

Laboratório Nacional de Computação Científica
Programa de Pós Graduação em Modelagem Computacional

**Um modelo iterativo em elementos finitos
estabilizados para solução de escoamento
acoplado: canal com superfície livre e meio
poroso subsuperficial**

Por

Flávio Pietrobon Costa

PETRÓPOLIS, RJ - BRASIL

AGOSTO DE 2009

Livros Grátis

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

Milhares de livros grátis para download.

UM MODELO ITERATIVO EM ELEMENTOS FINITOS
ESTABILIZADOS PARA SOLUÇÃO DE ESCOAMENTO
ACOPLADO: CANAL COM SUPERFÍCIE LIVRE E MEIO
POROSO SUBSUPERFICIAL

Flávio Pietrobon Costa

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO LABORATÓRIO NACIONAL
DE COMPUTAÇÃO CIENTÍFICA COMO PARTE DOS REQUISITOS
NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR D.SC. EM
MODELAGEM COMPUTACIONAL

Aprovada por:

Prof. Augusto César Noronha Rodrigues Galeão, D.Sc.

Prof. Abimael Fernando Dourado Loula, D.Sc.

Prof. José Luis Drummond Alves, D.Sc.

Prof. Lucia Catabriga, D.Sc.

Prof. Antônio José da Silva Neto, Ph.D.

PETRÓPOLIS, RJ - BRASIL

AGOSTO DE 2009

PIETROBON COSTA, FLÁVIO

MXXX Um modelo iterativo em elementos finitos estabilizados para solução de escoamento acoplado: canal com superfície livre e meio poroso subsuperficial / Flávio Pietrobon Costa. Petrópolis, RJ. : LNCC/MCT, 2009.

xx, yy p. : il.24 cm

Orientadore(s):Prof. Augusto César Noronha Rodrigues Galeão, D.Sc. e Prof. Luiz Bevilacqua, Dr.Ing.

Tese (D.Sc.) – Laboratório Nacional de Computação Científica – LNCC/MCT, 2009.

1. ASSUNTO , 2. palavra chave , 3. palavra chave, 4. palavra chave

I. LNCC/MCT II. Título

CDD XXX.XXX

de Guilherme-William de Ockham

”As entidades não devem ser multiplicadas além do necessário, a natureza é por si econômica.”, em **Ordinatio**, ”Toda a ciência se refere a um complexo”, assim, de todas as explicações válidas e possíveis para um fenômeno a mais apropriada é a mais simples...

Dedicatória

Aos ancestrais, desbravadores e fortes.

A minha amada cúmplice, Rosangela,
A meu maior amigo, meu filho incentivador,

Pedro,

A meu grande amigo e pai, Orris Schuler
Costa (in memoriam), que saudade !!! Sei

que você está junto nessa vitória...

A minha mãe, amiga de vidas, Ana Lúcia.

Aos que "tomaram" nas batalhas que vivi,
Aos que nos sucederão: sejam firmes e
decididos,
"Viver é lutar.
A vida é combate..."

(Canção do Tamoio, Gonçalves Dias)

À minha Companheira e Cúmplice de vidas
e ao meu Filho, obrigado pela cumplicidade,
imensa Solidariedade, vivência conjunta,
extremo apoio sempre, paciência com
minhas ausências e impossibilidades... sem
você meu eu estaria perdido nesta esfera...

Ao meu Pai, Orris, e minha Mãe, Ana Lúcia,
obrigado pelas minhas experiências na
infância, pelo apoio em meus 1^{os} anos nesta
vida, pela dedicação em minha formação e
pela compreensão com minha necessidade de
liberdade... sua admiração e tolerância me
permitiram ser quem sou...

Ao meu 2^o Pai (formalmente Sogro), José
Machado, e à minha 2^a Mãe (formalmente
Sogra), Vilma, pela dedicação com a família,
pelo seu apoio e palavras de incentivo, pela
sua energia sempre incentivadora, e seu
exemplo...

Aos meus avós, Antônio Costa, Olindina
Schuler, Angelo Pietrobon, Dídima Costa
Pietrobon, pelos ensinamentos, mesmo de
longe, e pela História...

Agradecimentos

Agradecer a tantos(as) que com sua amizade, companheirismo, solidariedade, dedicação profissional, apoio e/ou cumplicidade que nos empenharam atenção é um risco, de que possamos pecar por não reconhecer à altura o tanto que alguns dedicaram, para que na elaboração deste trabalho, tenha sido alcançada a presente etapa. Muitos me apoiaram, especialmente nestes últimos 6 anos, e ao longo destes quase 45 anos de estudos e análises da realidade...

Ao Altíssimo, Energia Suprema, Eterno Misericordioso (com nossas falhas), Pai Universal... Obrigado !!! Por cada momento, cada instante de todas as vidas (materiais e imateriais), por cada fração de Energia a que tive a dádiva de receber. Por me conduzir (em seus "braços") sempre que precisei, ainda que nem sempre percebendo isso no mesmo momento. Que eu e Minha Essência possamos alcançar a dignidade de corresponder em mérito a tanto que recebemos...

Aos meus orientadores, prof. Augusto César N. R. Galeão, e prof. Luiz Bevilacqua, pelo apoio, incentivo, conhecimentos e exemplos de vida e dedicação à ciência. Em especial ao prof. Galeão, muito mais que um farol e condutor nesta jornada, um verdadeiro amigo; em diversos momentos, percebendo minhas angústias, soube ouvir meus desabafos e, em seu modo direto de ser, me ajudou a superar diversas dificuldades...ao mesmo tempo que orientador firme, um leal companheiro nesta jornada, e exemplo de sinceridade... Ao prof. Bevilacqua, que me fez ver e acreditar...

Aos demais pesquisadores do Curso de Doutorado deste LNCC que contribuíram, com sua paciente e decidida transferência de conhecimentos, com meu aperfeiçoamento profissional e pessoal, dentro e fora de sala de aula, em especial às

professoras Sônia Monteiro, Regina Célia, Sandra Malta, e em especial aos professores Abimael Loula, José Karam Fo., Márcio Mourad, Renato Silva, Raul Feijóo, Edgardo Tarouco, Eduardo "Bidu" Garcia. Meu apreço e gratidão...

Um agradecimento especial a todos os funcionários do LNCC, efetivos e prestadores de serviço, que com sua gentileza, presteza e solidariedade, contribuem silenciosamente com a viabilidade estrutural e de serviços para o Programa de Pós-Graduação do laboratório, sempre nos "dando força", perguntado pelo andamento dos trabalhos, e disponíveis a nos apoiar. Obrigado.

Aos amigos(as) e companheiros(as) de jornada no Curso, de Petrópolis, e funcionários do LNCC: Honório Kambeche, um "irmão de superações" que descobri nessa vida, Jairo Rocha, Marcos Alcoforado, Daniel Fernandes, Demerson Nunes, Sidarta, Raquel, Júlio, Maicon Correa, Leandro Gazonni, Arthur, Ana Nery, Ana Paula, Angela, Márcia Regina, Rogério, e a todos(as) demais... por tudo que dividimos, e pelo que aprendi...

Aos amigos que ao longo destes anos me incentivaram, dividiram meus momentos, alegrias e tristezas, e foram cúmplices no caminho, só pelo prazer de dividir estes momentos: Rosane Leite, minha "irmã adotiva", André e Gerson, Nilton Silva, meu "irmão de visões da vida", Gilberto Andrade, meu "irmão de história", Pedro Paulo, Isabel e Romaneli, Lúcia Zugaib, Fermin Vellasco e família, Anderson e Agnes, Gesil Segundo, Gabriela Reys, Edson, Afonso e Rose, Lícia Queiroz e Olímpio, Liana e Fernando, Ana Paula e Marcelo...e tantos outros...

Aos demais professores da Universidade Estadual de Santa Cruz, UESC, que participaram com seu incentivo e apoio desta jornada, em especial aos professores(as): Max Menezes, Neurivaldo Guzzi, Evandro Freire, João Attie...e aos colegas da área de engenharia da UESC pela tolerância com minha disponibilidade restrita.

Aos meus professores do passado, por tudo que me ensinaram e contribuíram, alguns com seu exemplo e dedicação, outros com seu incentivo e apoio me fazendo ver, ponderar e agir: Ernani Dias, Ronaldo Batista, Dymas Joseph, José Alves,

Luiz Taborda, Sérgio Villaça, Álvaro Coutinho, Henrique Longo, Oswaldo, Humberto Soriano, Webe Mansur, Fernando Barata, Rubin Aquino, José Luis Cardoso...

Àqueles(as) para os quais porventura eu possa ter cometido injusto lapso de não citação, quando merecido, lembrem-se que os mantenho e sou grato à suas contribuições nos meus sentimentos e no fruto de minha formação nos diversos níveis de educação e como ente humano.

Resumo da Tese apresentada ao LNCC/MCT como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências (D.Sc.)

**UM MODELO ITERATIVO EM ELEMENTOS FINITOS
ESTABILIZADOS PARA SOLUÇÃO DE ESCOAMENTO
ACOPLADO: CANAL COM SUPERFÍCIE LIVRE E MEIO
POROSO SUBSUPERFICIAL**

Flávio Pietrobon Costa

Agosto, 2009

Orientador(es): Prof. Augusto César Noronha Rodrigues Galeão, D.Sc.

Prof. Luiz Bevilacqua, Dr.Ing.

Escoamento hídrico ambiental, em meios superficiais e subsuperficiais acoplados, é típico de sistemas de bacias hidrográficas. Neste problema sazonal, o fluxo varia de direção do canal fluvial para o meio poroso, e vice-versa, no tempo. Nesta situação de alternância de direção de fluxo e de acoplamento dos meios de escoamento, poluição e contaminantes podem ser transportados pela água. Lidar com este problema requer o desenvolvimento de um modelo computacional realista para adequadamente simular o escoamento entre estes dois meios e através da superfície de interface. Esta tese aborda esta prévia etapa de projeto. O modelo computacional é robusto em que os resultados numéricos estabilizados superam oscilações fictícias no campo de velocidade, pela abordagem do CAU, em situação de convecção dominante, e controlam os modos espúrios na pressão, pelo procedimento do FHS. O modelo é plenamente acoplado, transiente, e em elementos finitos. Soluções numéricas correspondem às da literatura. As soluções obtidas são física e numericamente consistentes. As soluções são convergentes, pela verificação da consistência da formulação numérica e pela estabilização das aproximações polinomiais. Foi verificada a conservação da massa.

Abstract of Thesis presented to LNCC/MCT as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Sciences (D.Sc.)

**COUPLING ENVIRONMENTAL WATER FLOW BETWEEN A
FREE SURFACE CHANNEL AND SUB-SUPERFICIAL POROUS
MEDIA**

Flávio Pietrobon Costa

August, 2009

Advisor(s): Prof. Augusto César Noronha Rodrigues Galeão, D.Sc.

Prof. Luiz Bevilacqua, Dr.Ing.

Flow of water in environmental surface and subsurface media is a typical river basin behavior. A seasonable phenomenon, in both domains of flow, occurs since the flow direction changes from rivers to subsurface porous medium or vice-versa, in time. In this behavior, pollution and contaminants may be carried by water. To deal with this problem a realistic computational model must be developed to adequately simulate this coupled flow in those media and across the common interface. This thesis deals with that previous step of design. The computational model is robust in the meaning that stabilized numerical results, of CAU (**C**onsistent **A**pproximate **U**pwind) formulation, overcome spurious oscillations in the velocity field, and avoid spurious modes in pressure results, with FHS (**F**ranca **H**ughes and **S**tenberg **p**rocedure). The full-coupled stabilized finite element model is able to approximate convective dominant transient surface/subsurface flows. Numeric results corresponds to those of the literature. Developed examples are physically and numerically consistent. Convergence of the numeric solutions are assured by consistency in numeric formulation and by stabilizations of polynomial approximations. Mass conservation was assured.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Motivação	1
1.2	Estado da arte: revisão bibliográfica	6
1.3	Caracterização comparativa dos modelos atuais	11
1.4	Considerações sobre o modelo proposto	12
1.5	Acoplamento do modelo superficial com o subsuperficial	14
1.6	Considerações ambientais	16
1.7	Estruturação da tese	19
2	Modelo Físico e Formulação Matemática	22
2.1	Apresentação do problema de escoamento acoplado	22
2.2	Modelo conceitual - físico	22
2.3	Forma forte das equações de conservação e balanço	27
2.3.1	Escoamento superficial	28
2.3.2	Percolação em meio poroso	29
2.4	Formulação contínua do modelo de escoamento	31
2.4.1	Escoamento com superfície livre	32
2.4.2	Percolação em meio poroso	36
2.4.3	Condições de interface	38
2.4.4	Equacionamento do modelo matemático	39
3	Formulação Discreta do Modelo Acoplado	41

3.1	Formulação fraca das equações	41
3.2	Recuperação da velocidade darcyniana	44
3.3	Escolha dos elementos	44
3.4	Espaços de solução	46
3.5	Formulação em elementos finitos	49
3.5.1	Montagem do sistema matricial	54
3.6	Formulação de estabilização	58
3.6.1	Problema convectivo - dominante	58
3.6.2	Estabilização da pressão hidrodinâmica	67
3.7	Resultados numéricos: validação do modelo	73
3.7.1	Escoamento de Pouissouille	73
3.7.2	Percolação em meio poroso	79
3.7.3	Evolução da resposta da superfície livre	83
4	Implementação Computacional	85
4.1	Linearização de equações	85
4.2	Algoritmo computacional	88
4.3	O teste de elementos e de malha	92
4.4	Convergência	94
5	Aplicações e Comentários	99
5.1	Conservação de massa	99
5.2	Continuidade da condição de interface de pressão	102
5.3	Influência da percolação em meio poroso sobre o escoamento superficial	103
5.4	Eficiência da combinação de elementos finitos de menor ordem . . .	107
5.5	Performance computacional	110
6	Conclusões e Trabalhos Futuros	115
6.1	Conclusões	115
6.2	Trabalhos futuros: rumos da pesquisa	118

Apêndice

.1 Apêndice: Tabelas de Dados 127

Lista de Figuras

Figura

2.1	Visão esquemática: domínios superficial e sub-superficial acoplados	23
2.2	Escoamento superficial a sub-superficial não-saturado, visão longitudinal	24
3.1	Seção longitudinal do sistema acoplado	64
3.2	Evolução do perfil da velocidade do fluido superficial, escoamento acoplado, impacto do CAU, malha: 0,05 m, Δt : 0,1 seg, elementos: <i>P2P0-P1P0</i>	65
3.3	Influência da estabilização (CAU) em convecção dominante, perfil da velocidade, escoamento superficialacoplado, malha: 0,05 m, Δt : 0,1 seg, elementos: <i>P2P0-P1P0</i>	66
3.4	Pressão total, perfil não estabilizado, interpolações de Lagrange e Spline (50 pontos), malha: 0,05m	70
3.5	Perfis comparados da pressão total, com e sem estabilização, interpolação de Lagrange (40 pontos), malha: 0,05m	72
3.6	Perfil de velocidades, planar, escoamento de Pouissouille: exemplo de Beavers e Joseph	74
3.7	Soluções analítica e numérica, escoamento de Pouissouille. Soluções de Beavers e Joseph (exata e experimental), e de Correa e Loula . . .	75
3.8	Soluções analítica e numérica, problema de Pouissouille: Modelo Proposto e de Beavers e Joseph, seção mediana do canal, malha: 0,05m	76

3.9	Evolução do perfil de velocidade, convergência iterativa, malha: 0,05m	77
3.10	Recarga de aquífero: problema de Gunduz e Aral (numérico), e de Glover (analítico e experimental)	80
3.11	Soluções comparadas, analítica e numérica, P_1P_0 , malha:0,05m	82
3.12	Ondulação de baixa amplitude na superfície livre, ponto nodal final, elementos P_1P_0 , malha: 0,5m	84
4.1	Teste de malha: descrição esquemática para elementos P_1P_0 , P_2P_0 e P_2P_{1dc}	97
4.2	"Patch Test": convergência para velocidade máxima, combo P_1P_0 - P_1P_0	98
5.1	Perfis: superfície livre e leito do canal, aclave 3% canal: 3m x 1m x 1m, malha: 0,05m	101
5.2	Perfil magnificado da superfície livre, canal: 3m x 1m x 1m, malha: 0,05m	102
5.3	Convergência entre pressão total no fluido livre e função de carga hidráulica, seção final, malha: 0,05m	104
5.4	Influência do parâmetro de Beavers e Joseph: perfil de velocidade, malha: 0,05m	106
5.5	Perfis de velocidade planar, fluido livre, elementos P_1P_0 , P_2P_0 , e P_2P_{1dc} , malha: 0,05m	108
5.6	Evolução do tempo de processamento, modelos P_1P_0 - P_1P_0 , P_2P_0 - P_1P_0 , e P_2P_{1dc} - P_1P_0	113
5.7	Taxa de convergência: erro na carga hidráulica, modelos P_1P_0 - P_1P_0 e P_2P_{1dc} - P_1P_0	114

Lista de Tabelas

Tabela

5.1	Tempo de uso de CPU, combinações: P_1P_0 - P_1P_0 , P_2P_0 - P_1P_0 , P_2P_{1dc} - P_1P_0 , $\Delta t = 0,10\text{secs}$	110
1	Magnitude do perfil de velocidade, malha: 0,05m, $\Delta t = 0,10\text{ s}$	128
2	Perfis de velocidade planar, malha: 0,05m, P_1P_0 - P_1P_0 , P_2P_0 - P_1P_0 , e P_2P_{1dc} - P_1P_0 , $\Delta t = 0,10\text{ s}$	128
3	Velocidade planar, malha: 0,05m, P_1P_0 - P_1P_0 , refinamento da malha, $\Delta t = 0,10\text{ s}$	129

Capítulo 1

Introdução

1.1 Motivação

A água é substância essencial à geração e sustentação da vida baseada em carbono, como a conhecemos. Disponível sob vários estados, é encontrada em quase todos os ambientes, sendo uma das substâncias mais disponíveis no planeta (Braga *et al*, 2002). Constitui um recurso natural renovável por meio do ciclo hidrológico, ou seja, um insumo disponível na natureza. Apesar de renovável tem caráter finito, sendo as reservas de água limitadas. Sendo sua disponibilidade finita, o valor decorrente desta disponibilidade tem se elevado ao longo do tempo. A sobrevaloração do recurso água encontra dependência quanto à qualidade deste recurso e quanto às exigências de tratamento que lhe possam ser necessárias. Seu valor é atribuído pela importância para a vida, bem como uso, consumo, e produção de energia, de bens, e de mercadorias. Tal importância justifica estudos do escoamento deste fluido. A hidrodinâmica do escoamento acoplado deste fluido em uma rede de canais sobre meio poroso tem sido foco de atenção de recentes pesquisas. Sua simulação computacional com maior proximidade da física do problema real é objetivo desta tese.

O escoamento deste fluido Newtoniano, a água, entre canais de rios, o domínio superficial, e o meio subsuperficial, poroso, é parte do universo de fenômenos e aplicações relacionadas à simulação computacional em hidrodinâmica. O escoamento viscoso deste fluido, em um canal parcialmente preenchido com um meio

poroso, ocorre em alguns processos de filtração industrial (Hanspal *et al*, 2006), em processos de transporte biológico (Deng & Martinez, 2005), na análise dos efeitos de rajadas de vento (Lemos, 2005), e no uso e conservação de recursos hídricos, este último foco desta tese, exigindo o estabelecimento de modelos computacionais robustos para a simulação do escoamento acoplado, como desenvolvido por Cai (2008).

O escoamento acoplado de um fluido em um canal de, ou para, um meio poroso ocorre em problemas de filtração industrial e no meio-ambiente. O processo pode transportar substâncias que afetam reservas de água doce (Hanspal *et al*, 2006; Sophocleous, 2002). Tais efeitos são condicionados pelas características do escoamento acoplado. Uma melhor compreensão deste tipo de escoamento é necessária (Sophocleous, 2002) para quantificar de forma precisa os recursos hídricos, bem como viabilizar avaliações de danos ambientais originados por descartes em cursos ou reservas de água doce, de poluentes ou contaminantes, originados de ações antrópicas, afetando a disponibilidade de recursos hídricos.

