$

$$\theta_j^{n+1} = H_j^n \{ z_j^n - v \theta_{j-1}^{n*} \Delta t \} \quad (3.46)$$

$$q_j^{n+1} = \frac{\partial}{\partial z} H_j^n \{ z_j^n - v \theta_{j-1}^{n*} \Delta t \} \quad (3.47)$$

A evolução de θ e q é obtida do fato de que, no transporte advectivo, a função em dado ponto do espaço e instante de tempo deve ser igual ao valor da célula vizinha imediatamente anterior no instante de tempo imediatamente anterior, como dito na Seção 2.9.

Note que o cálculo de cada passo de tempo do teor de umidade volumétrico envolve ter conhecimento prévio das derivadas parciais espaciais no instante atual. A derivada em cada passo de tempo é calcula pela Eq. (3.47) usando o polinômio de Hermite. Isto implica que seu cálculo também necessita do conhecimento da derivada espacial no instante atual. Desta forma, no instante inicial, os valores q_j^0 precisam ser obtidos de outra forma que não a Eq. (3.47). Por conseguinte, os valores da derivada espacial são obtidos usando a condição inicial e as condições de contorno com o método das diferenças finitas em atraso.

3. Repete-se o passo 2 de forma iterativa até convergência da solução.

Quanto ao critério de estabilidade, o seguinte pode ser exposto: o método CIP associado ao método de Grünwald-Letnikov transladado resolve dois métodos numéricos separadamente em essencial, portanto cada método deve ser individualmente estável para que a combinação também o seja. O critério de estabilidade é:

$$\text{Max} \left[\frac{a_s \Delta t}{\Delta z}, \left(\frac{\Delta t \alpha D_z}{\Delta z^\alpha} \right) \right] \leq 1 \quad (3.48)$$

O conjunto de equações dado a partir da Eq. (3.36) até a Eq. (3.48) define o método CIP aplicado à equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária.

A Figura 4.21 mostra a comparação do método com a solução analítica para diferentes índices de estabilidade. A Tabela 4.13 resume os valores máximos e médios de desvio e a Tabela 4.14 mostra os valores dos números de estabilidade.

Tabela 4.13 – Desvios máximos e médios para o método CIP combinado com o método Grünwald-Letnikov transladado e diferentes valores de α .

<i>Desvio Máximo</i>				
α	Curva 10 dias	Curva 20 dias	Curva 30 dias	Curva 40 dias
1,9	0,0535	0,0352	0,0274	0,0230
1,7	0,0491	0,0285	0,0258	0,0274
1,5	0,0609	0,0332	0,0317	0,0342
1,3	0,105	0,0774	0,0709	0,0640
<i>Desvio Médio</i>				
α	Curva 10 dias	Curva 20 dias	Curva 30 dias	Curva 40 dias
1,9	0,00359	0,00395	0,00452	0,00520
1,7	0,00273	0,00385	0,00574	0,00793
1,5	0,00348	0,00565	0,00840	0,0114
1,3	0,00546	0,00776	0,0104	0,0132

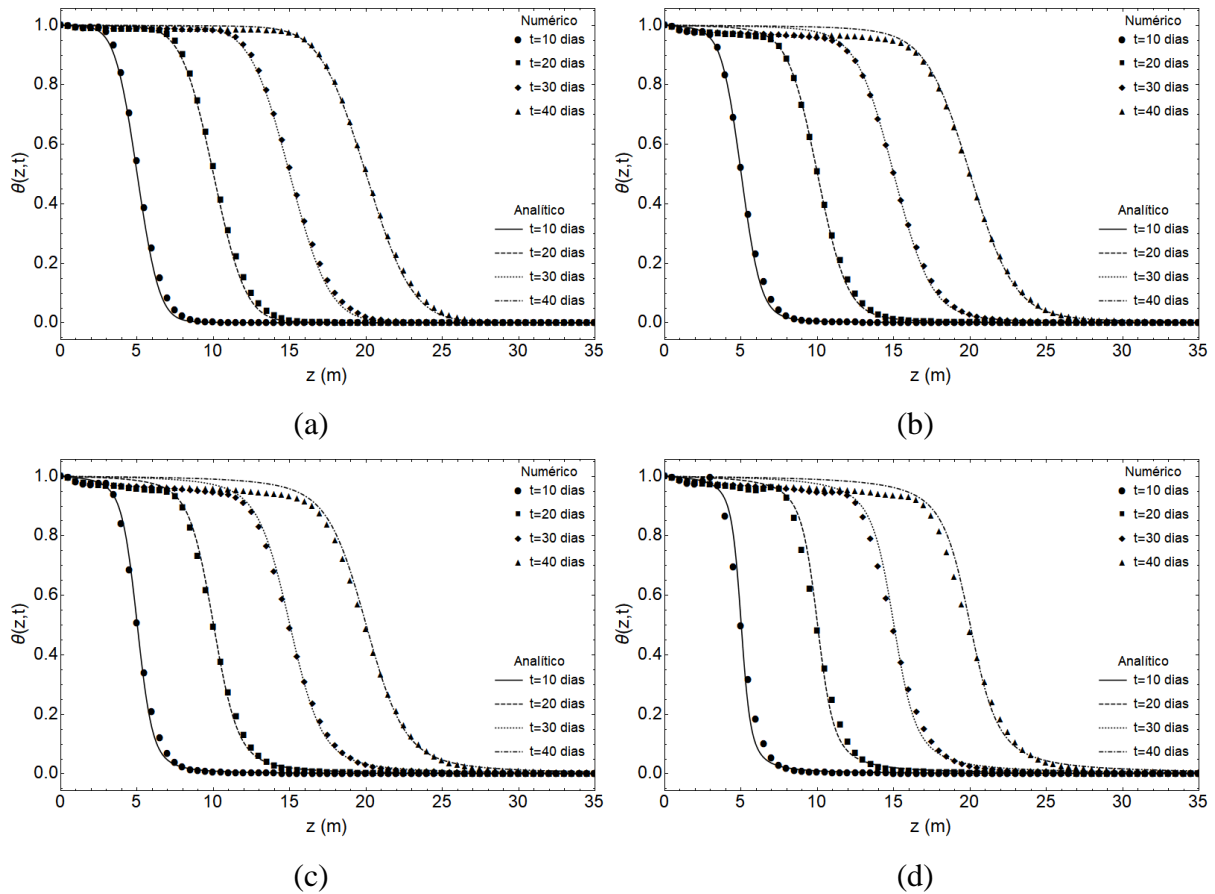


Figura 4.21 – Método CIP e Grünwald-Letnikov transladado com $\beta=0$; $\Delta z=0,5\text{ m}$ e $\Delta t=0,5$ dia: (a) $\alpha=1,9$; (b) $\alpha=1,7$; (c) $\alpha=1,5$; (d) $\alpha=1,3$.

Tabela 4.14 - Estabilidade do método de Grünwald-Letnikov associado ao CIP para diferentes valores de α .

α	<i>Estabilidade na advecção</i>	<i>Estabilidade na dispersão</i>
1,9	0,5	0,25
1,7	0,5	0,19
1,5	0,5	0,15
1,3	0,5	0,11

A Figura 4.22 mostram a comparação do método para diferentes valores do coeficiente de assimetria e a solução analítica. Os valores de desvio estão resumidos na Tabela 4.15. A Tabela 4.16 mostra os valores dos números de estabilidade.

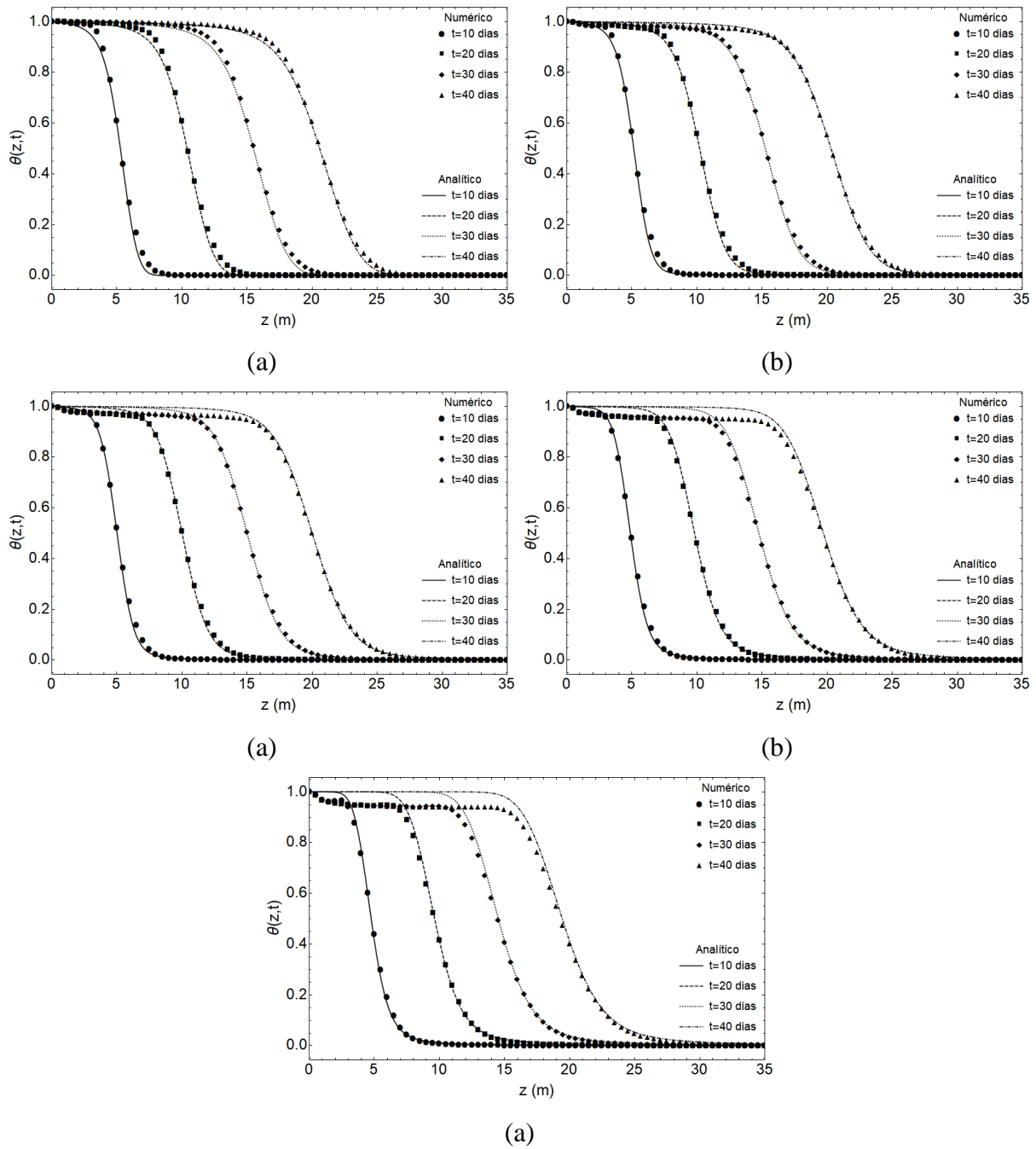


Figura 4.22 – Método CIP e Grünwald-Letnikov transladado com $\alpha=1,7$; $\Delta z=0,5 m$ e $\Delta t=0,5$ dia: (a) $\beta=-1$; (b) $\beta=-0,5$; (c) $\beta=0$; (d) $\beta=0,5$; (e) $\beta=1$.

Tabela 4.15 – Desvios máximos e médios para o método CIP combinado com o método Grünwald-Letnikov transladado e diferentes valores de β .

<i>Desvio Máximo</i>				
β	Curva 10 dias	Curva 20 dias	Curva 30 dias	Curva 40 dias
-1	0,0621	0,0416	0,0346	0,0305
-0,5	0,0540	0,0356	0,0271	0,0222
0	0,0491	0,0285	0,0258	0,0274
0,5	0,0402	0,0383	0,0417	0,0435
1	0,0390	0,0544	0,0588	0,0609
<i>Desvio Médio</i>				
β	Curva 10 dias	Curva 20 dias	Curva 30 dias	Curva 40 dias
-1	0,00388	0,00441	0,00476	0,00504
-0,5	0,00310	0,00353	0,00417	0,00494
0	0,00273	0,00385	0,00573	0,00793
0,5	0,00284	0,00564	0,00897	0,0125
1	0,00356	0,00765	0,0125	0,0177

Tabela 4.16 - Estabilidade do método de Grünwald-Letnikov associado ao CIP para diferentes valores de β .

β	<i>Estabilidade na advecção</i>	<i>Estabilidade na dispersão</i>
-1	0,5	0,19
-0,5	0,5	0,19
0	0,5	0,19
0,5	0,5	0,19
1	0,5	0,19

4.5.3 Comparação dos métodos

Nota-se claramente que o método CIP associado ao Grünwald-Letnikov transladado oferece um ajuste mais preciso do que a associação com diferenças finitas, a exemplo do que ocorre no caso de apenas derivadas inteiras. Além do aspecto visual fornecer tal conclusão qualitativamente, os valores de desvio a justificam quantitativamente.

