



**Frederico Coutinho Leal**

**Análise numérica de problemas  
termo-hidráulicos em meios porosos**

**Dissertação de Mestrado**

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção de grau de Mestre pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil do Departamento de Engenharia Civil do Centro Técnico Científico da PUC-Rio. Área de Concentração: Geotecnia.

Orientador: Prof. Eurípedes do Amaral Vargas Júnior

Rio de Janeiro  
Janeiro de 2003

# **Livros Grátis**

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização da universidade, do autor e do orientador.

### **Frederico Coutinho Leal**

Graduou-se em Engenharia Civil na UFPA (Universidade Federal do Pará) em 1999. Trabalhou como engenheiro civil residente em diversas obras civis em Belém-PA.

#### Ficha Catalográfica

Leal, Frederico Coutinho

Análise numérica de problemas termo-hidráulicos em meios porosos / Frederico Coutinho Leal; orientador: Eurípedes do Amaral Vargas Júnior. – Rio de Janeiro : PUC, Departamento de Engenharia Civil, 2003.

[15], 78 f. : il ; 30 cm

Dissertação (mestrado) – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Civil.

Inclui referências bibliográficas.

1. Engenharia civil – Teses. 2. Calor-Transmissão. 3. Método dos elementos finitos. 4. Meios porosos parcialmente saturados. 5. Transporte de umidade. I. Vargas Junior, Eurípedes A. II. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Engenharia Civil. III. Título.



**Frederico Coutinho Leal**

**Análise numérica de problemas termo-hidráulicos  
em meios porosos**

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil do Departamento de Engenharia Civil do Centro Técnico Científico da PUC-Rio. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada.

**Prof. Eurípedes do Amaral Vargas Júnior**

Orientador

Departamento de Engenharia Civil – PUC-Rio

**Prof. Tácio Mauro Pereira de Campos**

Departamento de Engenharia Civil – PUC-Rio

**Prof. José Tavares Araruna Jr.**

Departamento de Engenharia Civil – PUC-Rio

**Dr. João Luiz Elias Campos**

Consultor TecGraf

**Prof. Ney Augusto Dumont**

Coordenador Setorial

Do Centro Técnico Científico – PUC-Rio

Rio de Janeiro, 30 de janeiro de 2003

Aos meus pais,  
pelo seu amor e esforço dedicados  
durante todos os anos de minha vida.

## Agradecimentos

A Deus, ao qual somos tementes, e que nos concebeu a divina graça da vida e intercede em todas nossas realizações na nossa vida.

Aos meus pais, Jayme e Edilce, por todo amor, carinho e ensinamentos recebidos, que foram essenciais em toda minha vida, e principalmente pelo apoio nos momentos difíceis de minha vida.

A minha esposa, Patrícia, pelo amor, carinho e compreensão durante todos os anos de convivência.

Ao Prof. Eurípedes do Amaral Vargas Jr., pela sua orientação, pelo conhecimento adquirido durante esses anos e pela amizade.

A minha avó Rita, minha tia Marita, pelo amor e carinho sempre dedicados a mim.

A minha tia Mita, tio Armando, meus primos, pelos momentos em que me acolheram e ajudaram no Rio de Janeiro.

A todos os meus familiares e amigos de Belém que sempre me apoiaram durante todos esses anos.

Aos amigos Júlio César da Silva e Heber Cotarelli, pelas suas contribuições e discussões proveitosas no decorrer do trabalho.

Aos amigos Hans e Khaled pelos momentos de descontração no Rio de Janeiro.

Aos amigos da PUC, Ana Júlia, Flávia, Matilde, Sérgio, Carlos Ataliba, Luís Eduardo, Maristâni, Alexandre, Laryssa e todos os demais não mencionados aqui, mas que contribuíram de alguma forma para a realização deste trabalho.

A todos os professores do Departamento de Engenharia Civil da PUC-Rio.

A todos os funcionários do Departamento de Engenharia Civil da PUC-Rio.

A CAPES por financiar a realização desta dissertação.

## Resumo

Leal, Frederico Leal; Vargas, Eurípedes do Amaral. **Análise numérica de problemas termo-hidráulicos em meios porosos**. Rio de Janeiro, 2003. 93p. Dissertação de Mestrado – Departamento de Engenharia Civil, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

A dissertação apresenta um estudo da resolução de problemas de acoplamento termo-hidráulico através do uso técnicas numéricas. O estudo tem por objetivo a validação de implementações de efeitos de gradientes de temperatura no fluxo de umidade.

Para isto utiliza-se o programa UNSATCHEM-2D que simula o fluxo bidimensional de umidade em meios de saturação variável, transporte de calor, transporte de CO<sub>2</sub> e transporte de solutos. O programa desenvolvido por *Simunek e Suarez* (1993), possui código aberto (escrito em Fortran 77), onde as equações governantes de fluxo e transporte de calor são resolvidas por elementos finitos.

A partir do programa UNSATCHEM-2D, foram realizadas implementações no código a fim de permitir o acoplamento parcial (“staggered”) do fluxo de umidade e o fluxo de calor que reproduz o fenômeno descrito por *de Vries* (1958). Paralelamente, desenvolveram-se mudanças no programa MTool (Tecgraf/PUC-Rio), utilizado como pré- e pós-processador.

Posteriormente, foram validadas as implementações realizadas no programa comparando-se os resultados da solução numérica com resultados experimentais a partir de um ensaio de coluna (*Bach*, 1989), com resultados considerados satisfatórios. Finalizando, são apresentadas simulações com fontes de calor interna e externa paralelamente com o emprego de condições de contorno atmosféricas que simulam coberturas de resíduos de minério.

## Palavras-chave

Meios porosos parcialmente saturados; transporte de umidade; transferência de calor; acoplamento termo-hidráulico; método dos elementos finitos.

## Abstract

Leal, Frederico Leal; Vargas, Eurípedes do Amaral (Advisor). **Numerical analysis of thermo-hydraulic problems in porous media**. Rio de Janeiro, 2003. 93p. Msc. Dissertation – Department of Civil Engineering. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

The dissertation presents a study of the resolution of thermo-hydraulic coupling problems, through the use of numerical techniques. The study has the objective the implementations validation of the temperature gradients effects in the moisture flux.

For this, the program UNSATCHEM-2D is used to simulate the flow of water in mediums of variable saturation to two dimensions, transport of heat, transport of CO<sub>2</sub> and solute transport. The program developed by *Simunek and Suarez* (1993), has open code (written in Fortran 77), where the governing equations of flow and transport of heat are solved for the method of the finite elements.

Starting from the original program UNSATCHEM-2D, alterations were carried out in the code in order to allow the partial coupling (staggered) of moisture flow and heat flow as described by *de Vries* (1958). In parallel, changes were developed in the software MTool (Tecgraf/PUC-Rio), used as pre- and post-processor.

Later, the modifications carried out in the program were validated by the comparison of the numeric solution results with experimental results starting from a column test (*Bach*, 1989), with acceptable results. Concluding, simulations are presented with internal and external sources of heat together with the use of atmospheric boundary conditions, one that simulates covers for mining wastes.

## Keywords

Variable saturated porous medium; moisture transport; heat transfer; thermo-hydraulic coupling; finite elements method.

# Sumário

1. Introdução	16
2. Transporte de umidade e calor em solos não-saturados	20
2.1. Introdução	20
2.2. Análise física dos processos de transporte de umidade e calor no solo	21
2.3. Modelo de Philip e de Vries	24
2.3.1. Equações de transporte de umidade	25
2.3.2. Equações de transporte de calor	29
2.4. Modelo adotado	31
3. Metodologia de solução	36
3.1. Método dos elementos finitos	36
3.1.1. Método dos Resíduos Ponderados	37
3.1.2. Método de Galerkin	38
3.2. Programa UNSATCHEM-2D	43
3.2.1. Fluxo de umidade	44
3.2.2. Transporte de calor	45
3.2.3. Solução numérica das equações de fluxo e de calor	48
3.3. Formulação numérica do problema de transporte de umidade e calor no solo	52
3.4. Implementações numéricas	56

4. Resultados e discussões	60
4.1. Verificação do modelo	60
4.2. Simulações de problemas termo-hidráulicos	67
4.2.1. Simulação de uma fonte de calor interna	67
4.2.2. Malha bidimensional com fonte de calor externa	73
4.2.3. Simulação de uma cobertura de resíduos sólidos	80
5. Conclusões	89
6. Referências bibliográficas	91

## Lista de Figuras

Figura 1 - Dois meniscos de uma ponte de líquido formados entre dois grãos de solo	23
Figura 2 - (a) objeto contínuo, (b) malha típica de elementos finitos com elementos triangulares	37
Figura 3 - O resíduo $R_D$ é ortogonal ao espaço gerado pelas funções peso $W_i$	39
Figura 4 - Solução “staggered” utilizada para resolver o problema de acoplamento entre fluxo de umidade e fluxo de calor	58
Figura 5 - Fluxograma do programa modificado	59
Figura 6 - Malha de elementos finitos utilizada na validação dos resultados, com condições de contorno para o caso não-isotérmico	63
Figura 7 - Variação do teor de umidade volumétrico com condição isotérmica para valores de $\theta_i = 0,151$ e $t = 6$ hs	64
Figura 8 - Variação do teor de umidade volumétrico com condição isotérmica para valores de $\theta_i = 0,151$ e $t = 12$ hs	64
Figura 9 - Variação do teor de umidade volumétrico com condição isotérmica para valores de $\theta_i = 0,151$ e $t = 24$ hs	65
Figura 10 - Variação do teor de umidade volumétrico com condição não-isotérmica para valores de $\theta_i = 0,151$ e $t = 6$ h	65
Figura 11 - Variação do teor de umidade volumétrico com condição não-isotérmica para valores de $\theta_i = 0,151$ e $t = 12$ h	66
Figura 12 - Variação do teor de umidade volumétrico com condição não-isotérmica para valores de $\theta_i = 0,151$ e $t = 24$ h	66
Figura 13 - Malha de elementos finitos representando um cabo de potência aterrado	68
Figura 14 - Isotermas para o instante inicial (fonte de calor interna)	69
Figura 15 - Isotermas para o tempo de 9600 segundos (fonte de calor interna)	69
Figura 16 - Isotermas para o tempo de 19200 segundos (fonte de calor interna)	70
Figura 17 - Isotermas para o tempo de 38400 segundos (fonte de calor interna)	70
Figura 18 - Isotermas para o tempo de 76800 segundos (fonte de calor interna)	71
Figura 19 - Isoumidades para o instante inicial (fonte de calor interna)	71
Figura 20 - Isoumidades para o tempo de 19200 segundos (fonte de calor interna)	72

Figura 21 - Isomidades para o tempo de 38400 segundos (fonte de calor interna)	72
Figura 22 - Isomidades para o tempo de 76800 segundos (fonte de calor interna)	73
Figura 23 - Malha de elementos finitos representando o recipiente confinante	74
Figura 24 - Isotermas para o instante inicial (fonte de calor externa)	75
Figura 25 - Isotermas para o tempo de 9600 segundos (fonte de calor externa)	76
Figura 26 - Isotermas para o tempo de 19200 segundos (fonte de calor externa)	76
Figura 27 - Isotermas para o tempo de 38400 segundos (fonte de calor externa)	77
Figura 28 - Isotermas para o tempo de 76800 segundos (fonte de calor externa)	77
Figura 29 - Isomidades para o instante inicial (fonte de calor externa)	78
Figura 30 - Isomidades para o tempo de 19200 segundos (fonte de calor externa)	78
Figura 31 - Isomidades para o tempo de 38400 segundos (fonte de calor externa)	79
Figura 32 - Isomidades para o tempo de 76800 segundos (fonte de calor externa)	79
Figura 33 - Malha de elementos finitos representando a “cobertura A”	81
Figura 34 - Malha de elementos finitos representando a “cobertura B”	81
Figura 35 - Variação da temperatura ao longo de dois dias	83
Figura 36 - Variação da carga de pressão ao longo do tempo	85
Figura 37 - Variação da umidade ao longo do tempo	85
Figura 38 - Variação da temperatura ao longo do tempo	86
Figura 39 - Isomidades da simulação da cobertura A nos tempos de 0, 90 e 180 dias	87
Figura 40 - Isomidades da simulação da cobertura B nos tempos de 0, 90 e 180 dias	88

## Lista de Tabelas

Tabela 1 - Parâmetros hidráulicos de van Genuchten (exemplo de validação)	62
Tabela 2 - Parâmetros térmicos (exemplo de validação)	62
Tabela 3 - Condições experimentais para cada caso ( <i>Bach</i> , 1989)	62
Tabela 4 - Parâmetros hidráulicos de van Genuchten (fonte de calor interna)	68
Tabela 5 - Parâmetros térmicos (fonte de calor interna)	68
Tabela 6 - Parâmetros hidráulicos de van Genuchten (fonte de calor externa)	74
Tabela 7 - Parâmetros térmicos (fonte de calor externa)	74
Tabela 8 - Parâmetros hidráulicos de van Genuchten (cobertura A)	82
Tabela 9 - Parâmetros térmicos (cobertura A)	82
Tabela 10 - Parâmetros hidráulicos de van Genuchten (cobertura B)	82
Tabela 11 - Parâmetros térmicos (cobertura B)	82
Tabela 12 - Dados de precipitação e evaporação utilizados nas simulações de cobertura de resíduos	83

## Lista de Símbolos

$[A]$	matriz de coeficientes da equação global de fluxo
$[A^T]$	matriz de coeficientes da equação global de fluxo de calor
$A_t$	amplitude da onda seno
$\{B\}$	vetor da equação global de fluxo
$C$	capacidade de retenção específica
$c_l$	calor específico do líquido
$C_M$	capacidade de calor volumétrica do meio poroso
$c_p$	calor específico do vapor da água em pressão constante
$\{D\}$	vetor da equação global de fluxo
$D_{am}$	difusividade molecular do vapor d'água no ar
$D_T$	difusividade térmica
$D_{Ta}$	coeficiente relacionado ao calor de "molhagem"
$D_{Tl}$	difusividade térmica do líquido
$D_{Tv}$	difusividade térmica do vapor
$D_q$	difusividade mássica
$D_{ql}$	difusividade isotérmica do líquido
$[F]$	matriz de coeficientes da equação global de fluxo
$[F^T]$	matriz de coeficientes da equação global de fluxo de calor
$g$	aceleração da gravidade
$[G^T]$	matriz de coeficientes da equação global de fluxo de calor
$h$	umidade relativa
$K$	condutividade hidráulica
$\bar{K}$	valor médio da condutividade hidráulica em um elemento $e$
$K^A$	vetor de anisotropia da condutividade hidráulica

$K_{ij}^A$	componentes do vetor de anisotropia $K^A$
$L$	calor latente de vaporização da água
$L_0$	calor latente de vaporização da água calculado em $T = T_0$
$N$	número de nós
$n'$	parâmetro de correção para valores altos do fluxo de vapor
$p_t$	período de tempo necessário para a onda seno completar um ciclo
$\{Q\}$	vetor da equação global de fluxo
$ q $	valor absoluto do fluxo
$q_h$	fluxo de calor
$q_l$	fluxo de líquido
$q_m$	fluxo de umidade
$\{Q^T\}$	vetor da equação global de fluxo de calor
$q_v$	fluxo de vapor
$R$	constante dos gases para o vapor d'água
$S$	volume de água removido por unidade de tempo de uma unidade de solo devido ao armazenamento de água das plantas
$\bar{S}$	valor médios do termo de armazenamento de água pelas plantas em um elemento $e$
$S_h$	conteúdo de calor total por unidade de volume
$T$	temperatura
$t$	tempo
$\bar{T}$	temperatura média na superfície do solo durante o período $p_t$
$T^k$	temperatura em graus Kelvin
$T_0$	temperatura de referência arbitrada
$W$	calor de “molhagem” diferencial
$w_n$	funções de ponderação
$z$	componente vertical da carga hidráulica total
$\mathbf{b}$	fator de conversão igual a $4.2 \times 10^7$
$\Gamma_C$	segmento de contorno de Cauchy

$\Gamma_D$	segmento de contorno de Dirichlet
$\Gamma_e$	segmento de contorno do elemento $e$
$\Gamma_G$	segmento de contorno de gradiente prescrito
$\Gamma_N$	segmento de contorno de Neumann
$d_{ij}$	função delta de Kronecker
$h$	porosidade
$q$	teor de umidade volumétrico
$q_a$	teor de umidade volumétrico de ar
$r_l$	massa específica do líquido
$r_v$	massa específica do vapor d'água
$r_0$	massa específica do vapor d'água saturado
$z$	fator de correção para o fluxo de vapor devido a elevados gradientes de temperatura
$s$	tensão superficial da água
$I_*$	condutividade térmica do meio poroso
$I_L$	dispersividade térmica longitudinal
$I_T$	dispersividade térmica transversal
$t$	fator de tortuosidade
$n$	fator de fluxo de massa
$f_n$	funções de interpolação
$y$	carga de pressão
$\Omega$	região de fluxo
$\Omega_e$	domínio ocupado pelo elemento $e$
$\nabla T$	gradiente de temperatura macroscópico
$(\nabla T)_a$	gradiente médio de temperatura nos poros preenchidos com ar

## Introdução

A transferência de umidade sob a influência de gradientes de temperatura em solos não-saturados está presente em muitas aplicações práticas da engenharia. Técnicas de remediação de áreas contaminadas que envolvem diretamente a imposição de calor, projetos de cabos de potência aterrados, tanques de armazenamento subterrâneos, entre outros, dependem do conhecimento das propriedades que estão envolvidas no transporte de massa e energia no solo. Para o estudo de tal fenômeno, é necessário o conhecimento das propriedades difusivas e termofísicas do solo, que são fortemente influenciadas pela temperatura e pelo teor de umidade. Desse modo, a transferência de umidade e calor, tanto na forma líquida quanto de vapor, depende de ambos os gradientes, térmico e de umidade, fazendo com que seja um fenômeno que envolve processos que interagem e influenciam-se mutuamente.

Estudos do movimento de umidade em meios não-saturados são realizados desde o início do século passado, porém no início da década de 50, tais estudos sofreram um significativo avanço com a publicação de modelos que incorporaram a influência da temperatura no transporte de umidade. A análise do processo de transporte de umidade em condições isotérmicas, em situações com presença de expressivos gradientes de temperatura, pode apresentar erros significativos na estimativa de umidade no meio poroso. Como exemplo, temos as regiões áridas e semi-áridas, com altas temperaturas na superfície do solo ou casos de transporte de contaminantes químicos em águas subterrâneas.

*Philip e de Vries* (1957) descreveram o processo do movimento de umidade em solos sob a influência de gradientes térmicos através de um modelo físico-matemático que se tornou referência básica no assunto. A partir do modelo de *Philip e de Vries*, inúmeros outros modelos foram desenvolvidos. *Milly* (1982) modificou o modelo de *Philip e de Vries* onde generalizou a formulação em

função da carga de pressão, incluiu os efeitos da temperatura na solução do fluxo de umidade, um fator que *Philip e de Vries* negligenciavam, e também efeitos de histerese no fenômeno.

*Wilson et al* (1994) apresenta a teoria do acoplamento termo-hidráulico a partir de gradientes carga total e de pressão de vapor, com a inclusão de um módulo de mudança de volume com respeito à fase de vapor d'água. *Thomas e Sansom* (1995) apresentam a formulação do acoplamento termo-hidráulico com a inclusão da transferência de ar no processo. Isso se torna importante devido a complexibilidade do fenômeno na presença da fase ar durante o processo de resaturação e a necessidade de incluir a influência de elevadas pressões de ar na resaturação. Também são descritos estudos sobre a migração de contaminantes gasosos (*Thomas e Ferguson*, 1999) através de um liner de argila de um aterro sanitário, tratando a migração de água, calor ar e contaminante gasoso separadamente.

*Khalili e Loret* (2002) apresentam a teoria para o fenômeno do acoplamento termo-hidro-mecânico (THM) em meios porosos não-saturados deformáveis, baseada nas equações de equilíbrio, conceito de tensões efetivas, lei de Darcy, lei de Fourier e conservação de massa e energia. *Thomas et al* (1995) também apresentam a modelagem de processos termo-hidro-mecânicos em contaminantes de rejeitos nucleares, com a utilização de barreiras reativas. A utilização de modelos termo-hidráulicos também esta presente na mecânica das rochas com a análise multifásica de fluxo de umidade, transporte de calor, e deformação em rochas fraturadas (*Rutqvist et al*, 2002)

Tais modelos baseiam-se em conceitos derivados da mecânica dos fluídos, da difusão de umidade e da condução de calor. Partindo-se do pressuposto que ainda não são claramente compreendidos os processos físicos e termodinâmicos dos solos não saturados, todas as análises feitas adotam hipóteses simplificadoras e fornecem resultados considerados aproximados.

Entre os diversos fatores que dificultam uma análise correta nos processos de transferência de umidade e calor em meios não-saturados podemos citar o simples entendimento dos fenômenos físicos que ocorrem na matriz sólida de solo, e a compreensão das equações dos modelos citados acima e suas simplificações, as quais serão citadas no decorrer do trabalho.