A caracterização do problema de acoplamento exige o estabelecimento de um modelo computacional realista capaz de considerar os fenômenos físicos do acoplamento do escoamento de fluido entre estes meios, e para a compreensão mais próxima possível do fenômeno real.

Neste trabalho considerou-se o acoplamento de escoamento de água em um sistema ambiental composto por canal superficial inserido em substrato composto por meio poroso. Sendo um fenômeno sazonal, com variação temporal da dinâmica do fluxo, este escoamento acoplado necessita ser tratado como transiente em sua totalidade independente de sua natureza superficial ou subsuperficial. Estes aspectos somente recentemente têm sido considerados, e não de forma plena, pelos modelos atuais (Miglio *et al*, 2003; Cai, 2008). Uma forma eficiente de abordar estes problemas reside no estabelecimento de um modelo computacional assegurando uma solução acurada, desenvolvida em tempo finito e em um procedimento econômico.

Ponto sensível é no estabelecimento do modelo matemático considerado é o avanço obtido em relação ao tratamento desenvolvido pela hidrologia. Nesta área é usual o emprego das equações de Saint-Venant para modelar o escoamento superficial, em presença de superfície livre (Gunduz & Aral, 2005). Esta metodologia somente viabiliza a aquisição de vazões médias e, estimativa do nível da superfície livre do líquido, com base na seção transversal do canal de escoamento, porém as distribuições de pressão e de velocidade do fluxo permanecem incógnitas. Esta última somente pode ser avaliada por valores médios nas seções transversais do canal de escoamento, enquanto a pressão não é avaliável por esta abordagem. Descartar a necessária continuidade entre a carga hidráulica e a pressão total no fluido livre em torno da interface (leito do canal) apresenta-se como uma perda de acurácia na aproximação da solução - um equívoco severo. No modelo que propomos, são consideradas as relações de acoplamento entre o nível da superfície livre do fluido em escoamento no canal superficial e a condição de incompressibilidade desenvolvida da conservação de massa no problema. O modelo é, portanto, incompressível, com relação ao fluido em escoamento, e verifica a conservação de massa.

Para modelar o balanço de forças no escoamento superficial aplicamos as equações de Navier-Stokes, combinadas com a equação de continuidade e com a equação de posição da superfície livre. Quanto ao escoamento (percolação) do fluido no meio poroso empregamos uma combinação das equações de Richard, em termos de carga hidráulica, como equação de conservação de massa, e de Darcy, uma equação de balanço de momentum linear. Considerou-se na superfície de interface entre os subdomínios de escoamento o balanço de pressões, a continuidade do escoamento, e uma condição de tensão de cisalhamento como em Galeão *et al* (2007). A estrutura sólida (esqueleto) do meio poroso foi também considerado incompressível, além de indeformável, e portanto rígido. O fluido em escoamento neste meio é uma mistura de ar e água fluindo à pressão atmosférica na sua região não-saturada. Elementos finitos de menor ordem foram considerados na

formulação, além de combinações polinomiais, em elementos finitos, de ordem superior, tanto para o escoamento superficial, como para a percolação subsuperficial. Esta abordagem fornece resultados extremamente favoráveis, comparando positivamente resultados entre elementos que satisfazem a condição LBB e elementos que não passam por este critério, conforme determinado por Galeão *et al* (2008); E. Hanert (2002); Dvorkin (2001).

A incompressibilidade da água é uma propriedade física, inerente à pequena variação de volume em resposta a solicitações de esforços externos ao meio fluido, em condições normais de temperatura e pressão. Esta hipótese é assumida como válida, estando associada com o elevado módulo de elasticidade intrínseco $\bar{\beta}$ desta substância, sendo p a pressão total neste fluido, e ρ a massa específica:

$$dp = \bar{\beta}d\rho/\rho \quad (1.1)$$

onde $\bar{\beta} = 2,298.10^5 KPa$. Esta aproximação tem origem no período histórico de formulação dos problemas hidrodinâmicos em diferenças finitas, conforme Tanehill *et al* (1997) e Gresho & Sani (2000), como uma simplificação aceitável, com erros desprezíveis, para atender à conservação de massa.

A necessidade de descrição mais precisa do escoamento acoplado de água em calhas fluviais com a percolação no solo e da transferência de substâncias entre estes meios é parte do estudo dos processos que têm a água por veículo. Sendo substância essencial à vida, sua disponibilidade e qualidade condicionam a existência e troca de substâncias, nos, e, entre os ecossistemas. Particularmente em sistemas acoplados de bacias hidrográficas e aquíferos, o fluxo de substâncias é condicionado pela corrente hídrica, e pelas características físicas do solo onde se situa a bacia. Faz-se necessário modelar este processo de transferência de massa, sendo que os modelos computacionais desenvolvidos, até o presente, o têm como principal objetivo de pesquisa na área (Weill *et al*, 2001). Esta troca ocorre, entre estes sistemas de escoamento, na zona de troca de massa denominada em hidrologia como "hyporheic zone", região em que a água da corrente hídrica sofre mistura

com o fluido da região subsuperficial (Runkel *et al*, 2003).

A presença de condições físicas adequadas dos recursos hídricos é fundamento condicionante da sua utilização pelos seres vivos. Os mesmos mecanismos físicos e químicos que agem no transporte e dispersão de matéria, substâncias, e elementos entre, e para, os seres vivos e respectivos habitats, também determinam a propagação de poluentes e contaminantes, com efeitos danosos sobre os ecossistemas. A disponibilidade de água está associada assim tanto com a quantidade, como também com a qualidade da água. Na concepção deste trabalho consideramos que este seja uma primeira etapa no desenvolvimento futuro de um modelo associado à necessidade de determinação quantitativa da disponibilidade e da qualidade da água armazenada em bacias hidrográficas, e nos respectivos aquíferos subterrâneos. Este trabalho busca também contribuir em etapa futura à compreensão dos processos de transporte e dispersão de poluentes e contaminantes, em sistemas de escoamento superficial e subsuperficial interligados, e à compreensão dos respectivos mecanismos de acoplamento.

O presente trabalho concentra-se no desenvolvimento e validação do modelo computacional de fluxo de água em sistema acoplado composto por canal de escoamento superficial de bacia hidrográfica com percolação em meio poroso contribuindo para a caracterização da quantidade e disponibilidade da água nos subsistemas de escoamento/percolação. As soluções do modelo fornecem estimativas temporais de valores numéricos das variáveis primitivas que descrevem o problema, para a descrição aperfeiçoada do acoplamento, quantificando as variáveis físicas a partir do estudo dos mecanismos de convecção e difusão. Os sistemas acoplados são o de escoamento superficial, com superfície livre, e de percolação subsuperficial, em meio poroso. O modelo tem aplicação a sistemas de bacias hidrográficas. Pretende-se futuramente efetuar a extensão do modelo a outras áreas de aplicação, explorar considerações teóricas da formulação em elementos finitos, e o desenvolvimento de métodos numéricos a partir do modelo complexo aqui estabelecido.

1.2 Estado da arte: revisão bibliográfica

A solução do problema de escoamento hídrico entre sistemas acoplados, canais de rios e região subsuperficial não saturada de aquífero, contribui para estudos tais como: (1) quantificação dos acúmulos, distribuição e absorção de substâncias, poluentes e/ou contaminantes no meio ambiente, (2) a compreensão e análise de fenômenos relativos à hidrologia e hidrodinâmica de sistemas de bacias hidrográficas, envolvendo evapotranspiração, e determinação do campo de velocidades, (3) determinação da capacidade de aproveitamento de aquífero, limites de bombeamento, e estabelecimento da capacidade de recarga do sistema bacia - aquífero, (4) caracterização da magnitude das permutas de substâncias na zona de troca (hyporheic), dentre outros. Estudos, análises e simulações desses fenômenos, com consideração parcial do acoplamento, em regime estacionário ou transiente, têm sido parcialmente abordados na literatura científica especializada.

A abordagem hidrológica tem sido empregada historicamente para a análise e simulação do problema de acoplamento aqui tratado, porém limitando a precisão nos resultados à média dos campos das variáveis do problema, e prescindindo da determinação direta, obtida da solução numérica computada pelo modelo, da variação de nível da superfície livre da água nas calhas fluviais, informação de importância na determinação do regime de águas, recarga de aquíferos e cálculo de inundações. Historicamente as trocas de fluido hídrico entre sistemas de fluxo superficiais e sistemas subsuperficiais têm sido modeladas computacionalmente pelo emprego de interface de transferência de variáveis e parâmetros entre estes sistemas, ou por adoção de termos de fonte nas equações do modelo, buscando-se obter a convergência de soluções, ora por métodos iterativos para a determinação das quantidades físicas comuns aos dois sistemas, ora por contabilização das quantidades físicas associadas aos termos de fonte.

Os modelos atuais, objeto de trabalhos publicados, são em geral iterativos, uni ou bidimensionais para o escoamento hídrico na rede fluvial, e bidimensionais para o escoamento subsuperficial. Somente Miglio *et al* (2003) e Cai (2008)

trataram parte do domínio do modelo de forma tridimensional, para o subdomínio determinado pelo meio poroso, exigindo maior potência de processamento computacional. Trata-se de modelos transientes, sendo o hidrodinâmico superficial aplicado a fluido incompressível. Como usual em modelos fundamentados nestas hipóteses, o sistema hidrodinâmico superficial foi modelado matematicamente pelas equações de conservação de massa e momentum, pela abordagem das equações de Navier-Stokes. Neste trabalho o problema de escoamento subsuperficial em meio poroso está determinado pela infiltração hídrica percolando nos poros, condicionada pela pressão total no fluido em escoamento livre, pela ação gravitacional, pela porosidade, a capacidade hidráulica e parâmetros do solo. A matriz sólida e a fase líquida do fluido apresentam comportamento de incompressibilidade, a percolação obedece à Lei de Darcy, e a infiltração é bifásica, composta por água e ar, ocorrendo em meio insaturado. Este problema obedece às equações de conservação de massa e momentum para o meio poroso, sendo regido pela Lei de Darcy de percolação e pela Equação de Richards.

Sophocleous (2002) enfatizou que há necessidade do desenvolvimento de modelos em que a acurada avaliação da capacidade de armazenamento de reservatórios subsuperficiais seja determinada pela representação precisa do acoplamento entre o fluxo superficial e subsuperficial. Sophocleous localizou historicamente a modelagem matemática em diferenças finitas (Riessenauer, 1963) para o estudo da infiltração no solo da água de irrigação de um canal não linear, com presença de meandros, o modelo de recarga de aquíferos e de reabastecimento de rios por aquíferos de Stephens (1996), o modelo transiente de Peterson & Wilson (1988) do problema de recarga de aquíferos por correntes superficiais a partir de lençóis de água rebaixados por bombeamento, e o modelo matemático de Winter (1995) de troca de fluido hídrico entre canais superficiais e reservatórios subterrâneos com base nas oscilações do nível do lençol freático e das condições de saturação do solo.

Miglio *et al* (2003) e Discacciati *et al* (2002) apresentaram um modelo parcialmente transiente de acoplamento dos dois sistemas incluindo uma interface de

troca de quantidades físicas entre estes, associando os processos de fluxo de fluido hídrico com superfície livre em canal superficial com a percolação deste mesmo fluido em meio poroso. O primeiro fenômeno é regido pelas equações de Navier - Stokes transientes quase tridimensionais para águas rasas e o segundo pela Lei de Darcy - conservação de momentum - e por uma equação de conservação de massa (continuidade) transiente, tridimensionais. O estabelecimento de condições de interface determinou neste modelo o acoplamento dos dois sistemas, pela determinação de uma função de pressão, a partir da carga piezométrica. O modelo computacional ficou estabelecido por uma formulação variacional fraca, em elementos finitos, para a discretização espacial. Quanto à evolução temporal do modelo, os autores adotaram diferenças finitas no tempo, Euler implícito, para o domínio poroso, e fracionário para cada passo de tempo para a posição da superfície livre no fluxo superficial. Trata-se, portanto em ambos os sistemas, de uma abordagem numérica semi-discreta. Nestes trabalhos os termos transientes para os campos de velocidades (planar e vertical) foram desconsiderados, sendo computados somente para os campos referentes à posição da superfície livre e à carga hidráulica.

Cai (2008) considerou o problema de escoamento acoplado de um fluido escoando livremente sobre um meio poroso, à semelhança do abordado pelo grupo de pesquisa integrado por Miglio *et al* (2003). Em sua tese, Cai inicia o desenvolvimento do modelo matemático fundamentado nas equações de Navier-Stokes (ou Stokes, em algumas soluções), com satisfação da equação de continuidade (condição cinemática), e Darcy, para o meio poroso. Considerando a construção do modelo matemático com esta conformação resultaria um problema de ponto de sela. Este foi o procedimento adotado por Miglio. Cai adota um procedimento distinto, semelhante ao que foi adotado para a construção do modelo matemático da presente tese. Reformula seu modelo matemático, em um procedimento típico de problemas de águas rasas, integrando a equação de continuidade no sentido vertical à superfície livre em estado de repouso (somente sujeita à atração gravitacional). A formulação discreta é então desenvolvida em elementos finitos, em

uma formulação também semi-discreta, com o tratamento dos termos transientes por um esquema implícito de diferenças finitas. A solução numérica do modelo computacional é então construída por um algoritmo de dois níveis de solução, determinando uma aproximação para o sub-problema difusivo em uma malha fina, seguido por um procedimento de aproximação para a contribuição convectiva em uma malha menos refinada.

O mesmo problema de acoplamento de escoamentos em domínios acoplados foi modelado computacionalmente por Lin & Medina-Jr. (2003) e por Panday & Huyakorn (2004). Os escoamentos considerados foram o superficial, em uma rede de canais, sobre o solo (devido ao "run off", escoamento de água em um plano superficial devido à gravidade), e um terceiro devido à percolação (escoamento) subsuperficial, em meio poroso de saturação variável. Os primeiros consideraram o escoamento superficial e a percolação no meio poroso, enquanto os segundos acrescentaram a este sistema de equações o escoamento superficial da lâmina de água sobre o solo ("run-off"). Ambos os trabalhos consideraram para o sistema de equações uma formulação em abordagem tridimensional para a percolação em meio poroso. Para o escoamento com superfície livre na rede de canais de bacia hidrográfica, este foi considerado como sendo unidimensional; enquanto o escoamento sobre o solo foi modelado em abordagem bidimensional. Nestes modelos o acoplamento entre os sistemas de escoamento é representado por termos de fonte para acoplamento lateral: escoamento subsuperficial - escoamento sobre o solo - escoamento superficial (canal aberto). Para o primeiro é empregada a equação de Richards formulada em termos de carga hidráulica e saturação, para o segundo sistema é adotada a equação de águas rasas de Saint Venant, em termos da área média molhada da seção transversal de escoamento, da qual resulta a determinação da elevação média da lâmina de água sobre o solo, na seção, e para o terceiro escoamento é empregada esta mesma equação, unidimensional, para a determinação da vazão e desta mesma variável no canal. No trabalho de Panday e Huyakorn o modelo acoplado considera o armazenamento de fluido hídrico devido às depressões topográficas no terreno, a

existência de evapotranspiração, e o armazenamento hídrico devido a presença de vegetação. Ambos os grupos de pesquisadores trataram numericamente o sistema de equações por uma discretização em diferenças finitas, no espaço, e evolução temporal em formulação semi-implícita. Assim como em nossa formulação, os termos não lineares da formulação são tratados pela abordagem de aproximações sucessivas do Método de Picard, um procedimento fundamentado na teoria de equações de diferenças ou fórmulas de recursão. Esta abordagem é uma modificação do conhecido Método de Newton-Raphson.

Recentemente Gunduz & Aral (2005) estabeleceram um modelo computacional para o problema com solução temporal iterativa simultânea para o escoamento acoplado em rede de canais com o subsuperficial. A conexão dos dois sistemas, o superficial e o subsuperficial, é obtida pelo fluxo lateral entre o canal ribeirinho e o subsolo, por meio de um termo de fonte de massa e de um termo de fonte de momentum. A formulação matemática é obtida pelas equações de Navier-Stokes para momentum e continuidade em termos de vazão (Saint Venant), para o fluido superficial, e pela equação de conservação de massa e Lei de Darcy, para a percolação no meio poroso. Perceba-se que, no procedimento hidrológico se trata do mesmo modelo conceitual que o da abordagem hidrodinâmica, como adotado por Miglio et al., Cai, e nesta tese, porém o modelo matemático é distinto do de Gunduz e Aral e de outros hidrologistas. Para este último grupo de pesquisadores as equações são tratadas tal que as variáveis são expressas como variáveis médias da vazão e da área (molhada) da seção transversal, sendo estas as variáveis primitivas. Trata-se da formulação de Saint Venant, para águas rasas, e da combinação das equações de Richards e de Darcy, para o meio poroso. Em Gunduz e Aral, a formulação numérica, para a solução computacional do problema acoplado, considerou um esquema de diferenças finitas progressivas, para a discretização temporal de ambos os sistemas, um esquema implícito unidimensional de diferenças finitas progressiva para a discretização espacial do fluxo no canal ribeirinho, e uma formulação variacional em elementos finitos por Galerkin

clássico para a discretização espacial do fluxo no meio poroso. Esta formulação é semi-discreta para o domínio subsuperficial, e em diferenças finitas clássicas, considerado uma célula de quatro pontos (dois no espaço e dois no tempo) para o sistema superficial. É interessante observar que a formulação clássica de Galerkin, empregada por estes pesquisadores permitiu a obtenção de soluções extremamente próximas de dados reais.

1.3 Caracterização comparativa dos modelos atuais

O desenvolvimento de modelos matemáticos e de simulações computacionais, associando o acoplamento e as interações entre os fluxos hídricos em canais superficiais e a hidrodinâmica subsuperficial, tem sido um problema com poucas referências na literatura.

Os modelos que tratam do acoplamento do escoamento hídrico entre sistemas de escoamento superficial e subsuperficial seguem duas linhas de desenvolvimento conceitual. A primeira corresponde aos modelos que tratam o campo de velocidade no canal ou a vazão com superfície livre por valores médios. Estes modelos matemáticos ficam descritos pelas equações de Saint Venant, e a percolação no solo pela equação de Richard em termos da carga hidráulica. Por hipótese este procedimento considera válido expressar as variáveis do problema em termos de valores médios na seção transversal de escoamento. Neste caso não é possível descrever a variação do nível da superfície livre pontualmente, bem como as distribuições de velocidades de escoamento no canal de escoamento livre e no meio poroso. A segunda classe de modelos descrevem matematicamente o problema pelas equações de Navier-Stokes e Richard-Darcy, descrevendo os campos pontualmente em uma abordagem Euleriana ou Lagrangeana-Euleriana. Tais modelos, consideram a hipótese de regime estacionário para o escoamento com superfície livre, até o presente. Ambas as abordagens apresentam como característica comum a adoção de hipóteses, como estas citadas, que restringem as soluções obtidas pelos modelos a aspectos do problema que somente de forma parcial representam a

realidade do escoamento acoplado entre aqueles sistemas.

No desenvolvimento deste trabalho, detectamos, que no momento atual estes estudos longe de apresentarem um modelo que considere sob uma ótica ampla os fenômenos envolvidos no acoplamento, não são conclusivos, com relação à compreensão dos mecanismos de acoplamento entre sistemas de escoamento superficial e de percolação subsuperficial. Avaliamos também, a partir da pesquisa bibliográfica, carência de artigos envolvendo aplicações de métodos numéricos, particularmente em elementos finitos, à compreensão do problema. Há inexistência de modelos que considerem campos de velocidade de elevada magnitude, e ausência de formulações que considerem estabilização para captação de soluções numéricas que não prescindam desta característica.