Visualmente, o método de diferenças finitas gera curvas um pouco mais abatidas que o método CIP, o que pode ser causado por certa dispersão numérica associada ao método. Assim, os maiores desvios desse encontram-se logo antes e depois do ponto de mudança de curvatura das curvas. O maior erro ocorre claramente antes do ponto de curvatura. Nesta região, o método se distancia consideravelmente da solução analítica nos casos mais críticos de solução assimétrica e baixos valores do índice de estabilidade. O método CIP tende a corrigir a dispersão numérica apresentada pelo método de diferenças finitas até certo ponto. Ele também sofre com desvios maiores ocorrendo antes do ponto de mudança de curvatura da solução, mas em menor escala do que o método de diferenças finitas.

Na comparação com diferentes valores de α , os métodos tendem a ser menos precisos quando se diminui os índices de estabilidade. A Tabela 4.17 condensa as informações dos desvios da Tabela 4.10 e da Tabela 4.13 para os dois métodos comparados para que se tenha uma comparação direta entre os métodos.

Tabela 4.17 – Comparação entre os métodos CIP e diferenças finitas para diferentes valores de índice de estabilidade e mantendo o coeficiente de assimetria constante.

<i>Desvio Máximo</i>								
<i>Diferenças Finitas</i>					<i>CIP</i>			
α	10 dias	20 dias	30 dias	40 dias	10 dias	20 dias	30 dias	40 dias
1,9	0,155	0,127	0,115	0,107	0,0535	0,0352	0,0274	0,0230
1,7	0,157	0,124	0,108	0,0989	0,0491	0,0285	0,0258	0,0274
1,5	0,177	0,135	0,116	0,104	0,0609	0,0332	0,0317	0,0342
1,3	0,232	0,184	0,155	0,138	0,105	0,0774	0,0709	0,0640

<i>Desvio Médio</i>								
<i>Diferenças Finitas</i>					<i>CIP</i>			
α	10 dias	20 dias	30 dias	40 dias	10 dias	20 dias	30 dias	40 dias
1,9	0,0535	0,0352	0,0274	0,0230	0,00359	0,00395	0,00452	0,00520
1,7	0,0491	0,0285	0,0258	0,0274	0,00273	0,00385	0,00574	0,00793
1,5	0,0609	0,0332	0,0317	0,0342	0,00348	0,00565	0,00840	0,0114
1,3	0,105	0,0774	0,0709	0,0640	0,00546	0,00776	0,0104	0,0132

Menores valores deste índice indicam um maior desvio da equação com relação a sua correspondente clássica, mais partículas efetuam saltos de tamanho grande e o movimento se

torna mais irregular se comparado ao caso clássico. Para um mesmo valor de índice de estabilidade, os valores máximos de desvio tendem a diminuir com o tempo. Com o passar do tempo, os desvios médios aumentam para o método CIP e diminuem para o método de diferenças finitas.

O maior valor de desvio encontrado para o método de diferenças finitas é de 0,232 e ocorre na curva de 10 dias para $\alpha=1,3$. O maior valor de desvio médio encontrado para o método de diferenças finitas é de 0,105 e ocorre para $\alpha=1,3$ na curva de 10 dias. Para o método CIP, o maior valor de desvio e o maior desvio médio ocorrem para $\alpha=1,3$. O primeiro é de 0,105 e ocorre na curva de 10 dias e o segundo ocorre na curva de 0,0132 e ocorre na curva de 40 dias. Ambos estes desvios são próximos da metade dos desvios apresentados pelo método de diferenças finitas.

Com relação aos diferentes valores de índice de assimetria, pode-se repetir a afirmação de que desvios máximos tendem a diminuir com a progressão no tempo. Este padrão não foi visto para $\beta = 1$ no método CIP, valor para o qual os desvios, de fato, aumentaram com o tempo. Os desvios médios aumentam com o tempo para o método CIP e não seguem uma tendência bem definida para o método de diferenças finitas. Com relação aos desvios médios, não há também uma regra bem definida quanto ao seu crescimento ou decréscimo. Contudo, os desvios médios para índices de assimetria próximos de 1 são menores que os desvios para índices de assimetria próximos de -1 .

A Tabela 4.18 condensa as informações dos desvios da Tabela 4.12 e da Tabela 4.15 para os dois métodos comparados para que se tenha uma comparação direta entre os métodos.

O índice de assimetria indica maior dispersão na direção de fluxo (β mais próximo de 1) e erros médios maiores quando o índice de assimetria indica maior dispersão em sentido contrário ao fluxo (β mais próximo de -1).

O método de diferenças finitas apresentou maior valor de desvio igual a 0,161, ocorrendo na curva de 10 dias com $\beta = -1$ (e na curva de 10 dias com $\beta=-1$), e maior valor de desvio médio de 0,257, ocorrendo na curva de 40 dias com $\beta = 1$. O método CIP apresentou maior valor de desvio igual a 0,0621, ocorrendo na curva de 10 dias com $\beta = -1$, e maior valor de desvio médio de 0,0177, ocorrendo na curva de 40 dias com $\beta = 1$.

Tabela 4.18 – Comparação entre os métodos CIP e diferenças finitas para diferentes valores de coeficiente de assimetria e mantendo o índice de estabilidade constante.

<i>Desvio Máximo</i>								
<i>Diferenças Finitas</i>					<i>CIP</i>			
β	10 dias	20 dias	30 dias	40 dias	10 dias	20 dias	30 dias	40 dias
-1	0,161	0,135	0,121	0,113	0,0621	0,0416	0,0346	0,0305
-0,5	0,161	0,128	0,115	0,107	0,0540	0,0356	0,0271	0,0222
0	0,157	0,124	0,108	0,0989	0,0491	0,0285	0,0258	0,0274
0,5	0,146	0,115	0,100	0,0905	0,0402	0,0383	0,0417	0,0435
1	0,144	0,107	0,107	0,110	0,0390	0,0544	0,0588	0,0609

<i>Desvio Médio</i>								
<i>Diferenças Finitas</i>					<i>CIP</i>			
β	10 dias	20 dias	30 dias	40 dias	10 dias	20 dias	30 dias	40 dias
-1	0,00649	0,00812	0,00944	0,0106	0,00388	0,00441	0,00476	0,00504
-0,5	0,00725	0,00982	0,0121	0,0143	0,00310	0,00353	0,00417	0,00494
0	0,00808	0,0117	0,0150	0,0182	0,00273	0,00385	0,00573	0,00793
0,5	0,00890	0,0134	0,0178	0,0220	0,00284	0,00564	0,00897	0,0125
1	0,00961	0,0150	0,0204	0,0257	0,00356	0,00765	0,0125	0,0177

Quanto à estabilidade, o método de diferenças finitas associado ao de Grünwald-Letnikov será sempre instável antes da associação com o método CIP. Isto ocorre porque seu critério de estabilidade é a soma do critério de advecção e dispersão que são checados individualmente para o CIP. Desta forma, o CIP se torna instável quando qualquer um destes critérios ultrapassar 1, mas o método de diferenças finitas se torna instável quando a soma ultrapassar 1.

O método CIP apresentou melhores resultados se comparado quantitativamente com o método de diferenças finitas, com desvios médios e máximos que giram em torno de metade daqueles apresentados pelo método de diferenças finitas.

A vantagem do método CIP consiste justamente em obter resultados precisos mesmo para valores críticos de índice de estabilidade, que no método de diferenças finitas resultariam em dispersões numéricas acentuadas.

Para $\alpha = 1,1$; $\beta = 0$ e refino de malha $\Delta t = 0,5$ dias e $\Delta z = 0,25$, o método CIP associado ao Grünwald-Letnikov transladado gera os resultados mostrados na Figura 4.23.

Para estes valores de refino de malha, o critério de estabilidade para o método de diferenças finitas associado ao Grünwald-Letnikov transladado é de 1,18; portanto o método não é estável nestas condições.

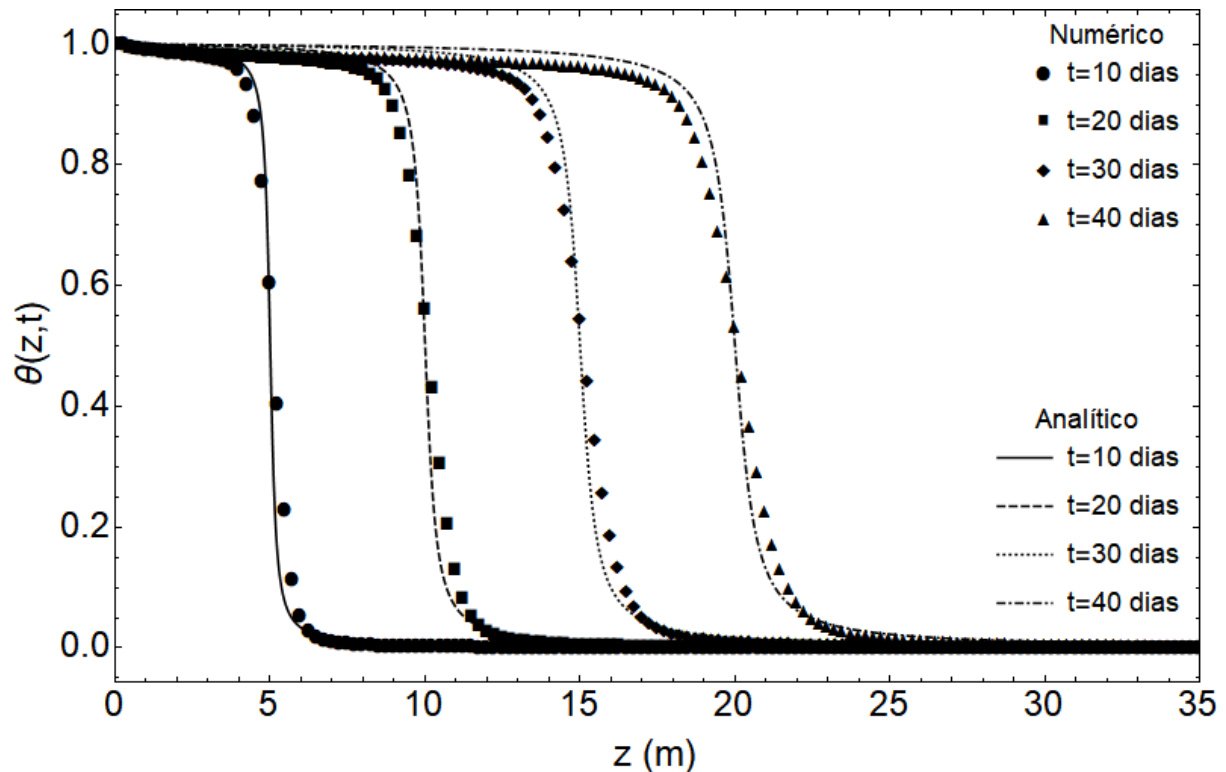


Figura 4.23 – Método CIP e Grünwald-Letnikov transladado com $\alpha=1,1$; $\beta=0$; $\Delta z=0,25$ m e $\Delta t=0,5$ dia.

Da Figura 4.23, nota-se que o método CIP apresenta baixa dispersão numérica. O critério de estabilidade da advecção encontra-se no limite da estabilidade, sendo igual a 1 e o critério de dispersão é de 0,18. De fato, O método CIP simula de forma ideal a advecção quando o número de estabilidade na advecção encontra-se o mais próximo possível da unidade (Cavalcante e Zornberg, 2017a; Cavalcante e Zornberg, 2017b). O desvio médio máximo é de 0,012 e o desvio máximo é de 0,26.

Como exposto, o método CIP começa a se tornar instável quando qualquer um dos critérios individuais – ou dispersão, ou advecção – se torna instável. Para $\Delta x=0,45$ m; $\Delta t=1$ s; $\beta=0$ e $\alpha=1,1$; o critério de estabilidade na advecção é de 1,11 e o critério na dispersão é de 0,19. A Figura 4.24 mostra que este refino de malha já demonstra sinais de instabilidade. Para estes valores, o método de diferenças finitas e Grünwald-Letnikov transladado é 1,3. Com este valor de número de estabilidade na advecção, o método CIP começa a mostrar certa instabilidade.

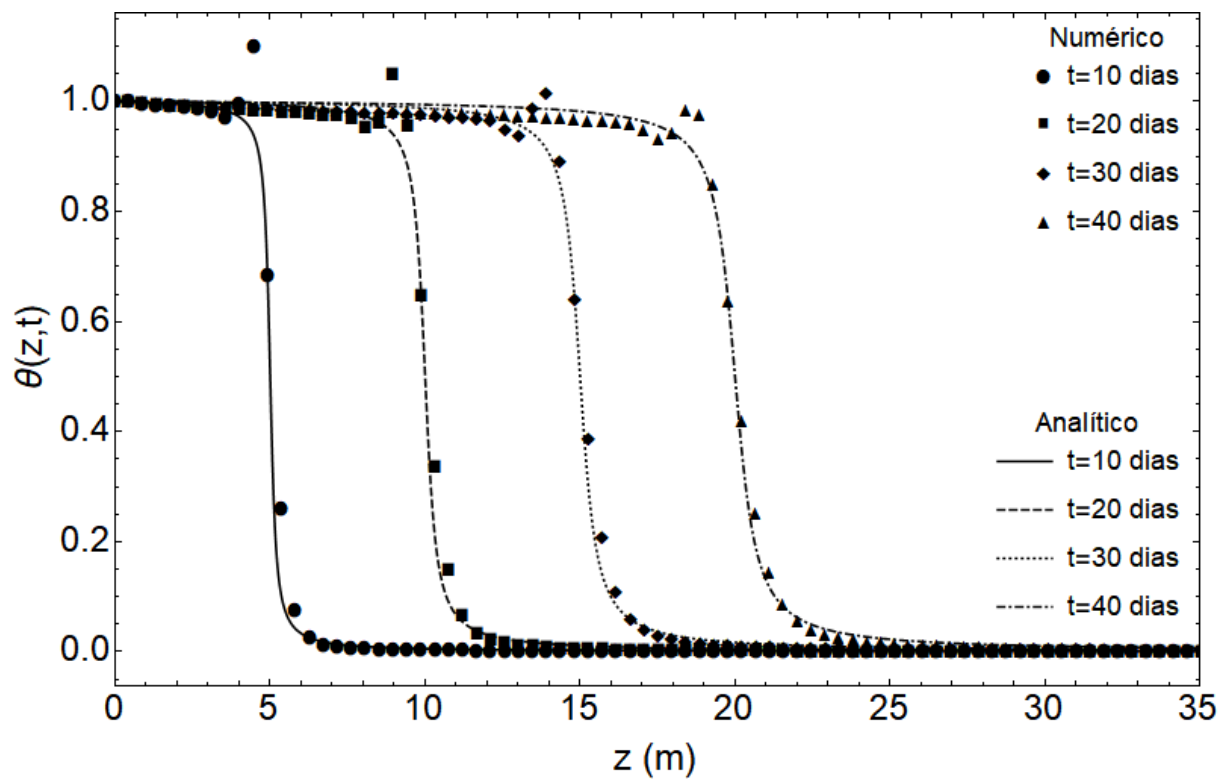


Figura 4.24 – Método CIP e Grünwald-Letnikov transladado com $\alpha=1,1$; $\beta=0$; $\Delta z=0,45$ m e $\Delta t=1$ dia.