A principal motivação deste estudo é a compreensão do processo de migração da umidade no solo em resposta a gradientes de temperatura existentes ou impostos. Este processo, especificamente na geotecnia ambiental, está envolvido diretamente em técnicas de remediação de áreas contaminadas que utilizam a aplicação de calor, como por exemplo, a desorção térmica.

A dissertação tem como objetivo a validação de implementações de efeitos de gradientes de temperatura no fluxo de umidade em um programa originalmente desenvolvido para a simulação bidimensional de fluxo em meios não-saturados, transporte de calor e transporte de soluto. A idéia inicial consistia da validação de resultados de simulações numéricas contra resultados gerados a partir de uma solução analítica, porém devido à alta não-linearidade do fenômeno juntamente com as hipóteses simplificadoras envolvendo as condições iniciais e condições de contorno, tornam as soluções analíticas existentes muito limitadas, sendo difícil sua utilização. Assim sendo, as simulações numéricas realizadas foram comparadas com resultados gerados experimentalmente por *Bach* (1989).

No capítulo 2 é apresentada uma breve introdução do processo de transferência de umidade e calor no solo, mostrando os aspectos físicos que estão envolvidos no fenômeno. São também mencionados os principais modelos de fluxo e de calor em meios não-saturados destacando o modelo desenvolvido por *Philip e de Vries* (1957) e o modelo desenvolvido por *Milly* (1982) que foi adotado no programa, assim como outros modelos existentes na literatura.

O capítulo 3 descreve a metodologia da solução numérica, onde são demonstradas as formulações numéricas e em elementos finitos das equações governantes do modelo termo-hidráulico. Neste capítulo é mostrada ainda a estratégia de solução numérica para as equações de fluxo utilizada pelo programa, descrevendo o processo de iteração numérica adotado. Ainda neste capítulo são demonstradas as implementações que foram realizadas no código do programa e que representam os efeitos dos gradientes térmicos na solução numérica do fluxo de umidade e os efeitos dos gradientes de pressão no fluxo de calor.

A validação do programa é realizada no capítulo 4, através de resultados experimentais, com a descrição das condições iniciais e condições de contorno, assim como uma breve introdução ao experimento. Também são descritos os exemplos utilizados na simulação numérica, com sua geometria, condições iniciais e de contorno, e simplificações numéricas que foram adotadas.

Finalizando, no capítulo 5 são apresentadas as conclusões sobre os estudos realizados durante o desenvolvimento da dissertação, e também sugestões para futuros trabalhos no assunto.

## 2

# Transporte de umidade e calor em solos não-saturados

### 2.1

#### Introdução

No presente capítulo é apresentada uma breve introdução dos mecanismos físicos que ocorrem em solos não-saturados durante o processo de transferência de umidade e calor. Tal introdução tem como objetivo facilitar o entendimento dos modelos físico-matemáticos mais importantes e como são desenvolvidas as equações que representam o fenômeno.

Em seguida, o modelo físico-matemático desenvolvido por *Philip e de Vries* (1957) é apresentado de maneira mais detalhada por se tratar de referência básica no assunto. Posteriormente é apresentado o modelo adotado na referida dissertação.

Inicialmente são adotadas algumas hipóteses simplificadoras que foram introduzidas por *Ferreira* (1993) em seu trabalho e que serão aceitas nos modelos e equações apresentados no decorrer do texto.

1. O vapor e o ar contidos nos poros comportam-se como gases ideais.
2. Não há influência de histerese, apesar do modelo adotado no presente estudo permitir o seu cálculo.
3. O efeito da presença de solutos na água é desprezado, embora o programa utilizado na simulação possua o modulo de simulação de transporte de solutos, como será visto no capítulo 3.
4. A fase sólida é uma matriz rígida e fixa.

## 2.2

### **Análise física dos processos de transporte de umidade e calor no solo**

A modelagem numérica de fluxo de umidade em meios porosos não-saturados é complexa devido a diferentes aspectos. Solos contêm partículas sólidas que são habitualmente desordenadas, e espaços nos poros, que são preenchidos com gás ou fluido ou ambos, formando tortuosos caminhos interconectados. A água pode ser transportada por difusão do líquido devido a diferentes concentrações de soluto, difusão do vapor, evaporação e condensação interna, fluxo devido a forças de capilaridade ou gravidade, e fluxo de líquido e vapor devido a diferenças na pressão total (*Bruin e Luyben, 1980 apud Hampton, 1989*). Essas diferenças de pressão podem ser geradas por pressões externas, capilaridade, contração, ou por altas temperaturas dentro do material úmido. Frequentemente, existe uma combinação de diversos mecanismos de transporte variando de local para local e mudando com o teor de umidade.

Igualmente ao que ocorre com a umidade, muitos processos contribuem para o fluxo de calor em meios não-saturados. A transferência de calor pode ocorrer por condução, convecção, radiação, transporte de calor latente e fluxo de umidade. Em camadas de água contínuas e no esqueleto das partículas sólidas interconectadas ocorre a transferência de calor por condução e fluxo de umidade (transporte de calor sensível). Convecção, radiação e transporte de calor latente são mecanismos primários dos poros preenchidos por gás.

No modelo descrito por *Philip e de Vries (1957)*, são considerados todos os mecanismos primários responsáveis pelo transporte de umidade e calor nos solos. O fluxo de água ocorre devido a gradientes de pressão de capilaridade e a gravidade. A difusão do vapor d'água que ocorre através de uma fase gasosa estagnante é devido a diferenças de concentração no vapor, criadas por gradientes térmicos e de umidade. O transporte de calor latente e a condução representam a transferência de calor. Existe um fluxo de líquido secundário provocado por gradientes de temperatura.

Estes mecanismos citados foram considerados em propostas a explicação dos problemas físicos do solo mesmo antes de *Philip e de Vries. Hampton (1989)*

cita em seu trabalho pesquisas que concluem que um solo sujeito a gradientes de temperatura move-se principalmente como um vapor, e experimentos que demonstram que uma quantidade de vapor d'água transportada em tal solo é de três a dez vezes maior que a quantidade prevista usando a Lei de Fick. Assim sendo, existem razões para acreditar que o transporte de vapor d'água é difusivo por natureza.

De acordo com *Philip e de Vries*, a principal razão para a teoria de Fick falhar é porque esta foi formulada para descrever um diferente processo, onde *Penman* (1940) utilizou a teoria para a análise de difusão isotérmica do carbono desulfatizado e acetona através dos solos. Nenhum desses gases, presumidamente, interagem com as fases sólida ou líquida do solo (*Hampton*, 1989). Entretanto, quando esta equação foi em seguida aplicada ao vapor d'água, nenhuma alteração foi feita para evidenciar a interação entre o vapor d'água com as fases líquida e sólida. Esta observação e os mecanismos propostos por *Philip e de Vries* para a interação entre líquido e vapor foram contribuições significativas para o estudo do fenômeno.

Em solos secos, *Philip e de Vries* desenvolveram esta interação através de uma série de processos de evaporação e condensação juntamente com fluxo através das “ilhas” de líquido, que são pequenas áreas de umidade formadas entre as partículas de solo. O termo “solo seco” citado acima é aplicado a um solo tão seco que as continuidades de líquido não existam, ou caso existam, possuam uma condutividade hidráulica bem reduzida. O líquido restante é absorvido pelos poros da superfície preenchendo pequenos vazios e formando as pontes ou “ilhas” entre poros em pontos de contato entre partículas de solo (Figura 1)

Quando um gradiente de temperatura é aplicado através de um solo, alguma água irá evaporar na extremidade mais quente (lado A) dos poros e se deslocar por difusão em direção a menor densidade de vapor na extremidade mais fria (lado B). As “ilhas” de líquido se distribuem de maneira aleatória pelo solo servindo como válvulas de sentido único para o transporte de água. Condensação, no lado mais quente da “ilha”, ou seja, no menisco do lado A, e evaporação do lado mais frio, alteram a curvatura do menisco originalmente igual para uma curvatura representada pelas linhas tracejadas da Figura 1.

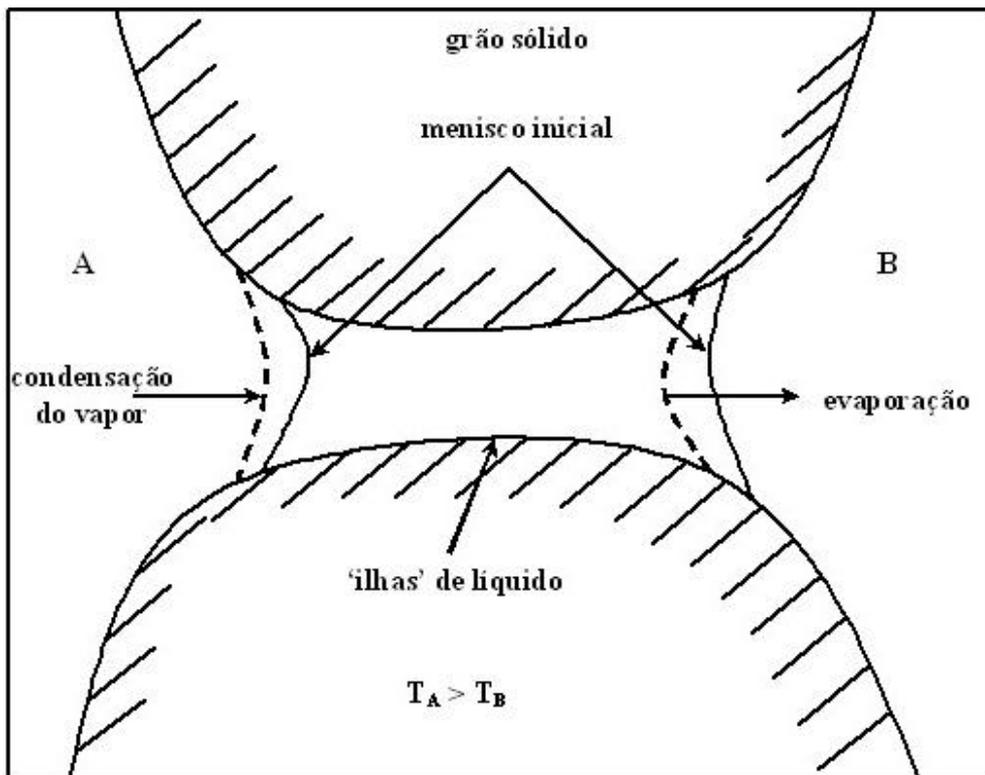


Figura 1 – Dois meniscos de uma ponte de líquido formados entre dois grãos de solo.

A curvatura do menisco na região mais quente (menisco A) decresce enquanto que na região mais fria esta curvatura aumenta (menisco B). A condensação e evaporação continuam e a diferença entre as curvaturas aumenta até que o fluxo capilar através das “ilhas” seja igual à taxa de condensação ou evaporação. O transporte de água na direção da região mais fria aumenta devido a este curto ciclo no processo de difusão do vapor.

Desse modo, a transferência de umidade sob gradientes de temperatura em um solo com uma baixa continuidade líquida é definida, segundo *Hampton* (1989), como uma série de processos paralelos de fluxo através de regiões de vapor e líquido. O fluxo de vapor é determinado pelo gradiente de pressão de vapor que atravessa os poros preenchidos com ar, onde o fluxo através das “ilhas” de líquido ajusta-se para se igualar este fluxo de vapor. Este mecanismo para o aumento do fluxo é aplicável a todos os líquidos voláteis e não somente a água, já que as fases de vapor e líquida estão na mesma substância. A tensão superficial existente nos meniscos formados nas “ilhas” também provoca variações no fluxo, porém quando comparadas às variações decorrentes de gradientes de temperatura,

que podem ser da ordem de centenas de graus Celsius, estas se tornam secundárias.

## 2.3

### Modelo de Philip e de Vries

O transporte de umidade e calor em solos não-saturados iniciou-se a partir do modelo simples de fluxo volumétrico de líquido em meios porosos saturados de *Darcy* (1856) e que foi estendido por *Buckingham-Darcy* (1907) para um meio poroso não-saturado. *Philip e de Vries* (1957) foram os primeiros a modelar o fenômeno de migração de umidade sob um ponto de vista macroscópico, onde *Vries* (1958) generalizou o modelo dando distinção especial às mudanças de umidade nas fases líquida e de vapor. *Milly e Eagleson* (1980) e *Milly* (1982) modificaram a teoria de *Philip e de Vries* (1957) utilizando uma formulação baseada na carga de pressão, onde os efeitos de histerese das propriedades hidráulicas dos solos são considerados. Outros estudiosos formularam o fenômeno utilizando as leis da termodinâmica, onde os precursores foram *Cary e Taylor* (1962) e *Taylor* (1964) e através de modelos estatísticos, com trabalhos pioneiros de *Childs e Collis-George* (1950) para a análise do fenômeno.

O modelo proposto por *Philip e de Vries* (1957) trata o fenômeno de migração de umidade em meios porosos não-saturados sob um ponto de vista macroscópico e, ao contrário da teoria física ser intuitivamente clara, suas transcrições em um modelo matemático não são claramente entendidas. O modelo consiste da utilização de leis fenomenológicas da difusão de umidade na fase líquida, difusão de umidade na fase vapor e difusão de calor, Lei de Darcy, Lei de Fick e Lei de Fourier, respectivamente, nas equações de balanço de massa e energia. Assim, o modelo matemático obtido apresenta explicitamente as influências combinadas dos gradientes de temperatura e umidade nos processos de migração de umidade e calor. A seguir serão desenvolvidas as equações do transporte de umidade e transporte de calor. Para tanto são necessárias algumas colocações pertinentes. O meio poroso será tomado como um meio contínuo e todos os balanços de massa e energia são feitos sobre um elemento infinitesimal,

que é pequeno comparado à dimensão do corpo em estudo, mas grande o suficiente para ser uma amostra representativa do meio que contém as três fases.

### 2.3.1

#### Equações de transporte de umidade

A equação para o transporte de umidade é obtida a partir da expressão da conservação de massa que estabelece que:

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} = -\nabla \left( \frac{q_v + q_l}{r_l} \right) \quad (2.1)$$

onde  $q_v$  é o fluxo de vapor,  $q_l$  é o fluxo de líquido,  $r_l$  é a massa específica do líquido,  $t$  é o tempo e  $\mathbf{q}$  é teor de umidade volumétrico, definido como a razão entre o volume de líquido e volume total. Deve-se ressaltar que, conforme a primeira hipótese citada no item 2.1, a massa de vapor d'água presente nos poros é desprezada comparada à massa de líquido. O lado esquerdo da equação (2.1) representa a variação do teor de umidade volumétrico em relação ao tempo em um volume infinitesimal de um elemento poroso.

O fluxo de vapor d'água  $q_v$  é obtido a partir de modificações na Lei de Fick para um meio poroso expressa por (Penman, 1940; van Bavel, 1952; Rollins et al., 1954 apud Hampton, 1989):

$$q_v = -D_{atm} \mathbf{n} \mathbf{a} \mathbf{q}_a \nabla \mathbf{r}_v \quad (2.2)$$

onde  $D_{atm}$  é a difusividade molecular do vapor d'água no ar,  $\mathbf{n}$  é o fator de fluxo de umidade, que é uma correção para as diferenças nas condições de contorno governantes do ar e do vapor d'água,  $\mathbf{a}$  é o fator de tortuosidade,  $\mathbf{q}_a$  é o teor de umidade volumétrico de ar e  $\mathbf{r}_v$  é massa específica do vapor d'água.

*Philip e de Vries* (1957) estudaram dados existentes no fenômeno de movimento de umidade em solos em resposta a gradientes de temperatura, e notaram que valores observados de difusão de vapor aparente são maiores que os

previstos pela eq. (2.2). Notaram que a transferência de umidade sob gradientes de temperatura é infinitamente menor em solos muito secos e em solos úmidos, mas atinge valores máximos em solos com teores de umidade médios. Eles então, conciliaram estes fatos desenvolvendo uma equação que descreve o movimento de umidade em solos em resposta a gradientes de umidade e gradientes de temperatura.

A eq. (2.2) foi estendida por *Philip e de Vries* para separar os componentes isotérmicos e não-isotérmicos da transferência de vapor, e para incluir os efeitos da umidade relativa na transferência. Para isso, foi usada a relação termodinâmica de *Edlefsen e Anderson* (1943):

$$\mathbf{r}_v(\mathbf{y}, T) = \mathbf{r}_0(T)h = \mathbf{r}_0(T) \exp(\mathbf{y} g / RT) \quad (2.3)$$

onde  $\mathbf{r}_0$  é a massa específica do vapor d'água saturado,  $h$  é a umidade relativa,  $\mathbf{y}$  é a carga de pressão,  $g$  é a aceleração da gravidade,  $R$  é a constante dos gases para o vapor d'água e  $T$  é a temperatura.

Em seguida, *Philip e de Vries* afirmaram baseados em provas informais (*Bach*, 1989) que  $\partial h / \partial t$  pode ser assumido como zero em todo o intervalo de  $h$ . Desse modo, desprezando a dependência da temperatura em função da umidade relativa e, assumindo que  $\mathbf{r}_0$  é função apenas de  $T$  e  $h$  é função apenas de  $\mathbf{q}$ , obtém-se:

$$\nabla \mathbf{r}_v = h \frac{d\mathbf{r}_0}{dT} \nabla T + \mathbf{r}_0 \frac{dh}{d\mathbf{q}} \nabla \mathbf{q} \quad (2.4)$$

e, da eq. (2.3) temos:

$$\nabla \mathbf{r}_v = h \frac{d\mathbf{r}_0}{dT} \nabla T + \frac{g\mathbf{r}_v}{RT} \frac{d\mathbf{y}}{d\mathbf{q}} \nabla \mathbf{q} \quad (2.5)$$

e substituindo a eq. (2.5) na eq. (2.2), obtém-se:

$$q_v = -D_{amt} n a q_a \nabla r_v \left( h \frac{d r_0}{dT} \nabla T + \frac{g r_v}{RT} \frac{d y}{d q} \nabla q \right) \quad (2.6)$$

ou, na forma reduzida:

$$\frac{q_v}{r_l} = -D_{T_v} \nabla T - D_{q_v} \nabla q \quad (2.7)$$

onde  $D_{q_v}$  é a difusividade isotérmica da fase vapor e  $D_{T_v}$  é a difusividade térmica da fase vapor.

Para meios isotrópicos que não estão sujeitos a gradientes de temperatura, o fluxo de umidade na fase líquida é dado por uma modificação da equação de Darcy (*Richards, 1931 apud Ferreira, 1993*):

$$\frac{q_l}{r_l} = -K(q) \nabla(y + z) \quad (2.8)$$

onde  $K$  é a condutividade hidráulica e  $z$  é a componente vertical da carga hidráulica total.

A teoria para o transporte de líquido em meios porosos descrita na eq. (2.8), foi também estendida por *Philip e de Vries* para separar os componentes isotérmicos e térmicos no fluxo do líquido. Utilizando o fato que  $y = y(q, T)$ , de forma que:

$$\nabla y = \frac{\partial y}{\partial q} \nabla q + \frac{\partial y}{\partial T} \nabla T \quad (2.9)$$

e assumindo que  $y$  é determinada pela capilaridade, temos:

$$\frac{\partial y}{\partial T} = \frac{y}{s} \frac{ds}{dT} = \mathbf{g}y \quad (2.10)$$

onde  $s$  é a tensão superficial da água, Philip e de Vries obtiveram a seguinte equação:

$$\frac{q_l}{r_l} = -K \frac{\partial y}{\partial q} \nabla q - K g y \nabla T - K \nabla z \quad (2.11)$$

ou

$$\frac{q_l}{r_l} = -D_{q_l} \nabla q - D_{T_l} \nabla T - K \nabla z \quad (2.12)$$

onde  $D_{q_l}$  é a difusividade isotérmica da fase líquida e  $D_{T_l}$  é a difusividade térmica da fase líquida.