1.4 Considerações sobre o modelo proposto

A pesquisa bibliográfica indicou predominância de modelos formulados em diferenças finitas e a verificação de ausência de tratamento sob uma abordagem integralmente desenvolvida em elementos finitos, como em formulações espaço-tempo. As atuais formulações em elementos finitos (no espaço) consideram um esquema implícito no tempo, resultando em uma formulação semi-discreta, a qual seguiremos no modelo proposto. Não foi localizado até o presente um modelo em que ocorra predominância do termo advectivo sobre o difusivo. Iremos considerar esta possibilidade.

O modelo computacional, objeto de foco do presente trabalho, em elementos finitos, adota aquela formulação, para efetuar a aproximação de um conjunto de variáveis, ou seja, seis campos, para a estimativa da solução do problema acoplado em cada ponto nodal da malha de elementos finitos. O acoplamento dos dois subdomínios de escoamento foi possível em presença de interface de transferência de variáveis, no estabelecimento da combinação adequada de elementos finitos para aproximação das incógnitas: campos de velocidades, carga hidráulica no fluido em meio poroso, nível da superfície livre, e da pressão no fluido livre. A abordagem do

problema de acoplamento entre o fluxo superficial e o escoamento subsuperficial, em sistemas de calhas fluviais e segmento não saturado do meio poroso, adjacente à calha fluvial e ao aquífero associado. A modelagem computacional, considera o estabelecimento de soluções aproximadas, tratando o sistema de equações variacionalmente. O problema físico estabelecido está associado às interações entre os dois sistemas de escoamento hídrico.

Nas condições ambientais, de que se ocupam os modelos, o fluido em escoamento superficial e a fase líquida do fluido em percolação subsuperficial, apresentam comportamento incompressível, no sentido que a massa específica do elemento representativo do fluido, no sentido da teoria do contínuo, não varia sob oscilações da pressão total atuante; além disso, cinematicamente a conservação de massa implica em incompressibilidade do escoamento, conforme Gresho & Sani (2000) e Dvorkin & Goldschmit (2006). Ainda que sob bruscas variações das condições de escoamento, resultando em elevadas magnitudes do campo de velocidade para o escoamento superficial, como em presença de inundações, contribuições laterais de fluxo ao sistema acoplado, e presença de fortes oscilações de marés em sistema estuarino de fluxo superficial, o comportamento de incompressibilidade do fluido se mantém. Contudo destes eventos podem resultar fortes gradientes no campo de velocidades superficial, requerendo o tratamento do problema sob a ótica da convecção dominante.

Para a consideração de fortes variações no gradiente do campo de velocidades, rumo a uma generalização de sua aplicação, é exigido um tratamento, para captura de soluções, por método numérico estabilizado, permitindo a simulação mais próxima de uma correspondência com a física real do escoamento em redes fluviais, no futuro próximo. Tal procedimento foi implantado no modelo computacional, considerando-se ainda a captura de soluções associadas às estimativas realistas da pressão hidrodinâmica pelo modelo. O primeiro requisito é o caso de contribuições laterais para a corrente hídrica em rios, devido a contribuição de afluentes à calha principal da bacia. O segundo permite obter respostas, soluções

do problema de escoamento acoplado, sem poluição de origem numérica, comprometedoras da qualidade destas soluções.

1.5 Acoplamento do modelo superficial com o subsuperficial

O problema, para o qual consideramos propor solução, estabelece a hipótese de acoplamento entre os dois sub-domínios de escoamento, requerendo a imposição de condições de acoplamento do escoamento superficial com a percolação subsuperficial para o fechamento do sistema de equações, tal que este seja compatível com esta hipótese.

O acoplamento do escoamento ocorre fisicamente, devido à existência de fluxo de fluido em canal em presença de superfície livre de ou para um meio poroso, sendo ainda um fenômeno sob investigação não plenamente modelado computacionalmente. Este fenômeno ocorre na natureza, em escoamento hídricos em calhas fluviais, em sistemas industriais, e em análise de processos biológicos. O aspecto plenamente transiente deste problema encontra-se em início de investigação, sendo a direção de fluxo dependente da posição relativa da superfície livre e do nível da camada saturada de fluido no meio poroso. Numericamente, a ocorrência deste acoplamento de fluxo (físico) precisa ser reproduzido, para atender à correspondência, o mais realista possível, entre o modelo computacional e o problema físico. Existem algumas abordagens possíveis para a consideração de acoplamento (e sua incorporação ao modelo computacional), entre aqueles dois escoamentos, consistem: (1^o) na satisfação de um conjunto de condições de cisalhamento, continuidade, e pressão; sendo uma outra abordagem, (2^o) a incorporação de contribuições laterais ou termos de fontes à formulação; enquanto uma também possível (3^a) abordagem incorpora à malha de discretização, dos meios de escoamento, a presença de nós de transferência de condições de restrição ao escoamento.

A questão vital associada ao escoamento acoplado, do (para o) meio superficial para o (do) subsuperficial, reside então na abordagem adotada para o tratamento do mecanismo de acoplamento dos escoamentos. Desde que Brinkman

(1947) propôs uma correção para a Lei de Darcy, e posteriormente Beavers & Joseph (1967) propuseram a premissa de descontinuidade da tensão de cisalhamento na superfície de interface entre estes subdomínios, a verificação de uma condição de interface associado à tensão de cisalhamento tem sido alvo do trabalho de pesquisadores. Kubik & Cieszko (2005) desenvolveram uma forma geral das equações de balanço em torno daquela superfície de descontinuidade, verificando as condições de continuidade para a velocidade de escoamento, nas direções tangente e normal à superfície, bem como para a tensão de cisalhamento no fluido. Esta abordagem das condições de interface foi verificada ser uma generalização da condição de não aderência de Beavers & Joseph (1967).

As condições de interface, aqui consideradas, para o acoplamento do escoamento superficial com a percolação subsuperficial do fluido Newtoniano incompressível ficam, à luz destas considerações, determinadas pelo sistema de equações representativo da continuidade do fluido, da descontinuidade da tensão de cisalhamento e da compatibilidade entre os campos de pressão (no fluido em escoamento livre) e de carga hidráulica (para o fluido em escoamento no meio poroso).

Projetamos que o modelo acoplado assim desenvolvido viabilizará futuramente, a modelagem do transporte, por processos convectivo e difusivo, de partículas, de poluentes e/ou de contaminantes em cursos de água natural em presença de acoplamento deste escoamento com meio poroso. Consideramos ainda que tal abordagem do problema permitirá a exploração de aspectos do problema de modelagem de filtragem industrial. As aplicações à despoluição ambiental e redução dos efeitos da poluição industrial são a extensão natural para este desenvolvimento de pesquisas.

O problema aqui abordado está, assim, associado com a manutenção das condições de pureza dos recursos hídricos, ou a gestão destes recursos colaborando no desenvolvimento sustentável de regiões de bacias hidrográficas. A plena compreensão do fenômeno físico-químico de redução da carga física, química e biológica das substâncias contaminantes e poluentes originadas de efluentes líquidos

lançados em sistemas aquáticos, requer o desenvolvimento de modelos computacionais que permitam observar o padrão de troca de massa (água) em sistemas hídricos, analisá-lo física e matematicamente, e processar o elevado volume de dados originado por este processo. Desta forma, são gerados resultados que permitam analisar a migração de efluentes, verificar o impacto, na biosfera do lançamento destes efluentes e propor mecanismos e processos de minoração ou eliminação do impacto ambiental decorrente, contribuindo com o desenvolvimento sustentável de regiões geoestratégicas. O problema associado que nos propomos a analisar será restrito a regiões de bacias hidrográficas, com ocorrência de acoplamento entre o escoamento superficial e a percolação subsuperficial da corrente hídrica. A construção deste modelo e o sucesso da solução do problema é uma etapa anterior ao estudo e análise do transporte advectivo e difusivo de substâncias poluentes ou contaminantes pela corrente hídrica, do mecanismo de difusão, da permeabilidade do solo e da difusão daquelas substâncias no fluido. O presente modelo propõe solução, e metodologia de compreensão e análise, do fluxo de água entre os sistemas acoplados de escoamento/percolação.

1.6 Considerações ambientais

As ações antrópicas modificam a natureza e alteram as relações de troca de matéria e energia nos e entre os ecossistemas. A manutenção da vida humana no planeta, o consumo de energia, e as demandas por bens de uso, de consumo e de capital, exigem esta intervenção humana sobre a natureza, retirando desta insumos na forma de recursos naturais, materiais e energia para atendimento de nossas próprias necessidades.

Dentre aqueles insumos, a água enquanto recurso natural, renovável porém de disponibilidade limitada, atende necessidades humanas de reposição dos nossos próprios fluidos corporais, de higiene, de limpeza e de insumo industrial. A demanda por água de consumo e de higiene exige a sua pureza, livre de elementos e substâncias tóxicas, poluentes e de contaminantes devido aos efeitos danosos à

saúde humana. A demanda por água industrial solicita a captação de água livre de componentes danosos a equipamentos e bens de produção, suficientemente limpa de substâncias comprometedoras da produção fim da indústria e em condições físicas minimamente adequadas às características específicas de cada linha de produção.

As reservas imediatamente utilizáveis de água doce, em aquíferos, rios e lagos, para que mantenham seu caráter de renovabilidade, necessitam ter preservadas suas relações com o ciclo hidrológico. A preservação de características de qualidade e potabilidade, bem como de recarga de reservas, estão associadas com a disponibilidade deste recurso. Ambos estes aspectos são necessários para a manutenção saudável e sustentável da vida e das atividades econômicas humanas.

Para áreas geográficas específicas há carência de aplicação de modelos de escoamento/propagação hídrica em sistemas acoplados de bacia hidrográfica-aquífero, como na região de influência da Universidade Estadual de Santa Cruz, UESC, particularmente nas regiões da Bacia do Rio Cachoeira, do Rio Almada, e de sistemas de Rios da Baía de Camamu, e demais bacias e áreas costeiras no Sul da Bahia e Costa do Dendê.

A importância de aplicações de um modelo de escoamento acoplado, bacia - segmento superficial de aquífero, àquelas Regiões, deve-se a que estas começam a experimentar um desenvolvimento em extração de hidrocarbonetos, além da política industrial do Estado da Bahia, bem como devido ao planejamento estratégico do Governo Federal, os quais prevêm, ou já têm implantado, na Costa do Cacau e na do Dendê, uma ZPE (Zona de Processamento de Exportação), indústrias de transformação, de geração de energia, de extração e processamento de minerais estratégicos como urânio, nióbio e níquel. Todos estes projetos consideram instalações com potencial demanda de água proveniente de bacias hidrográficas regionais. São fontes de recursos hídricos também os aquíferos Barreiras e da Bacia Sedimentar do Extremos Sul da Bahia. Além destas ações, já em execução, encontra-se em projeto sistemas de transporte intercontinental, como a Ferrovia Leste-Oeste, ligando a Costa Peruana (Oceano Pacífico) à Costa Bahiana (Oceano

Atlântico). Todas estas ações são potencialmente emissoras de fluidos poluentes, danosos a sistemas hidrográficos, camadas superficiais do solo, e aquíferos subterrâneos.

Avaliamos que o desenvolvimento atual do modelo computacional aqui apresentado, e seus desenvolvimentos futuros, possam encontrar naquelas regiões forte contribuição à preservação ambiental, em termos de cursos fluviais e aquíferos. A par de atualizações de dados de campo por séries históricas, disponíveis na UESC, e da disponibilização atual de recursos computacionais de alto desempenho, poderá ser viabilizada uma validação realista do modelo em grande escala.

A água existe na Terra totalizando $265,4 \times 10^5$ toneladas, ou seja, 265,4 quatrilhões de toneladas. Deste total apenas 0,5 % é água doce explorável econômica e tecnologicamente. Considerando que o volume contido nos pólos é de exploração economicamente remota e existe uma parcela nos sistemas ribeirinhos e lacustres já bastante afetada por poluentes, a disponibilidade de água doce utilizável se reduz a 0,003 % daquele total, segundo Braga *et al* (2002). Estas reservas encontram-se sobretudo nos aquíferos subterrâneos, subsuperficiais, e bacias hidrográficas. Avaliamos que, por ser reduzido o volume de água doce disponível para as necessidades humanas, encontra-se aqui uma forte justificativa para a pesquisa deste tema.

A forma de ocupação do espaço terrestre pela civilização, particularmente em sua fase industrial, tem afetado de maneira significativa a distribuição e disponibilidade da água como recurso natural alterando o ciclo hidrológico (precipitações, infiltração e evapotranspiração), alterando a recarga de aquíferos, modificando a permeabilidade e compactação do solo, modificando suas características físicas e químicas, em regiões significativas e usualmente nas de maior densidade de ocupação onde a demanda por este recurso é mais elevada. O presente trabalho se propõe a contribuir com parcela da análise deste impacto, propondo um modelo computacional que possa ser desenvolvido em etapas futuras com a incorporação de aspectos característicos do ciclo hidrológico e do transporte e dispersão de polu-

entes e contaminantes por corrente hídrica nos sistemas aqui estudados.

Águas marítimas costeiras, sistemas lacustres, os rios e seus afluentes têm sido utilizados historicamente como canais de lançamento, de transporte, e de decomposição de substâncias não aproveitáveis pela sociedade humana. Rejeitos domésticos e águas servidas, dejetos e despejos agro-industriais, emissões de fluidos líquidos de origem industrial, têm encontrado naqueles sistemas de escoamento o destino após a realização de ações necessárias à manutenção diária da sociedade. A sua absorção e decomposição pelos ecossistemas têm sido a forma usual de reintegração de substâncias na biosfera. Contudo, tais emissões líquidas afetam significativamente as reservas utilizáveis de água doce, contribuindo para a redução da disponibilidade de reservas de água utilizável pela sociedade humana, devido à contaminação e poluição destas por volumes de substâncias tóxicas, contaminantes ou poluentes em quantidade maior que as que os biomas e a biosfera podem processar e absorver em formas inertes, ou não danosas, à vida. Contribuir com uma etapa para a simulação e análise deste fenômeno, em reservas hídricas, apresenta-se como uma terceira característica de contribuição deste trabalho.

1.7 Estruturação da tese

A presente tese busca apresentar a seqüência de capítulos em correspondência aproximada ao desenvolvimento de idéias, concepções conceituais, estabelecimento do modelo considerando os subdomínios do problema, modelagem física, formulação contínua, variacional e discreta do modelo matemático. Os resultados de experimentos numéricos obtidos por solução computacional do modelo foram então, por considerações de metodologia didática, distribuídos entre os capítulos da tese.

O Capítulo 2 apresenta a física do problema e o modelo conceitual correspondentes, bem como a formulação matemática sob a ótica do contínuo com relação aos subdomínios de escoamento: superficial em presença de superfície livre em canal de rio, e subsuperficial correspondente ao meio poroso (percolação) em presença de matriz sólida rígida. Esse capítulo apresenta ainda a formulação correspon-

dente às condições na interface de acoplamento (ou troca de massa) entre aqueles subdomínios, e as condições de contorno.

O Capítulo 3 apresenta os aspectos referentes à formulação do sistema de equações por uma abordagem em elementos finitos, a metodologia de escolha do modelo, dos elementos de discretização do contínuo e dos seus respectivos espaços (conjuntos de funções) de aproximação, teste e de ponderação, apresenta a formulação em elementos finitos do modelo e especifica os mecanismos de acoplamento entre os dois subdomínios; neste capítulo encontram-se também desenvolvidas as técnicas numéricas de estabilização da solução. Finalmente o capítulo apresenta resultados numéricos preliminares.

O Capítulo 4 apresenta a técnica de linearização do sistema de equações, o desenvolvimento do algoritmo computacional de solução iterativa do problema numérico, com relação à convergência da solução para ambos os subdomínios de escoamento, e considera o critério de consistência da formulação em elementos finitos associado à escolha dos elementos, apresentando testes de malha quanto à prevenção do travamento na solução.

O Capítulo 5 apresenta, respectivamente para os subdomínios de escoamento superficial e de percolação subsuperficial, fundamentado na formulação variacional e discreta das equações em elementos finitos, alguns resultados numéricos de simulações para o escoamento em presença de superfície livre e em meio poroso, com acoplamento das soluções empregando-se as técnicas desenvolvidas nos capítulos precedentes, além de comentários sobre estes resultados.

O Capítulo 6 contém considerações sobre desdobramentos futuros do presente trabalho, discorrendo-se neste capítulo comentários sobre as conclusões com relação aos resultados obtidos.

Os capítulos 3, 4 e 5 exploram em seus resultados numéricos algumas soluções referentes ao escoamento superficial (em calha de fluxo com superfície livre), para a percolação em meio poroso, e para o escoamento simultâneo em ambos os subdomínios em presença de acoplamento destes escoamentos (interface de acopla-

mento). Apresentamos distribuídos nestes capítulos alguns resultados numéricos associados com a validação numérica do modelo computacional e com os métodos numéricos empregados para solução do problema.

Capítulo 2

Modelo Físico e Formulação Matemática

2.1 Apresentação do problema de escoamento acoplado

O modelo computacional proposto considera o acoplamento entre os escoamentos superficial e subsuperficial (percolação) nos problemas-modelo. A fig. 2.1, apresenta esquematicamente o problema de escoamento acoplado, no qual o fluido em escoamento livre, na ausência de barreiras ao fluxo hídrico ou desvios da corrente de fluxo, flui sobre um meio poroso. A superfície livre, interface entre a água e o ar atmosférico, é indicada na fig. 2.1 por η , enquanto a superfície de interface entre o domínio de escoamento livre, Ω_f , e o meio poroso, Ω_p , é indicada por Γ . Na fig. 2.1 o nível de referência é dado por z_0 .

A fig. 2.2 apresenta de forma esquemática, em uma visão 3D, os dois subdomínios de escoamento, o superficial, Ω_f , e o subsuperficial, Ω_p , para uma situação de escoamento superficial em presença de superfície livre, com o sentido de fluxo acoplado do subdomínio superficial para o subsuperficial, não-saturado. Na fig. 2.2 estão indicados sentidos do campo superficial de velocidades, e do campo de velocidade darcyniano. O nível do lençol freático, fronteira inferior da região não-saturada do meio poroso, é também indicado de forma esquemática.