Para estudar o efeito da instabilidade provocada pela parcela dispersiva no método CIP, aumenta-se o coeficiente de dispersão *ad hoc* de $0,07$ m^2 /dia para $0,455$ m^2 /dia, de forma que o critério de estabilidade na dispersão passa a exercer maior influência na estabilidade do processo. Para $\Delta x=0,5$ m; $\Delta t=1$ s; $\beta=0$ e $\alpha=1,1$; o critério de estabilidade na advecção é de 1 e o critério na dispersão é de 1,07. O critério de estabilidade para o método de diferenças finitas é de 2,07. A Figura mostra que o método CIP já sofre influência de instabilidade ainda não muito elevada com estes valores.

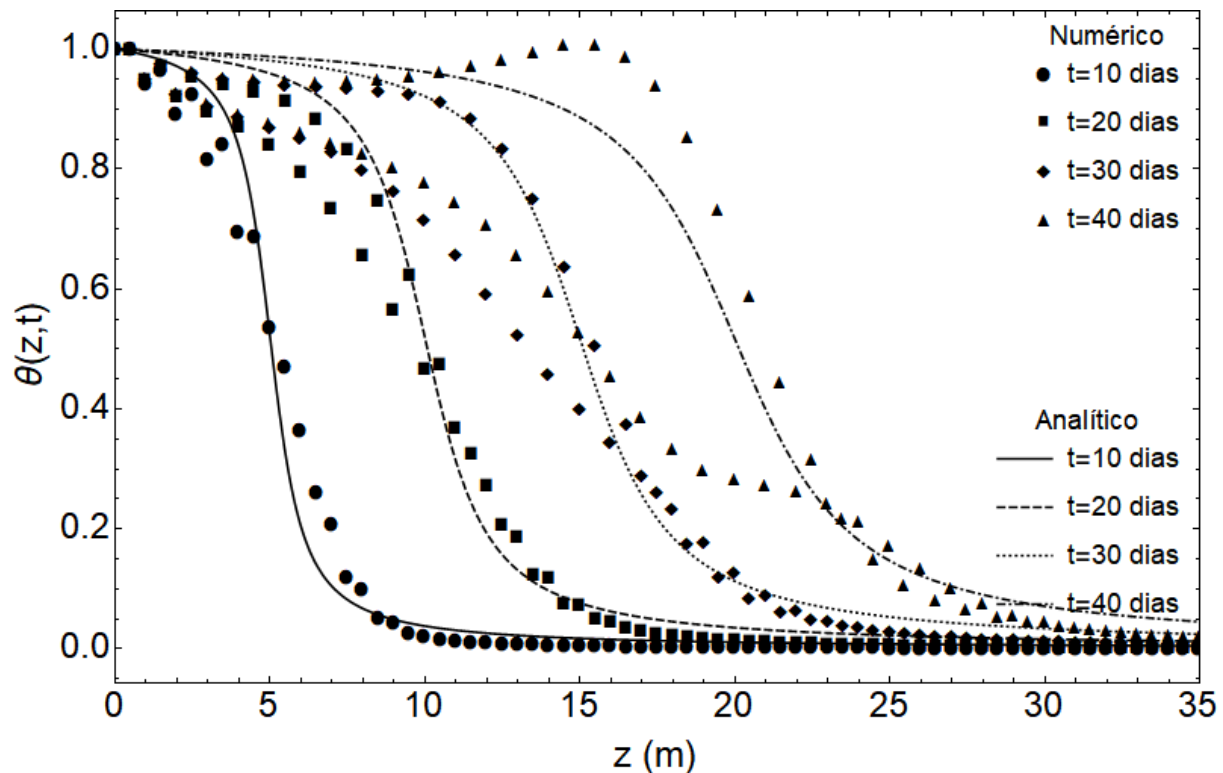


Figura 4.25 – Método CIP e Grünwald-Letnikov transladado com $\alpha=1,1$; $\beta=0$; $\Delta z=0,5\text{ m}$ e $\Delta t=1$ dia. Coeficiente de dispersão aumentado para $0,455\text{ m}^2/\text{dia}$ temporariamente.

Apesar do número de estabilidade na advecção ter seu valor ideal fixado em 1 na teoria do método CIP, ele apresenta certos pontos a serem considerados quanto a sua aplicação em conjunto como método de Grünwald-Letnikov transladado. Adotando-se $\alpha = 1,5$; $\Delta t=1\text{ s}$ e $\Delta z = 0,5\text{ m}$; pode-se analisar o efeito deste número nas curvas geradas com o método CIP quando o coeficiente de assimetria indica tendências na direção do fluxo. Quando $\beta = -1$, o método se torna mais preciso com o número de estabilidade da advecção fixado em 1, como mostra a Figura 4.26. Nestas condições, o desvio máximo é de 0,106 e o desvio médio máximo é de 0,00681. Quando $\beta = 1$, o método se torna menos preciso com o número de estabilidade da advecção fixado em 1, como mostra a Figura 4.27. Claramente, os pontos da solução numérica se distanciam da solução analítica na região superior da curva. Nestas condições, o desvio máximo é de 0,115 e o desvio médio máximo é de 0,737.

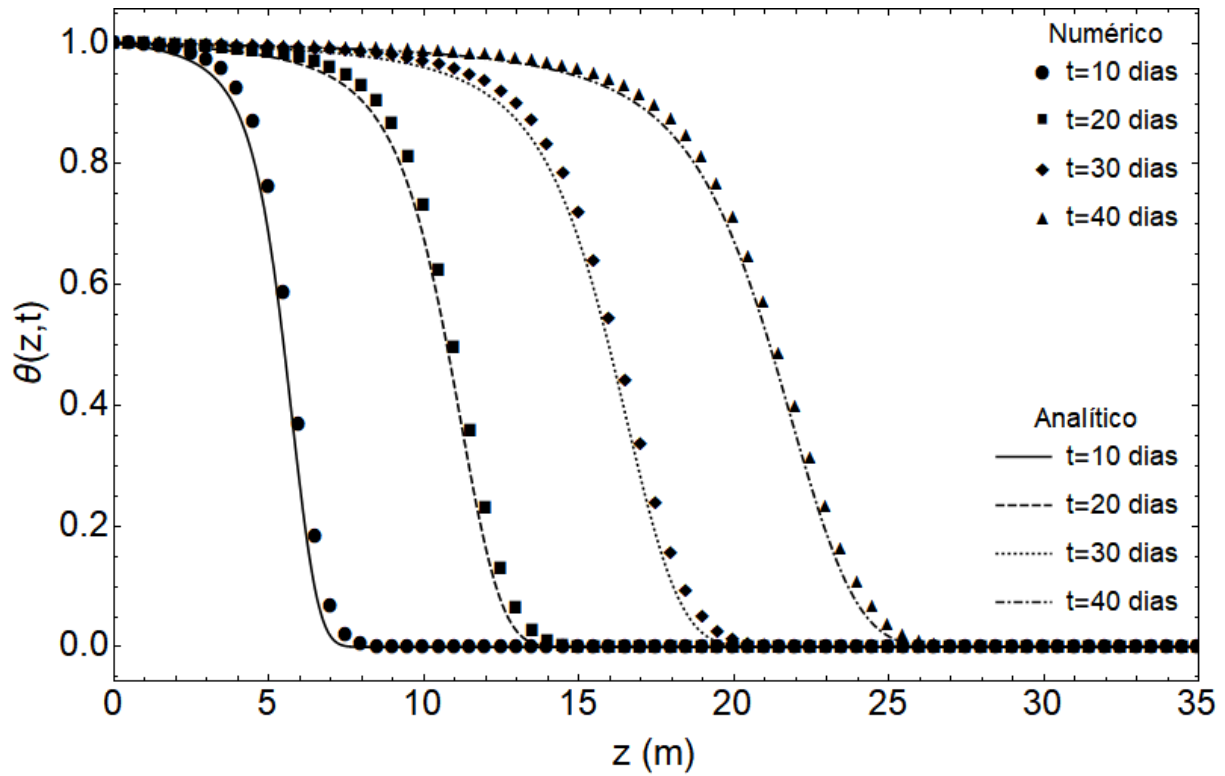


Figura 4.26 – Método CIP e Grünwald-Letnikov transladado com $\alpha=1,5$; $\beta=-1$; $\Delta z=0,5$ m e $\Delta t=1$ dia.

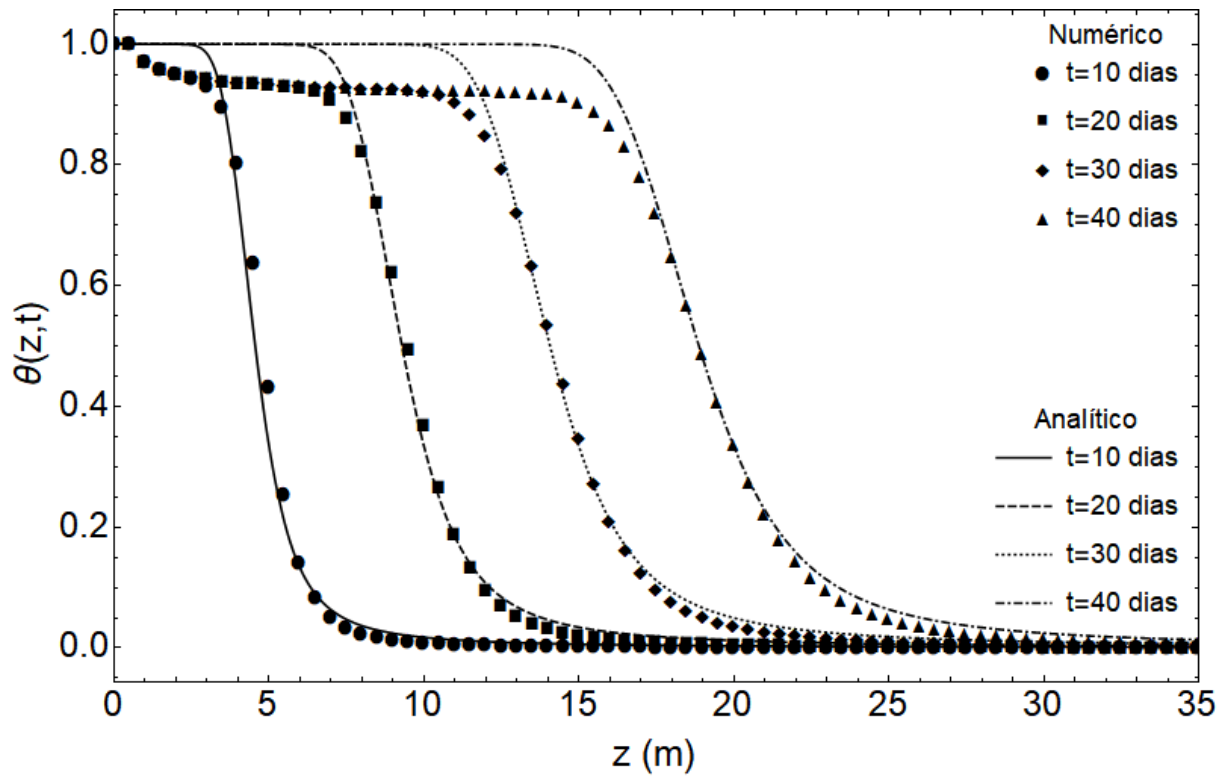


Figura 4.27 – Método CIP e Grünwald-Letnikov transladado com $\alpha=1,5$; $\beta=1$; $\Delta z=0,5$ m e $\Delta t=1$ dia.