Combinando as equações (2.1), (2.7) e (2.12) obtemos equação diferencial generalizada que descreve o movimento de umidade sob a influência combinada de gradientes de temperatura e de teor de umidade volumétrico nos fluxos de líquido e vapor, conforme a eq. (2.13):

$$\frac{\partial q}{\partial t} = \nabla(D_{T_v} \nabla T + D_{q_v} \nabla q) + \nabla(D_{T_l} \nabla T + D_{q_l} \nabla q) + \nabla(K z) \quad (2.13)$$

Rearranjando a expressão (2.13), temos:

$$\frac{\partial q}{\partial t} = \nabla(D_q \nabla q) + \nabla(D_T \nabla T) + \nabla(K z) \quad (2.14)$$

onde  $D_q$  e  $D_T$  são as difusividades mássica e térmica, respectivamente, definidas por:

$$D_q = D_{q_l} + D_{q_v} \quad \text{e} \quad D_T = D_{T_l} + D_{T_v} \quad (2.15)$$

### 2.3.2

#### Equações de transporte de calor

A expressão de energia térmica é dada por uma extensão da equação de Fourier para condução de calor, onde são acrescentados os processos de convecção, transporte de calor latente e fluxo de umidade (transporte de calor sensível). O fluxo de calor em meios não-saturados, segundo *de Vries* (1958), pode ser expresso por:

$$q_h = -\mathbf{I}_* \nabla T + L_0 q_v + c_p (T - T_0) q_v + c_l (T - T_0) q_l \quad (2.16)$$

onde  $q_h$  é o fluxo de calor no meio,  $\mathbf{I}_*$  é a condutividade térmica do meio poroso,  $L_0$  é o calor latente de vaporização da água calculado em  $T = T_0$ ,  $c_p$  é o calor específico do vapor da água em pressão constante,  $c_l$  é o calor específico do líquido e  $T_0$  é uma temperatura de referência arbitrada. O primeiro termo do lado direito da eq. (2.16) representa a contribuição da condução pura de calor. O segundo termo representa a transferência de calor latente pelo movimento de vapor. O terceiro e quarto termos representam a transferência de calor sensível na forma de vapor e líquida, respectivamente.

O conteúdo de calor total por unidade de volume  $S_h$ , segundo *de Vries* (1958) é expresso por:

$$S_h = C_M (T - T_0) + L_0 \mathbf{r}_v \mathbf{q}_a - \mathbf{r}_v \int_0^q W d\mathbf{q} \quad (2.17)$$

onde  $C_M$  é a capacidade de calor volumétrica do meio poroso e  $W$  representa o calor de “molhagem” diferencial. Quando uma quantidade mínima de água é adicionada a matriz de solo, uma pequena quantidade de calor é liberada e esta energia térmica é chamada calor de “molhagem” (*Groenevelt e Kay, 1974 apud Hampton, 1989*).

Uma forma alternativa do fluxo de calor é obtida através da relação termodinâmica:

$$L_0 + c_p(T - T_0) = L + c_l(T - T_0) \quad (2.18)$$

que fornece a eq. (2.19),

$$q_h = -\mathbf{I}_* \nabla T + Lq_v + c_l(T - T_0)q_m \quad (2.19)$$

onde  $q_m = q_l + q_v$ . Substituindo por  $q_v$  na eq. (2.7), temos:

$$q_h = -(\mathbf{I}_* + \mathbf{r}_l LD_{T_v}) \nabla T + \mathbf{r}_l LD_{q_v} \nabla \mathbf{q} + c_l(T - T_0)q_m \quad (2.20)$$

Uma vez que os mecanismos responsáveis pelo fluxo de calor devido a gradiente de temperatura não podem ser separados fisicamente, *de Vries* (1958) sugere que a expressão  $\mathbf{I}_* + \mathbf{r}_l LD_{T_v}$  seja substituída por  $\mathbf{I}$ , que é a condutividade térmica aparente do meio incluindo os efeitos do transporte de calor latente do vapor devido a gradientes de temperatura nos poros preenchidos com ar.

A aplicação do princípio de conservação de energia térmica ao fluxo de calor na eq. (2.20) e o teor de calor expresso na eq. (2.17) produz a seguinte equação diferencial parcial que descreve o fluxo de energia térmica em um meio poroso sob gradientes de temperatura e gradientes de pressão:

$$\frac{\partial S_h}{\partial t} = \nabla [(\mathbf{I}_* + \mathbf{r}_l LD_{T_v}) \nabla T + \mathbf{r}_l LD_{q_v} \nabla \mathbf{q} - c_l(T - T_0)q_m] \quad (2.21)$$

## 2.4

### Modelo adotado

Conforme citado no capítulo 1, o modelo de *Milly* (1982) foi escolhido pelo fato de sua formulação ter sido desenvolvida em função da carga de pressão, além de incluir os efeitos dos gradientes de temperatura no fluxo de umidade. As equações governantes utilizadas neste modelo descrito por *Milly e Eagleson* (1980) e por *Milly* (1982) são baseadas nas formulações propostas por *Philip e de Vries* (1957) e *de Vries* (1958), utilizando modificações das equações (2.14) e (2.21).

De acordo com *Milly* (1982), o fluxo de umidade na fase líquida do solo, em função da carga de pressão e temperatura, é dada por:

$$q_l = -K \nabla y - r_l D_{Ta} \nabla T - r_l K \quad (2.22)$$

onde  $D_{Ta}$  é um coeficiente relacionado ao calor de “molhagem” no campo de pressão responsável pelo fluxo de líquido absorvido.

$$D_{Ta} = \frac{-0.0013}{T} \quad (2.23)$$

Esta transferência de líquido na fase absorvida é importante apenas para materiais argilosos onde a magnitude da integral do calor de “molhagem” e a espessura da camada de água podem ser significativas (*Kay e Groenevelt*, 1974 apud *Hampton*, 1989).

O fluxo de vapor d’água é dado por uma equação modificada da Lei de Fick, semelhante à descrita por *Philip e de Vries* (1957):

$$q_v = -D_{am} \mathbf{t} \nabla \mathbf{r}_v \quad (2.24)$$

onde  $t$  é um fator de tortuosidade. Para a expansão da eq. (2.24) em termos de gradientes de pressão e temperatura é utilizada a mesma relação termodinâmica descrita por *Philip e de Vries* (1957) no item 2.3.1, obtendo a seguinte equação:

$$q_v = -r_l D_y \nabla y - r_l D_{Tv} \nabla T \quad (2.25)$$

onde  $D_y$  é a difusividade isotérmica (semelhante a  $D_q$  no modelo de *Philip e de Vries*) definida como:

$$D_y = \frac{D_{atm} t}{r_l} \frac{g r_v}{RT^k} \quad (2.26)$$

onde  $T^k$  é a temperatura em graus Kelvin, utilizada devido as relações termodinâmicas empregadas no modelo, e  $D_{Tv}$  é a difusividade térmica do vapor dada pela seguinte equação:

$$D_{Tv} = \frac{D_{atm} t}{r_l} n' \left[ h \frac{d r_0}{dT} - \frac{g y r_v}{R (T^k)^2} \frac{dT^k}{dT} \right] \quad (2.27)$$

O parâmetro  $n'$  na eq. (2.27) foi introduzido por *Philip e de Vries* (1957) para prever os efeitos de valores altos de fluxo de vapor comparados a valores previstos através da equação modificada pela Lei de Fick. É representado pela seguinte equação:

$$n' = \frac{1}{t} \begin{cases} h z, & q \leq q_k \\ \left( q_a + \frac{q_a}{h - q_k} q \right) z, & q_k < q \end{cases} \quad (2.28)$$

onde  $h$  é a porosidade do meio,  $q_a$  é o teor de umidade volumétrico do ar,  $q_k$  é o teor de umidade volumétrico no qual o fluxo de líquido começa a ser desprezado.

O parâmetro  $z$  é um fator de correção introduzido por *Philip e de Vries* (1957) para levar-se em consideração o fluxo de vapor devido a elevados gradientes de temperatura médios nos poros preenchidos com ar comparados com a magnitude do gradiente de temperatura macroscópico, dado por:

$$z = \frac{(\nabla T)_a}{\nabla T} \quad (2.29)$$

onde  $(\nabla T)_a$  é o gradiente médio de temperatura nos poros preenchidos com ar e  $\nabla T$  é o gradiente de temperatura macroscópico. Valores de  $z$  a 20°C são descritos por *Philip e de Vries* no mesmo trabalho.

A difusividade molecular do vapor d'água no ar  $D_{am}$ , como sugerida por *Dorsey* (1940), válida para todo o intervalo de 0°C a 100°C, é expressa pela relação:

$$D_{am} = D_0 (P_0/P) (T^k/T_0^k)^{1.75} \quad (2.30)$$

onde  $D_0$  é o valor de  $D_{am}$  na pressão total  $P_0$  e na temperatura  $T_0^k$ . A eq. (2.31) fornece valores de  $D_{am}$  semelhantes aos valores da equação de *Philip e de Vries* (1957).

$$D_{am} = 5.80 \times 10^{-7} (T^k)^{2.3} \quad (2.31)$$

O fator de tortuosidade  $t$ , utilizado para reduzir a difusividade do vapor através dos poros no solo comparado com valores de difusão no ar livre, é definido como uma função potencial do teor de umidade volumétrico do ar no solo  $q_a$  adequados a dados experimentais e de campo (*Nobre e Thomson*, 1992), expresso por:

$$t = q_a^{5/3} \quad (2.32)$$

A equação do fluxo de umidade é obtida através das equações (2.22), que representa o fluxo de líquido, e (2.25), que representa o fluxo de vapor, formando:

$$\frac{q_m}{\mathbf{r}_l} = -(K + D_y)\nabla\mathbf{y} - (D_{Ta} + D_{Tv})\nabla T - K \quad (2.32)$$

A partir do princípio da conservação de massa obtém-se a equação diferencial que descreve o fluxo de umidade sob a influência combinada de gradientes de temperatura e de umidade:

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} \frac{1}{\mathbf{r}_l} = \nabla \left[ (K + D_y)\nabla\mathbf{y} + (D_{Ta} + D_{Tv})\nabla T \right] + \nabla K \quad (2.33)$$

A partir da expressão de Milly, foi adicionado o parâmetro de massa específica da fase líquida ao fluxo de umidade (*Thomas e Sansom, 1995*), conforme eq. (2.34). A inclusão do parâmetro de massa específica da fase líquida na parcela isotérmica do fluxo está relacionada com sua variação com a temperatura. Portanto, o fluxo em meios saturados ocorre também pela variação da massa específica da fase líquida com a temperatura.

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} = \nabla \left[ (\mathbf{r}_l K + D_y)\nabla\mathbf{y} + (D_{Ta} + D_{Tv})\nabla T \right] + \nabla K \quad (2.34)$$

A expressão utilizada para descrever o fluxo de calor em meios porosos não-saturados é derivada da teoria descrita no modelo de *Philip e de Vries*, sendo modificada por *Milly* (1982), e apresentada na seguinte forma:

$$q_h = -I\nabla T - \mathbf{r}_l \left( LD_y + \mathbf{b}^{-1}gTD_{Ta} \right) \nabla\mathbf{y} + c_l(T - T_0)q_m \quad (2.35)$$

onde  $I$  é a condutividade térmica do meio poroso úmido,  $L$  é o calor latente de vaporização da água,  $c_l$  é calor específico do líquido,  $T_0$  é uma temperatura de

referência e  $\mathbf{b}$  é um fator de conversão igual a  $4.2 \times 10^7$  requerido para converter de  $(\text{cm}^2 \text{ g}^{-1} \text{ }^\circ\text{C}^{-1})$  para (cal). O primeiro termo do lado direito da eq. (2.35) representa o processo de condução, onde a condutividade térmica  $\mathbf{I}$  considera também a contribuição do processo de transporte de calor latente associados a gradientes de temperatura. O segundo termo na eq. (2.35) representa a transferência de calor latente pelo movimento de vapor induzido por gradientes de pressão. O terceiro termo representa a transferência através do calor de “molhagem” e o quarto termo representa a transferência de calor por convecção.

A aplicação do princípio de conservação de energia térmica ao fluxo de calor é feita da mesma forma que foi descrita no modelo de *Philip e de Vries* na eq. (2.17), originando a equação que descreve o fluxo de energia térmica em um meio poroso sob gradientes de temperatura e gradientes de pressão para o modelo adotado:

$$\frac{\partial S_h}{\partial t} = \nabla \left[ \mathbf{I} \nabla T + \mathbf{r}_l (LD_y + \mathbf{b}^{-1} gTD_{T_a}) \nabla \mathbf{y} - c_l (T - T_0) q_m \right] \quad (2.36)$$

A formulação numérica das equações (2.33) e (2.36) são desenvolvidas nos capítulos seguintes, assim como as condições iniciais e condições de contorno especificadas no programa.

### 3

## Metodologia de solução

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

### 3.1

#### Método dos elementos finitos

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

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

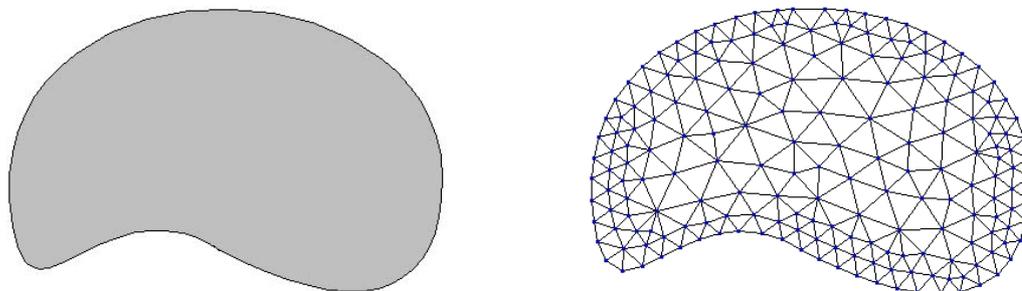


Figura 2 - (a) objeto contínuo, (b) malha típica de elementos finitos com elementos triangulares.

### 3.1.1

#### Método dos Resíduos Ponderados

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

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

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

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

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

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

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

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

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

### 3.1.2

#### Método de Galerkin

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

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

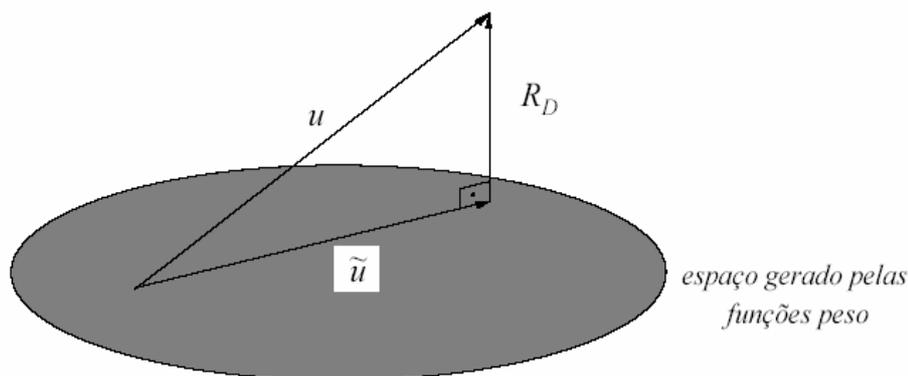


Figura 3 - O resíduo  $R_D$  é ortogonal ao espaço gerado pelas funções peso  $W_i$  (Luersen, 2000).

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

onde  $\Omega_e$  representa o domínio ocupado pelo elemento  $e$  e  $\Gamma_e$  é o segmento de contorno do elemento  $e$ .

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

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

onde

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

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

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

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

$$Q_n = -\sum_e \mathbf{s}_{1_l} \int_{\Gamma_e} \mathbf{f}_l \mathbf{f}_n d\Gamma = -\sum_e \mathbf{s}_{1_n} I_n \quad (3.17)$$

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

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

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

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

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

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

enquanto que para casos de fluxo axisimétrico:

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

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

### 3.2

#### Programa UNSATCHEM-2D

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

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

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

### 3.2.1

#### Fluxo de umidade

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

condição de contorno de fluxo prescrita (Neumann):

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

e condição de contorno de gradiente prescrita:

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

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

### 3.2.2

#### Transporte de calor

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

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

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

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

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

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

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

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

onde  $T_i$  é uma função prescrita de  $x$  e  $z$ .

Dois tipos de condições de contorno (Dirichlet e Cauchy) pode ser especificados ao longo do contorno  $\Omega$ . Condição de contorno de temperatura prescrita (Dirichlet) ao longo do contorno  $\Gamma_D$ :

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

condição de contorno de fluxo de calor prescrito (Cauchy) ao longo do contorno  $\Gamma_C$ :

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

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

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

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

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

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

### 3.2.3

#### Solução numérica das equações de fluxo e de calor

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

onde

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

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

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

### 3.3

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

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

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

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

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

ou de forma simplificada:

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

onde:

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

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

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

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

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

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

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

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

onde:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

onde:

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

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

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

### 3.4

#### Implementações numéricas

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

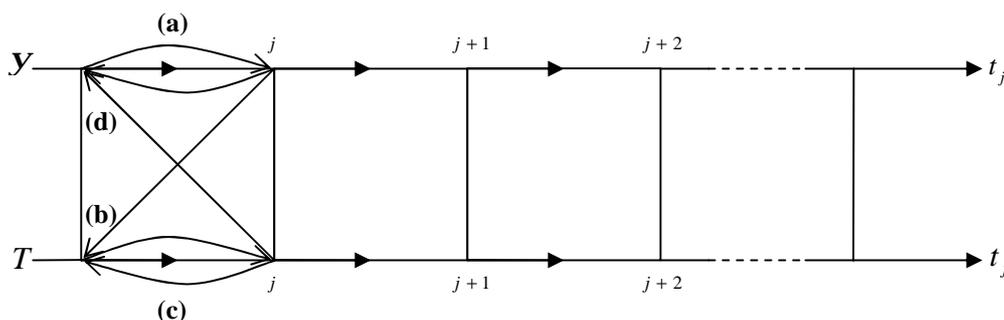


Figura 4 – Solução “staggered” utilizada para resolver o problema de acoplamento entre fluxo de umidade e fluxo de calor.

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

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

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

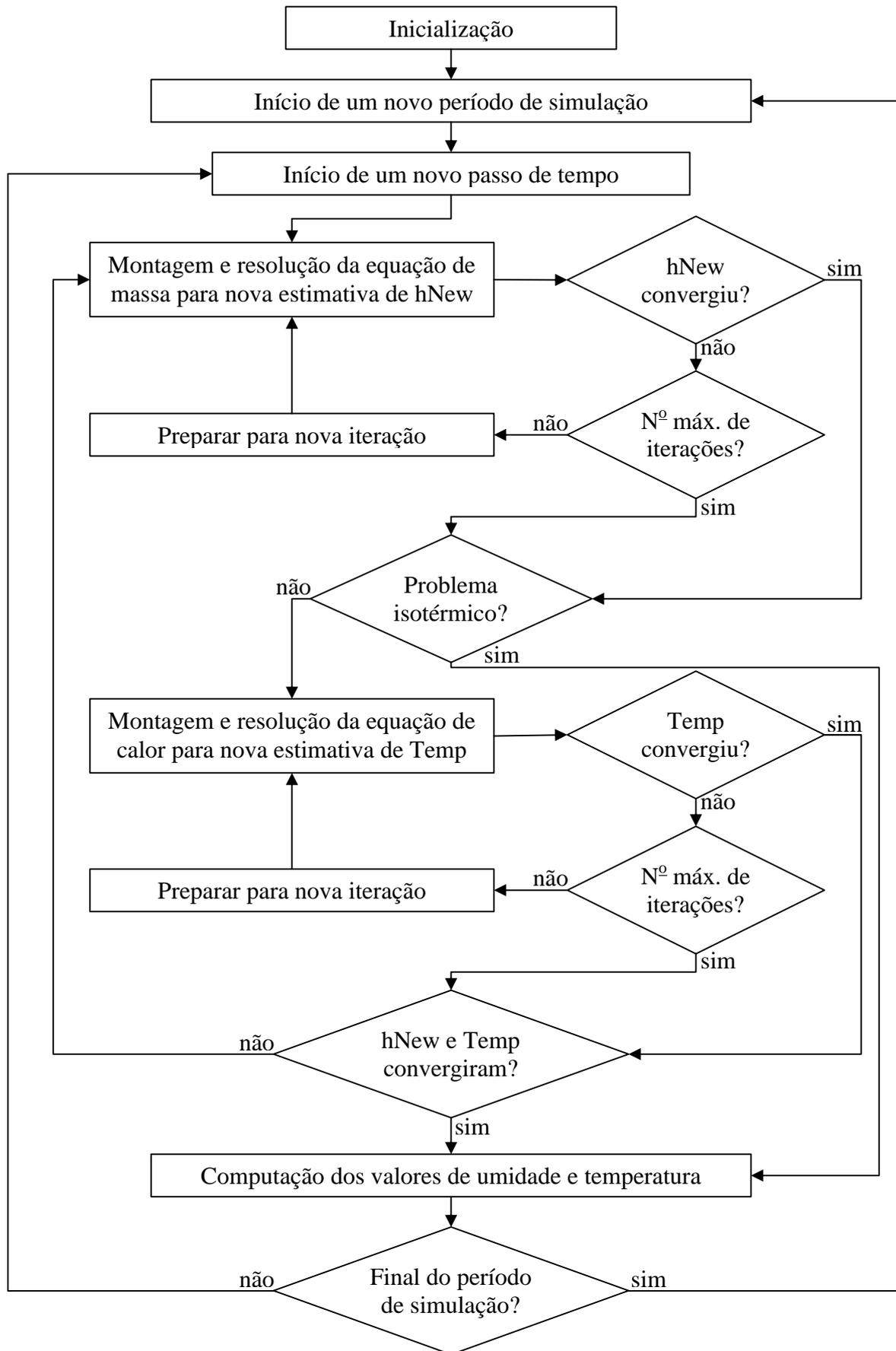


Figura 5 – Fluxograma do programa modificado.