2.2 Modelo conceitual - físico

Abordamos na presente tese o problema de escoamento acoplado de água em uma rede de canais cuja superfície livre está sujeita à pressão atmosférica. O flu-

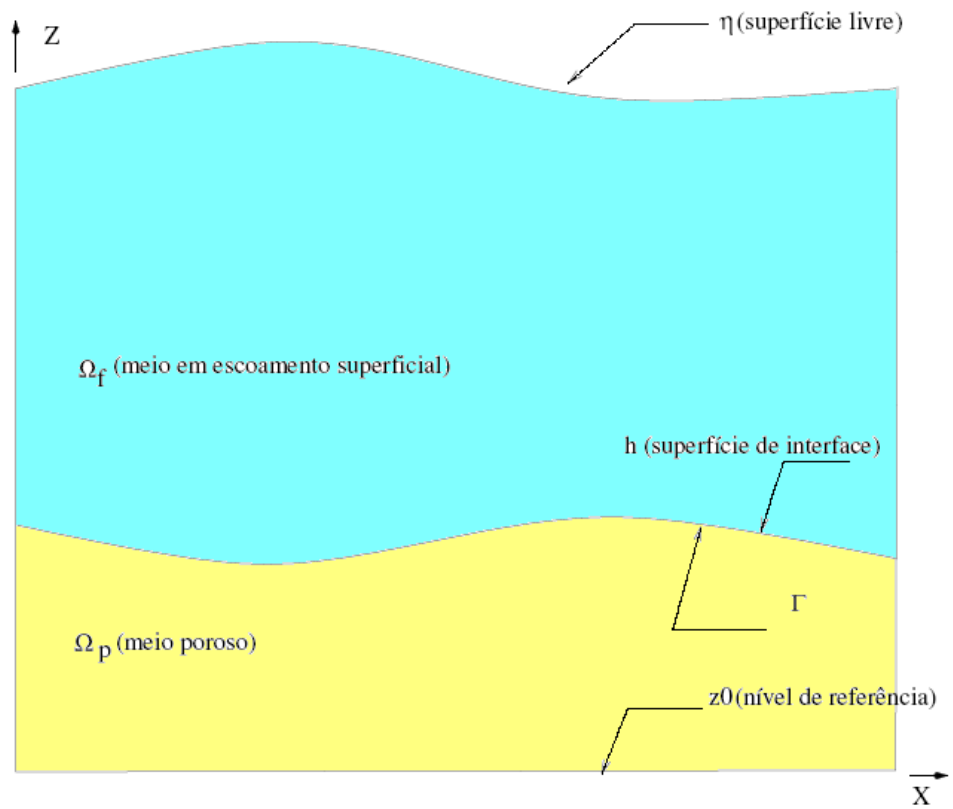


Figura 2.1: Visão esquemática: domínios superficial e sub-superficial acoplados

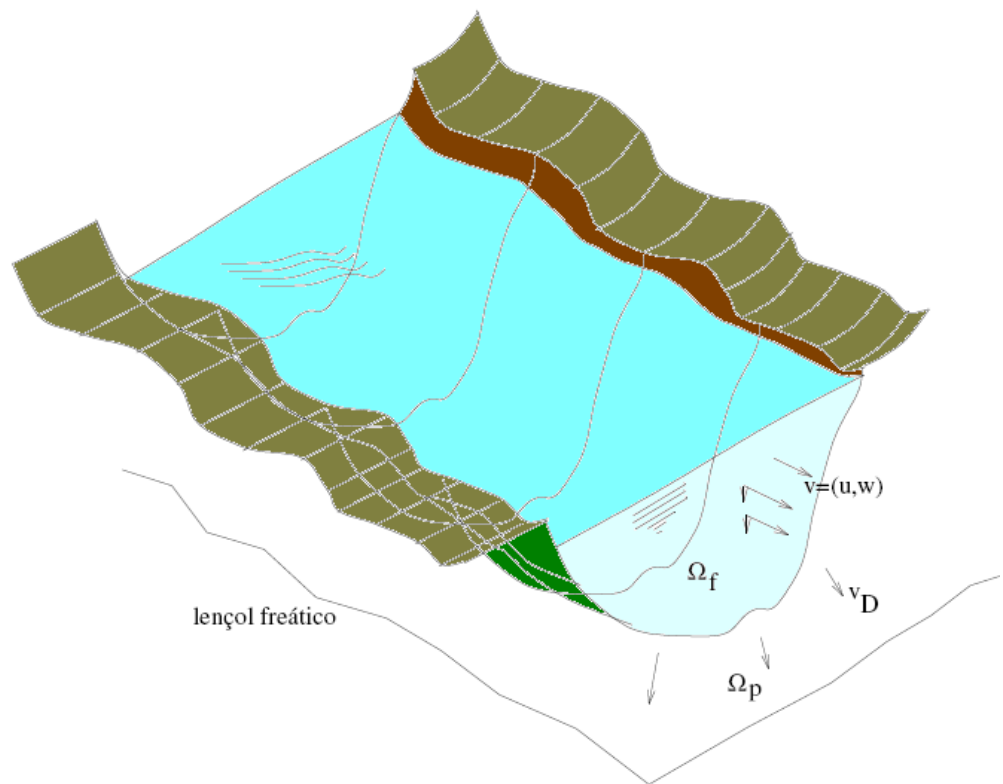


Figura 2.2: Escoamento superficial a sub-superficial não-saturado, visão longitudinal

ido na rede superficial flui simultaneamente à percolação de fluido em meio poroso. Neste meio o fluido é bi-fásico composto por ar e água, a qual é proveniente da infiltração hídrica superficial nos poros. A fronteira (ou contorno deste domínio), o leito do canal de escoamento ou paredes de uma canal de escoamento confinado, são compostas por material poroso. No caso de calhas de rios o meio poroso é o próprio solo. Uma extensão da formulação é possível para o problema de filtragem industrial, caso em que esta fronteira é o material de filtragem. O fluido, água, em escoamento, infiltra no meio poroso e sujeito a um campo de velocidade darcyniano percola nos poros deste meio. O meio poroso encontra-se assim parcialmente saturado, estando o fluido sob pressão atmosférica, devido ao contato deste meio não só com o leito da calha de escoamento (com superfície livre) mas também com a atmosfera. A matriz sólida do meio poroso é tomada como incompressível para fins deste estudo. A água comporta-se como fluido Newtoniano. A variação do volume e a presença de campo de velocidade não uniforme da água fluindo no canal de escoamento com superfície livre resulta na variação do nível ou profundidade da água com relação ao leito do canal. A variação assim determinada implica em variação do campo de velocidade do escoamento livre e do respectivo campo de pressão total. Estas alterações no valor das variáveis primitivas do problema, e a alteração da posição relativa do nível e da pressão da água nesse canal e no meio poroso não saturado, resulta em uma variação também da saturação deste meio e na elevação/redução do nível da água na parcela saturada do meio poroso, conduzindo a um problema transiente com a água fluindo ora do meio poroso para a calha de escoamento livre, ora em sentido inverso, com oscilação da posição relativa do nível de água no meio poroso e no canal de escoamento com superfície livre. A percolação da água no meio poroso e o escoamento deste meio para a calha de escoamento livre e em sentido contrário é função dos parâmetros e propriedades físicas do meio poroso, como a porosidade e a capacidade hidráulica, e do fluido em escoamento, como viscosidade, massa específica, campo de pressões e de velocidade.

O modelo temporal de escoamento acoplado considera que o fluxo hídrico, pelo seu comportamento sazonal, resultante do escoamento do canal para o meio poroso e vice-versa, caracteriza um fluxo de massa entre estes dois subdomínios. Este fluxo ocorre através de uma interface de troca de massa. Reside nesta consideração uma diferença conceitual básica com os modelos hidrológicos nos quais a troca de massa é considerada em presença de termos de fonte acrescentados às equações do modelo. A presença desta superfície de espessura desprezível (infinitesimal) requer a consideração de condições específicas em torno da interface que viabilizem a consideração do acoplamento do escoamento entre os subdomínios. Estas são denominadas condições de interface e apresentam propriedades de condições de contorno para a solução das equações em cada subdomínio, sendo estes solucionados sucessivamente e adotado método numérico de iteração da solução em torno da interface de acoplamento. É esta abordagem do acoplamento que viabiliza a simulação do escoamento do fluido do meio poroso para a calha de escoamento livre e inversamente.

O modelo matemático para o tratamento do presente problema foi desenvolvido com a consideração das equações de Navier-Stokes (conservação de massa e balanço de momentum linear), para o escoamento no sub-domínio superficial, e de Darcy (balanço de momentum linear) e Richards (conservação de massa), para a percolação de fluido no meio poroso, sub-superficial.

O presente modelo computacional considera: (1) o regime transiente em ambos os sub-domínios de escoamento, o superficial e o meio poroso, (2) a presença de uma superfície fictícia, interface, através da qual se dá o acoplamento do fluxo hídrico naqueles sub-domínios, (3) a solução do sistema de equações, associado à fluidodinâmica computacional e à percolação em meio poroso, por um procedimento de solução iterativa, em torno dessa interface, para captura de convergência entre os valores da pressão total no fluido em escoamento livre e da pressão convertida a partir da carga hidráulica do fluido no meio poroso, (4) a superfície livre e o fluido no meio poroso sujeitos à pressão atmosférica, e a matriz sólida do meio

poroso como incompressível, bem como (5) a solução da velocidade darcyniana, neste meio, por pós-processamento, viabilizado pelo tratamento da equação de conservação de massa (para o fluido) neste meio.

A solução é obtida por processo iterativo, buscando estabelecer convergência de magnitudes entre a carga hidráulica (no meio poroso, subsuperficial), com a conversão adequada para pressão capilar, e a pressão total (no fluido em escoamento livre, no meio superficial), em torno da interface: condição satisfeita simultaneamente nesta superfície, em ambos os sub-domínios de escoamento. A formulação **contínua** é integro-diferencial, a **variacional** considera uma aproximação por funções de ponderação, e a **discreta** aproxima a solução por elementos finitos no espaço - Galerkin estabilizado - e Euler implícito no tempo.

A orientação espacial adotada no desenvolvimento do modelo considera um sistema cartesiano de coordenadas na forma de um triedro direto em que são referenciadas coordenadas espaciais em relação aos eixos "x", "y" e "z". A orientação dos eixos é tomada positiva no sentido do escoamento da água no canal de escoamento livre, para o eixo "x", e sentido positivo da profundidade segundo o sentido da vertical da superfície impermeável para a superfície livre (interface água-ar), para o eixo "z".

2.3 Forma forte das equações de conservação e balanço

Dois princípios físicos regem o estabelecimento do modelo matemático, com validade para ambos os sub-domínios de fluxo. O problema é fisicamente conservativo no sentido da massa, ou seja, o volume de fluido que é inserido no sistema acoplado de escoamento deve equilibrar o que sai deste mesmo sistema. Com relação à quantidade de movimento, nesse problema físico o momentum linear, deve ser equilibrado pelo conjunto de forças solicitantes, devido às quais o fluido encontra-se em movimento.

Resultam daqueles princípios as leis de conservação da massa e de balanço de momentum linear. Com relação à primeira destas, para o fluido em escoamento

mento superficial (livre), esta lei pode ser substituída pela condição cinemática de incompressibilidade que assegura a conservação da massa para o fluido com este comportamento. Consideramos a seguir as equações representativas destas leis em coordenadas generalizadas, na forma tridimensional no espaço.

No desenvolvimento das equações, da forte fraca para a forte, considerou-se uma configuração deformada, $B_t \equiv \Omega_f|_{\wp}$ (para o subdomínio superficial), ou $B_t \equiv \Omega_p|_{\wp}$ (para o subdomínio subsuperficial), em relação ‘as respectivas configurações de referência, B_0 .

O tratamento matemático do problema de escoamento acoplado, aqui abordado, foram adotadas como incógnitas, ou como variáveis primitivas, do modelo matemático: a velocidade de escoamento do fluido no domínio superficial, \mathbf{v} , a pressão total, p , neste fluido, e a posição da superfície livre, η ; enquanto para o meio poroso foram consideradas a carga hidráulica, H , e a velocidade de escoamento, \mathbf{v}_D dada pela Lei de Darcy.

2.3.1 Escoamento superficial

Respectivamente para o balanço de momentum e a conservação da massa, na forma fraca, para o meio superficial, Ω_f :

$$\frac{D}{Dt} \int_{\Omega_f} \rho_f \mathbf{v} d\Omega_f = \int_{\Omega_f} \rho_f \mathbf{b} d\Omega_f + \int_{\partial\Omega_f} \sigma \mathbf{n} d\partial\Omega_f \quad (2.1)$$

$$\int_{\Omega_f} \text{div} \mathbf{v} d\Omega_f = 0 \Leftrightarrow \frac{D}{Dt} \int_{\Omega_f} \rho_f d\Omega_f = 0 \quad (2.2)$$

onde ρ_f é a massa específica da água, $\mathbf{v} := \mathbf{v}(x, y, z, t)$ o campo de velocidade. Na eq. (2.1) \mathbf{b} simboliza as forças de corpo, ou de campo (ação à distância), \mathbf{n} é o vetor normal, sendo μ a viscosidade da água. O tensor de tensões de Cauchy, para o fluido incompressível Newtoniano, é:

$$\sigma = -p\mathbf{I} + 2\mu\nabla^s \mathbf{v} \quad (2.3)$$

onde p é a pressão total no fluido. A derivada material (total ou substantiva) foi explicitada por $\frac{D}{Dt}(\cdot) = \frac{\partial}{\partial t}(\cdot) + \mathbf{v} \cdot \nabla(\cdot)$, e a parcela simétrica do tensor de deformações:

$$\mathbf{D} \equiv \nabla^s \mathbf{v} = \frac{1}{2}(\nabla^T \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}) \quad (2.4)$$

Na determinação da forma forte da eq. (2.1) foi empregada a derivação pela Regra de Leibnitz,

$$\frac{D}{Dt} \int_{\Omega_f} \rho_f d\Omega_f = \int_{\Omega_f} \frac{D}{Dt}(\rho_f d\Omega_f) - \rho_f \frac{d\Omega_f}{dt} \quad (2.5)$$

e considerou-se a derivada material de um volume na configuração deformada com relação à de referência.

Da eq. (2.1) resulta a forma forte da equação de momentum:

$$\rho_f \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\rho_f \mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = \rho_f \mathbf{b} + \text{div} \sigma \quad (2.6)$$

enquanto a conservação de massa tem equivalência na consideração da condição cinemática:

$$\text{div} \mathbf{v} = 0 \quad (2.7)$$

em que "div" é o operador divergência no referencial tridimensional (3D), tal que $\text{div}(\dots) \equiv \nabla \cdot (\dots)$.

2.3.2 Percolação em meio poroso

Considerando-se a conservação da massa e o balanço de momentum, nesta ordem, resultam as formas fracas das equações para este sub-domínio. Analogamente à eq. (2.2), para o meio poroso, Ω_p , seja um volume de fluido em movimento, onde este fluido é dado por uma solução composta por duas fases, ar e água. Nesta solução, ρ_α especifica a massa específica real para a fase α da solução em percolação no solo, em uma configuração deformada, B_t , em relação a uma configuração de

referência, B_0 . Para o superíndice "ap" referindo-se à massa específica aparente:

$$\frac{D}{Dt} \int_{\Omega_p} \rho_\alpha^{ap} d\Omega_p = 0 \quad (2.8)$$

fornece a equação de conservação de massa. A velocidade darcyniana, \mathbf{v}_D , é postulada por:

$$\mathbf{v}_D = S_\alpha \phi \mathbf{v}_\alpha = -\mathbf{K} \nabla H \quad (2.9)$$

onde $\mathbf{K} = k\mathbf{I}$ é o tensor de condutividade hidráulica, dados em termos da condutividade característica, k , e do tensor identidade, \mathbf{I} . A eq. (2.9) é a própria Lei de Darcy. Neste meio poroso define-se a carga hidráulica, H , como sendo a coluna de água equivalente que ascenderia no ponto como função da posição em relação ao nível de referência, z , e de uma sucção capilar, ψ , equivalente à elevação (associada à pressão capilar) devido à aderência do fluido nos grãos do meio poroso. Assim, a carga hidráulica é tal que $H = \psi + z$. Estando a fase "ar" da solução à pressão atmosférica, continuamente interconectada, em todos os poros intercomunicantes da rede de canais entre os grãos da matriz sólida, somente a fase "água", indicada aqui pelo subíndice " $\alpha = f$ ", encontra-se em escoamento nos intertúncios desta rede.

Da eq. (2.8) pela aplicação da Regra de Leibnitz, e da derivada material, obtém-se a forma diferencial para a equação de conservação da massa neste meio. A massa específica aparente é dada com relação à massa específica real por $\rho_\alpha^{ap} = S_\alpha \phi \rho_\alpha$. A saturação é dada por S_α , e ϕ denota a porosidade do meio, relação entre o volume de vazios e o volume total. Assim, da eq. (2.8) resulta, para a fase água, tal que $\alpha \equiv f$:

$$\frac{\partial}{\partial t} (S_\alpha \phi \rho_\alpha) + \text{div} (S_\alpha \phi \rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha) = 0 \quad (2.10)$$

Sendo a saturação do fluido água dada como função da sucção capilar, ou da pressão capilar:

$$\frac{\partial}{\partial t} S_f = \frac{\partial S_f}{\partial \psi} \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (2.11)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} \equiv \frac{\partial H}{\partial t} \quad (2.12)$$

Por estas relações resulta para a fase fluida, água, considerada incompressível, a forma da equação de Richards em termos de carga hidráulica e da velocidade darcyniana de percolação, da eq. (2.12) na eq. (2.11) e destas na eq. (2.10), e considerando-se a relação eq. (2.9) no segundo termo da eq. (2.10):

$$S_0 \frac{\partial H}{\partial t} + \text{div}(\mathbf{v}_D) = 0 \quad (2.13)$$

onde S_0 é a capacidade hidráulica do meio poroso, dada por:

$$S_0 = \phi \frac{\partial S_f}{\partial \psi} \quad (2.14)$$

2.4 Formulação contínua do modelo de escoamento

A parcela do domínio correspondente ao sistema superficial, canais de escoamento da bacia hidrográfica, pode ser definida por um domínio, Ω_f , do fluido superficial em escoamento com superfície livre, tal que:

$$\Omega_f = \{(x, y, z) | (x, y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2, z \in (h(x, y), \eta(x, y, t))\}$$

para $h(x, y)$ definindo a posição do leito da calha de escoamento do fluido em relação a um plano de referência, z a posição do elemento fluido em relação a este mesmo plano de referência arbitrário, e $\eta(x, y, t)$ a posição da superfície livre. Consideramos por hipótese $h(x, y)$ invariável com o tempo neste modelo, e η e h referidos ao plano de referência. As coordenadas x, y e z são espaciais cartesianas e t a coordenada temporal.

Como a física do problema considera o acoplamento entre o sistema de escoamento superficial do fluido hídrico, e o sistema de percolação em meio poroso, subsuperficial, define-se o domínio:

$$\Omega_p = \{(x, y, z) | (x, y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2, z \in (0, h(x, y))\}$$

referente ao meio poroso, tal que:

$$\hat{\Omega} = \Omega_f \cup \Omega_p$$

Neste trabalho, porém, o modelo computacional será solucionado como $2D - \eta$, ou seja, bidimensional na direção planar, e considerando a posição da superfície livre, η , como uma incógnita do problema; assim as parcelas das incógnitas ortogonais ao plano de referência são referenciadas à direção do eixo cartesiano z . Adotamos este procedimento no desenvolvimento da formulação do modelo.

2.4.1 Escoamento com superfície livre

Postulou-se a pressão total ao longo da coluna de água por:

$$p = \rho g(\eta - z) + q \quad (2.15)$$

onde $q := q(x, y, z, t)$ é uma correção hidrodinâmica para a pressão total, $g := g(z)$ é a aceleração da gravidade atuante unicamente no sentido vertical, e $\rho_f := \rho_f(x, y, z)$ é a massa específica do fluido. Na eq. (2.15) o primeiro termo à direita da igualdade é a própria pressão hidrostática, aquela determinada pela altura da coluna de água (em relação a um plano de posição z). O segundo termo está associado ao movimento do fluido, ou seja, à existência de um campo de velocidades no mesmo.

O vetor de velocidades, foi considerado, em termos do procedimento $2D - \eta$ como $\mathbf{v} = (\mathbf{u}, w)^T$, para $\mathbf{u} := \mathbf{u}(x, y, z, t) = (u, v)^T$ a componente de velocidade planar (2D) vetorial, paralela ao plano cartesiano $z=0$ de referência, $w := w(x, y, z, t)$ a componente vertical do campo de velocidades (sentido da coordenada z) do fluido, na direção da variação de η . Quanto ao vetor de forças, este ficou segmentado, segundo esta mesma abordagem, por $\mathbf{b} = (\mathbf{b}_{xy}, b_z)^T$

No subdomínio referente ao escoamento em canal, em presença de superfície livre, as condições de contorno são estabelecidas em termos de condição cinemática

e condição hidrodinâmica; para a superfície livre - uma interface entre a água em escoamento e o ar atmosférico - e para o leito do canal - a interface deste com o meio poroso.