5 CONCLUSÃO

Este estudo mostrou como utilizar argumentos estatísticos acerca do movimento microscópico de água para obter a equação de fluxo não saturado e transiente e como estender o argumento de tal forma que englobe o fluxo não-fickiano. Além disto, um novo esquema numérico que resolve a equação de fluxo foi proposto e comparado a um esquema numérico tradicional no âmbito do cálculo fracionário. Soluções analíticas construídas foram utilizadas para ajustar curvas experimentais que ilustram o avanço da frente de umidade em corpos de prova de argila. A formulação da modelo parte de uma descrição fundamentada em mecânica estatística de *quasi*-moléculas de água. A descrição é feita quanto ao movimento destas partículas mediante um campo de forças constante e outro de ação aleatória, que dispersa as partículas no domínio. A forma macroscópica desta descrição assume a forma de um vetor de fluxo de densidade com uma parcela de fluxo advectiva e outra seguindo uma forma de lei de Fick fracionária.

Apesar da lei de Fick fracionária estabelecer que o movimento das partículas ocorre na direção contrária ao gradiente do teor de umidade volumétrico, esta não é a causa do movimento. O modelo apresentado diz apenas como as partículas se movem no meio, e a parcela dispersiva ocorre sob um gradiente de teor de umidade volumétrico e um coeficiente de dispersão hidráulico que sofre influência direta da derivada parcial da sucção com relação ao teor de umidade volumétrico e à permeabilidade não saturada ao fluido. Esta descrição não exclui o fato de que a água está se movendo no sentido contrário ao gradiente de energia potencial de fluxo.

O novo esquema numérico, a associação do método CIP com o método de Grünwald-Letnikov transladado, provou-se mais preciso que a associação do método de diferenças finitas com o método de Grünwald Letnikov transladado. Os desvios para a solução analítica, tanto os desvios médios como máximos, giram em torno de metade daqueles apresentados pelo método de diferenças finitas. Além disto, mostrou-se que o critério de estabilidade do método CIP torna-o aplicável a uma maior faixa de valores que o método de diferenças finitas em sua formulação explícita.

Os dois métodos numéricos apresentaram precisão decrescente quando se aumenta o índice de estabilidade da solução analítica e quando se leva o coeficiente de assimetria para valores mais próximos de um.

Existem métodos numéricos para a resolução da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária mais precisos que a associação do método CIP e Grünwald-Letnikov transladado. Não obstante, estes métodos são computacionalmente mais caros e sua aplicação

é mais complexa. Neste sentido, a vantagem de se aplicar o método CIP para resolver a parcela advectiva de fluxo e o método de Grünwald-Letnikov transladado para resolver a parcela de dispersão fracionária consiste na conjugação de precisão razoável quando comparada a métodos similares e simplicidade de programação e aplicação.

No que concerne os ajustes, as comparações foram feitas usando a equação de fluxo de água em solos não saturados clássica e sua respectiva solução e as soluções da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária construídas propostas na Eq. (3.21) , Eq. (3.22) e Eq. (3.29). Há uma crescente melhora nos resíduos dos ajustes quando se parte da solução da equação de fluxo de água em solos não saturados clássica em direção à solução assimétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária, sendo esta melhora decrescente a cada ajuste. A solução assimétrica simples da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária e a solução assimétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária apresentaram resultados muito similares. Dada a maior simplicidade na solução assimétrica simples da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária, recomenda-se o seu uso em vez da solução assimétrica da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária por fornecer resultados muito similares e mais rapidamente.

Os resultados apresentados de índice de estabilidade e coeficiente de assimetria seguem certas tendências, exceto pelos resultados do TDR 2, que apresenta valores mais rígidos de anomalia. Este comportamento pode ter sido causado por algum erro experimental inerente ao ensaio. Já que não há grandes variações do material estudado, os resultados deveriam ter seguido todos alguma tendência similar.

Comparando-se os dois diferentes modelos de ajuste para os parâmetros hidráulicos, conclui-se que o modelo de Cavalcante e Zornberg (2017a) apresenta melhores resultados para curvas mais próximas daquelas dadas em situação gaussiana e pior quando a curva apresenta certo grau de anomalia elevado.

Afirma-se que o objetivo geral, que constituía em propor um modelo fracionário para o transporte não saturado de água no solo e resolvê-lo analítica e numericamente foi alcançado. No que segue, citam-se os objetivos específicos desta dissertação novamente e analisa-se se estes foram alcançados.

1. Formular um modelo utilizando o conceito de derivada fracionária e obter uma nova interpretação física dos parâmetros da equação fundamentada no novo paradigma;

O objetivo foi alcançado com sucesso, sendo o modelo obtido por meio da perspectiva estocástica, que imprime uma interpretação física diretamente na dedução do modelo, e por uma perspectiva macroscópica consequente.

2. *Resolver o modelo analiticamente, propor e validar uma formulação numérica nova para resolver o modelo;*

O modelo foi resolvido propondo-se três soluções fracionárias distintas inéditas no contexto estudado. Além disto, foi proposta com sucesso uma nova formulação numérica que resolve a equação e que foi validada com as soluções analíticas.

3. *Modelar um ensaio de fluxo não saturado unidimensional de água em coluna solo;*

Conseguiu-se ajustar as soluções analíticas fracionárias e a clássica ao ensaio em coluna. É necessário realizar mais ajustes e validações com ensaios experimentais deste tipo, cujos dados são pouco frequentes na literatura.

4. *Analisar ganhos de precisão quanto à aplicação da teoria, principalmente no que diz respeito à modelagem de solos com comportamento heterogêneo.*

Do ajuste das soluções aos dados experimentais, e tendo em vista o conceito de heterogeneidade que se aplica a este trabalho, percebe-se que o modelo fracionário possui melhor adequação ao estudo da água quando esta percola meios porosos. Desta forma, ela mostrou-se melhor na simulação do fluxo em meios poroso com heterogeneidades a nível microscópico. Além disto, as soluções foram facilmente implementadas na linguagem *Mathematica* e podem ser aplicadas diretamente a situações reais com melhor precisão que os modelos tradicionais. Adicionalmente, o custo computacional para o cálculo das expressões fracionárias é razoável o suficiente para aplicações a fluxos em grande escala.

5.1 Sugestão de estudos futuros

No que concerne o escopo da dissertação e os resultados obtidos, sugere-se as seguintes possíveis linhas de pesquisa para continuação dos estudos na aplicação do cálculo fracionário ao estudo de fluxo em meios porosos não saturados:

- Estender a solução analítica e a formulação estatística do transporte de água aos casos 2D e 3D;
- Estudo numérico do método CIP associado ao Grünwald-Letnikov trasladado para problemas em 2D e 3D com diferentes condições iniciais e de contorno;
- Resolução e estudo da solução da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária com termo fracionário aplicado à derivada temporal em vez da derivada espacial;

- Resolução e estudo da equação de fluxo de água em solos não saturados fracionária com ambos os termos de advecção e dispersão sendo derivadas fracionárias;
- Ajuste das soluções analíticas fracionárias de Moraes (2017) e Benson (1998) a resultados de diferentes ensaios em coluna são saturados e averiguação dos valores do coeficiente de dispersão com relação ao efeito escala;
- Correlacionar o transporte fracionário com a geometria fractal do solo;
- Aplicar o modelo fracionário para estimar o teor de umidade volumétrico em modelos de resistência ao cisalhamento do solo em condições não saturadas.

REFERÊNCIAS

- ARIS, R. (1990). *Vector, Tensors and the Basic Equations of Fluid Mechanics*. Dover, New York, 286 p.
- AZEVEDO, M. M. (2016). *Performance of Geotextiles with Enhanced Drainage*. PhD thesis. University of Texas, Austin, USA 411p.
- BEAR, J. (1972). *Dynamics of Fluids in Porous Media*. Dover, New York, v. 1, 755 p.
- BENSON, D. A (1998). *The Fractional Advection Dispersion Equation: Development and application*. PhD thesis. University of Nevada, Reno, USA, 199 p.
- BENSON, D. A.; WHEATCRAFT, S. W.; MEERSCHAERT, M. M. (2000). The fractional-order governing equation of Levy motion. *Water Resources Research*, 36(6): 1413-1423.
- BHATTACHARYA, R. N.; GUPTA, V. K.; SPOSITO, G. (1976). On Stochastic Foundations of the Theory of Water Flow Through Unsaturated Soil. *Water Resources Research*, 12(3): 503-512.
- BHATTACHARYA, R. N.; GUPTA, V. K. (1990). Application of central limit theorems to solute transport in saturated porous media: From kinetic to field scales, in *Dynamics of Fluids in Hierarchical Porous Media*, edited by J. H. Cushman, pp. 61–96, Academic, San Diego, California, USA.
- BOULOUTAS, E. T. (1989). *Improved numerical approximations for flow and transport in the unsaturated zone*. PhD Thesis. Massachusetts Institute of Technology, Massachusetts, 281 p.
- BUTERA, S.; PAOLA, M. D. (2014). A physically Based Connection Between Fractional Calculus and Fractal Geometry. *Annals of Physics*,. 350, 146-158.
- CARPINTERI, A.; MAINARDI, F (1997). *Fractals and Fractional Calculus in Continuum Mechanics*. Springer-Verlag Wien, New York, v. 378, 348 p.
- CAVALCANTE, A. L. B.; ZORNBERG, J. G. (2017a). Efficient Approach to Solving Transient Unsaturated Flow Problem I: Analytical Solutions. *International Journal of Geomechanics*, 17(7): 04017013-1--04017013-17.
- CAVALCANTE, A. L. B.; ZORNBERG, J. G. (2017b). Efficient Approach to Solving Transient Unsaturated Flow Problems. II: Numerical Solutions. *International Journal of Geomechanics*, 17(7): 04017014-1 - 04017014-13.
- CELIA, M. A.; BOULOUTAS, E. T. (1990). A general mass-conservative numerical solution for the unsaturated flow equation. *Water Resources Research*, 7(26): 1483-1496.
- CUSHMAN, J. H.; GINN, T. R. (1993). Nonlocal Dispersion in Media with Continuously Evolving Scales of Heterogeneity. *Transport in Porous Media*, 13: 123-138.

- MORAES, R. M. (2013). Transporte de Contaminantes Inorgânicos em Solos Tropicais Lateríticos: Abordagem com Cálculo Fracionário. Dissertação de Mestrado em Geotecnia - Universidade de Brasília, Brasília, DF, 138 p.
- MORAES, R. M. (2017). Cálculo fracionário, microtomografia e multifractalidade aplicados à modelagem de ensaios em coluna em diferentes escalas. Tese de Doutorado em Geotecnia, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 108 p.
- MORAES, R. M.; CAVALCANTE, A. L. B. (2015). Using the Fractional Advection Dispersion Equation to Improve the Scale Effect in the Sampling Process of Column Tests with Lateritic Soils. *Defect and Diffusion Forum*, v. 365: 188-193.
- MORAES, R. M.; CAVALCANTE, A. L. B.; CRESTANA, S. (2014). Uma Abordagem com Cálculo Fracionário ao Transporte de Contaminantes em Solos Tropicais Lateríticos. *Simpósio Nacional de Instrumentação Agropecuária*. São Carlos: 589-592.
- MORAES, R. M.; CAVALCANTE, A. L. B. (2014). Simulating Lateritic Soil Column Tests with the Space Fractional Advection-Dispersion Equation. *Electronic Journal of Geotechnical Engineering*, v. 19, p. 4111-4124.
- DIETHELM, K. (2004). *The Analysis of Fractional Differential Equations*. Springer, Berlin v. 2004, 262 p.
- FREDLUND, D. G.; RAHARDJO, H. (1993). *Soil Mechanics for Unsaturated Soils*. John Wiley & Sons, New York, 507 p.
- HALL, C (2007). Anomalous Diffusion in Unsaturated Flow: Fact or Fiction? *Cement and Concrete Research*, 37, p. 378-385.
- HERRMANN, R. (2014). *Fractional Calculus an introduction for Physicists*. World Scientific, Toh Tuck Link, 479p.
- HEYMANS, N.; PODLUBNY, I (2006). Physical Interpretation of Initial Conditions for Fractional Differential Equations with Riemann-Liouville Fractional Derivatives. *Rheologica Acta*, 45(5), p. 765-771.
- IBE, O. C. (2013). *Elements of Random Walk and Diffusion Processes*. John Wiley & Sons, New Jersey, 260 p.
- ISHTEVA, M. K. (2005). *Properties and Applications of the Caputo Fractional Operator*. Master Thesis. University of Karlsruhe, Alemanha, 65 p.
- KAVVAS, M. L.; ERCAN, A.; POLSINELLI, J. (2017). Governing equations of transient soil water flow and soil water flux in multi-dimensional fractional anisotropic media and fractional time. *Hydrology and Earth System Sciences*, 21: 1547-1557.