## 4

### Resultados e discussões

O processo de migração de umidade sob influência de gradientes de temperatura em solos não-saturados envolve uma série de parâmetros hidráulicos e térmicos na resolução do problema. A falta de estudos sobre o assunto abordado na dissertação no país, juntamente com o curto tempo para a realização de um estudo experimental no decorrer da dissertação fez com que as simulações realizadas sejam baseadas em estudos realizados com parâmetros hidráulicos e térmicos diferenciados em relação aos parâmetros de solos existentes no país. O objetivo deste capítulo é apresentar a validação do programa e resultados de simulações de modelos hipotéticos com condições iniciais e condições de contorno bem definidas. Na utilização do programa utilizou-se como pré- e pós-processador o aplicativo MTool (Tecgraf/PUC-Rio), onde, como citado no capítulo 3, foram realizadas alterações subseqüentes.

#### 4.1

##### Verificação do modelo

A falta de soluções analíticas que descrevam com clareza o problema associado ao transporte acoplado de umidade e calor em meios porosos restringiu a validação às soluções experimentais existentes. Por se tratar de um programa original que contém simulações que validam e descrevem fenômenos de fluxo e infiltração, e por ser utilizado com alguma frequência em pesquisas realizadas pela geotecnia da PUC-Rio, julgou-se irrelevante a validação contra soluções analíticas que representam fenômenos isotérmicos, uma vez que as alterações têm por objetivo simular o transporte não-isotérmico. O modelo numérico proposto na

dissertação foi verificado através da comparação com resultados gerados experimentalmente por *Bach* (1989). A comparação foi realizada para condições isotérmicas e não-isotérmicas. Em uma breve descrição do experimento, para ambas as condições citadas acima, colunas de solo arenoso (“Otero sandy loam”) foram colocadas em posição horizontal, com diferentes teores de umidade volumétrica inicial, e com suas respectivas vazões prescritas aplicadas em uma das extremidades da coluna. Para o caso não-isotérmico, foi aplicado um gradiente térmico obtido pelo aquecimento de uma extremidade da coluna e resfriamento na outra extremidade. Na utilização dos parâmetros hidráulicos foi realizada uma interpolação linear entre o modelo da curva característica do solo utilizado pelo programa UNSATCHEM2D e o modelo utilizado na análise experimental. O modelo utilizado na referida dissertação é o modelo de van Genuchten, enquanto que o modelo utilizado por *Bach* (1989) é baseado em uma solução empírica do modelo de Brooks e Corey (1966). Tal interpolação não obteve uma total convergência, devido à alta não-linearidade do modelo do experimento. Porém os valores obtidos foram considerados aceitáveis pelo autor para utilização como validação das implementações numéricas.

Os parâmetros hidráulicos e térmicos necessários para a simulação numérica são os parâmetros de van Genuchten, com as umidades volumétrica saturada e residual ( $\theta_s$  e  $\theta_r$ ), os parâmetros empíricos  $n$  e  $\alpha$ , a permeabilidade saturada ( $K_s$ ) e a porosidade do material ( $por$ ). Os parâmetros térmicos são definidos a partir das equações de *Philip e de Vries* (1957) e *de Marsily* (1986) para o cálculo da condutividade térmica aparente do solo ( $I_{ij}(\mathbf{q})$ ). Ambos os parâmetros hidráulicos e térmicos podem ser definidos a partir de ensaios de laboratório, ou através do banco de dados de programas comerciais, como o programa HYDRUS2D.

Os parâmetros hidráulicos de van Genuchten e térmicos utilizados na solução numérica estão descritos na Tabela 1 e Tabela 2.

Tabela 1 – Parâmetros hidráulicos de van Genuchten (exemplo de validação).

Parâmetros	$\theta_s$	$\theta_r$	n	$\alpha$	$K_s$	por <sup>1</sup>
Coluna	0,50	0,05	2,057	0,0166	0,0011	0,47

Tabela 2 - Parâmetros térmicos (exemplo de validação).

Parâmetros	$\theta_n$	$\theta_o$	$\lambda_L$	$\lambda_T$	b1	b2	b3	Cn	Co	Cw
Coluna	0,6	1e-2	0,5	0,1	22,8	-249,6	490,9	19200	25100	41800

A Tabela 3 mostra os diferentes teores de umidade inicial com as respectivas vazões aplicadas e os gradientes de temperatura aplicados para o caso isotérmico e não-isotérmico.

Tabela 3 – Condições experimentais para cada caso (Bach, 1989).

Exp #	Caso <sup>2</sup>	Teor de Umidade Inicial (cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup> )	Temperatura Inicial Média (°C)	Temperatura Extremidade Aquecida (°C)	Temperatura Extremidade Resfriada (°C)	Fluxo (cm/hr)
5	I	0,151	24,00			0,094
6	NI	0,151	23,88	35,5	24	0,094
7	I	0,049	23,68			0,091
8	NI	0,049	23,55	35,5	18,5	0,091
9	I	0,282	23,55			0,092
10	NI	0,282	23,10	35,5	24	0,092

A malha de elementos finitos utilizada nas simulações é formada por 60 nós com 58 elementos triangulares (Figura 6). As condições iniciais e condições de contorno empregadas nas simulações são semelhantes às condições utilizadas nos experimentos citadas na Tabela 3.

<sup>1</sup> porosidade

<sup>2</sup> I = Caso Isotérmico NI = Caso Não-Isotérmico

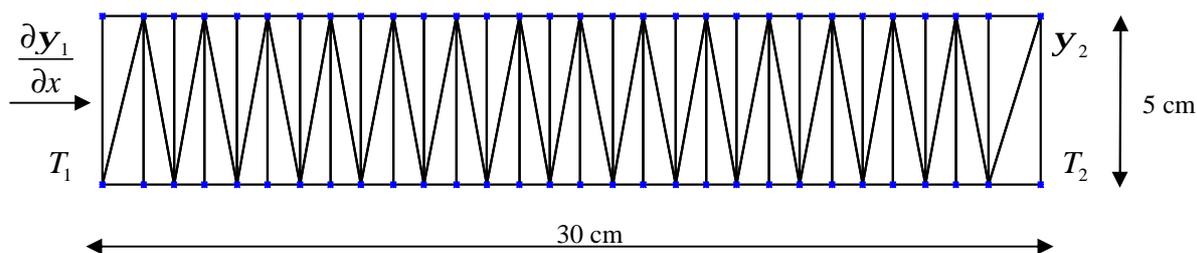


Figura 6 – Malha de elementos finitos utilizada na validação dos resultados, com condições de contorno para o caso não-isotérmico.

Na simulação com umidade inicial igual a 0,151, temos para o caso não-isotérmico as condições iniciais e de contorno iguais a:

$$\left. \begin{array}{l} y = -240 \text{ cm} \\ T = 23,88 \text{ }^\circ\text{C} \end{array} \right\} \quad \text{para } t=0\text{s em } 0 \leq x \leq 30 \text{ cm}$$

$$\left. \begin{array}{l} q_m / r_l = -2,6 \times 10^{-5} \text{ cm/s} \\ T = 33,5 \text{ }^\circ\text{C} \end{array} \right\} \quad \text{para } t>0\text{s em } x = 0 \text{ cm}$$

$$\left. \begin{array}{l} \partial y / \partial x = 0 \\ T = 23,88 \text{ }^\circ\text{C} \end{array} \right\} \quad \text{para } t>0\text{s em } x = 30 \text{ cm}$$

A comparação entre os valores numéricos e experimentais para as simulações isotérmicas é apresentada na Figura 7, Figura 8 e Figura 9 para um tempo de simulação de 6, 12 e 24 horas, com teor de umidade inicial igual a 0,151. Os valores comparados apresentaram uma boa concordância e curvas de variação de umidade semelhantes.

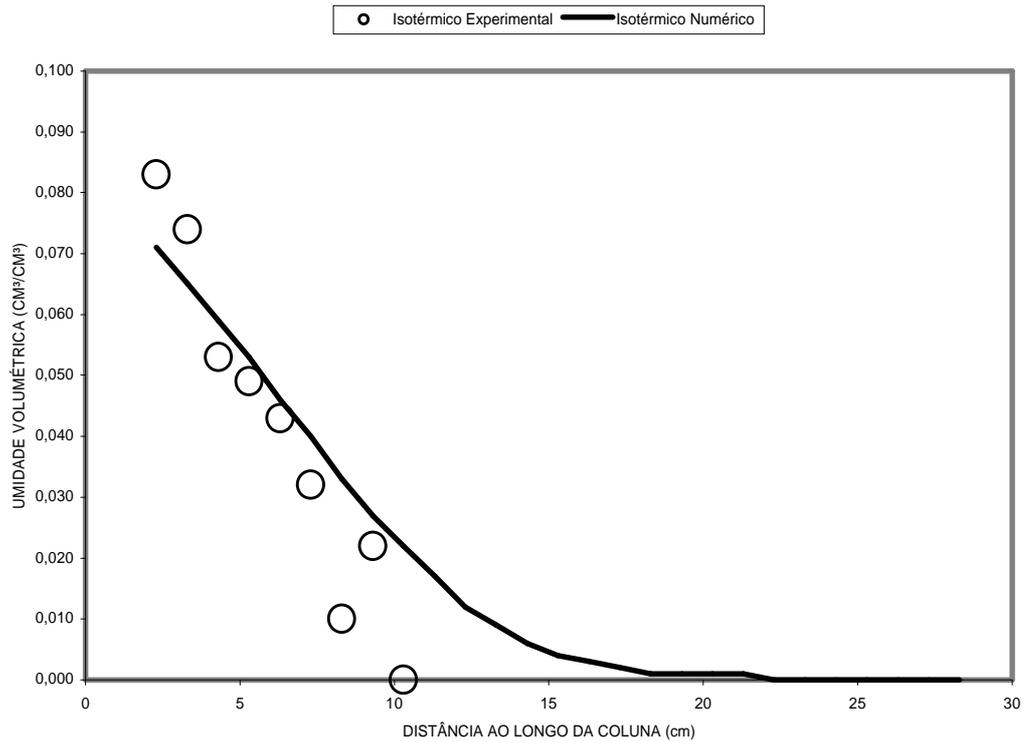


Figura 7 – Variação do teor de umidade volumétrica com condição isotérmica para valores de  $\theta_i = 0,151$  e  $t = 6$  hs.

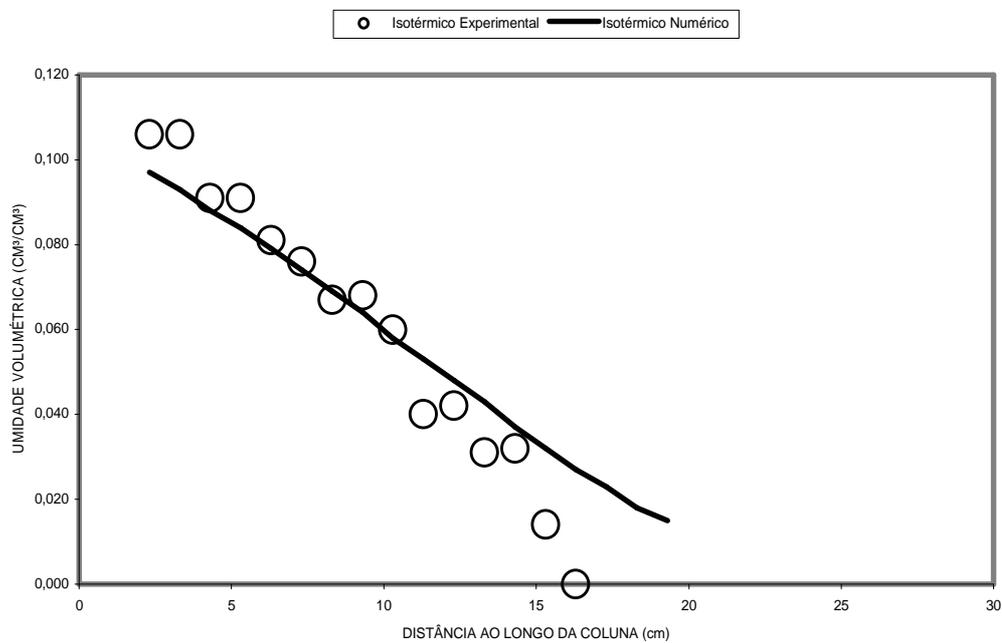


Figura 8 – Variação do teor de umidade volumétrica com condição isotérmica para valores de  $\theta_i = 0,151$  e  $t = 12$  h.

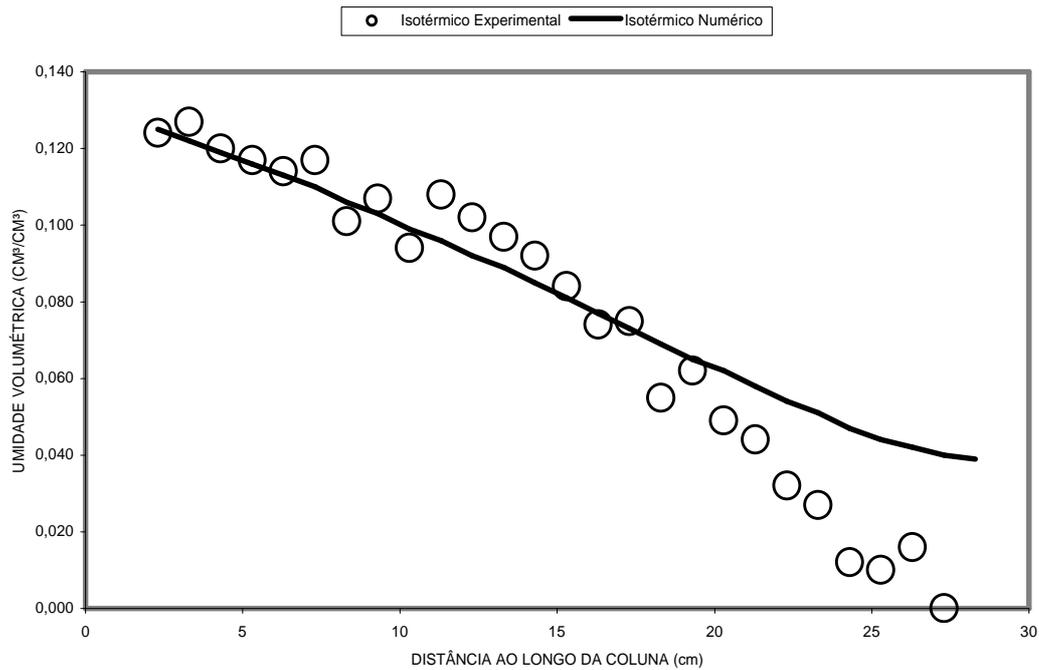


Figura 9 – Variação do teor de umidade volumétrica com condição isotérmica para valores de  $\theta_i = 0,151$  e  $t = 24$  h.

Os valores numéricos e experimentais para a condição não-isotérmica são igualmente demonstrados na Figura 10, Figura 11 e Figura 12.

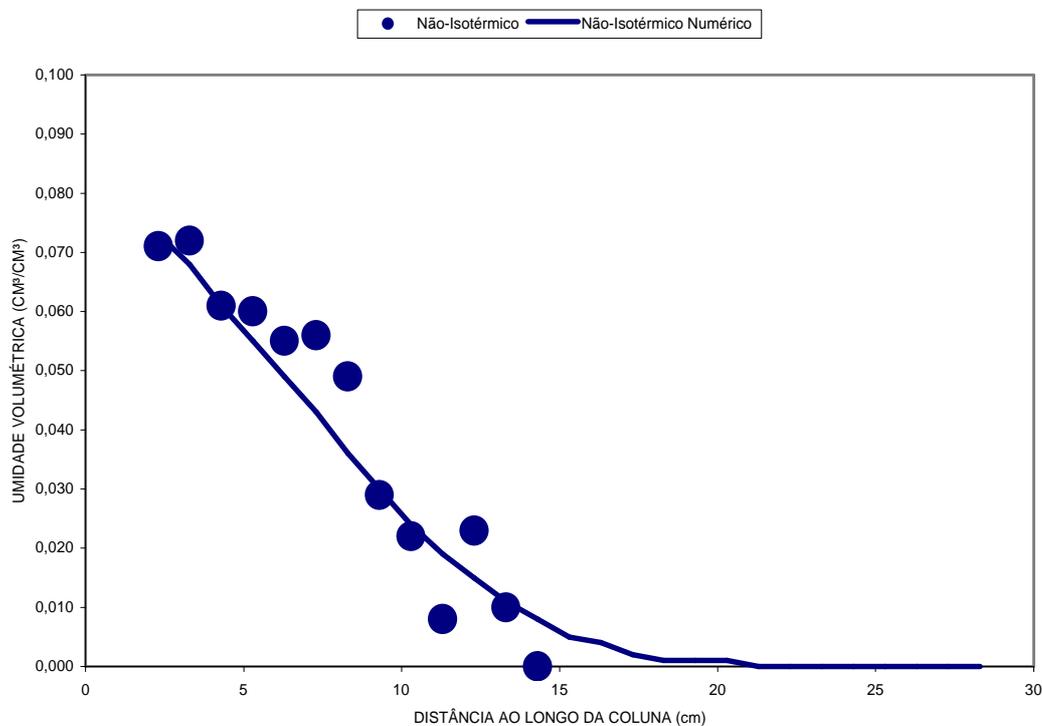


Figura 10 – Variação do teor de umidade volumétrica com condição não-isotérmica para valores de  $\theta_i = 0,151$  e  $t = 6$  h.

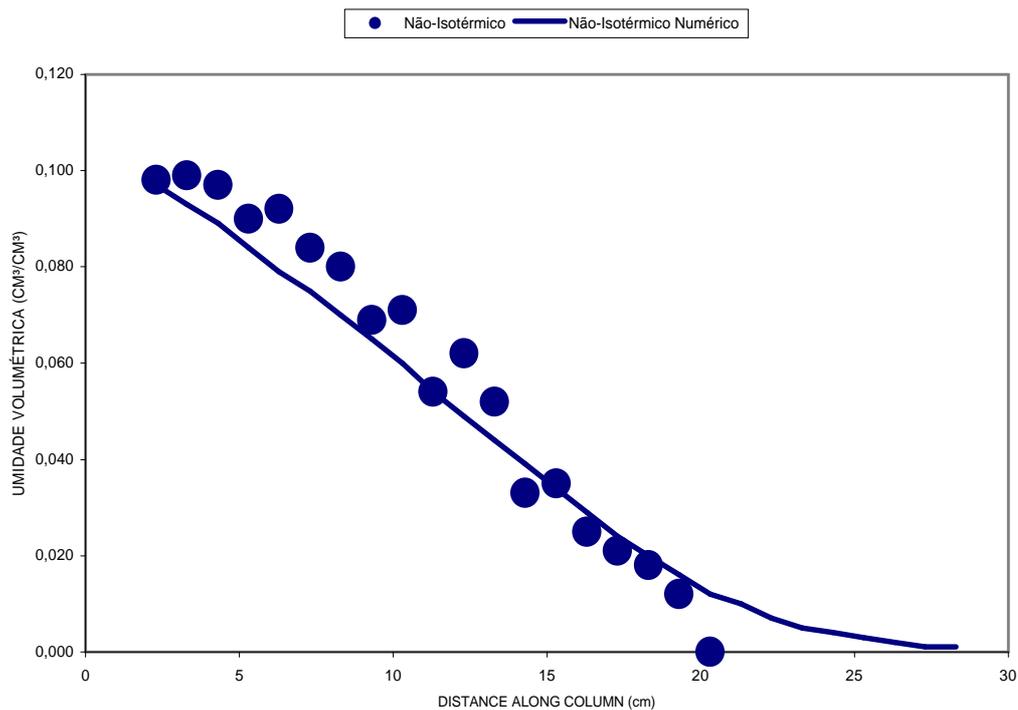


Figura 11 – Variação do teor de umidade volumétrica com condição não-isotérmica para valores de  $\theta_i = 0,151$  e  $t = 12$  h.