Para a superfície livre em contato com o ar a condição cinemática determina que a derivada total (em relação ao tempo) da posição da superfície livre é equivalente à velocidade vertical do fluido na superfície, assim:

$$w|_{\eta} = \frac{D\eta}{Dt} = \frac{\partial\eta}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla\eta \quad (2.16)$$

$$w|_{\eta} = \frac{D\eta}{Dt} = \frac{\partial\eta}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla_{2D}\eta \quad (2.17)$$

onde $\mathbf{v} = (u, v, w)^T$ e $\mathbf{u} = (u, v)^T$ são respectivamente as formas tridimensional e bidimensional planar do campo vetorial de velocidade do fluido em escoamento livre. As componentes escalares $u = u(x, y, z, t)$, $v = v(x, y, z, t)$ e $w = w(x, y, z, t)$ são associadas às direções longitudinal e transversal horizontal, e à direção vertical, respectivamente, à do escoamento, e $\eta = \eta(x, y, t)$ à posição da superfície livre. Os operadores ∇ e ∇_{2D} são respectivamente a forma tridimensional e planar do gradiente.

A pressão na superfície é livre dada pela identidade com a pressão atmosférica:

$$p = p_{atm} \quad (2.18)$$

Na presente etapa de desenvolvimento do modelo computacional considerou-se que o efeito de deslocamento de ar atmosférico (vento) sobre a superfície livre não exerça influência sobre o fluido, assim a tensão de cisalhamento, nesta superfície, é tomada como identicamente nula na formulação do problema:

$$\frac{\partial \mathbf{v}_{pf}}{\partial z}|_{\eta} = 0$$

onde $\mathbf{v}_{pf} = (u, v)^T$ é o vetor de velocidade planar do fluido em escoamento livre.

O leito do canal de escoamento, ou o que é equivalente à superfície superior

do meio poroso em contato com a água em escoamento livre, determina a interface de acoplamento entre os dois sub-domínios. A posição do leito deste canal é dada então por $h := h(x, y)$, e \mathbf{n} determina o vetor normal a esta superfície.

Nesta interface a velocidade vertical do fluido, ortogonal à superfície de acoplamento, é não-nula. A própria superfície foi considerada imóvel e sem acúmulo (ou perda) de material sólido devido à corrente de escoamento:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = 0 \quad (2.19)$$

além disso à continuidade de fluxo de fluido através da interface, é tal que:

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{v}_D \cdot \mathbf{n} \quad (2.20)$$

resultando para a componente vertical da velocidade do fluido na interface de acoplamento:

$$w|_h = \frac{Dh}{Dt} + \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = \frac{\partial h}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla_{2D} h + \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{u} \cdot \nabla_{2D} h + \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \quad (2.21)$$

A condição cinemática de incompressibilidade, $div \mathbf{v} = 0$, segundo as componentes do campo \mathbf{v} , segundo a orientação espacial $2D - \eta$, fica dada por:

$$\nabla_{2D} \cdot \mathbf{u} + \frac{\partial}{\partial z} w = 0 \quad (2.22)$$

Integrando-a verticalmente segundo a direção z , obtém-se a equação da superfície livre, com relação à lâmina de água do meio superficial de escoamento:

$$\int_{h(x,y)}^{\eta(x,y,t)} (\nabla_{2D} \cdot \mathbf{u} + \frac{\partial}{\partial z} w) dz = 0 \quad (2.23)$$

considerando-se a Lei de Leibnitz para a integração:

$$\nabla_{2D} \cdot \int_{h(x,y)}^{\eta(x,y,t)} \mathbf{u} dz = \int_{h(x,y)}^{\eta(x,y,t)} \nabla_{2D} \cdot \mathbf{u} dz + \mathbf{u} \cdot \nabla_{2D} \eta - \mathbf{u} \cdot \nabla_{2D} h \Leftrightarrow \quad (2.24)$$

$$\Leftrightarrow \nabla_{2D} \cdot \int_{h(x,y)}^{\eta(x,y,t)} \mathbf{u} dz - \mathbf{u} \cdot \nabla_{2D} \eta + \mathbf{u} \cdot \nabla_{2D} h = \int_{h(x,y)}^{\eta(x,y,z,t)} \nabla_{2D} \cdot \mathbf{u} dz \quad (2.25)$$

e as derivadas parciais para a variação vertical da superfície livre e da profundidade sob a lâmina de água:

$$\int_{h(x,y)}^{\eta(x,y,t)} \left(\frac{\partial}{\partial z} w \right) dz = [w]_h^\eta = w|_\eta - w|_h \Rightarrow \quad (2.26)$$

$$\Rightarrow \int_{h(x,y)}^{\eta(x,y,t)} \left(\frac{\partial}{\partial z} w \right) dz = \frac{\partial \eta}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla_{2D} \eta - \mathbf{u} \cdot \nabla_{2D} h - \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \quad (2.27)$$

substituindo-se as eqs. (2.27) e (2.25) na eq. (2.23), obtém-se a equação para a superfície livre:

$$\frac{\partial}{\partial t} \eta + \nabla_{2D} \cdot \int_h^\eta \mathbf{u} dz = \tilde{Q} \quad (2.28)$$

onde $\tilde{Q} = \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{v}_D \cdot \mathbf{n}$.

Com relação ao desenvolvimento da equação de balanço de momentum, considera-se o particionamento da eq. (2.6) segundo as direções planar e vertical do sistema de coordenadas, e pela incorporação das formas planar e vertical do vetor de forças de corpo e do Tensor de Cauchy:

$$\rho_f \frac{\partial(\mathbf{u}, w)^T}{\partial t} + (\rho_f(\mathbf{u}, w)^T \cdot \nabla)(\mathbf{u}, w)^T = \rho_f \mathbf{b}_{xy} + \rho_f b_z + \text{div}(-p\mathbf{I} + \mu \nabla(\mathbf{u}, w)) \quad (2.29)$$

considerando a aplicação da eq. (2.15) na eq. (2.29):

$$\frac{\partial \rho_f(\mathbf{u}, w)^T}{\partial t} + (\rho_f(\mathbf{u}, w)^T \cdot \nabla)(\mathbf{u}, w)^T = \rho_f \mathbf{b}_{xy} + \rho_f b_z + \text{div}((-\rho_f g(\eta - z) - q)\mathbf{I} + \mu \nabla(\mathbf{u}, w)) \quad (2.30)$$

e da consideração dos campos das variáveis pelas suas formas no sentido do referencial $2D - \eta$, nas direções planar e vertical, resultam as equações de balanço de momentum linear:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_f \mathbf{u} + (\rho_f \mathbf{u} \cdot \nabla_{2D}) \mathbf{u} + \left(\rho_f w \frac{\partial}{\partial z} \right) \mathbf{u} - \nabla_{2D} \cdot (\mu \nabla_{2D} \mathbf{u}) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{u} \right) +$$

$$+\rho_f g \nabla_{2D} \eta + \nabla_{2D} q = \rho_f \mathbf{b}_{xy} \quad (2.31)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_f w + (\rho_f \mathbf{u} \cdot \nabla_{2D}) w + \rho_f w \frac{\partial}{\partial z} w - \nabla_{2D} \cdot (\mu \nabla_{2D} w) - \frac{\partial}{\partial z} (\mu \frac{\partial}{\partial z} w) + \\ + \frac{\partial}{\partial z} q = \rho_f b_z \end{aligned} \quad (2.32)$$

2.4.2 Percolação em meio poroso

No subdomínio correspondente ao meio poroso, sendo o fluido em escoamento bifásico, o fenômeno de escoamento é também denominado percolação. Trata-se de movimento do fluido entre e em torno dos grãos ou partículas do meio, tomadas fixas em virtude da consideração de incompressibilidade para a matriz sólida do meio (solo).

As variáveis primitivas do problema para a percolação no meio poroso são a carga hidráulica e a velocidade do fluido (em termos da fase líquida), dadas com relação às leis que governam esta parte do problema.

Estando o meio poroso em contato com o ar atmosférico, somente parcialmente isolado deste, na região de contato com o fluido do canal de escoamento livre, admite-se que a região não saturada de fluido do meio poroso, a denominada região subsuperficial, possui seus poros (vazios entre os grãos da estrutura sólida) submetidos à pressão atmosférica. Esta hipótese viabiliza a adoção da condição hidrodinâmica:

$$p = p_{atm} \quad (2.33)$$

à semelhança da adotada para o fluido livre. Desta condição resulta a necessidade de determinação somente da pressão na fase água do fluido em percolação entre os poros deste meio. Da carga hidráulica resulta esta quantidade física, pelo produto da primeira pela massa específica e pela aceleração da gravidade. Assim, sendo tal carga uma variável associada à pressão nesta fase do percolante, pode ser considerada na interface entre os dois subdomínios de escoamento, o estabelecimento

de uma relação linear entre a carga hidráulica subsuperficial e a pressão total no fluido livre, uma função de continuidade. A última pressão obtida do nível da superfície livre e da pressão hidrodinâmica. Estas considerações vinculam a variação da posição da superfície livre com a pressão no fluido.

Da eq. (2.9) na eq. (2.13) obtém-se:

$$S_0 \frac{\partial H}{\partial t} + \text{div}(-\mathbf{K}\nabla H) = 0 \quad (2.34)$$

equação de Richards, unicamente para a fase líquida do fluido em escoamento, devido à consideração da hipótese (2.33), expressa em termos da carga hidráulica. A eq. (2.34) é uma equação diferencial parcial parabólica, descrevendo um processo difusivo: a variação da pressão da fase líquida do fluido percolando nos poros do meio poroso. A adoção desta forma para a equação de Richards viabiliza a associação de uma única variável ao escoamento subsuperficial. Assim, o seu emprego na solução da parcela subsuperficial do escoamento permite superar o problema de ponto de sela, associado ao cálculo das duas variáveis, a carga hidráulica e a velocidade (de Darcy) de escoamento. Considerando-se o segundo termo da eq. (2.34), e uma função \hat{H} , é possível estabelecer uma relação para correlacionar o produto desta função por este termo, assim:

$$\text{div}(-\mathbf{K}\hat{H}\nabla H) = \hat{H}\text{div}(-\mathbf{K}\nabla H) - \mathbf{K}\nabla\hat{H}\nabla H \quad (2.35)$$

onde a função \hat{H} será determinada no Capítulo 3. O sistema de equações do modelo matemático que rege o escoamento acoplado considera, assim, duas equações associadas ao balanço de momentum, respectivamente com relação às velocidades planar e vertical do fluido superficial, eqs. (2.28) e (2.30), uma equação, (2.28), construída para que seja possível determinar a posição da superfície livre do fluido em escoamento superficial, ou seja, sua elevação sobre a interface do canal superficial com o meio poroso, além da equação de incompressibilidade (2.22) do fluido neste sistema de escoamento, fechando o sistema de equações deste sub-

domínio. Para o meio poroso é adotada a eq. (2.34) permitindo-se contornar a necessidade de determinação de dois campos. A solução do problema acoplado foi desenvolvida pela adoção de um procedimento iterativo, que busca estabelecer a convergência entre a pressão total no fluido superficial e a pressão correspondente, obtida da carga hidráulica, no fluido percolando no meio poroso, em torno da interface de acoplamento. Detalhes deste processo são apresentados no Capítulo 4. Considerando-se o procedimento iterativo, o cálculo da velocidade de fluxo darcyiana é efetuado "a posteriori", ao final de cada passo de iteração, por meio de um pós-processamento determinado pela solução da equação correspondente, eq. (2.9), no sub-domínio associado ao meio poroso.

2.4.3 Condições de interface

Para escoamento de água em canal fluvial, com recarga do rio pelo aquífero ou o inverso, é necessário considerar a percolação subsuperficial acoplada ao escoamento da água com superfície livre.

O tratamento dos mecanismos de acoplamento considera a descontinuidade de tensões de cisalhamento - a abordagem de Beavers & Joseph (1967) para condição de não aderência na interface entre os sistemas de escoamento - continuidade do campo de velocidades ortogonal à interface de acoplamento e transferência de massa, e um compromisso entre os campos de pressão total, no fluido livre, e de carga hidráulica, no fluido em escoamento no meio poroso, em torno desta interface.

As componentes normais das velocidades no meio poroso e no fluido superficial são tomadas como de mesmo módulo e sentidos opostos, normais à interface de contato, eq. (2.35) a seguir:

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_f = \mathbf{v}_D \cdot \mathbf{n}_p \quad (2.36)$$

onde \mathbf{n}_f e \mathbf{n}_p são respectivamente os vetores normais à superfície de interface, no fluido em escoamento livre e no fluido em escoamento no meio poroso. Se-

gundo Beavers & Joseph (1967), admitido um parâmetro experimental adimensional, $\alpha_{BJ} = (0, 1; \dots; 4, 3)$, cujo valor depende das propriedades físicas do meio poroso, as componentes tangenciais daquelas velocidades, na interface, são admitidas descontínuas, resultando em condição de salto na tensão de cisalhamento, naquela interface,

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial z} = \frac{\alpha_{BJ}}{\sqrt{\text{tr} \mathbf{K}}} (\mathbf{u} - \mathbf{u}_p) \quad (2.37)$$

onde \mathbf{u}_p é a componente planar do campo de velocidade \mathbf{v}_D no meio poroso. Com relação à pressão no fluido em torno da interface resulta a relação que estabelece uma dependência de continuidade entre a pressão total no fluido em escoamento superficial, e a pressão no fluido percolando subsuperficialmente, transformada da carga hidráulica, tal que:

$$p = \rho_f g H \quad (2.38)$$

A eq. (2.38) estabelece, assim, relação linear entre a pressão total no fluido em escoamento em presença de superfície livre e a carga hidráulica no meio poroso, em torno da interface de troca de massa.

Nas equações (2.36) a (2.38) o subíndice p indica o meio poroso e o subíndice f é relativo ao fluido livre.

2.4.4 Equacionamento do modelo matemático

O modelo matemáticos, contínuo, que rege, então o problema, é dado pelas eqs. (2.31), (2.32), (2.22), (2.28), (2.13), e (2.9). Resumidamente:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_f \mathbf{u} + (\rho_f \mathbf{u} \cdot \nabla_{2D}) \mathbf{u} + (\rho_f w \frac{\partial}{\partial z}) \mathbf{u} - \nabla_{2D} \cdot (\mu \nabla_{2D} \mathbf{u}) - \frac{\partial}{\partial z} (\mu \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{u}) + \\ + \rho_f g \nabla_{2D} \eta + \nabla_{2D} q = \rho_f \mathbf{b}_{xy} \end{aligned} \quad (2.39)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_f w + (\rho_f \mathbf{u} \cdot \nabla_{2D}) w + \rho_f w \frac{\partial}{\partial z} w - \nabla_{2D} \cdot (\mu \nabla_{2D} w) - \frac{\partial}{\partial z} (\mu \frac{\partial}{\partial z} w) +$$

$$+\frac{\partial}{\partial z}q = \rho_f b_z \quad (2.40)$$

$$\nabla_{2D} \cdot \mathbf{u} + \frac{\partial}{\partial z}w = 0 \quad (2.41)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\eta + \nabla_{2D} \cdot \int_h^\eta \mathbf{u} dz = \tilde{Q} \quad (2.42)$$

$$S_0 \frac{\partial H}{\partial t} + \text{div}(\mathbf{v}_D) = 0 \quad (2.43)$$

$$\mathbf{v}_D = -\mathbf{K}\nabla H \quad (2.44)$$

Capítulo 3

Formulação Discreta do Modelo Acoplado

3.1 Formulação fraca das equações

Para o problema de escoamento com superfície livre definido no domínio Ω_f , escolhemos como funções teste, candidatas à solução deste problema as funções admissíveis $\mathbf{u} \in U, w \in W, p, q \in P, \eta \in N$, onde:

$$U = \{ \mathbf{u} \in [H^1(\Omega_f)]^2 \mid \mathbf{u} = \mathbf{u}_0 \in \partial\Omega_f \}$$

$$W = \{ w \in [H^1(\Omega_f)] \mid w = w_0 \in \partial\Omega_f \}$$

$$P = \{ p \in [L^2(\Omega_f)] \}$$

$$N = \{ \eta \in [L^2(\Omega_f)] \}$$

definindo-se os espaços de Sobolev, conforme Kesavan (1989):

$$L^2 = L^2(\hat{\Omega}) = \{ \omega \mid \int_{\hat{\Omega}} \omega^2 d\hat{\Omega} \leq \infty \}$$

$$H^1 = H^1(\hat{\Omega}) = \{ \omega \in L^2(\hat{\Omega}) \mid D^1\omega \in L^2(\hat{\Omega}) \}$$

onde H^1 é um espaço de Hilbert.

Para funções peso, ou de ponderação para a formulação variacional, intro-

duzimos as funções $\hat{\mathbf{u}} \in \hat{U}$, $\hat{w} \in \hat{W}$, $\hat{q} \in \hat{P} = P$, $\hat{\eta} \in \hat{N} = N$, definidas nos espaços:

$$\hat{U} = \{ \hat{\mathbf{u}} \in [H_0^1(\Omega_f)]^2 | \hat{\mathbf{u}} = \mathbf{0} \in \partial\Omega_f \}$$

$$\hat{W} = \{ \hat{w} \in [H_0^1(\Omega_f)] | \hat{w} = 0 \in \partial\Omega_f \}$$

Para o problema de percolação no meio poroso, definido no domínio Ω_p , onde $\mathbf{v}_D \in V_D$ e $H \in H_h$ são as funções admissíveis, tal que:

$$V_D = \{ \mathbf{v}_D \in [L^2(\Omega_p)]^3 | \frac{\partial \mathbf{v}_D}{\partial x_i} = \mathbf{c}_1 \in \partial\Omega_p \}$$

$$H_h = \{ H \in [H^1(\Omega_p)] | H = H_0 \in \partial\Omega_p \}$$

e sendo os espaços das funções peso dados por:

$$\hat{V}_D = \{ \hat{\mathbf{v}}_D \in [L^2(\Omega_p)]^3 | \frac{\partial \hat{\mathbf{v}}_D}{\partial x_i} = \mathbf{0} \in \partial\Omega_p \}$$

$$\hat{H}_h = \{ \hat{H} \in [H_0^1(\Omega_p)] | \hat{H} = 0 \in \partial\Omega_p \}$$

para \mathbf{c}_1 uma constante real.