- LI, C.; ZENG, F. (2012). Finite Difference Methods for Fractional Differential Equations. *International Journal of Bifurcation and Chaos*, 22(4): 120014-1 - 120014-28, 2012.
- MACHADO, J. T.; KIRYAKOVA, V.; MAINARDI, F. (2011). Recent History of Fractional Calculus. *Communications Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 16: 1140-1153.
- MAINARDI, F.; LUCHKO, Y.; PAGNINI, G. (2001). The fundamental Solution of the Space-Time Fractional Diffusion Equation. *arXiv*, 4(2): 153-292.
- MEERSCHAERT, M. M.; SIKOSKII, A. (2012). *Stochastic Models for Fractional Calculus*. De Gruyter, Berlin, 291 p.
- MEERSCHAERT, M. M.; TADJERAN, C. (2004). Finite difference approximations for fractional. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 172: 65-77.
- MEERSCHAERT, M. M.; TADJERAN, C. (2006). Finite difference approximations for two-sided space-fractional. *Applied Numerical Mathematics*, 56: 80-90.
- MORELES, M. A.; PEÑA, J.; B. , S.; ITURRIAGA, R. (2013). On Modeling Flow in Fractal Media Form Fractional Continuum Mechanics and Fractal Geometry. *Transport in Porous Media*, 99: 161-174.
- NELSON, E (2001). *Dynamical Theory of Brownian Motion*. Princeton: Princeton University Press, New Jersey, 114 p.
- NOLAN, J. O. (2016). *Stable Distributions Models for Heavy Tailed Data*. Birkhauser, Boston, USA.
- OCHOA-TAPIA, J. A.; VALDES-PARADA, F. J.; ALVAREZ-RAMIREZ, J. (2007). A fractional-order Darcy's Law. *Physica A*, 374: 1-14.
- OGATA, A.; BANKS, R. B (1961). A Solution of the Differential Equation of Longitudinal Dispersion in Porous Medium. *Fluid Movement in Earth Materials*, 411-A: A1 - A7.
- OLDHAM, K. B.; SPAINER, J (2006). *The Fractional Calculus*. Dover Publications, Mineola, 234 p.
- OLIVEIRA, E. C.; MACHADO, T. J. A. (2014). Review of Definitions for fractional Derivatives and Integrals. *Mathematical Problems in Engineering*, 2014: 1-6.
- OSLER, T. (1971). Taylor's Series Generalized for Fractional Derivatives and Applications. *SIAM Journal on Mathematical Analysis*, 2(1): 37-48.
- OZELIM, L. C. D. S.; CAVALCANTE, A. L. B. (2018). Representative Elementary Volume Determination for Permeability and Porosity Using Numerical Three-Dimensional Experiments in Microtomography Data. *International Journal of Geomechanics*, 18(2): 04017154-1 - 04017154-11.

- PACHEPSKY, Y. (2004). *Fractals in Soil Science*. 1. ed. Elsevier, Amsterdam: v. 88/3-4, 293 p.
- PACHEPSKY, Y.; TIMLIN, D.; RAWLS, W. (2003). Generalized Richards' Equation to Simulate Water Transport in Unsaturated Soils. *Journal of Hydrology*, 272: 3-13.
- PODLUBNY, I. (1999). *Fractional Differential Equations*. Academic Press, San Diego, v. 198: 339 p.
- RATHIE, P. N.; OZELIM, L. C. (2017). Exact and approximate expressions for the reliability of stable Lévy random variables with applications to stock market modelling. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 321: 314-322.
- SCHNEIDER, W. R. (1986). *Stable Distributions: Fox H Function Representation and Generalization (Lecture Notes in Physics)*. Springer-Verlag, Berlin, v. 262: 497-511.
- SCHUMER, R.; BENSON, D. A.; MEERSCHAERT, M. M.; WHEATCRAFT, S. W. (2001). Eulerian derivation of the fractional advection-dispersion equation. *Journal of contaminant hydrology*, 48: 69-88.
- SCHUMER, R.; MEERSCHAERT, M. M.; BAEUMER, B. (2009). Fractional Advection-Dispersion Equations for Modeling Transport at the earth Surface. *Journal of Geophysical Research*, 114(F00A07): 1-15.
- SUN, H.; MEERSCHAERT, M. M.; ZHANG, Y.; JIANTING, Z.; CHEN, W. (2013). A Fractal Richard's Equation to Capture the non-Boltzmann Scaling of Water Transport in Unsaturated Media. *Advances in Water Resources*, 52: 292-295.
- SZYEMKIEWICZ, A. (2013). *Modelling Water Flow in Unsaturated Porous Medium*. Springer, Gdansk.
- TAKEWAKI, H.; NISHIGUCHI, A.; YABE, T. (1985). Cubic Interpolated Pseudo-Particle method (CIP) for Solving Hyperbolic-Type Equations. *Journal of Computational Physics*, 61(2): 261-268.
- TAKEWAKI, H.; NISHIGUCHI, A.; YABE, T. (1987). The Cubic Pseudo-Particle (CIP) Method: Application to Nonlinear and Multi-Dimensional Hyperbolic Equations. *Journal of Computational Physics*, 70(2): 355-372.
- TARASOV, V. E. (2005). Fractional Hydrodynamic Equations for Fractal Media. *Annals of Physics*, 318: 286-307.
- USERO, D. (2008). *Fractional Taylor series for Caputo Fractional Derivatives. Construction of Numerical Schemes*. Complutense University of Madrid, Madrid, Espanha, 18p. http://www.fdi.ucm.es/profesor/lvazquez/calfrac/docs/paper_Usero.pdf Último acesso em 16/05/2018

- WHEATCRAFT, S. W.; MEERSCHAERT, M. M. (2008). Fractional Conservation of Mass. *Advances in Water Resources*, 31(10), 1377-1381.
- WHITTAKER, S. (1986). Flow in Porous Medium I: A Theoretical Derivation of Darcy's Law. *Transport in Porous Medium*, 1(1), 3-25.
- WOLFRAM RESEARCH, Inc. Mathematica (2018). Versão 11, Champaign, Illinois.
- YANOVSKY, V. V.; CHECHKIN, A. V.; SCHERTZER, D.; TUR, A. V. (2000). Lévy Anomalous Diffusion and fractional Fokker-Planck Equation. *Physica A*, 282: 13-34.
- ZOIA, A.; NÉEL, M. C.; CORTIS, A. (2010). Continuous-Time Random-Walk Model of Transport in Variably Saturates Heterogeneous Porous Media. *Physical Review E*, (81): 031104-1 - 031104-12.

A. APÊNDICE: TEOREMA CENTRAL DO LIMITE E MOVIMENTO BROWNIANO

Utilizando a expansão em séries de Taylor da função exponencial e dado que os primeiros momentos da função de densidade de probabilidade existem, a transformada de Fourier, Eq. (2.36), pode ser expressa por:

$$\hat{\theta}(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(1 - ikz + \frac{1}{2!}(-ikz)^2 + \dots\right) \theta(z) dz \quad (\text{A.1})$$

$$\hat{\theta}(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\theta(z) - ikz \theta(z) + \frac{1}{2!}(-ikz)^2 \theta(z) + \dots\right) dz \quad (\text{A.2})$$

$$\hat{\theta}(k) = 1 - ik\mu_1 - \frac{1}{2}k^2\mu_2 + O(k^3) \quad (\text{A.3})$$

onde $O(k^3)$ denota uma função que se aproxima de zero tão rapidamente quanto k^3 quando $k \rightarrow 0$.

A soma de variáveis aleatórias na Eq. (2.32) tem transformada de Fourier dada por:

$$E\left[e^{-ikS_n}\right] = E\left[e^{-ik(Z_1 + \dots + Z_n)}\right] \quad (\text{A.4})$$

$$E\left[e^{-ikS_n}\right] = E\left[e^{-ikZ_1}\right] \dots E\left[e^{-ikZ_n}\right] \quad (\text{A.5})$$

Como as variáveis aleatórias são iid, todos seus momentos são iguais. Logo, as funções características de todas também são iguais:

$$E\left[e^{-ikS_n}\right] = E\left[e^{-ikZ}\right]^n \quad (\text{A.6})$$

$$E\left[e^{-ikS_n}\right] = \theta(k)^n \quad (\text{A.7})$$

Pode-se também obter uma expressão para o primeiro momento e a variância da soma de variáveis aleatórias em termos dos momentos da densidade de probabilidade das variáveis individuais. É imediato, da definição de primeiro momento de uma variável aleatória, que a seguinte igualdade é válida:

$$E[S_n] = n\mu_1 \quad (\text{A.8})$$

onde μ_1 denota a média da função de densidade de probabilidade das variáveis aleatórias.

Assim, para a soma de variáveis aleatórias (Ibe, 2013):

$$\sigma_{S_n}^2 = E\left[(S_n - n\mu_1)^2\right] \quad (\text{A.9})$$

$$\sigma_{S_n}^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\sum_{j=1}^n (Z_j - \mu_1)\right)^2 \theta(z) dz \quad (\text{A.10})$$

$$\sigma_{S_n}^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\sum_{j=1}^n (Z_j - \mu_1)^2 + \sum_{j=1}^n \sum_{l=1, l \neq j}^n (Z_j - \mu_1)(Z_l - \mu_1) \right) \theta(z) dz \quad (\text{A.11})$$

$$\sigma_{S_n}^2 = nE[(Z_j - \mu_1)^2] + \sum_{j=1}^n \sum_{l=1, l \neq j}^n E[(Z_j - \mu_1)(Z_l - \mu_1)] \quad (\text{A.12})$$

O termo dentro do somatório duplo da Eq. (A.12) é a definição de covariâncias de variáveis aleatórias independentes, que é nula:

$$\sigma_{S_n}^2 = n\sigma^2 \quad (\text{A.13})$$

Para deduzir o teorema do limite central, por outro lado, necessita-se tratar não da soma de variáveis aleatórias, mas de sua soma normalizada. Neste caso, tem-se que o primeiro momento e a variância da soma normalizada podem ser encontrados por:

$$E\left[\frac{S_n - n\mu_1}{\sigma\sqrt{n}}\right] = 0 \quad (\text{A.14})$$

e

$$E\left[\left(\frac{S_n - n\mu_1}{\sigma\sqrt{n}}\right)^2\right] = 1 \quad (\text{A.15})$$

De posse da Eq. (A.3), Eq. (A.7), Eq. (A.14) e Eq. (A.15), a função característica pode ser escrita por:

$$E\left[e^{-ik\left(\frac{S_n - n\mu_1}{\sigma\sqrt{n}}\right)}\right] = \left[1 - \frac{1}{2} \frac{k^2}{n} + o(n^{-1})\right]^n \quad (\text{A.16})$$

No limite $n \rightarrow \infty$, tem-se:

$$E\left[e^{-ik\left(\frac{S_n - n\mu_1}{\sigma\sqrt{n}}\right)}\right] \rightarrow e^{-\frac{k^2}{2}} \quad (\text{A.17})$$

Tomando-se a transformada inversa de Fourier da Eq. (A.17):

$$\frac{S_n - n\mu}{\sigma\sqrt{n}} \sim \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-z^2/2} \quad (\text{A.18})$$

que é a densidade de probabilidade da função normal padronizada.

No caso de uma soma não normalizada e fazendo $n=t/\Delta t$ na Eq. (A.16), tem-se:

$$E\left[e^{-ik(S_n - n\mu_1)}\right] = \left[1 - \frac{1}{2} \frac{\sigma^2 k^2}{(t/\Delta t)^2} + o\left(\frac{\Delta t}{t}\right)\right]^{\frac{t}{\Delta t}} \quad (\text{A.19})$$

Fazendo:

$$D_z = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\sigma^2}{2} \quad (\text{A.20})$$

No limite $n \rightarrow \infty$, $\Delta t \rightarrow 0$ e tem-se:

$$E \left[e^{-ik(S_n - n\mu_1)} \right] = e^{-D_z tk^2} \quad (\text{A.21})$$

E a transformada da soma não deslocada é:

$$E \left[e^{-ik(S_n)} \right] = e^{-ika_s t - t D_z k^2} \quad (\text{A.22})$$

onde fez-se:

$$a_s = \lim_{n \rightarrow \infty} \mu_1 \quad (\text{A.23})$$

Supõe-se implicitamente que os limites (A.23) e (A.20) existem.

Por fim, chega-se à função de densidade de probabilidade normal:

$$S_n \sim \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{(z-a_s t)^2}{4D_z t}} \quad (\text{A.24})$$

A Transformada de Fourier da Eq. (A.24) é claramente solução da equação diferencial ordinária (Meerschaert e Sikoskii, 2012):

$$\frac{\partial \hat{\theta}}{\partial t} = \left(-ika_s + D_z (ik)^2 \right) \hat{\theta} \quad (\text{A.25})$$

Invertendo o lado direito da Eq. (A.25) usando a propriedade de derivada da transformada de Fourier resulta em:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = D_z \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} - a_s \frac{\partial \theta}{\partial z} \quad (\text{A.26})$$

A Eq. (A.26) é exatamente a equação de Richards na forma do teor de umidade volumétrico com parâmetros hidráulicos de Cavalcante e Zornberg (2017a).

No caso de partículas com pouca interação entre si, a função de densidade de probabilidade da Eq. (A.26) pode ser substituída pelo teor de umidade volumétrico (Bhattacharya e Gupta, 1990) e θ passa a ter a interpretação de teor de umidade volumétrico.

Considere, agora, um processo estocástico $S_n(t)$ que descreve a posição de um *random walk* no tempo. O passo $X(t)$ tem probabilidades p e $(1-p)$ de se mover em sentido positivo (Δx) ou negativo ($-\Delta x$) respectivamente, o primeiro e segundo momentos do incremento entre dois passos são (Ibe, 2013):

$$E[S_n(t + \Delta t) - S_n(t)] = p\Delta x + (1-p)(-\Delta x) = (2p-1)\Delta x \quad (\text{A.27})$$

$$E\left[\{S_n(t + \Delta t) - S_n(t)\}^2\right] = p(\Delta x)^2 + (1-p)(-\Delta x)^2 = (\Delta x)^2 \quad (\text{A.28})$$

Para o conjunto de passos efetuados, tem-se a soma de $\lfloor t/\Delta t \rfloor$ passos independentes e identicamente distribuídos. O valor esperado da posição final deve ser a média da soma de todos os passos, já que cada incremento é iid (Eq. (A.8) e Eq. (A.13)). Para que o *random walk* represente um movimento browniano, as seguintes equações devem ser satisfeitas:

$$\left\lfloor \frac{t}{\Delta t} \right\rfloor (2p-1)\Delta x = \mu_1 t \quad (\text{A.29})$$

$$\left\lfloor \frac{t}{\Delta t} \right\rfloor (\Delta x)^2 = \frac{\Delta x^2}{\Delta t} t = \sigma^2 t \quad (\text{A.30})$$

onde, no limite $n \rightarrow \infty$ adotou-se que $\lfloor t/\Delta t \rfloor \approx t/\Delta t$.