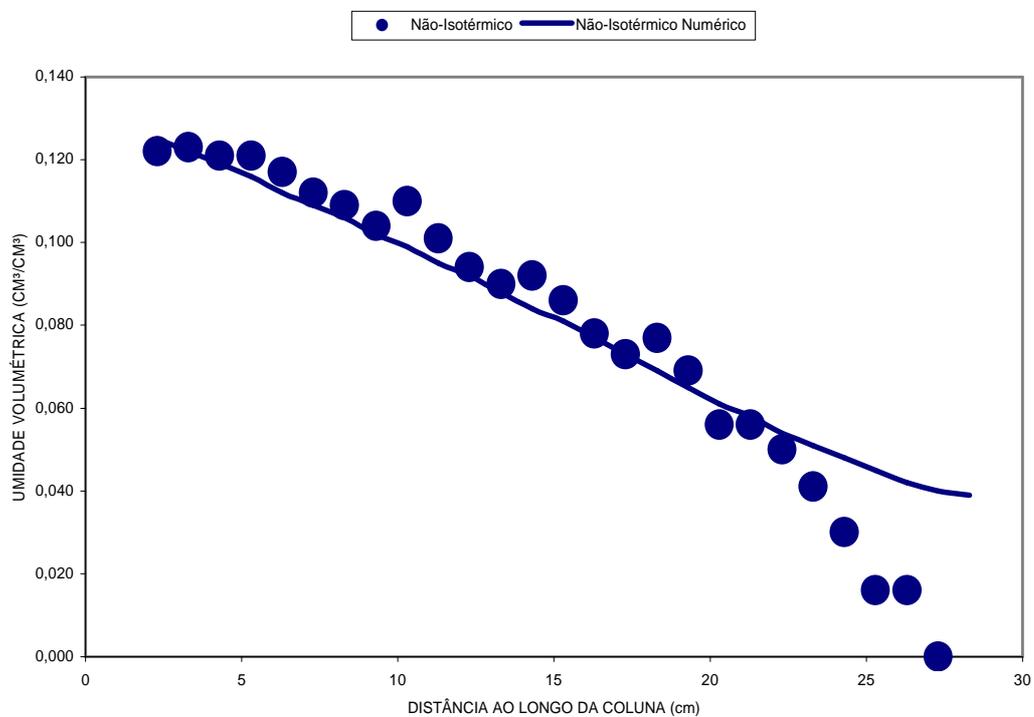


Figura 12 – Variação do teor de umidade volumétrica com condição não-isotérmica para valores de  $\theta_i = 0,151$  e  $t = 24$  h.

## 4.2

### Simulações de problemas termo-hidráulicos

As simulações realizadas neste capítulo visam demonstrar modelos hipotéticos que podem existir em campo. Foram realizadas simulações de modelos que envolvem a utilização de fontes de calor na zona não-saturada a fim de melhorar o processo de remediação, seja este por injeção de água, ou por extração de vapor do solo ou ainda bioremediação. Também é demonstrada a utilização de uma fonte de calor externa simulando um processo de desorção térmica. Outro ponto abordado nas simulações foi à cobertura de resíduos industriais ou de mineração, onde uma possível infiltração de água no resíduo pode acarretar em sérios danos ao meio ambiente, como a contaminação das águas subterrâneas por metais pesados. Para que haja segurança na deposição destes resíduos é necessário garantir uma situação de fluxo zero na camada de resíduo, simulando condições atmosféricas que levam a cobertura a processos de umidescimento e secagem de acordo com as condições climáticas do ambiente.

#### 4.2.1

##### Simulação de uma fonte de calor interna

Um dos possíveis métodos para melhorar os processos de remediação em solos contaminados é através da emissão de uma fonte de calor na zona não-saturada. Para estudar quais efeitos esta fonte de calor interna pode ter sobre o transporte acoplado de umidade e calor nos solo, utilizou-se uma malha bidimensional com 1662 nós e 3142 elementos, com dimensões apresentadas na Figura 13. Neste exemplo, simula-se um cabo de potência aterrado no centro da malha, que emite uma temperatura prescrita (condição de contorno de Dirichlet), provocando o fluxo de umidade. O meio poroso na região do fluxo encontra-se não-saturado com carga de pressão inicial igual a -100 cm e uma temperatura de 20 °C, em todos os pontos da malha. O fluxo, portanto, será gerado apenas pelos gradientes de temperatura impostos, a partir de uma temperatura prescrita no cabo de 65 °C.

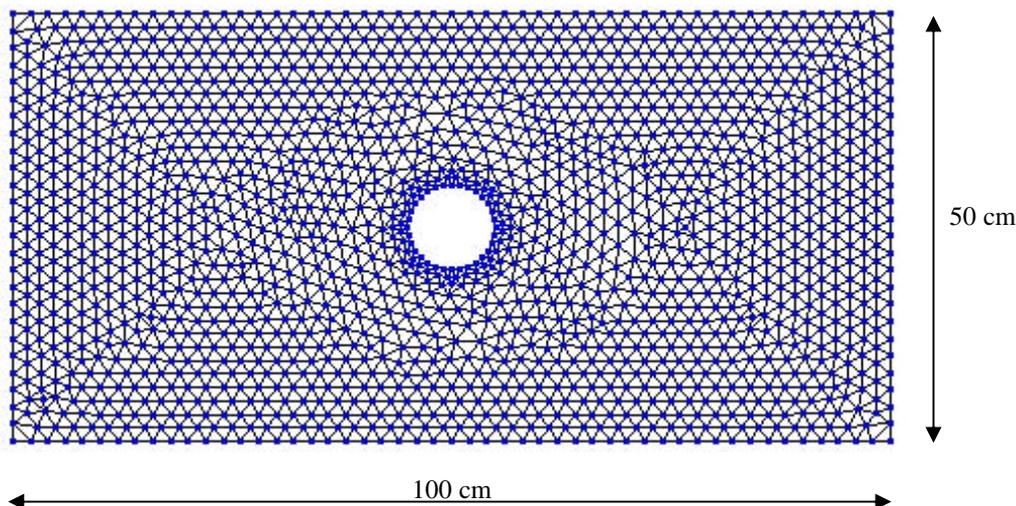


Figura 13 – Malha de elementos finitos representando um cabo de potência aterrado.

Na simulação utilizou-se parâmetros hidráulicos de van Genuchten de um solo argiloso hipotético, a partir do banco de dados do programa HYDRUS2D (Simunek e van Genuchten, 1999) descritos na Tabela 4.

Tabela 4 – Parâmetros hidráulicos de van Genuchten (fonte de calor interna).

Parâmetros	$\theta_s$	$\theta_r$	n	$\alpha$	$K_s$	por <sup>3</sup>
Fonte de calor interna	0,38	0,068	1,09	0,008	0,0000556	0,42

Tabela 5 - Parâmetros térmicos (fonte de calor interna).

Parâmetros	$\theta_n$	$\theta_o$	$\lambda_L$	$\lambda_T$	b1	b2	b3	Cn	Co	Cw
Fonte de calor interna	0,6	1e-2	0,5	0,1	-19,7	-96,2	252,1	19200	25100	41800

As condições de contorno de temperatura utilizadas consistem de um contorno impermeável onde não existe troca de calor com o meio externo, com a temperatura após um determinado tempo de simulação equalizando com a temperatura prescrita em todos os pontos da malha.

O processo de migração de umidade no meio poroso não-saturado ocorre exclusivamente por influência de gradientes de temperatura gerados pela fonte. A

<sup>3</sup> porosidade

simulação é realizada em fluxo horizontal, onde não existe o efeito de carga de elevação no processo de migração de umidade, com os gradientes de temperatura gerados pela fonte de calor provocando um fluxo de umidade em direção ao centro da malha. As figuras a seguir mostram as variações da temperatura, com as isotermas em cinco diferentes tempos da simulação.

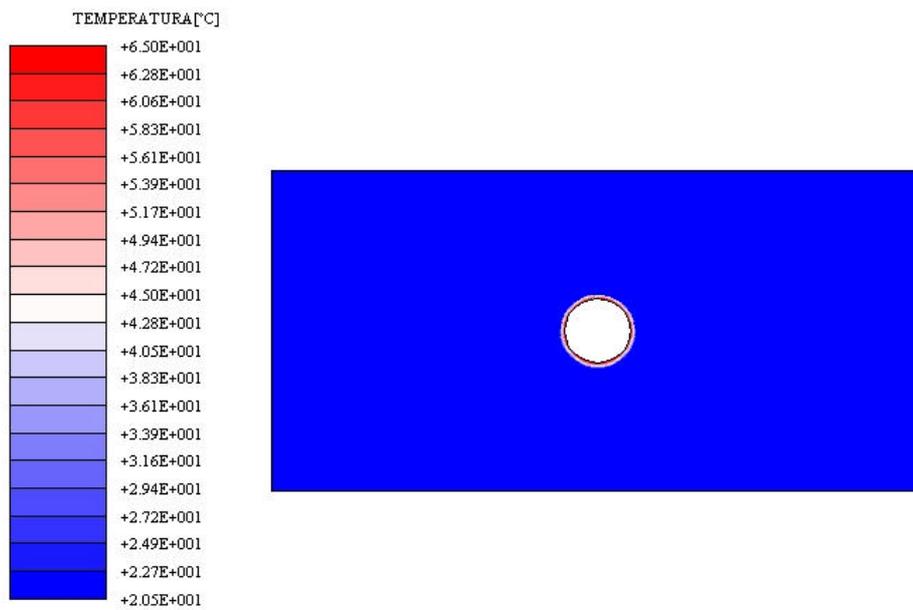


Figura 14 – Isotermas para o instante inicial (fonte de calor interna).

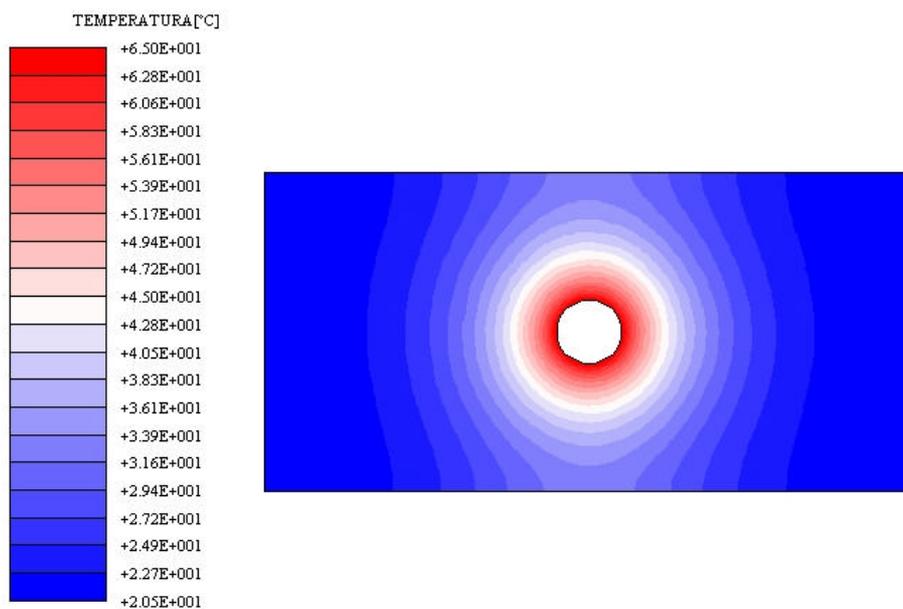


Figura 15 – Isotermas para o tempo de 9600 segundos (fonte de calor interna).

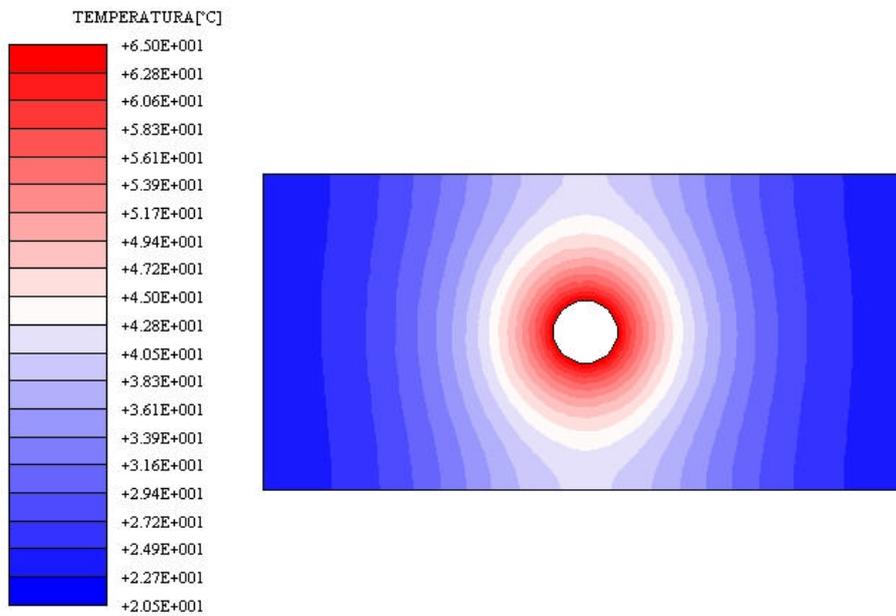


Figura 16 – Isothermas para o tempo de 19200 segundos (fonte de calor interna).

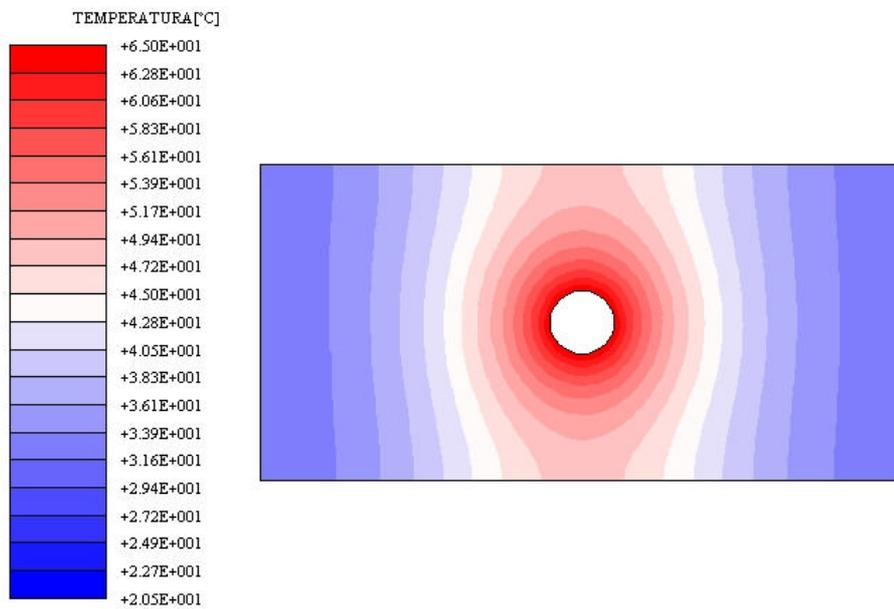


Figura 17 – Isothermas para o tempo de 38400 segundos (fonte de calor interna).

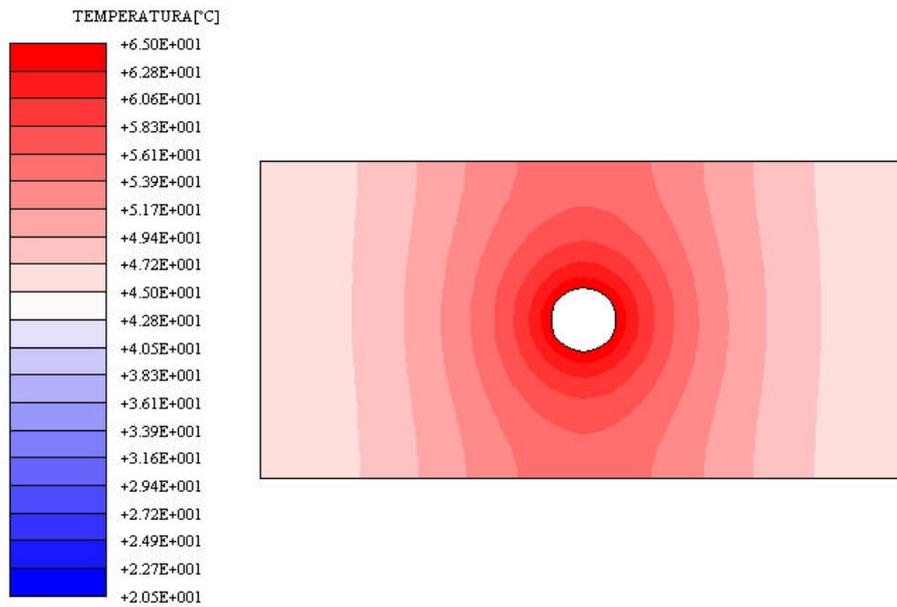


Figura 18 – Isotermas para o tempo de 76800 segundos (fonte de calor interna).

As figuras a seguir mostram as variações da umidade, com as isoumidades em quatro diferentes tempos da simulação.

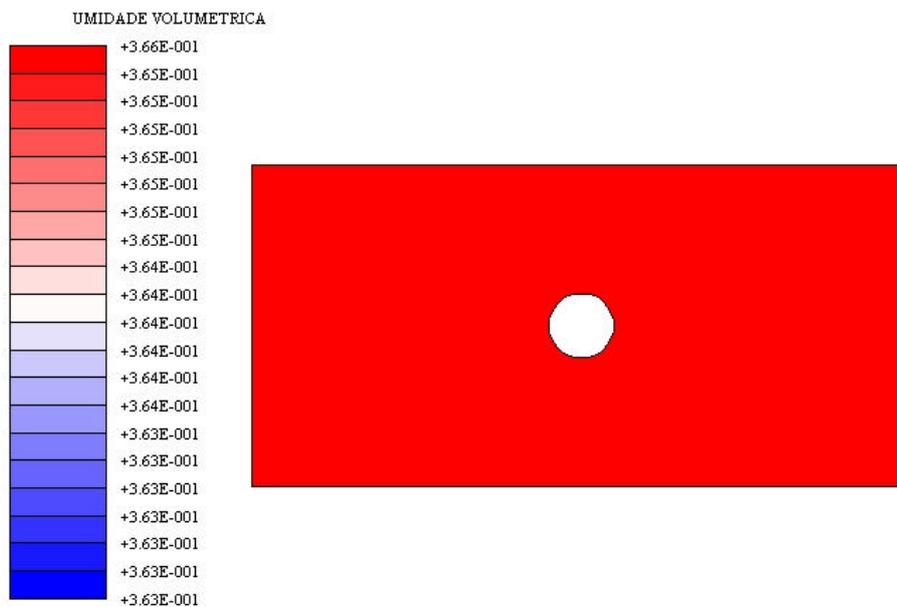


Figura 19 – Isoumidades para o instante inicial (fonte de calor interna).

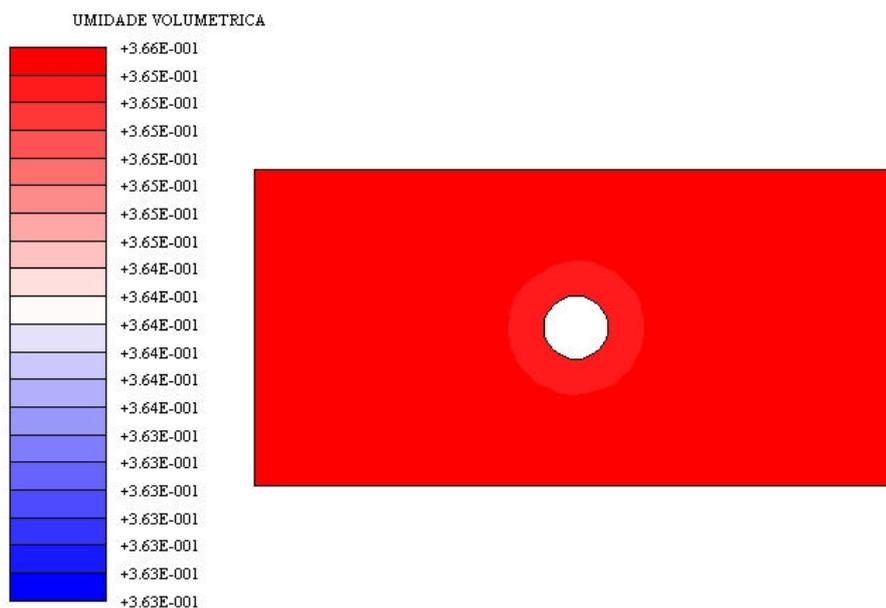


Figura 20 – Isomidades para o tempo de 19200 segundos (fonte de calor interna).

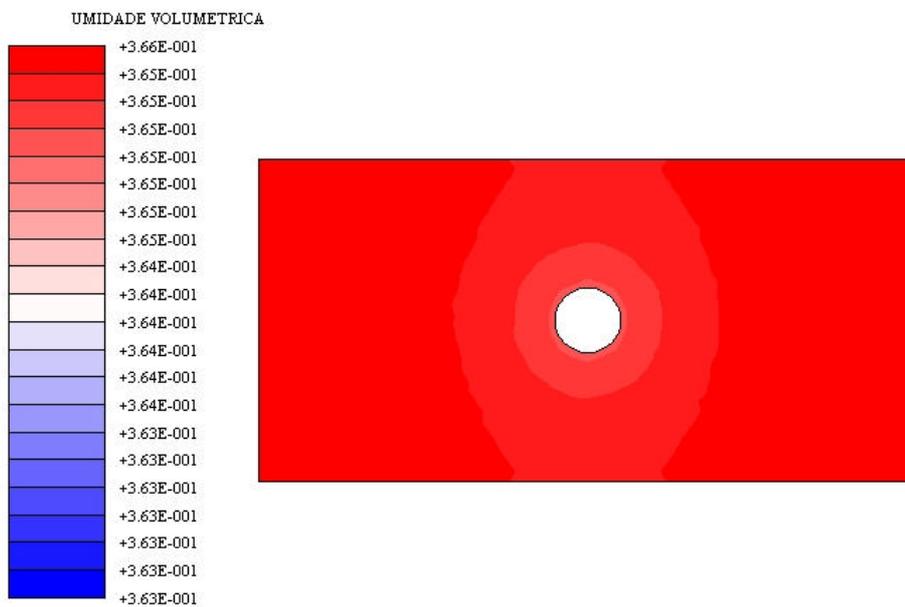


Figura 21 – Isomidades para o tempo de 38400 segundos (fonte de calor interna).