Com estas definições é possível propor a formulação variacional do problema definido pelas eqs. (2.22), (2.28), (2.31), (2.32), e (2.34) que consiste em:

Dados ν, g, b_{xy}, b_z, S_0 e \mathbf{K} , determinar as incógnitas $(\mathbf{u}, w, q, \eta) \in (U, W, P, N)$, definidas em Ω_f , e $H \in H_h$, definida em Ω_p , tal que para cada instante de tempo t , e para todo $(\hat{\mathbf{u}}, \hat{w}, \hat{q}, \hat{\eta})$ em Ω_f , e \hat{H} em Ω_p , sejam satisfeitas simultaneamente:

$$\int_{\Omega_f} [\hat{\mathbf{u}} \cdot \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u} + \hat{\mathbf{u}} \cdot (\mathbf{u} \cdot \nabla_{2D}) \mathbf{u} + \hat{\mathbf{u}} \cdot (w \frac{\partial}{\partial z}) \mathbf{u} + \nu \nabla_{2D} \hat{\mathbf{u}} \cdot \nabla_{2D} \mathbf{u} + \nu \frac{\partial \hat{\mathbf{u}}}{\partial z} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial z} + \eta g \nabla_{2D} \cdot \hat{\mathbf{u}} + q \nabla_{2D} \cdot \hat{\mathbf{u}}] d\Omega_f = \int_{\Omega_f} \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{b}_{xy} d\Omega_f + \int_{\partial\Omega_f} [q \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{n} + \nu \hat{\mathbf{u}} (\mathbf{n} \cdot \nabla_{2D}) \mathbf{u} + \eta g \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{n}] d\partial\Omega_f \quad (3.1)$$

$$\int_z [\hat{w} \frac{\partial}{\partial t} w + \hat{w} (\mathbf{u} \cdot \nabla_{2D}) w + \hat{w} (w \frac{\partial}{\partial z}) w + \nu \nabla_{2D} \hat{w} \cdot \nabla_{2D} w + \nu \frac{\partial \hat{w}}{\partial z} \frac{\partial w}{\partial z} + q \frac{\partial}{\partial z} \hat{w}] dz =$$

$$\int_z \hat{w} b_z dz + [q \hat{w} + \hat{w} \mathbf{n} \cdot \nabla w]_h^\eta \quad (3.2)$$

$$\int_{\Omega_f} \hat{q} \nabla_{2D} \cdot \mathbf{u} d\Omega_f + \int_z \hat{q} \frac{\partial}{\partial z} w dz = 0 \quad (3.3)$$

$$\int_{\Omega_f} \hat{\eta} [\frac{\partial}{\partial t} \eta + \nabla_{2D} \cdot \int_h^\eta \mathbf{u} dz - \tilde{Q}] d\Omega_f = 0 \quad (3.4)$$

em Ω_f , e, considerando-se a equação (2.35):

$$\int_{\Omega_p} S_0 \hat{H} \frac{\partial H}{\partial t} d\Omega_p + \int_{\Omega_p} \mathbf{K} \nabla \hat{H} \cdot \nabla H d\Omega_p = \int_{\partial\Omega_p} \mathbf{K} \hat{H} \nabla H \cdot \mathbf{n} d\partial\Omega_p \quad (3.5)$$

em Ω_p ; estando estas equações sujeitas a condições de restrição e condições na interface, como especificado no Capítulo 2. Resumidamente, à restrição:

$$p = \rho_f g H \quad (3.6)$$

em $\partial d\Omega_f \cap \Omega_p$, e

$$p = \rho_f g (\eta - z) + q \quad (3.7)$$

em Ω_f , e sujeito às condições de interface:

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_f = \mathbf{v}_p \cdot \mathbf{n}_p \quad (3.8)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial z} = \frac{\alpha_{BJ}}{\sqrt{\text{tr} \mathbf{K}}} (\mathbf{u} - \mathbf{u}_p) \quad (3.9)$$

em $\partial d\Omega_f \cap \Omega_p$. Neste problema variacional ficam adotadas as identidades para a viscosidade cinemática, $\nu = \frac{\mu}{\rho_f}$, e para a pressão (correção) hidrodinâmica cinemática, $q^* = \frac{q}{\rho_f}$, omitindo-se o * nesta última, por simplicidade de notação.

3.2 Recuperação da velocidade darcyniana

A solução do sistema de eqs. (3.1) a (3.5), fica estabelecida ao final de cada iteração em cada passo de tempo. O tratamento dado à equação de conservação de massa, de Richards, resulta no tratamento desta em uma forma parabólica, conforme a incorporação da eq. (2.9) na eq. (2.34), da consideração da eq. (2.35), resultando a eq. (3.5). Tal procedimento permite a execução do cálculo do campo darcyniano de velocidade *a posteriori*. Este campo encontra-se determinado pela solução da equação variacional correspondente, para $\mathbf{v}_D \in V_D$ e $\hat{\mathbf{v}}_D \in \hat{V}_D$:

$$\int_{\Omega_p} \mathbf{v}_D \cdot \hat{\mathbf{v}}_D d\Omega_p = - \int_{\Omega_p} \mathbf{K} \nabla H \cdot \hat{\mathbf{v}}_D d\Omega_p \quad (3.10)$$

também determinada ao fim de cada iteração, porém após a solução do sistema de equações que regem o problema. Por este pós-processamento do campo de velocidade da fase líquida do fluido no meio poroso, fecha-se o cálculo das variáveis primitivas do problema acoplado de escoamento.

3.3 Escolha dos elementos

Com relação ao operador na equação de Navier-Stokes, o termo difusivo ($\Delta \mathbf{v}$) envolve uma ordem de grandeza de diferenciação superior que a do termo de carga devido à pressão (∇p), o que exige que o polinômio de aproximação da função discreta para o campo de velocidade seja pelo menos uma ordem de grandeza superior que o polinômio aproximador associado à pressão. Quanto à física do problema a presença de uma superfície livre, a qual pode apresentar movimento vertical, permite que a entrada de massa no canal de escoamento superficial possa ser compensada pela oscilação desta superfície nessa direção. O fluido superficial comporta-se então respondendo ao acréscimo ou perda de massa (fluido) neste domínio. Quanto aos termos relativos à posição dessa superfície e associados à correção hidrodinâmica da pressão, a característica do operador só exige que as funções representativas destas variáveis estejam no espaço L^2 .

Também um compromisso entre os polinômios das funções aproximantes é verificado para a carga hidráulica, termo de carga no meio poroso, e a velocidade de Darcy. Neste caso, da relação entre os termos das equações, pelo tratamento dado à Equação de Richards, considerou-se o desacoplamento entre os campos de incógnitas relativas à percolação sub-superficial, explicitando os termos da equação em função da carga hidráulica, e adquirindo-se informação relativa à velocidade de percolação por pós-processamento. A solução de uma equação de 2ª ordem, parabólica, para a modelagem do escoamento no meio poroso, elimina as características de vinculação mútua entre as variáveis associadas à percolação neste meio, contornando-se o problema de ponto-de-sela e a necessidade de satisfação da condição de LBB (Gresho & Sani, 2000; Hughes, 2000). Para a determinação da combinação de polinômios das funções de aproximação, a carga hidráulica apresenta-se nas equações do escoamento em meio poroso com ordem de diferenciação superior à da velocidade de Darcy, requerendo o atendimento a este aspecto na escolha dos elementos finitos.

Condicionado por estes requisitos, e pela física do problema, a solução aproximada, construída com base nos espaços de elementos finitos, deve satisfazer simultaneamente (1º) o princípio de conservação de massa globalmente e (2º) a relação entre as diferenciações associadas aos operadores das equações. A construção da solução numérica é determinada pela combinação de funções polinomiais de aproximação. Além disso o refinamento da solução é condicionado pela representação do domínio contínuo pelo domínio discreto, associada às coordenadas locais de elementos de discretização. Assim a qualidade da solução numérica é condicionada (i) pela topologia da malha representativa do domínio considerado, (ii) pela combinação adequada de funções aproximantes, no domínio discreto, (iii) por imposições da física pertinente, e (iv) pelas propriedades do operador do sistema de equações.

Alguns dos elementos que atendem a estes compromissos são os adotados para testar a formulação no presente trabalho, tal como os elementos denominados na literatura por P_1P_0 , triangular, e seu análogo quadrangular Q_1P_0 , P_2P_0 e

seu correspondente Q_2P_0 , e P_2P_1dc juntamente com o semelhante elemento Q_2P_{-1} . Nesta nomenclatura de elementos, "P" indica elementos triangulares, "Q" elementos quadrangulares, os sub-índices a ordem do polinômio de interpolação associado: 0 - constante, 1 - linear, 2 - quadrático, e o sufixo "dc" descontinuidade do polinômio entre elementos vizinhos. O 1º desses pares de elementos, P_1P_0 e Q_1P_0 , não atende à condição LBB, assim denominada devido ao trabalho dos matemáticos que contribuíram nesta análise de estabilidade: Ladyshenskaya (1969), Babuska (1971), e Brezzi (1974). Os demais atendem a esta condição. Seguindo os passos de Gresho & Sani (2000) "elementos que satisfaçam esta condição de estabilidade apresentam convergência ótima ... e os que falham no teste" ... pela LBB... *podem ter bom comportamento*, "**podendo apresentar convergência ótima**" ... sem modos espúrios..." **mas a teoria é silenciosa a respeito**". Trilhando os passos de Fortin, Oden e Zienkiewicz dentre outros (Gallagher *et al*, 1985), conforme citado por Gresho e Sani, "conhecer qual elemento é estável não é, contudo, amplamente, um panorama completo da situação". Os resultados numéricos que obtivemos permitem inferir a validade desta orientação, pelo menos para problemas conforme o abordado nesta tese, e a necessidade de considerar como não definitiva a satisfação do critério da LBB.

3.4 Espaços de solução

As eqs. (3.1) a (3.5) condicionam a seleção dos espaços de funções teste e peso, bem como as respectivas características dos espaços de polinômios associados às funções discretas nos sub-domínios acoplados. Os espaços discretos adotados incorporam as propriedades dos espaços contínuos U , W , P , N , V_D e H_h de dimensões infinitas.

Para o fluido livre a relação entre os operadores aplicados sobre o campo de velocidades e sobre o campo de pressões exige a satisfação de uma relação entre as

ordens de grandeza dos polinômios de aproximação, tal que:

$$\dim(P^h) \leq \dim(U^h)$$

$$\dim(P^h) \leq \dim(W^h)$$

Para o fluido em percolação no meio poroso a relação entre operadores, dada entre as eqs. (3.5) e (3.10), considera o campo de velocidade darcyniano e o campo de carga hidráulica, tal que seja satisfeita a relação:

$$\dim(V_D^h) \leq \dim(H_h^h)$$

O espaço composto das funções teste, sobre as quais é construída a solução aproximada, e o das funções peso, de dimensão finita, em termos dos polinômios de aproximação, ficam explicitados, considerando-se genericamente \mathbf{P} um polinômio aproximador, associado a elementos triangulares. A ordem desta função é dada por m ou n ($n \leq m - 1$) para o meio superficial de escoamento, e por r ou s ($r \leq s - 1$) para o meio sub-superficial poroso. Os espaços \mathbf{P}_m , \mathbf{P}_n , \mathbf{P}_r , e \mathbf{P}_s , são portanto aqueles de interpolação das funções do domínio discretizado em elementos finitos.

Na elaboração do código computacional de solução do presente modelo foi elaborado tanto um código próprio, em linguagem Fortran90, como um código baseado na utilização de bibliotecas do aplicativo FreeFem++ (Pironneau *et al*, 2005; Gresho & Sani, 2000), de licença livre, em linguagem C++. Com relação ao código próprio, este foi desenvolvido com emprego de elementos quadrangulares, sendo então utilizados elementos Q_1Q_0 equivalente ao Q_1P_0 , Q_2Q_0 , bem como Q_2Q_1dc . Quanto ao código baseado no FreeFem++, foram empregados elementos triangulares P_1P_0 , P_2P_0 , bem como P_2P_1dc .

Com relação ao particionamento do domínio do problema, foi considerada uma malha de elementos finitos, obtida pela partição, $\tau^h(\Omega)$, dada por $nelm$ elementos finitos, deste domínio. Neste contexto, h_{Ω^e} é tal que a malha de dis-

cretização do domínio fica determinada pela união dos elementos finitos:

$$h_{\Omega^e} = \max \dim(\Omega^e) \quad \bar{\Omega} = \Omega_f \cup \Omega_p \quad (3.11)$$

$$\bar{\Omega} = \cup_{i=1}^{n_{elm}} (\Omega_i^e) \quad (3.12)$$

Os espaços das funções teste e peso, para ambos os sub-domínios de funções do problema podem ser postos, sob estas considerações como (Donea & Huerta, 2003):

$$U^h = \{ \mathbf{u} \in [H^1(\Omega_f)]^2 \mid \mathbf{u}|_{\Omega^e} \in \mathbf{P}_m^2 \forall \Omega_f^e \in \tau^h; \mathbf{u} = \mathbf{u}_0 \in \partial\Omega_f \}$$

$$W^h = \{ w \in [H^1(\Omega_f)] \mid w|_{\Omega^e} \in \mathbf{P}_m \forall \Omega_f^e \in \tau^h; w = w_0 \in \partial\Omega_f \}$$

$$P^h = \hat{P}^h = \{ p \in [L^2(\Omega_f)] \mid p|_{\Omega^e} \in \mathbf{P}_n \forall \Omega_f^e \in \tau^h \}$$

$$N^h = \hat{N}^h = \{ \eta \in [L^2(\Omega_f)] \mid \eta|_{\Omega^e} \in \mathbf{P}_n \forall \Omega_f^e \in \tau^h \}$$

$$\hat{U}^h = \{ \hat{\mathbf{u}} \in [H^1(\Omega_f)]^2 \mid \hat{\mathbf{u}}|_{\Omega^e} \in \mathbf{P}_m^2 \forall \Omega_f^e \in \tau^h; \hat{\mathbf{u}} = \mathbf{0} \in \partial\Omega_f \}$$

$$\hat{W}^h = \{ \hat{w} \in [H^1(\Omega_f)] \mid \hat{w}|_{\Omega^e} \in \mathbf{P}_m \forall \Omega_f^e \in \tau^h; \hat{w} = 0 \in \partial\Omega_f \}$$

$$V_D^h = \{ \mathbf{v}_D \in [L^2(\Omega_p)]^3 \mid \mathbf{v}_D|_{\Omega^e} \in \mathbf{P}_r^3 \forall \Omega_p^e \in \tau^h; \frac{\partial \mathbf{v}_D}{\partial x_i} = \mathbf{c}_2 \in \partial\Omega_p \}$$

$$Hh^h = \{ H \in [H^1(\Omega_p)] \mid H|_{\Omega^e} \in \mathbf{P}_s \forall \Omega_p^e \in \tau^h; H = H_0 \in \partial\Omega_p \}$$

$$\hat{V}_D^h = \{ \hat{\mathbf{v}}_D \in [L^2(\Omega_p)]^3 \mid \hat{\mathbf{v}}_D|_{\Omega^e} \in \mathbf{P}_r^3 \forall \Omega_p^e \in \tau^h; \frac{\partial \hat{\mathbf{v}}_D}{\partial x_i} = \mathbf{0} \in \partial\Omega_p \}$$

$$\hat{H}^h = \{ \hat{H} \in [H_0^1(\Omega_p)] \mid \hat{H}|_{\Omega^e} \in \mathbf{P}_s \forall \Omega_p^e \in \tau^h; \hat{H} = 0 \in \partial\Omega_p \}$$

para \mathbf{c}_2 uma constante real, e onde Ω_f^e e Ω_p^e são respectivamente os sub-domínios de cada elemento finito, respectivamente para o sub-domínio de escoamento superficial e subsuperficial.

3.5 Formulação em elementos finitos

A formulação matemática do problema foi desenvolvida com base na física envolvida, cuidando-se de atender aos princípios cinemáticos, e assegurando-se o atendimento aos vínculos entre as variáveis. Para a escolha da formulação em elementos finitos buscou-se atender, então, as relações matemáticas derivadas desta cinemática, resultando em serem satisfeitas as relações entre os operadores diferenciais associados àquela formulação e aplicados às variáveis primitivas do problema.

Ainda que a formulação não seja mista, no sentido do vínculo entre os campos de velocidade e pressão, porém estando estes campos indiretamente associados pela correção hidrodinâmica da pressão, objetivou-se evitar uma eventual ocorrência do problema de "locking" ou travamento (Zienkiewicz & Taylor, 1989). Este cuidado foi considerado para suprimir uma possível introdução deste problema pela escolha de elementos finitos. Então o campo de velocidades foi representado por função polinomial contínua, e o campo de pressões descontínuo, para o escoamento superficial; bem como para a representação da solução aproximada, respectivamente para a carga hidráulica e o campo de velocidade darcyniano, para o escoamento em meio poroso.

Para o desenvolvimento da formulação em elementos finitos por Galerkin, considerou-se o particionamento das funções de aproximação em parcelas relativas aos respectivos espaços de funções homogêneas e não-homogêneas. Postulando-se ϕ uma função vetorial genérica, representativa dos campos de velocidades, \mathbf{u} e \mathbf{w} , do escoamento livre superficial, e do campo de carga hidráulica, H . Considerando-se S^h , espaço de funções não-homogêneas, $S^h = (U^h, W^h, P^h, N^h, V_D^h, Hh^h)$, tal que $\phi^h \in S^h$ e $\phi_0 \in S^h$ e o espaço também genérico V^h de funções homogêneas, tal que $\phi_*^h \in V^h$, associado com a representação dos espaços de funções peso, $V^h = (\hat{U}^h, \hat{W}^h, \hat{P}^h, \hat{N}^h, \hat{V}_D^h, \hat{H}^h)$. A formulação em elementos finitos foi desenvolvida considerando-se o particionamento das funções teste, candidatas a solução. Assim:

$$\phi^h = \phi_0^h + \phi_*^h$$

onde:

$$\phi^h, \phi_0^h \in S^h; \quad \phi_*^h \in V^h$$

Sob tais considerações, e suprimindo-se os sub-índices * na notação das funções teste, o problema variacional fica formulado para as funções candidatas nos mesmos espaços que o das funções peso, satisfazendo as hipóteses da formulação de Galerkin. Os espaços finitos de funções admissíveis (ou teste), para o escoamento superficial, e para a percolação subsuperficial, ficam assim postos segundo os mesmos espaços das funções peso.

As funções discretas em elementos finitos ficam descritas, para o i -ésimo nó, em cada elemento, segundo Rao (1989) e Lapidus & Pinder (1999), para uma função genérica $\phi_j(x_i)$, e função de base N_i :

$$\phi_j^h = \sum_{i=1}^{nno} N_i \phi_j(x_i)$$

genericamente os espaços de elementos finitos ficam então gerados por:

$$S^h := span(N_i) \subset S$$

O problema variacional discreto em elementos finitos por Galerkin, fica então dado por:

Problema SCS, *Escoamento Acoplado Superficial – Subsuperficial* : Dados ν, g , e b_{xy}, b_z, S_0 e \mathbf{K} , determinar as incógnitas $(\mathbf{u}^h, w^h, q^h, \eta^h, \mathbf{v}_D^h, H^h) \in (U^h, W^h, P^h, N^h, V_D^h, H_h^h) \times]0, T[$, tal que, para todo $(\hat{\mathbf{u}}^h, \hat{w}^h, \hat{q}^h, \hat{\eta}^h, \hat{\mathbf{v}}_D^h, \hat{H}^h) \in (\hat{U}^h, \hat{W}^h, \hat{P}^h, \hat{N}^h, \hat{V}_D^h, \hat{H}^h)$ sejam verificadas:

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega_f^e} [\hat{\mathbf{u}}^h \cdot \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u}^h + \hat{\mathbf{u}}^h \cdot (\mathbf{u}^h \cdot \nabla_{2D}) \mathbf{u}^h + \hat{\mathbf{u}}^h \cdot (w^h \frac{\partial}{\partial z}) \mathbf{u}^h + \nu \nabla_{2D} \hat{\mathbf{u}}^h \cdot \nabla_{2D} \mathbf{u}^h + \nu \frac{\partial}{\partial z} \hat{\mathbf{u}}^h \cdot \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{u}^h + \\
& \quad \eta^h g \nabla_{2D} \cdot \hat{\mathbf{u}}^h + q^h \nabla_{2D} \cdot \hat{\mathbf{u}}^h] d\Omega_f^e = \int_{\Omega_f^e} \hat{\mathbf{u}}^h \cdot \mathbf{b}_{xy} d\Omega_f^e + \\
& \quad \int_{\partial\Omega_f^e} [q^h \hat{\mathbf{u}}^h \cdot \mathbf{n} + \nu \hat{\mathbf{u}}^h (\mathbf{n} \cdot \nabla) \mathbf{u}^h + \eta^h g \hat{\mathbf{u}}^h \cdot \mathbf{n}] d\partial\Omega_f^e, \quad \forall \hat{\mathbf{u}}^h \in \hat{U}^h \quad (3.13)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \int_{z^-}^{z^+} [\hat{w}^h \frac{\partial w^h}{\partial t} + \hat{w}^h (\mathbf{u}^h \cdot \nabla_{2D}) w^h + \hat{w}^h (w^h \frac{\partial}{\partial z}) + \nu \nabla_{2D} \hat{w}^h \cdot \nabla_{2D} w^h + \nu \frac{\partial \hat{w}^h}{\partial z} \frac{\partial w^h}{\partial z} + \\
& \quad q^h \frac{\partial \hat{w}^h}{\partial z}] dz^e = \int_{z^-}^{z^+} \hat{w}^h b_z dz^e + [q^h \hat{w}^h + \nu \hat{w}^h (\mathbf{n} \cdot \nabla) w^h + \hat{w}^h \frac{\partial w^h}{\partial z}]_{z^-}^{z^+}, \quad \forall \hat{w}^h \in \hat{W}^h \quad (3.14)
\end{aligned}$$

$$\int_{\Omega_f^e} \hat{q}^h \nabla_{2D} \cdot \mathbf{u}^h d\Omega_f^e + \int_{z^-}^{z^+} \hat{q}^h \frac{\partial}{\partial z} w^h dz^e = 0, \quad \forall \hat{q}^h \in \hat{P}^h \quad (3.15)$$

$$\int_{\Omega_f^e} \hat{\eta}^h [\frac{\partial}{\partial t} \eta^h + \nabla_{2D} \cdot \int_h^\eta \mathbf{u}^h dz - \tilde{Q}] d\Omega_f^e = 0, \quad \forall \hat{\eta}^h \in \hat{N}^h \quad (3.16)$$