Colocando a Eq. (A.30) em função Δx e substituindo na Eq. (A.29),

$$\Delta x = \sigma \sqrt{\Delta t} \quad (\text{A.31})$$

$$p = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\mu_1 \Delta t}{\Delta x} \right) \quad (\text{A.32})$$

$$p = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\mu_1}{\sigma} \sqrt{\Delta t} \right) \quad (\text{A.33})$$

Desta forma, pode-se enunciar o movimento browniano a partir de um *random walk* da seguinte forma: para um processo estocástico iid $X(t)$ descrito por um *random walk* com $\Delta t = t/n$, $n=1,2,\dots$ e $t > 0$ que efetua passos de tamanho $\sigma\sqrt{\Delta t}$ com probabilidade $\{1+(\mu_1/\sigma(\Delta t)^{1/2})\}/2$ e $-\sigma\sqrt{\Delta t}$ com probabilidade $1-\{1+(\mu_1/\sigma(\Delta t)^{1/2})\}/2$, a soma dos passos adotados a cada intervalo de tempo, S_n , define a posição de um movimento browniano unidimensional, desde que Δx e Δt sejam infinitesimalmente pequenos e que os limites de $\Delta x^2/\Delta t$ e de $\Delta x/\Delta t$ sejam constantes. Do teorema central do limite, à medida que $n \rightarrow \infty$, este processo tende à distribuição normal.

B. APÊNDICE: DA EQUAÇÃO DE LANGEVIN PARA A EQUAÇÃO DE RICHARDS.

Considere a um processo de movimento de partículas em que cada partícula do sistema segue a Eq. (2.52) reescrita a seguir:

$$\frac{dz^*}{dt} = -\mu z^* + \frac{\sigma^2}{2} B(t) \quad (\text{B.1})$$

A distribuição de probabilidade da partícula pode ser escrita como

$$p(z, t) = E[\delta[Z(t) - z]] \quad (\text{B.2})$$

onde o símbolo $\delta(z)$ representa a função delta de Dirac.

A Eq. (B.2) é uma construção normalmente utilizada para descrever a probabilidade de se encontrar uma partícula que se move com posição referenciada a um eixo. Quando a posição espacial z se igual à posição real da partícula $Z(t)$, a Eq. (B.2) é igual à unidade. Caso contrário, tem-se o valor nulo.

O delta de Dirac é, de fato, a transformada de Fourier da unidade:

$$\delta[Z(t) - z] = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\{-ik[Z(t) - z]\} \frac{1}{2\pi} dk \quad (\text{B.3})$$

A média (esperança) da Eq. (B.3) pode ser calculada:

$$E[\delta[Z(t) - z]] = E\left[\int_{-\infty}^{\infty} \exp\{-ik[Z(t) - z]\} \frac{1}{2\pi} dk\right] \quad (\text{B.4})$$

$$E[\delta[Z(t) - z]] = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \exp\{-ikZ(t) - z\} \frac{1}{2\pi} dk\right] Z(t) dZ \quad (\text{B.5})$$

Invertendo-se a ordem de integração da Eq. (B.5), encontra-se:

$$E[\delta[Z(t) - z]] = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \exp\{-ik[z - Z(t)]\} Z(t) dz\right] dk \quad (\text{B.6})$$

Arranjando convenientemente os termos da Eq. (B.6), tem-se

$$E[\delta[Z(t) - z]] = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} \exp\{ikz\} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \exp\{-ikZ(t)\} Z(t) dz\right] dk \quad (\text{B.7})$$

Substituindo a Eq. (B.7) na Eq. (B.2) e evidenciando as operações de transformada e transformada inversa, percebe-se que:

$$p(z, t) = F^{-1}[\hat{Z}(k, t)] \quad (\text{B.8})$$

Em outras palavras, a probabilidade de se encontrar a partícula em dado ponto do espaço é a transformada inversa da transformada de Fourier de sua posição. Da unicidade da transformada de Fourier, a posição da partícula e a probabilidade de se encontrar em dado ponto serão usadas indistintamente no que segue.

A integral da Eq. (B.1) no tempo indo do instante inicial a um instante qualquer resulta em:

$$Z(t) = Z(0) + \int_0^t \mu z d\tau + \int_0^t \frac{\sigma^2}{2} B(\tau) d\tau \quad (\text{B.9})$$

Para maior simplicidade e sem perda de generalidade, assume-se que $Z(0)=0$. A derivada parcial no tempo da Eq. (B.8) é:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} F^{-1} \left[\hat{Z}(k) \right] \quad (\text{B.10})$$

Dado que a transformada de Fourier é uma integral calculada no espaço e que a derivada parcial é tomada no tempo, pode-se efetuar a operação de derivação antes da transformada inversa:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = F^{-1} \left[\frac{\partial}{\partial t} \hat{Z}(k) \right] \quad (\text{B.11})$$

Substituindo a Eq. (B.9) na Eq. (B.11):

$$\frac{\partial p}{\partial t} = F^{-1} \left[\frac{\partial}{\partial t} E \left[\exp \left[ik \int_0^t \left(\mu z + \frac{\sigma^2}{2} B(\tau) \right) d\tau \right] \right] \right] \quad (\text{B.12})$$

Como o ruído branco é dado pela soma de pulsos estocásticos independentes e que atuam em intervalos de tempo uniformemente distribuídos de forma que, a cada intervalo de tempo, a partícula executa um movimento devido ao campo de forças e outro aleatório de natureza estável:

$$B(t) = \sum_{j=0}^{\infty} B_{j,\Delta t} \Delta t \delta(t - t_j) \quad (\text{B.13})$$

$$\mu z(t) = \sum_{j=0}^{\infty} \mu z_{j,\Delta t} \Delta t \delta(t - t_j) \quad (\text{B.14})$$

com t_0 e $\Delta t = t_{j+1} - t_j$. A função característica de cada $B_{j,\Delta t}$ é a de uma distribuição normal com média zero e desvio padrão $\Delta t \sigma$. Substituindo (B.13) e a Eq. (B.14) na Eq. (B.12)

$$\frac{\partial p}{\partial t} = F^{-1} \left[\frac{\partial}{\partial t} E \left[\exp \left[ik \frac{\sigma^2}{2} \sum_{j=0}^n B_{j,\Delta t} + ik \sum_{j=0}^n \mu z_{j,\Delta t} \right] \right] \right] \quad (\text{B.15})$$

com $n=t / \Delta t$.

Dado que os processos são independentes, pode-se escrever:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = F^{-1} \left[\frac{\partial}{\partial t} E \left[\exp \left[ikB_{j,\Delta t} + ik\mu z_{j,\Delta t} \right] \right]^n \right] \quad (\text{B.16})$$

Note que:

$$E \left[\exp \left[ik \frac{\sigma^2}{2} B_{j,\Delta t} + ik\mu z_{j,\Delta t} \right] \right] = \exp \left(-\Delta t \frac{\sigma^2}{2} k^2 + i\mu k \Delta t \right) \quad (\text{B.17})$$

Como a função característica de cada $L_{j,\Delta t}$ é uma função característica de uma distribuição estável de Lévy, tem-se:

$$E \left[\exp \left[ik \frac{\sigma^2}{2} B_{j,\Delta t} + ik\mu z_{j,\Delta t} \right] \right]^n = \exp \left[\frac{t}{\Delta t} \left(-\Delta t \frac{\sigma^2}{2} k^2 + i\mu k \Delta t \right) \right] \quad (\text{B.18})$$

Substituindo a (B.16) na Eq. (B.18), chega-se a

$$\frac{\partial p}{\partial t} = F^{-1} \left[\frac{\partial}{\partial t} \exp \left(-t \frac{\sigma^2}{2} k^2 + i\mu k t \right) \right] \quad (\text{B.19})$$

O desenvolvimento desta equação resulta em:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} \left[i\mu k - \frac{\sigma^2}{2} k^2 \right] \hat{p}(-k) \exp(-ikz) dk \quad (\text{B.20})$$

Aplicando a transformada de Fourier à Eq. (B.20)

$$\frac{\partial \hat{p}(k)}{\partial t} = \left[i\mu k - \frac{\sigma^2}{2} k^2 \right] \hat{p}(k) \quad (\text{B.21})$$

Dado o exposto na Seção 2.2, a Eq. (B.21) é equivalente à equação:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\mu \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2 p}{\partial z^2} \quad (\text{B.22})$$

Se a Eq. (B.22) puder ser escrita para um grande número de partículas com interações fracas entre si, pode-se substituir a probabilidade pela densidade relativa de partículas no meio (Bhattacharya e Gupta, 1990). Então, a Eq. (B.22) se torna a equação de Richards:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -a_s \frac{\partial \theta}{\partial z} + D_z \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} \quad (\text{B.23})$$

Na Eq. (B.23), fez-se:

$$a_s = \mu \quad (\text{B.24})$$

e

$$D_z = \frac{\sigma^2}{2} \quad (\text{B.25})$$

Portanto, a descrição de um conjunto de partículas que se move segundo a equação de Langevin é equivalente a um movimento browniano.

C. APÊNDICE: DEFINIÇÕES DE DERIVADAS FRACIONÁRIAS.

É natural fazer da definição de derivada envolvendo limite uma primeira tentativa de definir uma derivada fracionária, ou seja:

$$\begin{aligned}\frac{d\theta}{dz} &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\theta(z) - \theta(z-h)}{h} \\ \frac{d^2\theta}{dz^2} &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\theta(z) - 2\theta(z-h) + \theta(z-h)}{h^2} \\ &\vdots \\ \frac{d^n\theta}{dz^n} &= \lim_{h \rightarrow 0} \sum_{j=0}^n \binom{n}{j} (-1)^j \theta(z-jh)\end{aligned}\tag{C.1}$$

onde, por definição:

$$\binom{n}{i} = \frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(n-i+1)\Gamma(i+1)}\tag{C.2}$$

Assim, troca-se os limites inteiros por limites reais e tem-se uma definição de derivada fracionária feita por construção:

$$\frac{d^\alpha\theta}{dz^\alpha} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^\alpha} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(\alpha-j+1)\Gamma(j+1)} (-1)^j \theta(z-jh)\tag{C.3}$$

A definição da Eq. (C.3) é a derivada fracionária de Grünwald-Letnikov. O argumento que levou à definição apresentada é fundamentado na extensão da definição em atraso da derivada. Pode-se utilizar a definição de derivada em avanço para definir a derivada à esquerda:

$$\frac{d^\alpha\theta}{d(z-)^\alpha} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^\alpha} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(\alpha-j+1)\Gamma(j+1)} (-1)^j \theta(z+jh)\tag{C.4}$$

Pode-se interpretar esta definição de derivada como uma ponderação entre todos os valores da função à esquerda ou à direita de dado ponto, onde os pesos são os chamados pesos de Grünwald:

$$w_j = \frac{(-1)^j \Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(\alpha-j+1)\Gamma(j+1)}\tag{C.5}$$

Uma pergunta natural que surge é se a definição de derivada de Grünwald-Letnikov é capaz de respeitar a propriedade da transformada de Fourier que é procurada. A transformada de Fourier da Eq. (C.3) é:

$$E \left[e^{-ikz} \frac{\partial^\alpha\theta}{\partial z^\alpha} \right] = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikz} \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^\alpha} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(\alpha-j+1)\Gamma(j+1)} (-1)^j \theta(z-jh) dz\tag{C.6}$$

Como o limite da Eq. (C.6) é independente da integração, supõe-se que é possível inverter a integração com o limite. Além disto, supõe-se que o somatório tem convergência uniforme, caso contrário não faria sentido calculá-los desde o princípio.

$$E \left[e^{-ikz} \frac{\partial^\alpha \theta}{\partial z^\alpha} \right] = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^\alpha} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(\alpha-j+1)\Gamma(j+1)} (-1)^j \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikz} \theta(z-jh) dz \quad (C.7)$$

Por uma simples substituição de variáveis:

$$z - jh = u \quad (C.8)$$

Tem-se:

$$E \left[e^{-ikz} \frac{\partial^\alpha \theta}{\partial z^\alpha} \right] = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^\alpha} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(\alpha-j+1)\Gamma(j+1)} (-1)^j e^{-ikjh} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-iku} \theta(u) du \quad (C.9)$$

$$E \left[e^{-ikz} \frac{\partial^\alpha \theta}{\partial z^\alpha} \right] = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^\alpha} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(\alpha-j+1)\Gamma(j+1)} (-1)^j e^{-ikjh} \theta(k) \quad (C.10)$$

Do binômio de Newton:

$$\sum_{j=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(\alpha-j+1)\Gamma(j+1)} (-1)^j e^{-ikjh} = (1 - e^{-ikh})^\alpha \quad (C.11)$$

$$E \left[e^{-ikz} \frac{\partial^\alpha \theta}{\partial z^\alpha} \right] = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^\alpha} (1 - e^{-ikh})^\alpha \theta(k) \quad (C.12)$$

$$E \left[e^{-ikz} \frac{\partial^\alpha \theta}{\partial z^\alpha} \right] = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^\alpha} (ikh)^\alpha \left(\frac{1 - e^{-ikh}}{ikh} \right)^\alpha \theta(k) \quad (C.13)$$

$$E \left[e^{-ikz} \frac{\partial^\alpha \theta}{\partial z^\alpha} \right] = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^\alpha} (ikh)^\alpha \left(\frac{1 - \left(1 - ikh + \frac{1}{2!} (-ikh)^\alpha + \dots \right)}{ikh} \right)^\alpha \theta(k) \quad (C.14)$$

$$E \left[e^{-ikz} \frac{\partial^\alpha \theta}{\partial z^\alpha} \right] = \lim_{h \rightarrow 0} (ik)^\alpha \left(1 - \frac{1}{2!} (-ikh)^\alpha + \dots \right)^\alpha \theta(k) \quad (C.15)$$

$$E \left[e^{-ikz} \frac{\partial^\alpha \theta}{\partial z^\alpha} \right] = (ik)^\alpha \theta(k) \quad (C.16)$$

No caso da derivada à esquerda, cálculos semelhantes levam à conclusão de que:

$$E \left[e^{-ikz} \frac{\partial^\alpha \theta}{\partial (z-)^\alpha} \right] = (-ik)^\alpha \theta(k) \quad (C.17)$$

Portanto a derivada de Grünwald-Letnikov é uma boa candidata para fornecer uma definição adequada de derivada fracionária, porque mantém a Eq. (2.82) e a Eq. (2.83) válidas. Por outro lado, o fato dela ser apresentada na forma de um limite de um somatório infinito dificulta sua aplicação à modelagem.