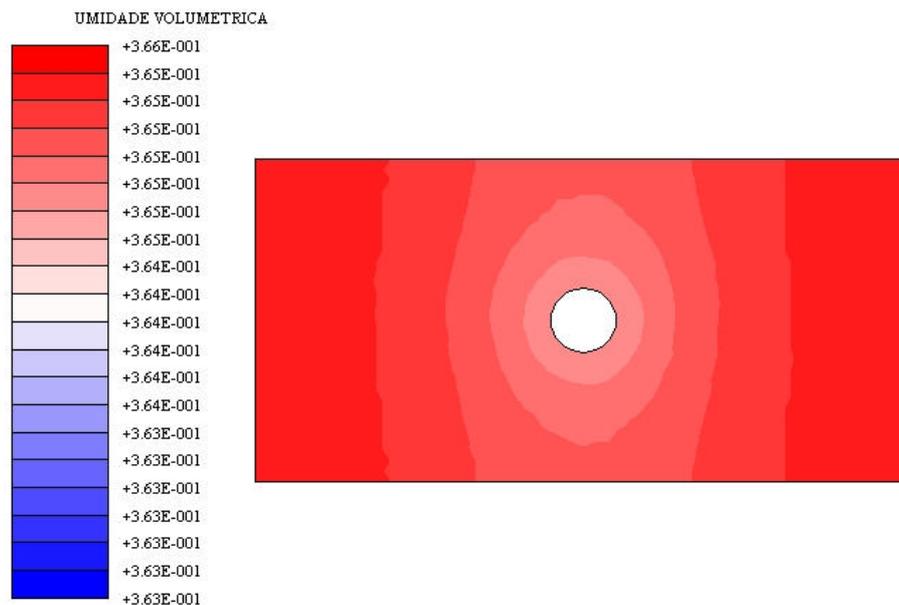


Figura 22 – Isoumidades para o tempo de 76800 segundos (fonte de calor interna).

#### 4.2.2

##### Malha bidimensional com fonte de calor externa

O processo de desorção térmica pode ser exemplificado ao simular uma fonte de calor externa que impõe uma temperatura a um recipiente com contornos impermeáveis onde se pode perceber o fluxo em direção a fonte de calor simulando um processo de volatilização dos gases presentes no solo confinado. Nesta simulação utilizou-se uma malha bidimensional com 1659 nós e 3166 elementos, com dimensões apresentadas na Figura 23, com uma fonte de calor prescrita (condição de contorno de Dirichlet) de 20 cm de comprimento situada na extremidade superior e central da malha. O meio poroso na região do fluxo encontra-se não-saturado com carga de pressão inicial igual a -150 cm e uma temperatura de 25 °C, em todos os pontos da malha. O fluxo, portanto, será gerado apenas pelos gradientes de temperatura impostos, a partir de uma temperatura prescrita no cabo de 50 °C.

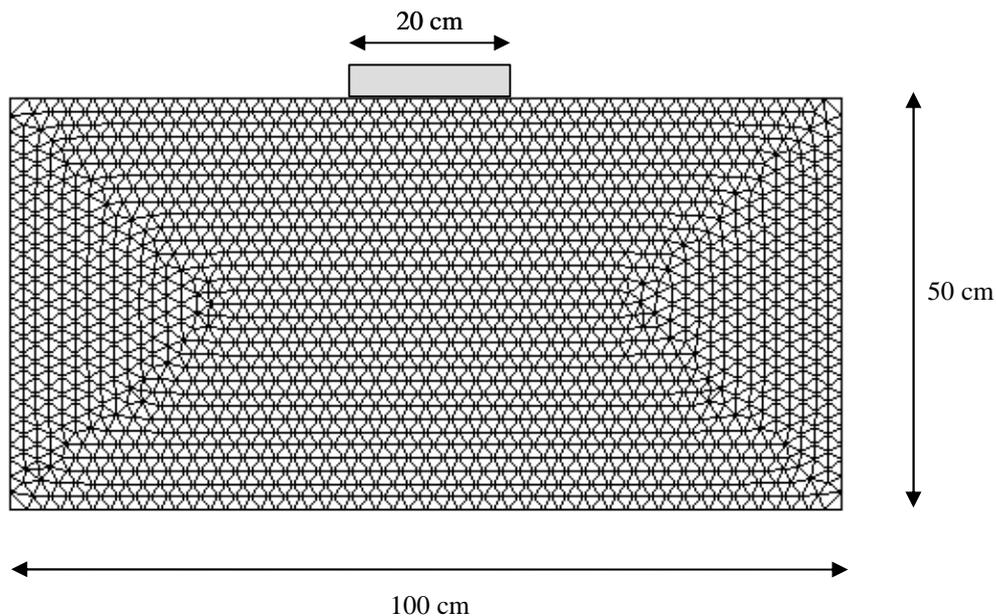


Figura 23 – Malha de elementos finitos representando o recipiente confinante.

Na simulação os parâmetros hidráulicos de van Genuchten são iguais aos parâmetros da simulação com fonte de calor interna, estipulados a partir do banco de dados do programa HYDRUS2D (*Simunek e van Genuchten, 1999*) descritos na Tabela 6.

Tabela 6 – Parâmetros hidráulicos de van Genuchten (fonte de calor externa).

Parâmetros	$\theta_s$	$\theta_r$	n	$\alpha$	$K_s$	por <sup>4</sup>
Fonte de calor externa	0,38	0,068	1,09	0,008	0,0000556	0,42

Tabela 7 - Parâmetros térmicos (fonte de calor externa).

Parâmetros	$\theta_n$	$\theta_o$	$\lambda_L$	$\lambda_T$	b1	b2	b3	Cn	Co	Cw
Fonte de calor externa	0,6	1e-2	0,5	0,1	-19,7	-96,2	252,1	19200	25100	41800

As condições de contorno de temperatura utilizadas são semelhantes as da simulação anterior, com um contorno impermeável onde não existe troca de calor com o meio externo, onde a temperatura após um determinado tempo de

<sup>4</sup> porosidade

simulação equaliza com a temperatura na extremidade superior prescrita em todos os pontos da malha. As figuras abaixo mostram as variações da temperatura, com as isotermas em cinco diferentes tempos da simulação.

A simulação foi realizada tanto para fluxo horizontal quanto para fluxo vertical, com os resultados apresentados para o fluxo horizontal, destacando efeitos dos gradientes de temperatura. Os gradientes de temperatura gerados pela fonte de calor provocam um fluxo de umidade em direção ao contorno superior da malha, e no caso de um processo de desorção térmica, os gradientes de temperatura provocam a volatilização de contaminantes existentes no solo com fluxo em direção a superfície. As figuras a seguir mostram as variações da temperatura, com as isotermas em cinco diferentes tempos da simulação.

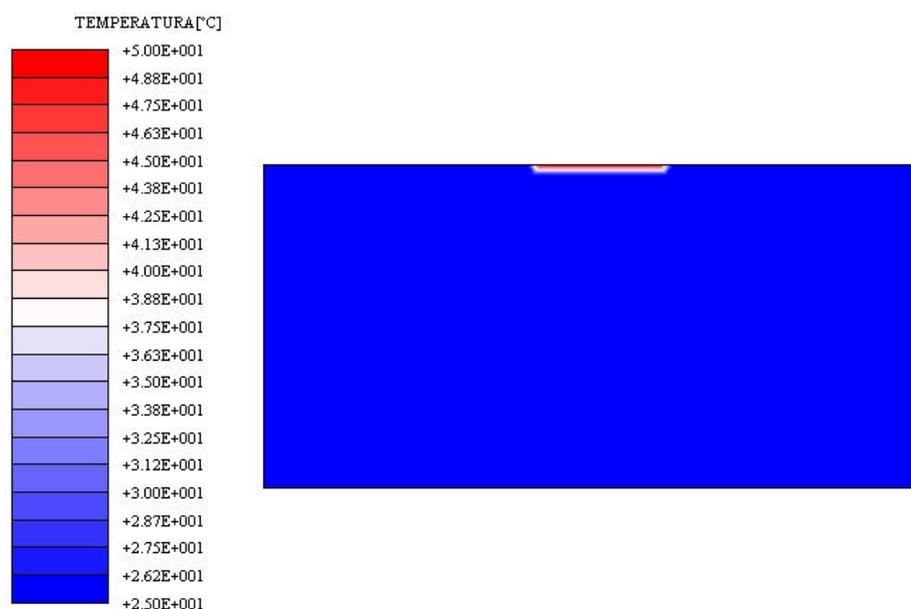


Figura 24 – Isotermas para o instante inicial (fonte de calor externa).

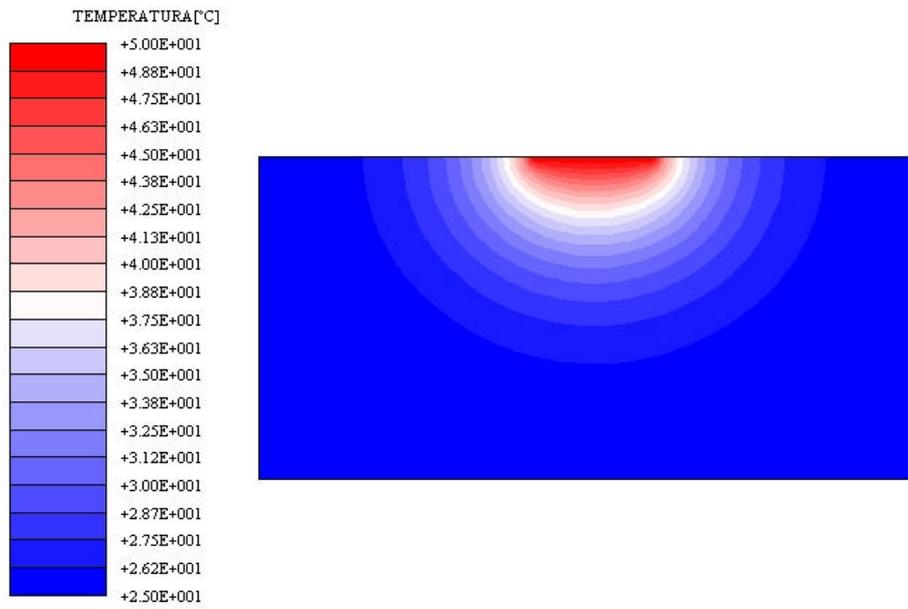


Figura 25 – Isotermas para o tempo de 9600 segundos (fonte de calor externa).

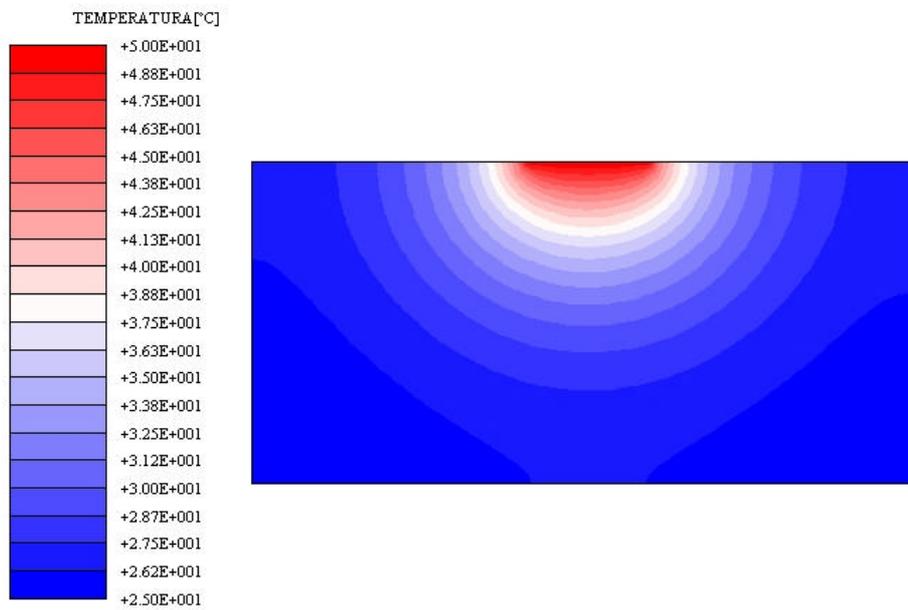


Figura 26 – Isotermas para o tempo de 19200 segundos (fonte de calor externa).

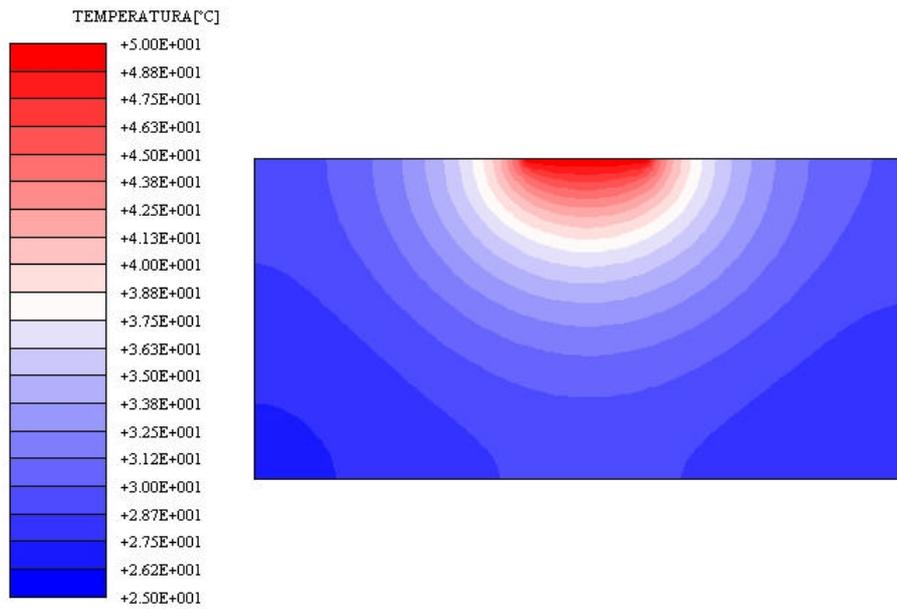


Figura 27 – Isotermas para o tempo de 38400 segundos (fonte de calor externa).

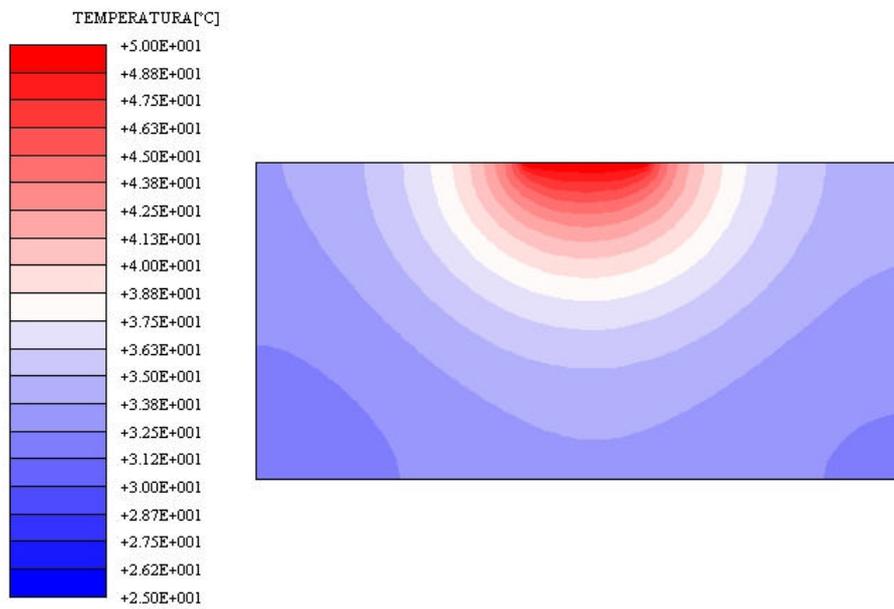


Figura 28 – Isotermas para o tempo de 76800 segundos (fonte de calor externa).

As figuras a seguir mostram as variações da umidade, com as isoumidades em quatro diferentes tempos da simulação.

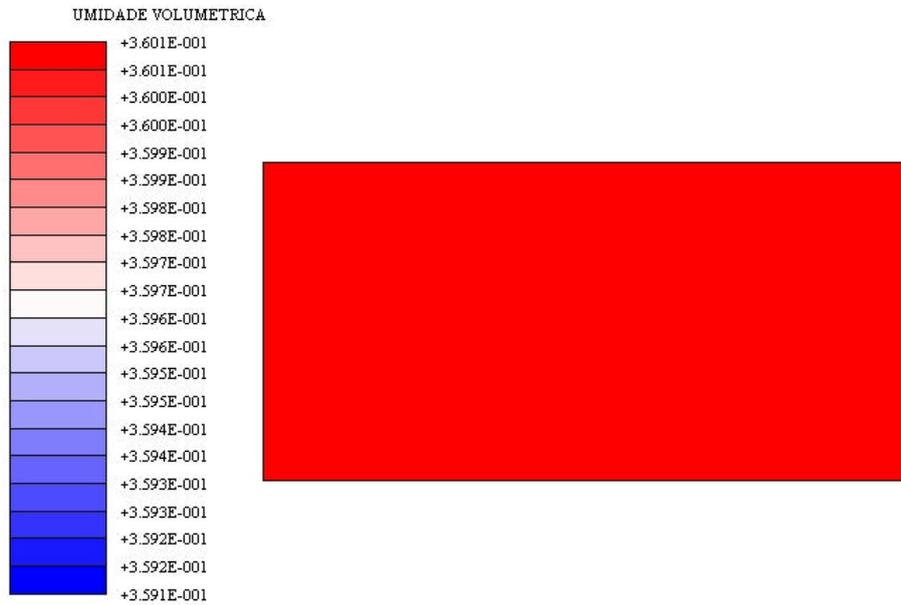


Figura 29 – Isoumidades para o instante inicial (fonte de calor externa).

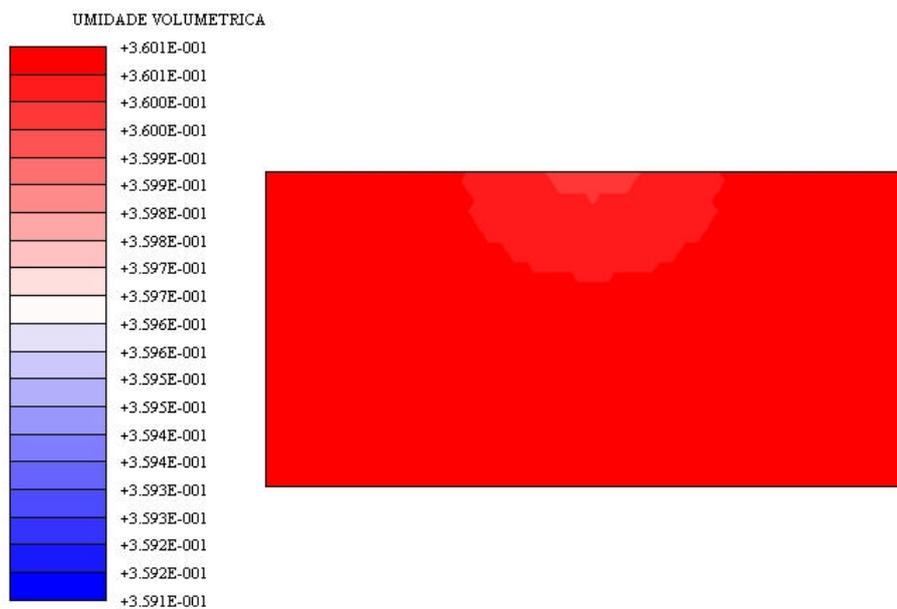


Figura 30 – Isoumidades para o tempo de 19200 segundos (fonte de calor externa).