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega_p^e} S_0 \frac{\partial H^h}{\partial t} \hat{H}^h d\Omega_p^e + \int_{\Omega_p^e} \mathbf{K} \nabla H^h \cdot \nabla \hat{H}^h d\Omega_p^e = \\
& \quad \int_{\partial\Omega_p^e} \mathbf{K} \hat{H}^h \nabla H^h \cdot \mathbf{n} d\partial\Omega_p^e, \quad \forall \hat{H}^h \in \hat{H}^h \quad (3.17)
\end{aligned}$$

sujeito a:

$$\mathbf{v}^h \cdot \mathbf{n}_f = \mathbf{v}_D^h \cdot \mathbf{n}_p, \quad em \quad \Gamma = d\partial\Omega_f \cap d\partial\Omega_p \quad (3.18)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}^h}{\partial z} = \frac{\alpha_{BJ}}{\sqrt{tr \mathbf{K}(H)}} (\mathbf{u}^h - \mathbf{u}_p^h), \quad em \quad \Gamma = d\partial\Omega_f \cap d\partial\Omega_p \quad (3.19)$$

e restrito a:

$$p^h = \rho_f g (\eta^h - z) + q^h, \quad em \quad \Omega_f \quad (3.20)$$

$$\rho_f g H^h = p^h, \quad em \quad d\partial\Omega_f \cap d\partial\Omega_p \quad (3.21)$$

em que estas duas últimas equações, (3.20) e (3.21), configuram o eixo de solução do

problema acoplado. A formulação adotada requer que seja empregado um esquema iterativo, com base na satisfação simultânea destas duas restrições, em torno da interface de acoplamento dos sub-domínios de escoamento. O atendimento a este requisito do problema em cada iteração é acompanhado, ao final da iteração, no interior de cada passo de tempo, da determinação do campo de velocidade de Darcy (a posteriori da solução do sistema de equações), pela solução da equação:

$$\int_{\Omega_p^e} \mathbf{v}_D^h \cdot \hat{\mathbf{v}}_D^h d\Omega_p^e = - \int_{\Omega_p^e} \mathbf{K} \nabla H^h \cdot \hat{\mathbf{v}}_D^h d\Omega_p^e, \quad \forall \hat{\mathbf{v}}_D^h \in \hat{V}_D^h \quad (3.22)$$

em que, na equação (3.17), \mathbf{u}_p^h é a componente planar do campo de velocidade darcyniano. Sobre este sistema de equações, após substituir as formas em elementos finitos das incógnitas, desenvolve-se a forma discreta do problema, em termos das funções de forma.

Adotou-se uma discretização temporal por Euler Implícito, e a linearização dos termos não-lineares por Picard, cujo desenvolvimento está explicitado no capítulo 4. Suprimindo-se o subíndice referente ao nó de aplicação do grau de liberdade, estando este implícito na própria variável, e permutando os subíndices entre a incógnita, funções candidatas a solução, e as funções peso, o problema variacional discreto fica posto na forma:

Problema SCS_h : *Escoamento Acoplado Superficial-Subsuperficial, discreto em elementos finitos*: Dados ν, g, b_{xy}, b_z, S_0 e \mathbf{K} , determinar as incógnitas $(u_j, w_j, q_j, \eta_j, v_{Dj}, H_j) \in (U^h, W^h, P^h, N^h, V_D^h, H_h^h) \times]0, T[$, tal que, para todo $(\hat{\mathbf{u}}_i, \hat{w}_i, \hat{q}_i, \hat{\eta}_i, \hat{\mathbf{v}}_{Di}, \hat{H}_i) \in (\hat{U}^h, \hat{W}^h, \hat{P}^h, \hat{N}^h, \hat{V}_D^h, \hat{H}^h)$ sejam verificadas:

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^{ngl(nno)} \hat{\mathbf{u}}_i \cdot \sum_{j=1}^{nno} \int_{\Omega_f^e} [N_i N_j \mathbf{u}_j^{n+1} - N_i N_j \mathbf{u}_j^n + \Delta t (N_i N_j \mathbf{u}_j^n \cdot \nabla_{2D} N_j \mathbf{u}_j^{n+1} + N_i N_j w_j^n \frac{\partial N_j}{\partial z} \mathbf{u}_j^{n+1} + \\ & \nu \nabla N_i \cdot \nabla N_j \mathbf{u}_j^{n+1} + \eta_j^{n+1} g N_j \nabla_{2D} N_i + q_j^{n+1} N_j \nabla_{2D} N_i)] d\Omega_f^e = \sum_{i=1}^{ngl(nno)} \hat{\mathbf{u}}_i \cdot \int_{\Omega_f^e} N_i \Delta t \mathbf{b}_\Omega d\Omega_f^e + \\ & \sum_{i=1}^{ngl(nno)} \hat{\mathbf{u}}_i \cdot \sum_{j=1}^{nno} \int_{\partial\Omega_f^e} \Delta t [N_i N_j q_j^n + \nu N_i \nabla N_j \mathbf{u}_j^n + \eta_j^n g N_i N_j] \mathbf{n} d\partial\Omega_f^e \quad (3.23) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=1}^{ngl(nno)} \hat{w}_i \sum_{j=1}^{nno} \int_{z^-}^{z^+} [N_i N_j w_j^{n+1} - N_i N_j w_j^n + \Delta t (N_i N_j \mathbf{u}_j^n \cdot \nabla_{2D} N_j w_j^{n+1} + N_i N_j w_j^n \frac{\partial N_j}{\partial z} w_j^{n+1} + \\
& \quad \nu \nabla N_i \cdot \nabla N_j w_j^{n+1} + q_j^{n+1} N_j \frac{\partial N_i}{\partial z})] dz^e = \\
& \sum_{i=1}^{ngl(nno)} \hat{w}_i \int_{z^-}^{z^+} \Delta t N_i b_z dz^e + \sum_{i=1}^{ngl(nno)} \hat{w}_i \sum_{j=1}^{nno} \Delta t [N_i N_j q_j^n + N_i \nabla_{2D} N_j w_j^n]_{z^-}^{z^+} \quad (3.24)
\end{aligned}$$

$$\sum_{i=1}^{ngl(nno)} \hat{q}_i \sum_{j=1}^{nno} \int_{\Omega_f^e} N_i \nabla_{2D} N_j \cdot \mathbf{u}_j^{n+1} d\Omega_f^e + \sum_{i=1}^{ngl(nno)} \hat{q}_i \sum_{j=1}^{nno} \int_{z^-}^{z^+} \frac{\partial N_j}{\partial z} w_j^{n+1} dz^e = 0 \quad (3.25)$$

$$\sum_{i=1}^{ngl(nno)} \hat{\eta}_i \sum_{j=1}^{nno} \int_{\Omega_f^e} [N_i N_j \eta_j^{n+1} - N_i N_j \eta_j^n + \Delta t (N_i \nabla_{2D} N_j \cdot \int_{z^-}^{z^+} \mathbf{u}_j^n dz^e - \tilde{Q})] d\Omega_f^e = 0 \quad (3.26)$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=1}^{ngl(nno)} \hat{H}_i \sum_{j=1}^{nno} \int_{\Omega_p^e} S_0 [N_i N_j H_j^{n+1} - N_i N_j H_j^n] d\Omega_p^e + \\
& \sum_{i=1}^{ngl(nno)} \hat{H}_i \sum_{j=1}^{nno} \int_{\Omega_p^e} \Delta t \mathbf{K} \nabla N_j \cdot \nabla N_i H_j^{n+1} d\Omega_p^e \\
& = \sum_{i=1}^{ngl(nno)} \hat{H}_i \sum_{j=1}^{nno} \int_{\partial\Omega_p^e} \Delta t \mathbf{K} N_i \nabla N_j \cdot \mathbf{n} H_j^n d\partial\Omega_p^e \quad (3.27)
\end{aligned}$$

sistema sujeito às eqs. (3.18) e (3.19), e restrito às eqs. (3.20) e (3.21), com avaliação da velocidade de percolação do fluido no meio poroso por:

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=1}^{ngl(nno)} \hat{w}_i \sum_{j=1}^{nno} \cdot \int_{\Omega_p^e} [N_i N_j \mathbf{v}_{Dj}^{n+1} - N_i N_j \mathbf{v}_{Dj}^n] d\Omega_p^e = \\
& - \sum_{i=1}^{ngl(nno)} \hat{w}_i \sum_{j=1}^{nno} \cdot \int_{\Omega_p^e} \Delta t \mathbf{K} N_i \nabla N_j H_j^{n+1} d\Omega_p^e \quad (3.28)
\end{aligned}$$

3.5.1 Montagem do sistema matricial

O sistema de equações assim desenvolvido fornece o sistema matricial, referenciado ao referencial global de coordenadas:

$$(\mathbf{M} + \Delta t(\mathbf{A} + \mathbf{C} + \mathbf{P}))\mathbf{s}^{n+1} = \Delta t\mathbf{F} + \mathbf{M}\mathbf{s}^n \quad (3.29)$$

onde \mathbf{M} determina a matriz de termos transientes (ou "de massa", por analogia com a mecânica dos sólidos), sendo \mathbf{A} , \mathbf{C} e \mathbf{P} , respectivamente, as matrizes de coeficientes (ou "de rigidez") para os termos difusivos, convectivos e de pressão, \mathbf{F} , o vetor de termos independentes (ou "de forças"), e onde \mathbf{s}^{n+1} é o vetor de incógnitas a determinar, enquanto \mathbf{s}^n é o vetor de termos conhecidos das incógnitas.

A montagem do sistema matricial, eq. (3.29), é efetuada pela incorporação nas matrizes globais das contribuições locais (nodais), de acordo com a incidência dos graus de liberdade locais no referencial global, tal que:

$$ndg = ngno * inc(im, j) - (ngl - 1) \quad im = 1, nelm \quad j = nne \quad (3.30)$$

onde "ndg" é o número do graus de liberdade no sistema de referência global, "ngno" o número de graus de liberdade por nó da malha, "inc(im,j)" a incidência (relação) entre o nó local (j) do elemento (im), "nelm" o número de elementos da malha e "nne" o número de nós do elemento.

Conforme as contribuições nodais elementares, estas são distribuídas no sistema matricial em correspondência ao referencial global de coordenadas segundo as relações de incidência do sistema local para o global. Nesta montagem cuidou-se de permutar as equações (e termos correspondentes) de incompressibilidade e de momentum planar, evitando-se o mal condicionamento do sistema. Assim, obtém-se as matrizes locais para o fluido em escoamento superficial, com relação às matrizes

de termos transientes, $\forall r, s = 1, \dots, 4$:

$$[m]_{(r,s)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & m_{22} & 0 & 0 \\ m_{31} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & m_{44} \end{pmatrix}$$

onde:

$$m_{rs} = \sum_{i=1}^{ngl(nno)} \sum_{j=1}^{nno} \int_{\Omega_f^e} N_i N_j d\Omega_f^e \quad (3.31)$$

enquanto, para os termos difusivos, obtém-se:

$$[a]_{(r,s)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_{22} & 0 & 0 \\ a_{31} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

onde:

$$a_{22} = \sum_{i=1}^{ngl(nno)} \sum_{j=1}^{nno} \int_{z^-}^{z^+} \Delta t \nu \nabla_{2D} N_i \cdot \nabla_{2D} N_j + \nu \frac{\partial N_i}{\partial z} \frac{\partial N_j}{\partial z} dz^e \quad (3.32)$$

$$a_{31} = \sum_{i=1}^{ngl(nno)} \sum_{j=1}^{nno} \int_{\Omega_f^e} \Delta t \nu \nabla_{2D} N_i \cdot \nabla_{2D} N_j + \nu \frac{\partial N_i}{\partial z} \frac{\partial N_j}{\partial z} d\Omega_f^e \quad (3.33)$$

resultando, para os termos convectivos:

$$[c]_{(r,s)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c_{22} & 0 & 0 \\ c_{31} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

onde:

$$c_{22} = \sum_{i=1}^{ngl(nno)} \sum_{j=1}^{nno} \int_{z^-}^{z^+} \Delta t N_i N_j w_j^n \frac{\partial N_j}{\partial z} dz^e +$$

$$\sum_{i=1}^{n_{gl}(nno)} \sum_{j=1}^{nno} \int_{z^-}^{z^+} \Delta t N_i N_j \mathbf{u}_j^n \cdot \nabla_{2D} N_j dz^e \quad (3.34)$$

$$c_{31} = \sum_{i=1}^{n_{gl}(nno)} \sum_{j=1}^{nno} \int_{\Omega_f^e} \Delta t N_i N_j w_j^n \frac{\partial N_j}{\partial z} d\Omega_f^e +$$

$$\sum_{i=1}^{n_{gl}(nno)} \sum_{j=1}^{nno} \int_{\Omega_f^e} \Delta t N_i N_j N_i N_j \mathbf{u}_j^n \cdot \nabla_{2D} N_j d\Omega_f^e \quad (3.35)$$

e para os termos de pressão e associados à posição da superfície livre:

$$[p]_{(r,s)} = \begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & p_{23} & 0 \\ 0 & 0 & p_{33} & p_{34} \\ p_{41} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

onde:

$$p_{11} = \sum_{i=1}^{n_{gl}(nno)} \sum_{j=1}^{nno} \int_{\Omega_f^e} \Delta t N_i \nabla_{2D} N_j d\Omega_f^e \quad (3.36)$$

$$p_{12} = \sum_{j=1}^{n_{gl}(nno)} \sum_{j=1}^{nno} \int_{z^-}^{z^+} \Delta t \frac{\partial N_j}{\partial z} dz^e \quad (3.37)$$

$$p_{23} = \sum_{i=1}^{n_{gl}(nno)} \sum_{j=1}^{nno} \int_{z^-}^{z^+} \Delta t N_j \frac{\partial N_i}{\partial z} dz^e \quad (3.38)$$

$$p_{34} = \sum_{i=1}^{n_{gl}(nno)} \sum_{j=1}^{nno} \int_{\Omega_f^e} \Delta t g N_j \nabla_{2D} N_i d\Omega_f^e \quad (3.39)$$

$$p_{33} = \sum_{i=1}^{n_{gl}(nno)} \sum_{j=1}^{nno} \int_{\Omega_f^e} \Delta t N_j \nabla_{2D} N_i d\Omega_f^e \quad (3.40)$$

$$p_{41} = \sum_{i=1}^{n_{gl}(nno)} \sum_{j=1}^{nno} \int_{\Omega_f^e} \Delta t N_i \nabla_{2D} N_j \cdot \int_{z^-}^{z^+} \mathbf{u}_j^n dz^e d\Omega_f^e \quad (3.41)$$

enquanto para o vetor de termos independentes resulta:

$$[f]_{(r)} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ f_4 \end{pmatrix}$$

em que:

$$f_1 = 0 \quad (3.42)$$

$$f_2 = \sum_{i=1}^{ngl(nno)} \int_{z^-}^{z^+} N_i b_z dz^e + \sum_{i=1}^{ngl(nno)} \sum_{j=1}^{nno} \int_{z^-}^{z^+} \Delta t [N_i N_j q_j^n + N_i \nabla_{2D} N_j w_j^n]_{z^-}^{z^+} \quad (3.43)$$

$$f_3 = \sum_{i=1}^{ngl(nno)} \int_{\Omega_f^e} N_i \Delta t \mathbf{b}_\Omega d\Omega_f^e +$$

$$\sum_{i=1}^{ngl(nno)} \sum_{j=1}^{nno} \int_{\partial\Omega_f^e} \Delta t [N_i N_j q_j^n + \nu N_i \nabla N_j \mathbf{u}_j^n + \eta_j^n g N_i N_j] \mathbf{n} d\partial\Omega_f^e \quad (3.44)$$

$$f_4 = \sum_{i=1}^{ngl(nno)} \sum_{j=1}^{nno} \int_{\Gamma} N_i N_j w_p \Gamma \quad (3.45)$$

Para a percolação subsuperficial são obtidos os vetores unitários locais, correspondentes à equação de Richards referida à carga hidráulica somente:

$$[mp]_{(r,s)} = (mp_{11})$$

$$[ap]_{(r,s)} = (ap_{11})$$

$$[fp]_{(r)} = (fp_1)$$

em que:

$$mp_{11} = \sum_{i=1}^{ngl(nno)} \sum_{j=1}^{nno} \int_{\Omega_f^e} N_i N_j d\Omega_f^e \quad (3.46)$$

$$ap_{11} = \sum_{i=1}^{n_{gl}(nno)} \sum_{j=1}^{nno} \int_{\Omega_p^e} \Delta t \mathbf{K} \nabla N_j \cdot \nabla N_i d\Omega_p^e \quad (3.47)$$

$$fp_1 = \sum_{i=1}^{n_{gl}(nno)} \sum_{j=1}^{nno} \int_{\partial\Omega_p^e} \Delta t \mathbf{K} N_i \nabla N_j \cdot \mathbf{n} H_j^n d\partial\Omega_p^e \quad (3.48)$$

Com relação às incorporações de condições de contorno ao sistema matricial, eq. (3.29), esta é efetuada de acordo com a técnica denominada na literatura como "hums e zeros", ou seja, os graus de liberdade prescritos são suprimidos nas matrizes de coeficiente e massa, e suas posições correspondentes na matriz (de massa) substituídas pelo valor unitário, enquanto todas as outras posições deste grau de liberdade são tomadas nulas. Assim o valor da incógnita correspondente a este grau de liberdade é o do valor prescrito. A técnica tem resultado equivalente à eliminação da linha correspondente ao grau de liberdade nestas matrizes.

3.6 Formulação de estabilização

3.6.1 Problema convectivo - dominante

Para fenômenos convectivo-dominantes a formulação clássica de elementos finitos por Galerkin apresenta reduzida capacidade de estabilização de soluções numéricas. Como consequência esse método permite a ocorrência de oscilações espúrias nos resultados referentes ao campo de velocidade, propagando-se por todo o domínio de interesse. Para prevenir este resultado indesejado, não-realístico na solução aproximada, são elaborados modelos de estabilização em elementos finitos, preservando a consistência variacional do modelo discretizado. Neste sentido a solução real do problema contínuo é também a solução do modelo discreto. Adotamos o *Consistent Approximated Upwind*, CAU, como método de estabilização, o qual pertence à classe de métodos consistentes de Petrov-Galerkin, fundamentados em formulações variacionais nos quais a magnitude de estabilização adicional introduzida ao método de Galerkin depende da magnitude do erro residual do processo de aproximação (Galeão & DoCarmo, 1988) da solução do problema.