Note que a derivada de Grünwald-Letnikov é dada como uma convolução discreta entre a função e os pesos de Grünwald. Usando as propriedades da função gama e a aproximação de Stirling:

$$\Gamma(z+1) \sim \sqrt{2\pi z} z^z e^{-z}, \quad z \rightarrow \infty \quad (\text{C.18})$$

Os pesos de Grünwald podem ser escritos por

$$w_j \sim \frac{-\alpha}{\Gamma(1-\alpha)} \sqrt{\frac{j-\alpha-1}{j}} \left(\frac{j-\alpha-1}{j} \right)^{j-\alpha-1} j^{-\alpha-1} e^{\alpha+1} \quad (\text{C.19})$$

No limite com $j \rightarrow \infty$:

$$w_j \sim \frac{-\alpha}{\Gamma(1-\alpha)} j^{-\alpha-1} \quad (\text{C.20})$$

Portanto, os pesos de Grünwald seguem uma função potência de forma assintótica. Seja a função potência definida por:

$$\Phi_j = \frac{-\alpha}{\Gamma(1-\alpha)} j^{-\alpha-1} \quad (\text{C.21})$$

Os pesos de Grünwald se aproximam da função potência rapidamente, como pode-se ver na Figura C.1.

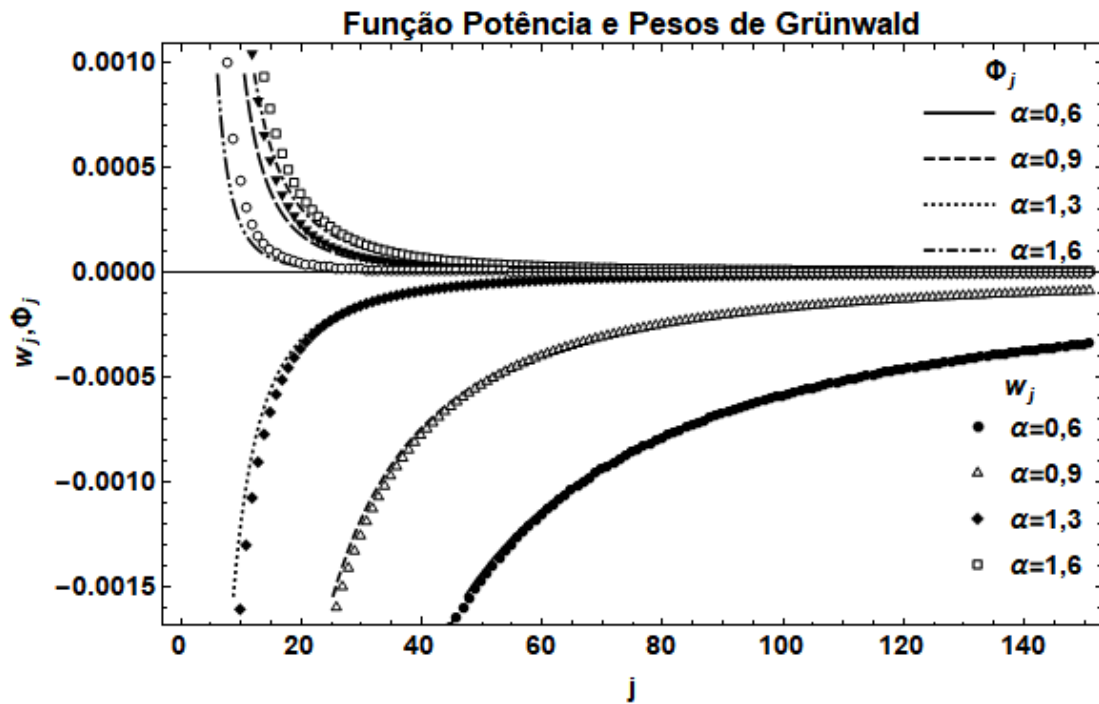


Figura C.1 – Comparação entre a evolução dos pesos de Grünwald e seu limite assintótico como uma função potência.

Assim, a definição de derivada de Grünwald-Letnikov pode ser vista como uma convolução discreta entre a função e uma função potência. Usando a convolução do limite assintótico dos pesos de Grünwald e uma derivada de uma função motivado pela Eq. (C.20), pode-se chegar à definição de Riemann-Liouville e à definição de Caputo.

A derivada fracionária à direita de Riemann-Liouville é definida por:

$${}^R D_z^\alpha \theta(z) = \frac{1}{\Gamma(N-\alpha)} \frac{d^N}{dz^N} \int_L^z \frac{\theta(\zeta)}{(z-\zeta)^{\alpha+1-N}} d\zeta \quad (C.22)$$

A derivada fracionária à esquerda de Riemann-Liouville é definida por:

$${}^R D_z^\alpha \theta(z) = \frac{(-1)^N}{\Gamma(N-\alpha)} \frac{d^N}{dz^N} \int_z^R \frac{\theta(\zeta)}{(\zeta-z)^{\alpha+1-N}} d\zeta \quad (C.23)$$

A derivada fracionária à direita de Caputo é definida por:

$${}^C D_z^\alpha \theta(z) = \frac{1}{\Gamma(N-\alpha)} \int_L^z \frac{f^{(N)}(\zeta)}{(z-\zeta)^{\alpha+1-N}} d\zeta \quad (C.24)$$

A derivada fracionária à esquerda de Caputo é definida por:

$${}^C D_z^\alpha \theta(z) = \frac{(-1)^N}{\Gamma(N-\alpha)} \int_z^R \frac{\theta^{(N)}(\zeta)}{(\zeta-z)^{\alpha+1-N}} d\zeta \quad (C.25)$$

Nas Equações (C.22) a (C.25), R e L são números reais e ilustram os limites do domínio, N é o maior inteiro menor do que α (i.e. $N = [\alpha]$, onde $[\]$ denota o menor inteiro maior que dado número).

As Equações (C.22) a (C.25) podem também ser obtidas independentemente de sua relação com a derivada de Grünwald-Letnikov, por um processo de construção semelhante em que se parte de uma fórmula construída de integral fracionária para, então, definir a derivada fracionária.

As integrais fracionárias de Caputo e de Riemann-Liouville – que são definidas da mesma forma – são construídas a partir da fórmula de integração iterada de Cauchy (Oldham e Spanier, 2006). A fórmula de integração de Cauchy fornece uma expressão em integral simples para o processo de integração de uma função em um mesmo intervalo diversas vezes. A ideia é, por meio de uma construção matemática, mudar a fórmula de modo que ela englobe situações não inteiras. Para isto, a definição de Riemann-Liouville troca expoentes inteiros por reais e troca funções de domínio inteiro por suas extensões reais (troca função fatorial pela função gama, por exemplo).

A fórmula de integração iterada de Cauchy é:

$$\int_L^x \int_L^{u_1} \int_L^{u_2} \dots \int_L^{u_{n-1}} \theta(\zeta) d\zeta du_{n-1} \dots du_2 du_1 = \frac{1}{(n-1)!} \int_L^z \frac{f(\zeta)}{(z-\zeta)^{n-1}} d\zeta \quad (C.26)$$

Usando a construção mencionada, a integral fracionária à direita de Riemann-Liouville é:

$${}^R I_z^q \theta(z) = \frac{1}{\Gamma(q)} \int_L^z \frac{\theta(\zeta)}{(x-\zeta)^{q-1}} d\zeta \quad (C.27)$$

Similarmente, a derivada fracionária à esquerda de Riemann-Liouville é:

$${}^L I_z^q \theta(z) = \frac{(-1)^N}{\Gamma(q)} \int_z^R \frac{\theta(\zeta)}{(\zeta-z)^{q-1}} d\zeta \quad (C.28)$$

Do fato de que a derivada é uma operação inversa à integração, pode-se combinar derivadas de ordem inteira com integrais fracionárias para resultar em uma derivação fracionária. Se a derivada for tomada antes da integração, tem-se a definição de Caputo. Se a derivada for tomada após a integração, tem-se a definição de Riemann-Liouville.

Devido à diferença de ordem das operações na definição destas derivadas, mostra-se que as duas definições são equivalentes apenas em situações específicas (Ishteva, 2005). É necessário que o valor da função se anule nos limites inferior ou superior da derivada ou que estes limites sejam infinitos. Nestas circunstâncias, as duas definições podem ser usadas indistintamente. Pode-se, também, mostrar que as definições de Grünwald-Letnikov são equivalentes à de Riemann-Liouville (Podlubny, 1999).

Da mesma forma que uma função analítica pode ser expandida em termos de suas derivadas inteiras pela série de Taylor, Osler (1971) mostrou que uma expansão em termos das derivadas fracionárias, quando estas existirem, é possível (Schumer *et al.*, 2001):

$$\theta(z + \Delta z) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \left[\frac{1}{2}(1 + \beta) \frac{\partial^{j+\alpha}}{\partial z^\alpha} + \frac{1}{2}(1 - \beta) \frac{\partial^{j+\alpha}}{\partial (z-)^{\alpha}} \right] \theta(z) \frac{\Delta z^{j+n}}{\Gamma(j+q+1)} \quad (\text{C.29})$$

Decorre das Equações (C.22) a (C.25) que diferentes representações em termos de séries de Taylor baseadas em diferentes definições de derivadas fracionárias são possíveis.

Além disto, decorre das séries de Taylor que é possível escrever uma aproximação de ordem zero para funções deriváveis de ordem fracionária em termos de sua derivada fracionária de uma ordem $0 < \alpha < 1$:

$$\theta(z) = \theta(a) + {}^c D_z^\alpha \theta(\xi) \frac{(z-a)^\alpha}{\Gamma(\alpha+1)} \quad (\text{C.30})$$

A Eq. (C.30) é conhecida como teorema do valor médio fracionário. A aproximação é em termos da derivada fracionária de Caputo, mas também poderia ter sido escrita em termos de outra definição de derivada fracionária. O valor ξ está entre a e z . Se o tamanho do intervalo $[z,a]$ for adotado muito pequeno, pode-se substituir ξ por z e obter uma aproximação razoável para a função.

D. APÊNDICE: DEDUÇÃO ESTOCÁSTICA DA EQUAÇÃO FRACIONÁRIA DE FLUXO NÃO SATURADO.

Retomando a Eq. (3.1):

$$\frac{dz}{dt} = -\mu z + \sigma^\alpha L(t) \quad (D.1)$$

A dedução da equação de fluxo não saturado a partir do mecanismo estatístico microscópico definido pela Eq. (D.1) é similar ao procedimento adotado no apêndice C para o caso inteiro. Por isto, omite-se alguns dos passos da demonstração.