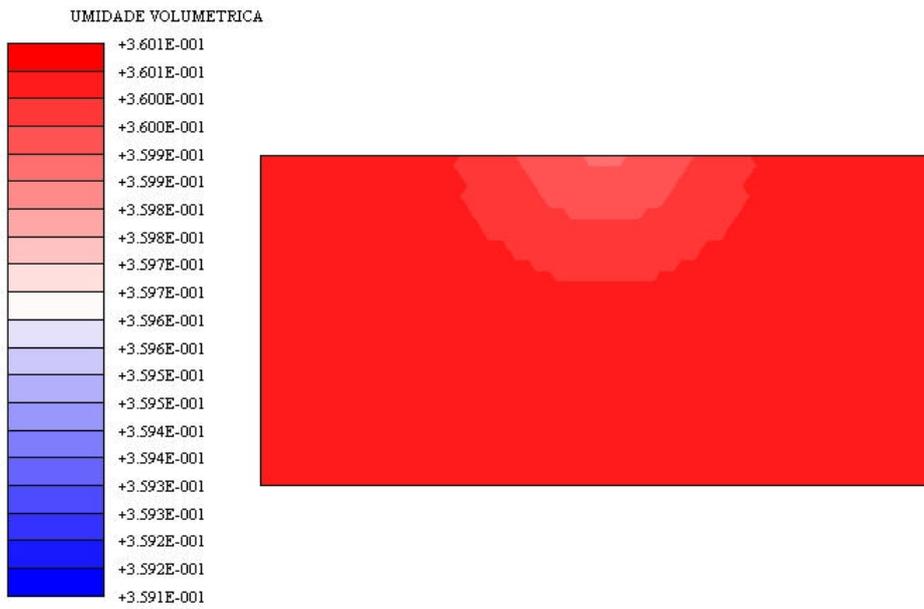


Figura 31 – Isoumidades para o tempo de 38400 segundos (fonte de calor externa).

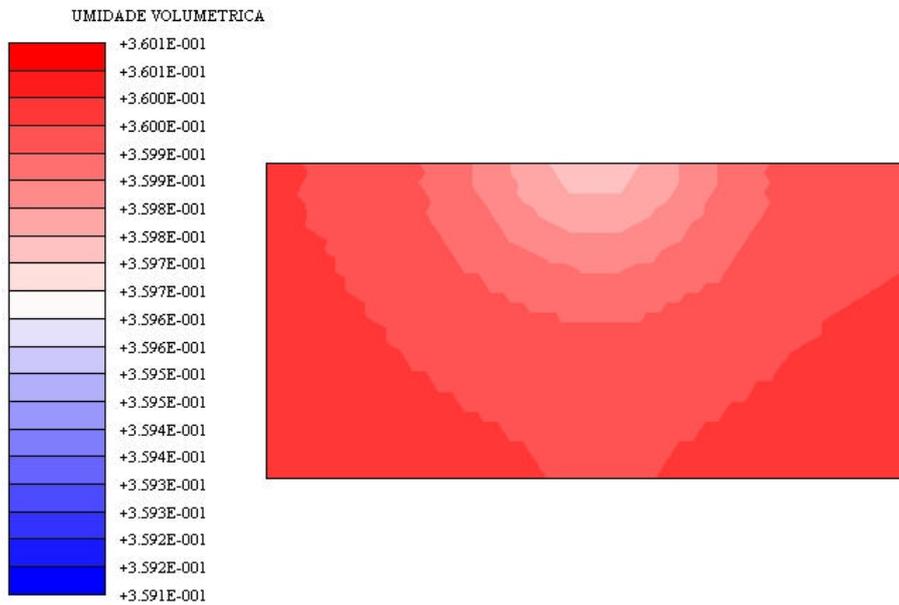


Figura 32 – Isoumidades para o tempo de 76800 segundos (fonte de calor externa).

### 4.2.3

#### Simulação de uma cobertura de resíduos sólidos

A simulação de coberturas de resíduos sólidos constitui outra aplicação importante do programa UNSATCHEM-2D (*Simunek e Suarez, 1993*) modificado. Como citado acima, infiltrações de água no resíduo podem acarretar sérios danos ao meio ambiente, como a contaminação das águas subterrâneas por metais pesados. O objetivo desta simulação é garantir um fluxo zero na camada de resíduo, simulando condições atmosféricas que levam a cobertura a processos de umedecimento e secagem de acordo com as condições climáticas do ambiente.

Para isso, são propostas duas configurações de cobertura. A primeira utiliza uma camada de argila entre a cobertura de solo orgânico e o material ou resíduo a ser protegido, simulado pela areia. A segunda configuração não utiliza a camada de argila na sua configuração. Ambas são apenas ilustrativas, e utilizam dados climáticos de precipitação verificando diferenças entre as duas configurações de cobertura.

Na primeira simulação, com a presença da camada de argila, denominada “cobertura A”, utilizou-se uma malha bidimensional com 3194 nós e 6116 elementos triangulares, com dimensões apresentadas na Figura 33. Na mesma figura pode-se verificar a inserção da argila entre a cobertura e o resíduo pelo material de cor vermelha. O meio poroso na região do fluxo encontra-se não-saturado com carga de pressão inicial igual a -250 cm e uma temperatura de 25 °C, em todos os pontos da malha.

A “cobertura B”, que não tem a camada de argila, é formada por uma malha bidimensional com 2912 nós e 5557 elementos triangulares, com dimensões apresentadas na Figura 34. O meio poroso na região do fluxo, idêntico ao da “cobertura A”, encontra-se não-saturado com carga de pressão inicial igual a -250 cm e uma temperatura de 25 °C, em todos os pontos da malha.

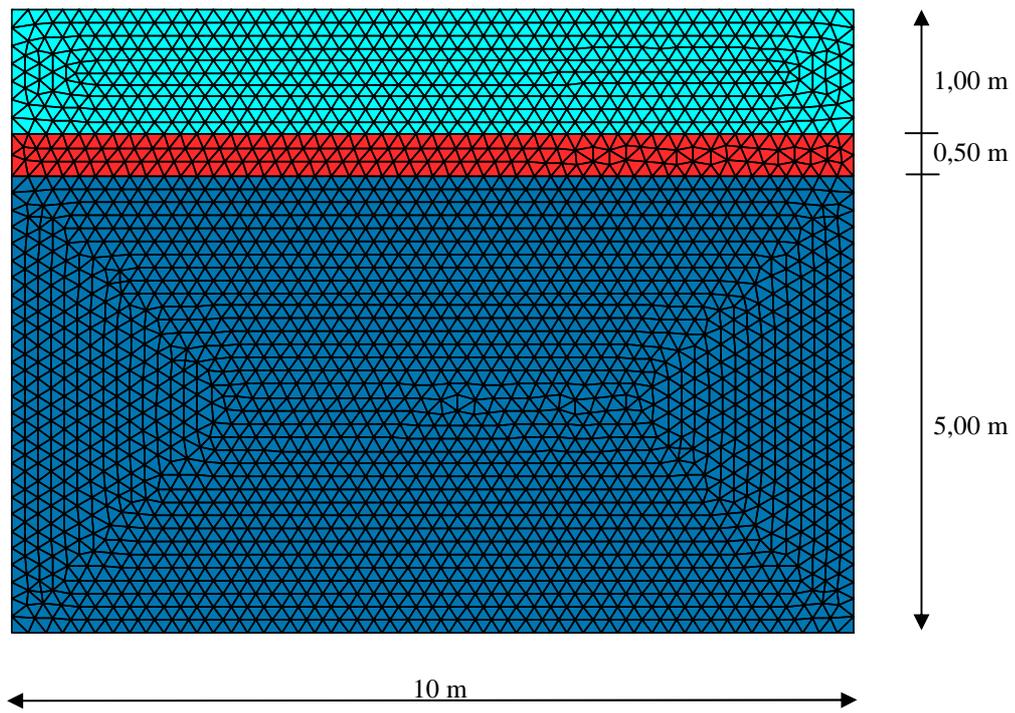


Figura 33 – Malha de elementos finitos representando a “cobertura A”.

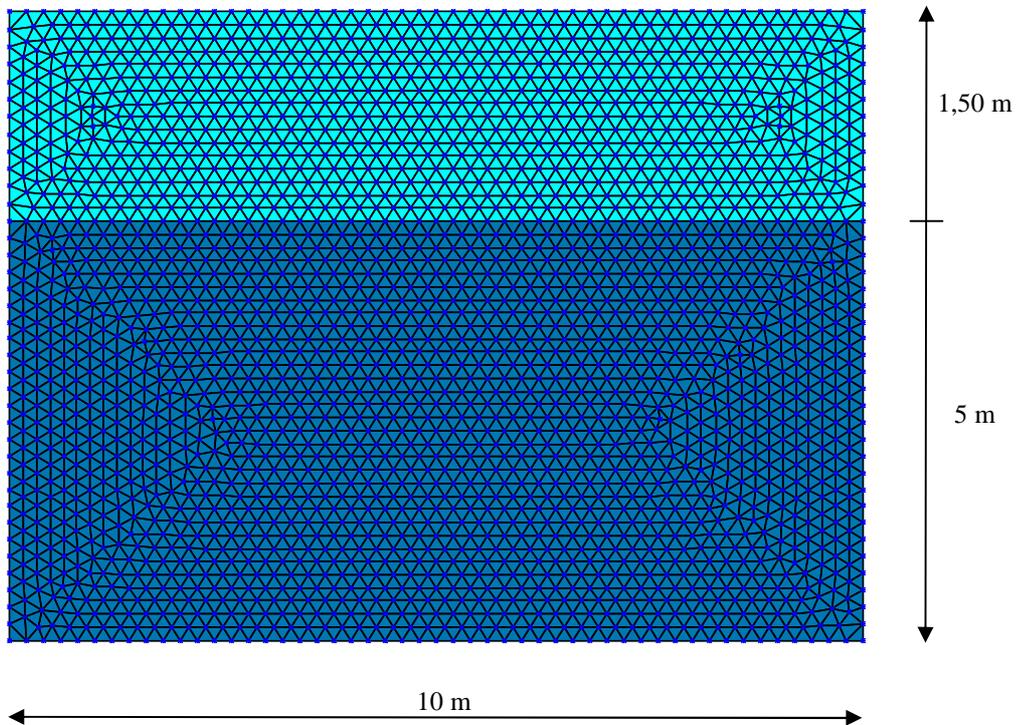


Figura 34 – Malha de elementos finitos representando a “cobertura B”.

Na simulação utilizou-se parâmetros hidráulicos (van Genuchten) e térmicos dos solos a partir do banco de dados do programa HYDRUS2D (*Simunek e van Genuchten, 1999*) descritos na Tabela 8, Tabela 9, Tabela 10 e Tabela 11.

Tabela 8 – Parâmetros hidráulicos de van Genuchten (cobertura A).

Cobertura A	$\theta_s$	$\theta_r$	n	$\alpha$	$K_s$	Por <sup>5</sup>
Solo orgânico	0,43	0,078	1,56	0,036	0,000288	0,41
Argila	0,38	0,068	1,09	0,008	0,000055	0,42
Areia	0,43	0,045	2,68	0,145	0,008250	0,39

Tabela 9 - Parâmetros térmicos (cobertura A).

Parâmetros	$\theta_n$	$\theta_o$	$\lambda_L$	$\lambda_T$	b1	b2	b3	Cn	Co	Cw
Solo orgânico	0,6	1e-2	0,5	0,1	24,3	39,3	153,4	19200	25100	41800
Argila	0,6	1e-2	0,5	0,1	-19,7	-96,2	252,1	19200	25100	41800
Areia	0,6	1e-2	0,5	0,1	22,8	-240,6	490,9	19200	25100	41800

Tabela 10 – Parâmetros hidráulicos de van Genuchten (cobertura B).

Cobertura B	$\theta_s$	$\theta_r$	n	$\alpha$	$K_s$	Por <sup>5</sup>
Solo orgânico	0,43	0,078	1,56	0,036	0,000288	0,41
Areia	0,43	0,045	2,68	0,145	0,008250	0,39

Tabela 11 - Parâmetros térmicos (cobertura B).

Parâmetros	$\theta_n$	$\theta_o$	$\lambda_L$	$\lambda_T$	b1	b2	b3	Cn	Co	Cw
Solo orgânico	0,6	1e-2	0,5	0,1	24,3	39,3	153,4	19200	25100	41800
Areia	0,6	1e-2	0,5	0,1	22,8	-240,6	490,9	19200	25100	41800

Os dados de precipitação e evaporação são colocados de acordo com o período de simulação estabelecido, não existindo um período mínimo ou máximo para a entrada dos dados climáticos. O programa possibilita também a utilização de dados que simulem a absorção de água pela cobertura vegetal na superfície. Em ambas simulações foram utilizados tempos de 180 dias, com a inserção de dados aleatórios, meramente ilustrativos, a cada 30 dias, conforme Tabela 12.

<sup>5</sup> porosidade

As condições de contorno utilizadas em ambos os casos foram apenas condições de contorno atmosféricas na superfície com contorno impermeável nas outras extremidades. A utilização de condições de contorno atmosféricas não elimina o uso de quaisquer outras condições de contorno existente no programa.

Tabela 12 – Dados de precipitação utilizados nas simulações de cobertura de resíduos.

Tempos (dias)	Precipitação (cm/dia)
30	0,1
60	0,1

A condição de contorno de evaporação imposta é de acordo com a eq.3.32, onde o ciclo de temperatura é descrito por uma onda senoidal (Figura 35). Pode-se verificar no gráfico da Figura 35, que mostra a variação da temperatura ao longo de dois dias completando dois ciclos, a incidência da maior temperatura por volta do meio-dia.

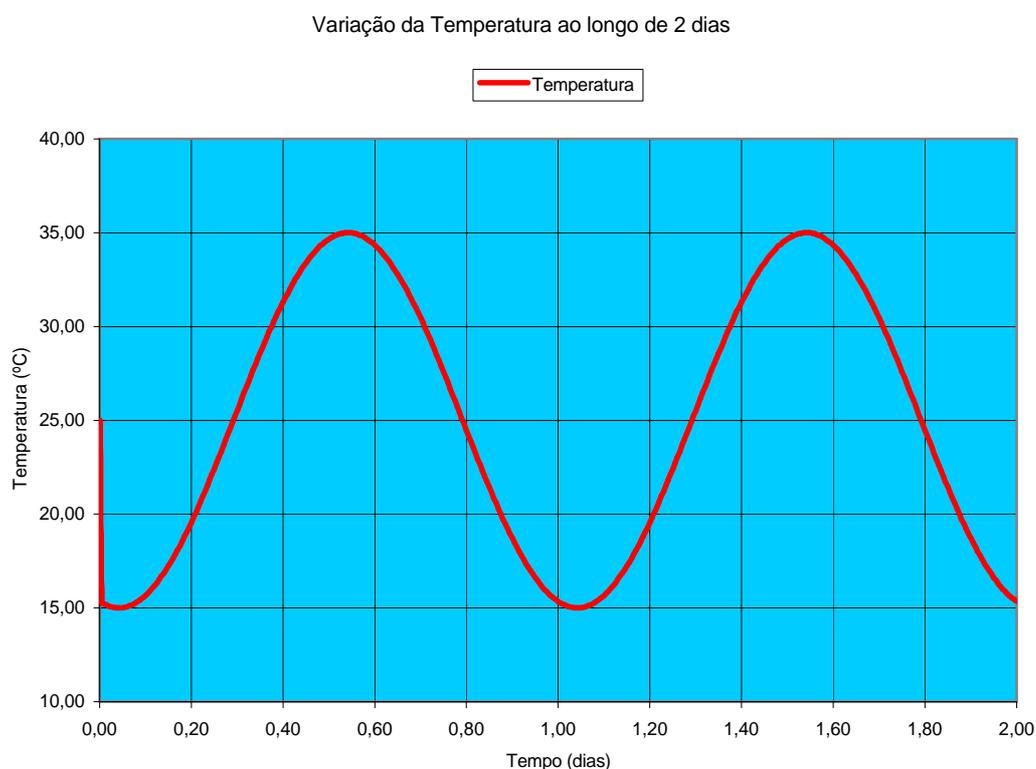


Figura 35 – Variação da temperatura ao longo de dois dias.

As Figuras 36, 37 e 38 demonstram a variação da carga de pressão, umidade volumétrica e temperatura respectivamente, em um ponto localizado 50 cm abaixo da superfície da cobertura. Ao final da simulação pode-se verificar que a cobertura A permitiu um maior avanço da frente de saturação, apesar da existência da camada de argila, porém para verificar qual cobertura vai garantir fluxo zero à camada de areia é necessário um tempo de simulação maior. Nota-se ainda que as condições de contorno atmosféricas impostas causam um fluxo evaporativo a partir de 60 dias, onde não existem condições de precipitação impostas. Na Figura 38, o ciclo da temperatura atmosférica é comparado ao ciclo da temperatura no interior do meio poroso, verificando a diferença entre os ciclos devido a condutividade térmica dos materiais constitutivos das camadas.

O exemplo desta simulação é meramente ilustrativo, sendo necessária a simulação de casos reais com seus respectivos parâmetros hidráulicos e térmicos para a verificação das condições de contorno atmosféricas. Uma alternativa é a utilização de diversos tipos de solos com diferentes coeficientes de permeabilidade na camada intermediária.

A Figura 39 apresenta as isoumidades para três diferentes tempos de simulação da cobertura A. No instante inicial, onde os materiais apresentam suas umidades iniciais calculadas a partir da carga de pressão inicial. Após 90 dias de simulação, onde já houve um avanço da frente de saturação (precipitação) e está ocorrendo um fluxo evaporativo e após 180 dias de simulação, onde o fluxo evaporativo equalizou a umidade na camada de solo orgânico e em um tempo de simulação maior continua a evaporação.

Na Figura 40 estão demonstradas as isoumidades da cobertura B em três diferentes tempos igualmente à cobertura A. No primeiro instante os materiais estão com suas umidades iniciais. Após 90 dias à frente de saturação percorreu a camada de solo orgânico conforme condições de contorno atmosféricas com valores de precipitação (Tabela 12) e em seguida inicia o fluxo evaporativo. Em 180 dias de simulação, o fluxo evaporativo continua ocorrendo conforme as isoumidades correspondentes.

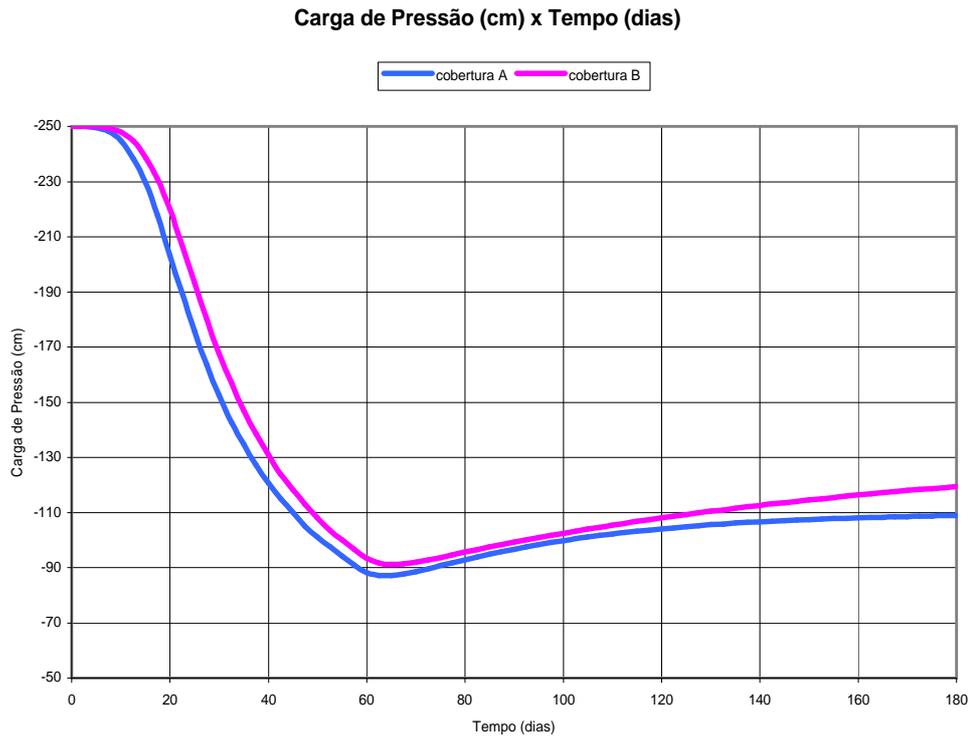


Figura 36 – Variação da carga de pressão ao longo do tempo para as duas coberturas.

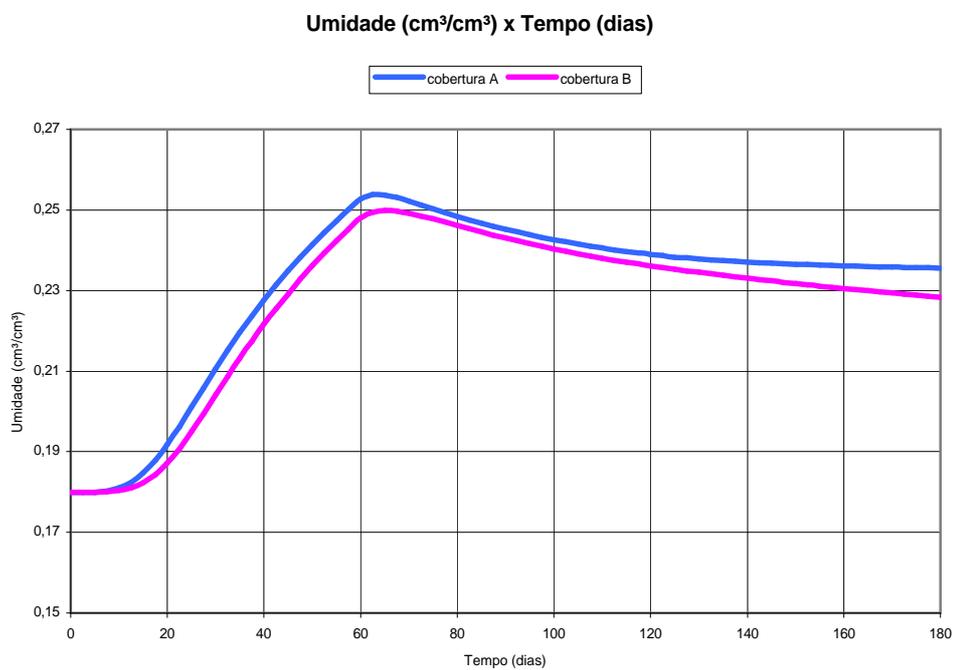


Figura 37 – Variação da umidade ao longo do tempo para as duas coberturas.

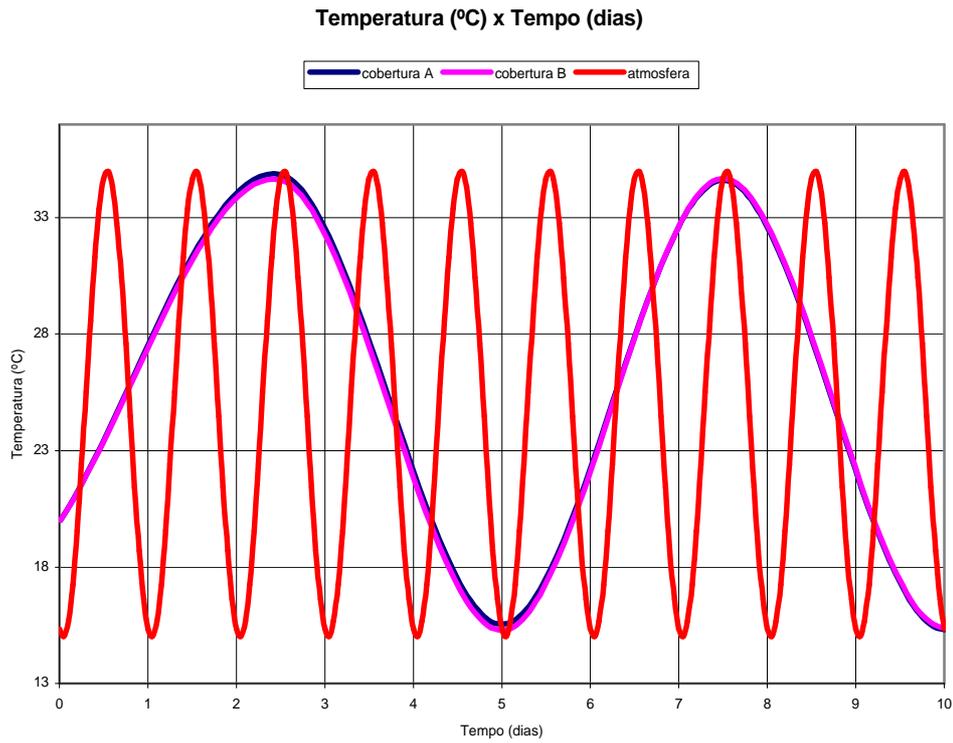


Figura 38 – Variação da temperatura ao longo do tempo para as duas coberturas.

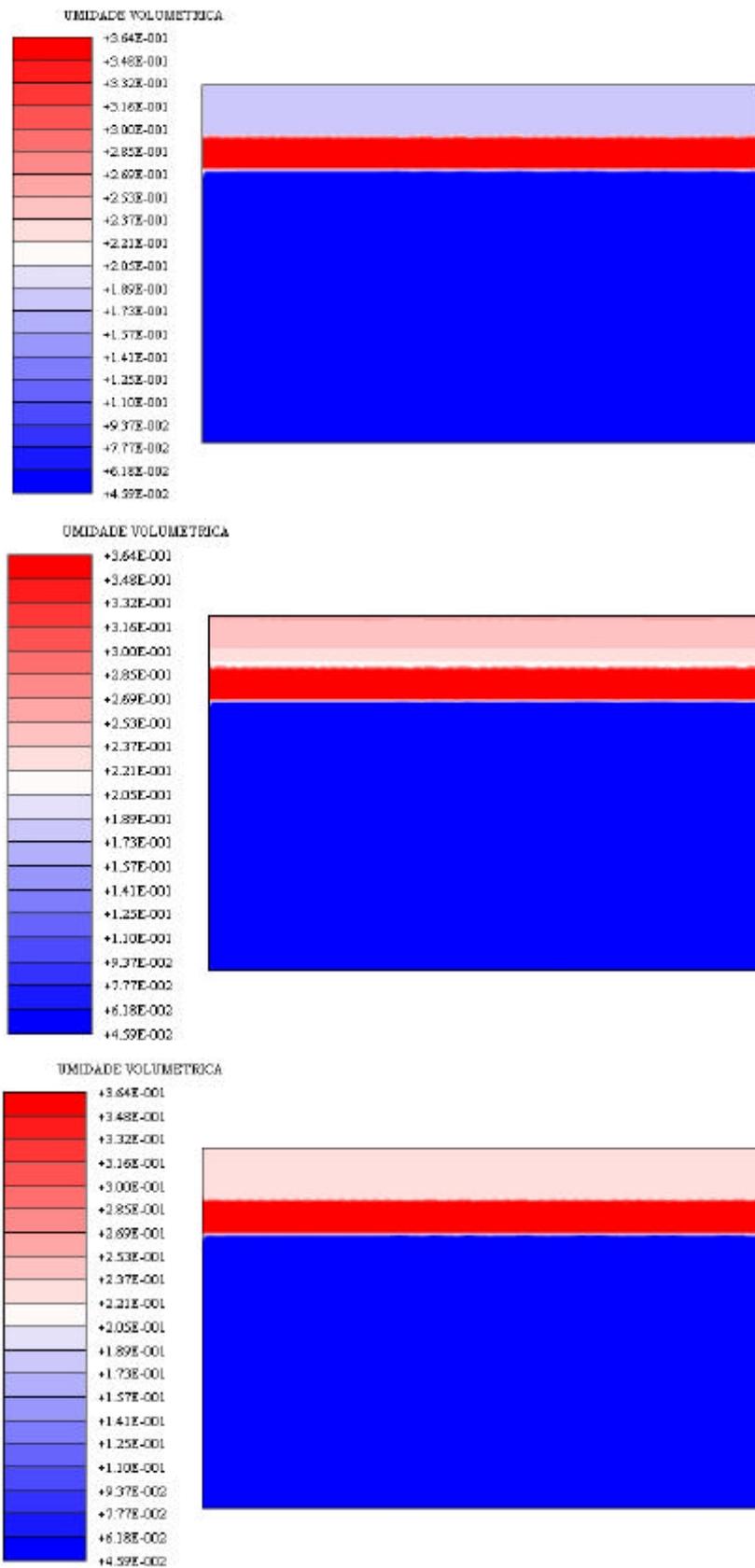


Figura 39 – Isohumidades da simulação da cobertura A nos tempos de 0, 90 e 180 dias.

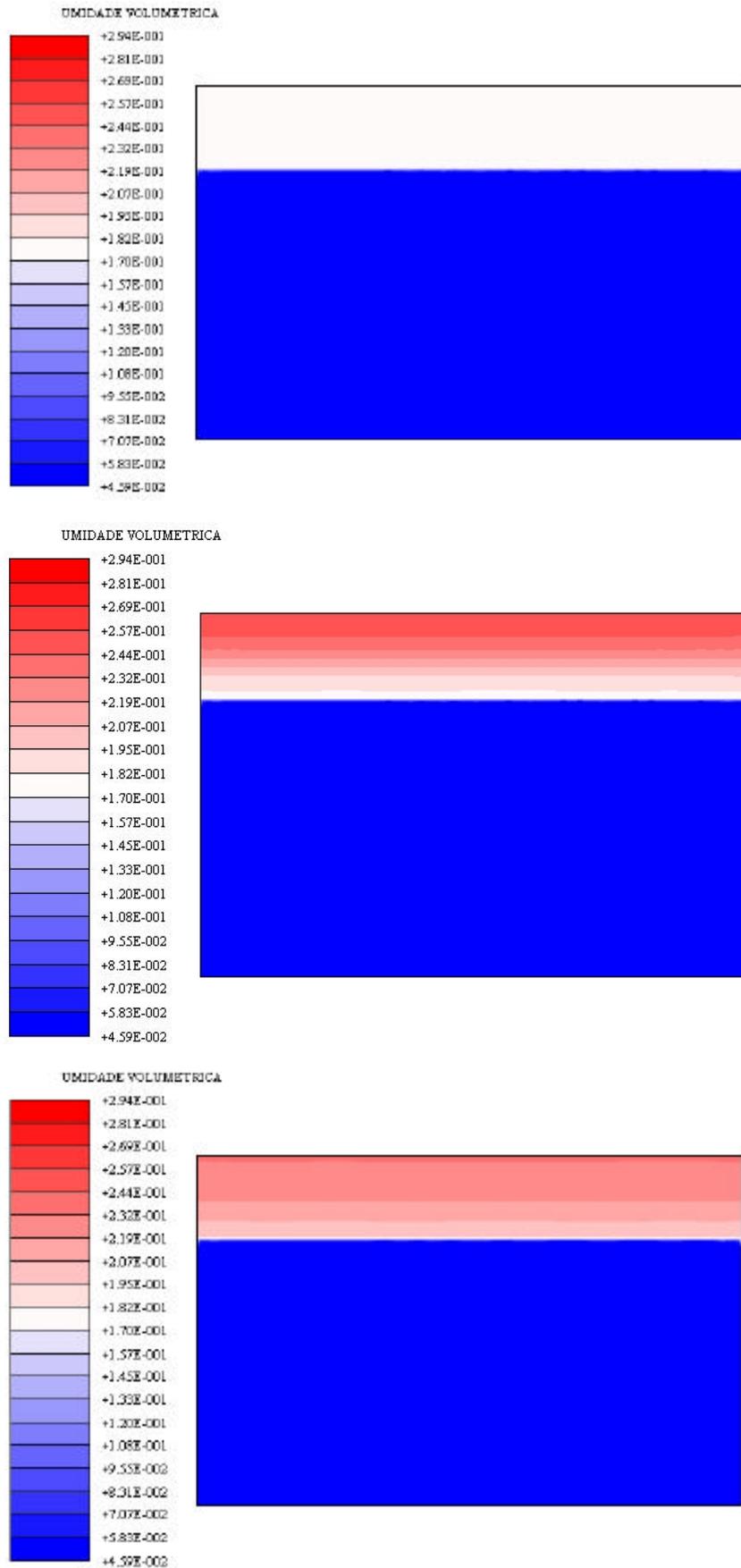


Figura 40 – Isohumidades da simulação da cobertura B nos tempos de 0, 90 e 180 dias.

## 5

### Conclusões

Este estudo tem como principal objetivo o desenvolvimento do módulo termo-hidráulico do programa UNSATCHEM-2D modificado, com a validação das implementações realizadas no programa.

Considerando a pouca literatura existente no assunto, os resultados numéricos mostraram-se bastante satisfatórios em comparação com os resultados experimentais, visto que mesmo os resultados experimentais, segundo o autor, necessitam de um ajuste melhor. As diferenças existentes entre os modelos numérico e experimental devem-se ao fato do modelo escolhido para as propriedades hidráulicas da curva característica do solo. O modelo experimental utiliza uma solução empírica a partir do modelo de Brooks e Corey (1966), enquanto que o modelo numérico utilizado no programa baseia-se em uma modificação do modelo de van Genuchten (1980). É válido lembrar que foi feita uma conversão dos parâmetros, porém por se tratar de dados empíricos não houve uma convergência total entre os modelos.

Verificou-se a influência de gradientes de temperatura no fluxo de umidade, fenômeno que foi demonstrado através da inserção de fontes de calor interna e externa no solo. Para o caso da fonte de calor interna, notou-se a migração de umidade em direção a fonte, demonstrando que não se podem negligenciar os efeitos da temperatura em processos de transporte de umidade. Notaram-se também os efeitos da difusividade térmica na fase líquida e vapor, variando significativamente com parâmetros intrínsecos ao solo como massa específica do líquido e do vapor d'água, além da carga de pressão e temperatura. No caso da fonte de calor externa, pode-se verificar o fluxo em direção a superfície demonstrando o processo de desorção térmica.

O exemplo que engloba a verificação de fluxo em coberturas de resíduos demonstrou que o programa pode ser utilizado na área de resíduos industriais e de

mineração em conjunto com o módulo químico, pois pode simular longos períodos de condições atmosféricas, além de permitir a inserção de dados climáticos em pequenos períodos.

Finalizando, o módulo hidro-térmico mostrou-se adequado a suas expectativas de utilização podendo demonstrar de forma satisfatória a influência dos gradientes de carga de pressão e temperatura atuando juntamente.

Como complemento para o modelo hidro-térmico implementado no programa sugere-se:

- A implementação do modelo em três dimensões abrangendo de forma mais conclusiva a maioria dos problemas envolvendo calor.
- A maior utilização do programa em problemas de resíduos sólidos, com alterações no balanço de energia, direcionando o programa aos propósitos desta área.
- A avaliação através do programa de parâmetros térmicos de solos brasileiros, com o estudo do processo de umidecimento e secagem de encostas.
- O acoplamento das reações químicas envolvendo troca de calor, realizadas pelo módulo químico, com o módulo térmico.
- A verificação das implementações termo-hidráulicas com outros modelos numéricos.
- Desacoplamento da fase vapor e da fase líquida no fluxo.

## 6

### Referências bibliográficas

BACH, L.B. **Soil moisture movement in response to temperature gradients**. Colorado, USA, 1989. 156p. Monografia (Tese de Ph.D.) – Colorado State University, Fort Collins.

BROOKS, R.H.; COREY, A.T. **Properties of porous media affecting fluid flow**. J. Irrig. And Drain. Div., ASCE, v.92, p. 61-88, 1966.

BRUIN, S.; LUYBEN, K.Ch.A.M. **Drying of food materials: a review of recent developments**. In: Advances in drying. v.1. Washington, D.C.: Hemisphere, p. 155-215, 1980.

CARY, J.W.; TAYLOR, S.A. **The interaction of the simultaneous diffusion of heat and water vapor**. Soil Sci. Soc. Am., v.26, p. 413-416, 1962.

CELIA, M.A.; BOUOUTAS, R.L.; ZARBA, R.L. **A general mass-conservative numerical solution for the unsaturated flow equation**. Water Resour. Res., v.26, n.7, p. 1483-1496, 1990.

CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO TECNOLÓGICA DO PARANÁ. Departamento Acadêmico de Mecânica. **Introdução ao método dos elementos finitos: fundamentos teóricos**. Paraná, 2000.

CHILDS, E.C.; COLLIS-GEORGE, N. **The permeability of porous materials**. Roy. Soc., v.201A, p. 392-405, 1950.

DARCY, H. **Les fontaines publiques de la Ville de Dijon**. Dalmont, Paris, 1856.

DE MARSILY, G. **Quantitative hydrogeology**. Academic Press, 1986.

DE VRIES, D. A. **Simultaneous transfer of heat and moisture in porous media**. Trans. Am. Geophys. Union, v.39, n.5, p. 909-916, out. 1958.

DORSEY, N.E. **Properties of ordinary water substance**. New York: Reinhold, 1940. 673p.

EDLEFSEN, N.E.; ANDERSON, A.B.C. **Thermodynamics of soil moisture**. Hilgardia, 1943.

FERREIRA, L.S.D. **Transferência de calor e migração de umidade em solos que envolvem cabos de potência aterrados.** Florianópolis, 1993. 187p. Monografia (Tese de Doutorado) – Universidade Federal de Santa Catarina.

GROENEVELT, P.H; KAY, B.D. **On the interaction of water and heat transport in frozen and unfrozen soils: II. The liquid phase.** Soil Sci. Soc. Am. J., v.38, p. 400-404, 1974.

HAMPTON, D. **Coupled heat and fluid flow in saturated-unsaturated compressible porous media.** Colorado, USA, 1989. 293p. Monografia (Tese de Ph.D.) – Colorado State University, Fort Collins.

KHALILI, N.; LORET, B. **A fully coupled termo-hydro-mechanical model for the behaviour of unsaturated porous medium.** Unsaturated Soils, p. 83-88, 2002.

KIRKHAM, D.; POWERS, W.L. **Advanced soil physics.** New York: John Wiley & Sons, 1972.

MILLY, P.C.D. **Moisture and heat transport in hysteretic, inhomogeneous porous media: A matric head-based formulation and a numerical model.** Water Resour. Res., v.18, n.3, p. 489-498, jun. 1982.

MILLY, P.C.D.; EAGLESON, P.S. **The coupled transport of water and heat in a vertical soil column under atmospheric excitation.** Department of Civil Engineering, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, Massachusetts, USA. jun. 1980. 226p. Report n. 258.

MUALEM, Y. **A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media.** Water Resour. Res., v.12, n.3, p. 513-522, 1976.

NEUMAN, S.P. **Saturated-unsaturated seepage by finite elements.** J. Hydraul. Div., ASCE, v.99 (HY12), p. 2233-2250, 1973.

NOBRE, R.C.M.; THOMSON, N.R. **The effects of transient temperature gradients on soil moisture dynamics.** Journal of Hydrology, n.152, p. 57-101, 1993.

PENMAN, H.L. **Gas and vapor movements in the soil: I. The diffusion of vapors through porous solids; II. The diffusion of carbon dioxide through porous solids.** Journal of Agric. Sci., v.30, p. 437-462; 570-581, 1940.

PHILIP, J.R.; DE VRIES, D.A. **Moisture movement in porous materials under temperature gradients.** Trans. Am. Geophys. Union, v.38, n.2, p. 222-232, 1957.

RICHARDS, L.A. **Capillary conduction of liquids through porous mediums**, Physics, 1931.

ROLLINS, R.L.; SPANGLER, M.G.; DON KIRKHAM. **Movement of soil moisture under a thermal gradient**. Highway Research Board Proceeding. 1954. p. 492-508. Report n. 33.

RUTQVIST, J.; WU, Y.-S.; TSANG, C.-F., BODVARSSON, G. **A modeling approach for analysis of coupled multiphase fluid flow, heat transfer, and deformation in fractured porous rock**. International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences, n.39, p. 429-442, 2002.

SIMUNEK, J.; SUAREZ, D.L. **UNSATCHEM-2D code for simulating two-dimensional variably saturated water flow, heat transport, carbon dioxide production and transport, and multicomponent solute transport with major ion equilibrium and kinetic chemistry**. U.S. Salinity Laboratory, Riverside, California, USA. out. 1993. 218p. Relatório de Pesquisa n.128.

SOPHOCLEOUS, M. **Analysis of water and heat flow in unsaturated-saturated porous media**. Water Resour. Res., v.15, n.5, p. 1195-1206, 1979.

TAYLOR, S.A.; CARY, J.W. **Linear equations for the simultaneous flow of matter and energy in a continuous soil system**. Soil Sci. Soc. Am., v.28, p. 167-172, 1964.

THOMAS, H.R.; ALONSO, E.E.; GENS, A. **Modelling thermo/hydraulic/mechanical processes in the containment of nuclear waste**. Unsaturated Soils, p. 1135-1141, 1995.

THOMAS, H.R.; FERGUSON, W.J. **A fully coupled heat and mass transfer model incorporating contaminant gas transfer in an unsaturated porous medium**. Computer and Geotechnics, 24, p. 65-87, 1999.

THOMAS, H.R.; SANSOM, M.R. **Fully Coupled Analysis of Heat, Moisture, and Air Transfer in Unsaturated Soil**. Journal of Engineering Mechanics, v.121, n. 3, 392-405, 1995.

VAN BAVEL, C.H.M. **Gaseous diffusion and porosity in porous media**. Soil Sci., v.87, p. 91-104, 1952.

VAN GENUCHTEN, M.Th. **A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils**. Soil Sci. Soc. Am. J., v.44, p. 892-898, 1980.

WILSON, G.W.; FREDLUND, D.G.; BARBOUR, S.L. **Coupled Soil-Atmosphere Modelling for Soil Evaporation**. Canadian Geotechnical Journal, 31-2, p. 151-161, 1994.

# Livros Grátis

( <http://www.livrosgratis.com.br> )

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)  
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)  
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)  
[Baixar livros de Matemática](#)  
[Baixar livros de Medicina](#)  
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)  
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)  
[Baixar livros de Meteorologia](#)  
[Baixar Monografias e TCC](#)  
[Baixar livros Multidisciplinar](#)  
[Baixar livros de Música](#)  
[Baixar livros de Psicologia](#)  
[Baixar livros de Química](#)  
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)  
[Baixar livros de Serviço Social](#)  
[Baixar livros de Sociologia](#)  
[Baixar livros de Teologia](#)  
[Baixar livros de Trabalho](#)  
[Baixar livros de Turismo](#)