A distribuição de probabilidade da partícula pode ser escrita como

$$p(z,t) = E \left[\delta [Z(t) - z] \right] \quad (D.2)$$

onde o símbolo $\delta(z)$ representa a função delta de Dirac. Além disto, tem-se

$$p(z,t) = F^{-1} \left[\hat{Z}(k,t) \right] \quad (D.3)$$

A integral no tempo indo do instante inicial a um instante qualquer resulta em:

$$Z(t) = Z(0) + \int_0^t \mu z d\tau + \int_0^t \sigma^\alpha L(\tau) d\tau \quad (D.4)$$

Para maior simplicidade e sem perda de generalidade, assume-se que $Z(0)=0$. A derivada parcial no tempo da Eq. (D.3) é:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} F^{-1} \left[\hat{Z}(k) \right] \quad (D.5)$$

Dado que a transformada de Fourier é uma integral calculada no espaço e que a derivada parcial é tomada no tempo, pode-se efetuar a operação de derivação antes da transformada inversa:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = F^{-1} \left[\frac{\partial}{\partial t} \hat{Z}(k) \right] \quad (D.6)$$

Substituindo a Eq. (D.4) na Eq. (D.6), tem-se:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = F^{-1} \left[\frac{\partial}{\partial t} E \left[\exp \left[ik \int_0^t (\mu z + \sigma^\alpha L(\tau)) d\tau \right] \right] \right] \quad (D.7)$$

Considere que o movimento aleatório descrito pela distribuição estável de Lévy seja dado pela soma de pulsos estocásticos independentes e que ajam em intervalos de tempo uniformemente distribuídos de forma que, a cada intervalo de tempo, a partícula executa um movimento devido ao campo de forças e outro aleatório de natureza estável:

$$L(t) = \sum_{j=0}^{\infty} L_{j,\Delta t} \Delta t \delta(t-t_j) \quad (D.8)$$

$$\mu z(t) = \sum_{j=0}^{\infty} \mu z_{j,\Delta t} \Delta t \delta(t-t_j) \quad (D.9)$$

com t_0 e $\Delta t = t_{j+1} - t_j$. A função característica década $L_{j,\Delta t}$ é aquela mesma dada pela Eq. (2.59). Substituindo a Eq. (D.8)

$$\frac{\partial p}{\partial t} = F^{-1} \left[\frac{\partial}{\partial t} E \left[\exp \left[ik \sigma^\alpha \sum_{j=0}^n L_{j,\Delta t} + ik \sum_{j=0}^n \mu z_{j,\Delta t} \right] \right] \right] \quad (D.10)$$

com $n=t / \Delta t$.

Dado que os processos são independentes, pode-se escrever:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = F^{-1} \left[\frac{\partial}{\partial t} E \left[\exp \left[ik \sigma^\alpha L_{j,\Delta t} + ik \mu z_{j,\Delta t} \right] \right]^n \right] \quad (D.11)$$

Note que:

$$E \left[\exp \left[ik \sigma^\alpha L_{j,\Delta t} + ik \mu z_{j,\Delta t} \right] \right] = \exp \left(-\Delta t \sigma^\alpha |k|^\alpha \left[1 - i\beta \operatorname{sign}(k) \tan \frac{\pi\alpha}{2} \right] + i\mu k \Delta t \right) \quad (D.12)$$

Como a função característica de cada $L_{j,\Delta t}$ é uma função característica de uma distribuição estável de Lévy, tem-se:

$$E \left[\exp \left[ik \sigma^\alpha L_{i,\Delta t} + ik \mu z_{i,\Delta t} \right] \right]^n = \exp \left[\frac{t}{\Delta t} \left(-\Delta t \sigma^\alpha |k|^\alpha \left[1 - i\beta \operatorname{sign}(k) \tan \frac{\pi\alpha}{2} \right] + i\Delta t \mu k \right) \right] \quad (D.13)$$

Assume-se que $\alpha \neq 1$. Substituindo na Eq. (D.11)

$$\frac{\partial p}{\partial t} = F^{-1} \left[\frac{\partial}{\partial t} \exp \left(-t |k|^\alpha \sigma^\alpha \left[1 - i\beta \operatorname{sign}(k) \tan \frac{\pi\alpha}{2} \right] + it \mu k \right) \right] \quad (D.14)$$

O desenvolvimento desta equação resulta em:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} \left[i\mu k - \sigma^\alpha |k|^\alpha - i\beta \sigma^\alpha \operatorname{sign}(k) \tan \frac{\pi\alpha}{2} |k|^\alpha \right] \hat{p}(-k) \exp(-ikz) dk \quad (D.15)$$

Usando as identidades $\pm(ik)^\alpha = |k|^\alpha \exp[\pm i\alpha\pi \operatorname{sign}(k)/2]$, $\exp(-ikz) = \cos(-ikz) + i\operatorname{sen}(-ikz)$, tem-se:

$$-\sigma^\alpha |k|^\alpha - i\beta \sigma^\alpha \operatorname{sign}(k) \tan \frac{\pi\alpha}{2} |k|^\alpha = \frac{-1}{\cos(\pi\alpha/2)} \left(\cos \frac{\operatorname{sign}(k)\pi\alpha}{2} \sigma^\alpha |k|^\alpha + i\beta \sigma^\alpha \operatorname{sen} \frac{\operatorname{sign}(k)\pi\alpha}{2} |k|^\alpha \right) \quad (D.16)$$

Da fórmula de Euler, conclui-se que:

$$\cos(z) = \frac{[\exp(iz) + \exp(-iz)]}{2} \quad (D.17)$$

$$isen(z) = \frac{[\exp(iz) - \exp(-iz)]}{2} \quad (D.18)$$

Portanto,

$$-\sigma^\alpha |k|^\alpha - i\beta\sigma^\alpha \text{sign}(k) \tan \frac{\pi\alpha}{2} |k|^\alpha = \frac{\sigma^\alpha}{\cos(\pi\alpha/2)} \left(\frac{(1+\beta)}{2} |k|^\alpha \exp[i\alpha\pi \text{sign}(k)/2] + \frac{(1-\beta)}{2} |k|^\alpha \exp[-i\alpha\pi \text{sign}(k)/2] \right) \quad (D.19)$$

Simplificando a Eq. (D.19):

$$-\sigma^\alpha |k|^\alpha - i\beta\sigma^\alpha \text{sign}(k) \tan \frac{\pi\alpha}{2} |k|^\alpha = \frac{\sigma^\alpha}{\cos(\pi\alpha/2)} \left(\frac{(1+\beta)}{2} (ik)^\alpha + \frac{(1-\beta)}{2} (ik)^\alpha \right) \quad (D.20)$$

Então, usando a Eq. (D.20), a Eq. (D.15) se torna:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{-1}{2\pi} \left[i\mu k - \frac{\sigma^\alpha}{\cos(\pi\alpha/2)} \left(\frac{(1+\beta)}{2} (ik)^\alpha + \frac{(1-\beta)}{2} (ik)^\alpha \right) \right] \hat{p}(k) \exp(-ikz) dk \quad (D.21)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -F^{-1} [i\mu k \hat{p}(-k)] + F^{-1} \left[\frac{\sigma^\alpha}{\cos(\pi\alpha/2)} \frac{(1+\beta)}{2} (ik)^\alpha \hat{p}(-k) \right] + F^{-1} \left[\frac{\sigma^\alpha}{\cos(\pi\alpha/2)} \frac{(1-\beta)}{2} (ik)^\alpha \hat{p}(-k) \right] \quad (D.22)$$

Substituindo a probabilidade pelo teor de umidade volumétrico, o processo descrito pela Eq. (D.1) corresponde à equação de movimento fracionário descrito pela equação:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -a_s \frac{\partial \theta}{\partial z} + D_z \frac{(1+\beta)}{2} \frac{\partial^\alpha \theta}{\partial z^\alpha} + D_z \frac{(1-\beta)}{2} \frac{\partial^\alpha \theta}{\partial (z-)^\alpha} \quad (D.23)$$

No contexto de distribuições de Lévy, β é o coeficiente de assimetria da distribuição, $\mu = a_s$ e $D_z = \sigma / \cos(\pi\alpha/2)$. A Eq. (D.23) é a equação de Richards fracionária no espaço.

E. APÊNDICE: DEDUÇÃO DO CRITÉRIO DE ESTABILIDADE - EQ. (3.35)

Considere o método de diferenças finitas associado ao método de Grünwald-Letnikov transladado como mostrado na Eq. (3.34):

$$\begin{aligned} \theta_j^{n+1} = & -a_s \frac{\Delta t (\theta_j^n - \theta_{j-1}^n)}{h} + D_z \frac{(1+\beta)}{2} \frac{\Delta t}{h^\alpha} \sum_{l=0}^N w_l \theta_{j-l+1}^n + \\ & D_z \frac{(1-\beta)}{2} \frac{\Delta t}{h^\alpha} \sum_{l=0}^N w_l \theta_{j+l-1}^n + \theta_j^n \end{aligned} \quad (\text{E.1})$$

Deseja-se mostrar que este método é estável quando

$$\left[\frac{a_s \Delta t}{\Delta z} + \left(\frac{\Delta t \alpha D_z}{\Delta z^\alpha} \right) \right] \leq 1 \quad (\text{E.2})$$

Pelo fato do método numérico possuir apenas um termo advectivo de diferença para a equação originalmente estudada por Meerschaert e Tadjeran (2006), a linha de raciocínio seguida é mais conveniente se tomada similar ao do artigo original, mas fazendo as mudanças necessárias. O método numérico explícito, Eq. (E.1), pode ser resumido em forma matricial:

$$\{\Theta\}^{n+1} = [A]\{\Theta\}^n \quad (\text{E.3})$$

onde $\{\Theta\}$ denota um vetor que contém o teor de umidade volumétrico em todas as células do domínio espacial em questão e $[A]$ é a matriz de coeficientes para este vetor. O índice superior indica o passo de tempo do processo iterativo.

O esquema é estável se o raio espectral da matriz $[A]$, definido como o módulo do maior autovalor da matriz e denotado por $\|\rho\|$, for igual ou menor que a unidade. Let $\varepsilon_i = v_i^n \Delta t / \Delta z$, $\xi_i = D_z (1+\beta) \Delta t / (2 \Delta z^\alpha)$ e $\eta_i = D_z (1-\beta) \Delta t / (2 \Delta z^\alpha)$. A matriz $[A]$ é:

$$A_{i,j} = \begin{cases} \xi_i g_{\alpha, i-j+1}, & j < i+1 \\ \xi_i g_{\alpha, 2} + \eta_i g_{\alpha, 0} + \varepsilon_i, & j = i-1 \\ 1 + (\xi_i + \eta_i) g_{\alpha, 1} - \varepsilon_i, & j = i \\ \xi_i g_{\alpha, 0} + \eta_i g_{\alpha, 2}, & j = i+1 \\ \eta_i g_{\alpha, j-i+1}, & j > i+1 \end{cases} \quad (\text{E.4})$$

O teorema de Gershgorin (Meerschaert e Tadjeran, 2004) afirma que o raio espectral de uma matriz está contido em algum dos discos cujos centros são dados pelos elementos da diagonal da matriz e cujos raios são iguais à soma dos valores absolutos dos outros elementos de mesma linha. Em outras palavras, para o problema em questão, os centros dos discos são achados por:

$$A_{i,i} = 1 + (\xi_i + \eta_i) g_{\alpha, 1} - \varepsilon_i \quad (\text{E.5})$$

Os raios dos discos são:

$$r_i = \sum_{j=1, j \neq i}^K |A_{i,j}| \quad (\text{E.6})$$

O somatório da Eq. (E.6) pode ser desenvolvido para mostrar que:

$$\sum_{j=1, j \neq i}^K |A_{i,j}| = \sum_{j=1, j \neq i}^{i+1} \xi_i g_{\alpha,j} + \sum_{j=1, j \neq i}^{K-i+1} \eta_i g_{\alpha,j} + \varepsilon_i \quad (\text{E.7})$$

Para o que segue, um resultado importante acerca dos pesos de Grünwald é necessário. Suponha a seguinte expansão do binômio de Newton para a soma:

$$(1+z)^\alpha = \sum_{k=0}^{\infty} \binom{\alpha}{k} z^k \quad (\text{E.8})$$

Note que, para $z = -1$:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \binom{\alpha}{k} (-1)^k = 0 \quad (\text{E.9})$$

Os termos dentro do somatório da Eq. (E.9) são, precisamente, pesos de Grünwald. Assim, a Eq. (E.9) mostra que:

$$\sum_{k=0}^{\infty} g_{\alpha,k} = 0 \quad (\text{E.10})$$

Da Eq. (E.10), pode-se concluir que:

$$-g_{\alpha,1} \geq \sum_{k=0, k \neq 1}^{k=N} g_{\alpha,i} \quad (\text{E.11})$$

Aplicando a Ineq. (E.11) na Eq. (E.7), é possível concluir que:

$$\sum_{j=1, j \neq i}^K |A_{i,j}| \leq (\xi_i + \eta_i)\alpha + \varepsilon_i \quad (\text{E.12})$$

A Ineq. (E.12) define um limite superior para os raios dos discos do teorema de Gershgorin. Somando a Eq. (E.12) com os centros dos discos, Eq. (E.5), chega-se a:

$$A_{i,i} + r_i \leq \varepsilon_i + (\xi_i + \eta_i)\alpha + 1 - \alpha(\xi_i + \eta_i) - \varepsilon_i \quad (\text{E.13})$$

$$A_{i,i} + r_i \leq 1 \quad (\text{E.14})$$

A Eq. (E.14), portanto, sempre satisfaz o critério de estabilidade. Subtraindo o limite superior do raio, Eq. (E.12), dos centros dos discos, Eq. (E.5), obtém-se:

$$A_{i,i} - r_i \geq -\varepsilon_i - (\xi_i + \eta_i)\alpha + 1 - \alpha(\xi_i + \eta_i) - \varepsilon_i \quad (\text{E.15})$$

$$A_{i,i} - r_i \geq 1 - 2\alpha(\xi_i + \eta_i) - 2\varepsilon_i \quad (\text{E.16})$$

O esquema é estável se:

$$1 - 2\alpha(\xi_i + \eta_i) - 2\varepsilon_i \geq -1 \quad (\text{E.17})$$

Manipulando a Ineq. (E.17), chega-se ao resultado de que o esquema definido pela Eq. (E.1) é estável se

$$\left[\frac{a_s \Delta t}{\Delta z} + \left(\frac{\Delta t \alpha D_z}{\Delta z^\alpha} \right) \right] \leq 1 \quad (\text{E.18})$$

Como queríamos mostrar.