Consideremos, para o escoamento superficial, as representações do vetor de

funções teste, ou de incógnitas, ϕ_j^{n+1} , e do vetor de funções peso, ψ_i , sendo estas funções vetoriais dadas por:

$$\phi_j^{n+1} = (\mathbf{u}_j, w_j, q_j, \eta_j)^{n+1} \quad (3.49)$$

$$\psi_i = (\hat{q}_i, \hat{w}_i, \hat{\mathbf{u}}_i, \hat{\eta}_i) \quad (3.50)$$

sendo o vetor de termos conhecidos dados por:

$$\phi_j^n = (\mathbf{u}_j, w_j, q_j, \eta_j)^n \quad (3.51)$$

$\forall i = 1, ngl(nno), j = 1, nno$. Consideremos então as eqs. (3.23) a (3.26). A forma geral do subsistema de equações, formado por estas, pode ser posto na forma abstrata:

$$s(\phi^h, \psi^h) = f(\psi^h) \quad (3.52)$$

tal que, sendo:

$$a(\phi^{h,n+1}, \psi^h) = [a]_{(r,s)} \psi_i \cdot \phi_j^{n+1} \quad (3.53)$$

$$c(\phi^{h,n}; \psi^h, \phi^{h,n+1}) = [c]_{(r,s)} \psi_i \cdot \phi_j^{n+1} \quad (3.54)$$

$$p(\phi^{h,n+1}, \psi^h) = [p]_{(r,s)} \psi_i \cdot \phi_j^{n+1} \quad (3.55)$$

$$f(\psi^{h,n}) = [f]_{(r)} \cdot \psi_i \quad (3.56)$$

$$(\psi^h, \phi^{h,n+1}) = [m]_{(r,s)} \psi_i \cdot \phi_j^{n+1} \quad (3.57)$$

$$(\psi^h, \phi^{h,n}) = [m]_{(r,s)} \psi_i \cdot \phi_j^n \quad (3.58)$$

resulta:

$$s(\phi^h, \psi^h) = (\psi^h, \phi^{h,n+1}) - (\psi^h, \phi^{h,n}) + a(\phi^{h,n+1}, \psi^h) +$$

$$c(\phi^{h,n}; \psi^h, \phi^{h,n+1}) + p(\phi^{h,n+1}, \psi^h)$$

$$\implies s(\phi^h, \psi^h) = (\psi^h, \phi^{h,n+1}) - (\psi^h, \phi^{h,n}) + d(\psi^h, \phi^{h,n+1}) \quad (3.59)$$

onde:

$$\begin{aligned} d(\phi^{h,n+1}, \psi^h) = & a(\phi^{h,n+1}, \psi^h) + c(\phi^{h,n}; \psi^h, \phi^{h,n+1}) + \\ & p(\phi^{h,n+1}, \psi^h) \end{aligned} \quad (3.60)$$

Assim, as formas $a(\phi^{h,n+1}, \psi^h)$, e $c(\phi^{h,n}; \psi^h, \phi^{h,n+1})$, são respectivamente as formas abstratas dos termos difusivos e convectivos, $p(\phi^{h,n+1}, \psi^h)$ a forma abstrata dos termos associados à pressão, e referente aos termos relativos à variação da posição da superfície livre, estando, finalmente, incorporados os termos de contorno no vetor de solicitações externas, $f(\psi^h)$.

As expressões dadas pelas eqs. (3.52) a (3.60) desta formulação, resultam em obter a representação abstrata, em uma expressão compacta, fundamentada na formulação de Galerkin, para aquele sistema de equações:

$$(\psi^h, \phi^{h,n+1}) + d(\psi^h, \phi^{h,n+1}) = f(\psi^h) + (\psi^h, \phi^{h,n}) \quad (3.61)$$

Considerando-se a totalidade das equações do sistema, da eq. (3.23) à eq. (3.28), parte dos termos que compõem as formas abstratas é inexistente para algumas destas equações, como explicitado no tópico (3.5.1). O sistema dado pela eq. (3.61) é representativo, na forma abstrata, da parcela superficial do sistema de equações do modelo computacional. A eq. (3.27) representa este sistema na forma matricial.

A solução deste sistema, resultando no vetor solução na forma como dado pela eq. (3.49), considera a aproximação pela composição de polinômios de aproximação constituindo a solução aproximada discreta, na forma de funções teste, por elementos finitos. Em termos da solução exata para aquele sistema, eqs. (2.22), (2.28), (2.31) e (2.32), o vetor solução é dado por:

$$\phi = (\mathbf{u}, w, q, \eta) \quad (3.62)$$

tal que este sistema de equações pode ser simbolizado por:

$$\mathbb{L}\phi = \mathbb{F} \quad (3.63)$$

onde:

$$\mathbb{L}\phi = \begin{pmatrix} \ell_1 \\ \ell_2 \\ \ell_3 \\ \ell_4 \end{pmatrix}$$

$$\mathbb{F} = \begin{pmatrix} \wp_1 \\ \wp_2 \\ \wp_3 \\ \wp_4 \end{pmatrix}$$

$$\ell_1 = \frac{\partial}{\partial t} \rho_f \mathbf{u} + (\rho_f \mathbf{u} \cdot \nabla_{2D}) \mathbf{u} + (\rho_f w \frac{\partial}{\partial z}) \mathbf{u} - \nabla_{2D} \cdot (\mu \nabla_{2D} \mathbf{u}) - \frac{\partial}{\partial z} (\mu \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{u}) +$$

$$\rho_f g \nabla_{2D} \eta + \nabla_{2D} q$$

$$\ell_2 = \frac{\partial}{\partial t} \rho_f w + (\rho_f \mathbf{u} \cdot \nabla_{2D}) w + \rho_f w \frac{\partial}{\partial z} w - \nabla_{2D} \cdot (\mu \nabla_{2D} w) - \frac{\partial}{\partial z} (\mu \frac{\partial}{\partial z} w) +$$

$$+ \frac{\partial}{\partial z} q$$

$$\ell_3 = \nabla_{2D} \cdot \mathbf{u} + \frac{\partial}{\partial z} w$$

$$\ell_4 = \frac{\partial}{\partial t} \eta + \nabla_{2D} \cdot \int_h^\eta \mathbf{u} dz$$

$$\wp_1 = \rho_f \mathbf{b}_{xy}$$

$$\wp_2 = \rho_f b_z$$

$$\wp_3 = 0$$

$$\wp_4 = \tilde{Q}$$

Sendo a eq. (3.49) uma solução aproximada, esta considera a existência de

um resíduo,

$$R(\phi^h) := (\mathbb{L}\phi - s(\phi^h, \psi^h)) + (\mathbb{F} - f(\psi^h)) \quad (3.64)$$

A necessária estabilização desta solução, para o desenvolvimento de uma abordagem convectivo-dominante, é alcançada pela incorporação (adição), nas eqs. (3.21) e (3.22), à formulação discreta de Galerkin, de termos de controle de oscilações espúrias no campo de velocidades, de forma consistente pela metodologia do CAU. Tais termos são desenvolvidos pela ponderação do resíduo na direção do escoamento (controle SUPG, "Streamline Upwind Petrov-Galerkin") e na direção da variação do gradiente de velocidade (controle CAU, "Consistent Approximate Upwind, Petrov-Galerkin"). A consideração de um campo fictício de velocidade que se aproxima do campo real na norma de L_2 , permite assegurar a minoração daquele resíduo e uma captura consistente da descontinuidade, dada pelo CAU, viabilizando o controle de oscilações espúrias no campo de velocidade do problema convectivo dominado, conforme Galeão *et al* (2004). Resultam assim os termos de estabilização como uma forma residual, eq. (3.65) a seguir, a ser adicionada à formulação de Galerkin. Para o domínio superficial de escoamento, em condições de convecção-dominante, a estabilidade extra provida pelo termo de estabilização, adicionado às equações de balanço de momentum, eqs. (3.23) e (3.24), é expressa em forma abstrata, com relação ao vetor de incógnitas, ϕ^h , pelo termo:

$$T_{CAU} = \sum_{e=1}^{nelm} \int_{\Omega} R(\phi^h) (\tau_s \phi^h \cdot \nabla \hat{\phi}^h + \tau_c \frac{\phi^h \nabla \phi^h + F_C(\phi^h)}{|\nabla \phi^h|^2} \phi^h \cdot \nabla \hat{\phi}^h) d\Omega^e \quad (3.65)$$

onde os termos τ_s e τ_c são os parâmetros de estabilização (respectivamente, funções de *up-wind* e de *consistent streamline*) característicos do procedimento do SUPG, conforme em Brooks & Hughes (1982), e do CAU, de Galeão & DoCarmo (1988). Na (3.65) $R(\phi^h)$ é referente ao resíduo da solução das equações, conforme de (3.64), e $F_C(\phi^h)$ é o resíduo composto dos termos temporal, difusivo, associados à pressão e à superfície livre, além do vetor de solicitações, daquelas equações. Na forma

abstrata:

$$F_C(\phi^h) = (\psi^h, \phi^{h,n+1}) - (\psi^h, \phi^{h,n}) + a(\psi^h, \phi^{h,n+1}) + p(\psi^h, \phi^{h,n+1}) - f(\psi^h) \quad (3.66)$$

A fig. 3.1 apresenta, de forma esquemática, o problema de escoamento acoplado a que se referem os resultados apresentados nas figs. 3.2 a 3.5. Modelou-se um sistema de acoplamento do escoamento de fluido superficial (em um canal inserido em meio poroso), Ω_f com superfície livre, com percolação de fluido neste meio, Ω_p . Foi arbitrada uma vazão de entrada na seção a jusante do canal de 5,0 m/s, para uma viscosidade do fluido livre de $1,002 \times 10^{-3}$, resultando em um número de Reynolds de 4.990,02. Trata-se de um problema de convecção dominante. O coeficiente de condutividade hidráulica do meio poroso foi tomado como $0,1 \times 10^{-5}$ (colunas referentes à estabilização do campo de velocidade, tabs. 1 e 2) e 10^{-7} (para resultados sem adoção do CAU, tabs. 1 e 2), e capacidade hidráulica de 0,02. O canal superficial simulado tem área transversal de $1,0 \text{ m}^2$ e profundidade de 1 m, sobre uma região não-saturada do meio poroso, com 1 m de profundidade. As soluções numéricas foram obtidas para a simulação de uma lâmina bi-dimensional de fluido-meio poroso longitudinal, paralela ao eixo do canal superficial de escoamento. Ambos os sub-domínios de escoamento foram discretizados por malha de dimensão característica 0,05m, com emprego de elementos finitos tipo P_2P_0 para aproximação da solução relativa ao escoamento superficial, e P_1P_0 para o mesmo procedimento quanto à percolação sub-superficial.

O foco do exemplo que forneceu os resultados plotados nas figs. 3.2 e 3.3, foi a componente planar do campo de velocidade de escoamento superficial, construindo-se um resultado comparativo entre a evolução da solução numérica sem estabilização, e a solução computacional desenvolvida com estabilização numérica do modelo pela incorporação do termo de estabilização do CAU.

A fig. 3.2 apresenta a evolução do perfil do campo de velocidade, em ausência do procedimento de estabilização adotado, comparativamente à solução obtida para 100 s de simulação com incorporação do termo de estabilização correspondente.

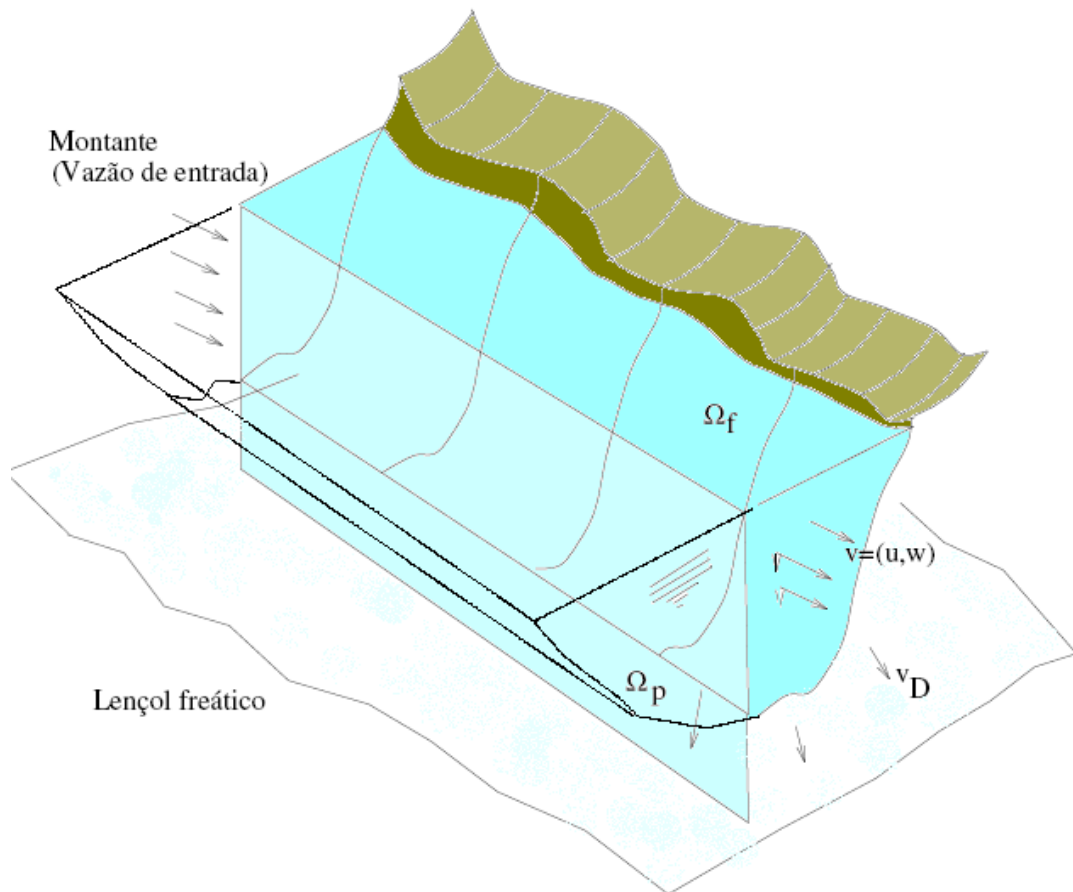


Figura 3.1: Seção longitudinal do sistema acoplado

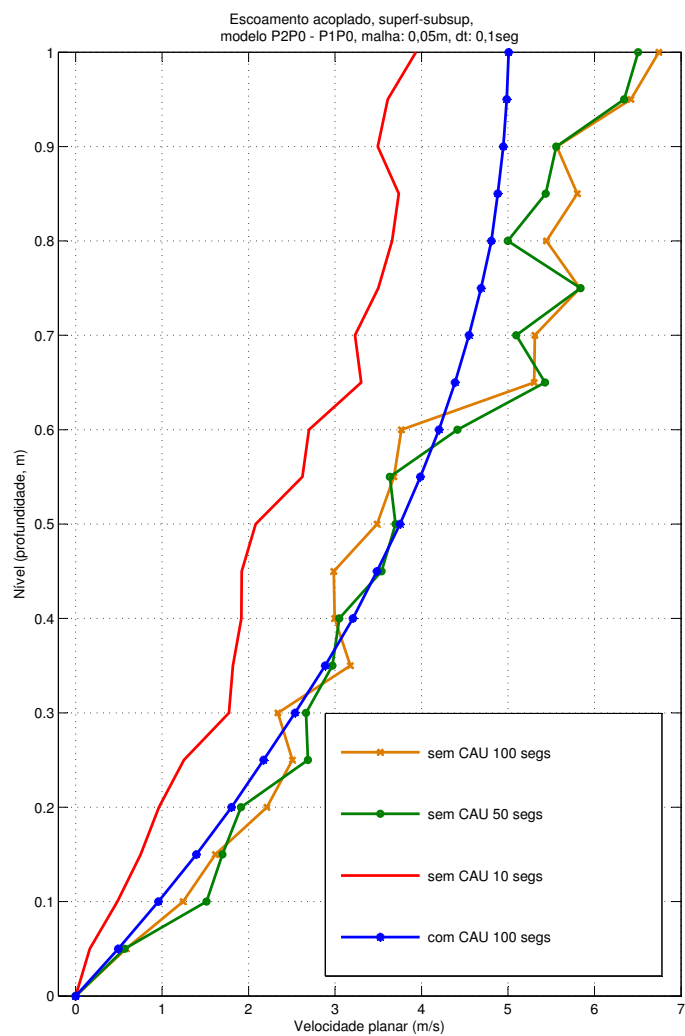


Figura 3.2: Evolução do perfil da velocidade do fluido superficial, escoamento acoplado, impacto do CAU, malha: 0,05 m, Δt : 0,1 seg, elementos: P2P0-P1P0

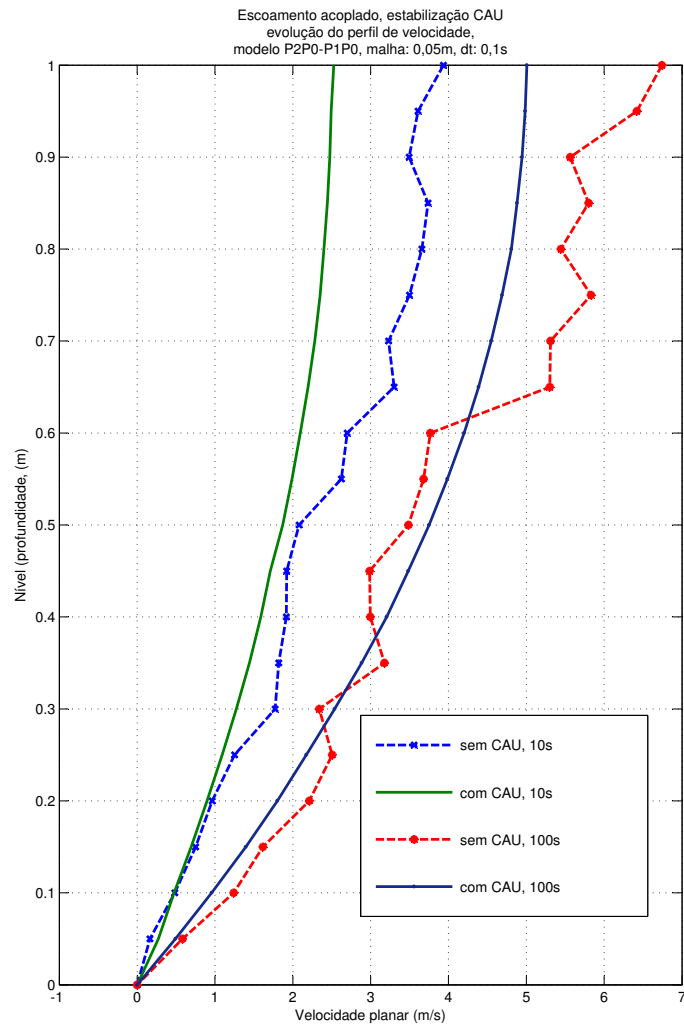


Figura 3.3: Influência da estabilização (CAU) em convecção dominante, perfil da velocidade, escoamento superficial acoplado, malha: 0,05 m, Δt : 0,1 seg, elementos: *P2P0-P1P0*

Na fig. 3.3 é possível perceber o ganho na performance do campo de velocidade após a incorporação daquele termo de estabilização para a situação de convecção dominante, em relação aos resultados obtidos nos mesmos instantes de tempo, sem a presença do termo associado ao CAU.

Ambos os tipos de solução, com e sem estabilização do campo de velocidade do escoamento superficial, foram obtidas com emprego do modelo computacional acoplado, em que a simulação do problema para uma lâmina central do sistema acoplado considera simétrica a contribuição lateral da componente planar do campo de velocidade. Pode-se considerar uma significativa melhora na captura da solução computacional com o emprego do Método CAU de estabilização (curva estabilizada para 100 s de simulação com CAU, na fig. 3.2; curvas de 10 e 100 s com CAU, na fig. 3.3) com relação à solução não estabilizada (curvas não estabilizadas para 10, 50 e 100 s de simulação, na fig. 3.2, e curvas de 10 e 100 s sem CAU, na fig. 3.3). O erro percentual relativo entre as soluções com e sem o emprego da estabilização pelo CAU chega a 34,67 % ao nível da superfície livre, para 100 s de processamento, com o modelo respondendo com uma magnitude do campo de velocidade planar de 5,00721 m/s, com estabilização, e 6,74297 m/s sem estabilização.

A tab. 1, no apêndice, fornece os valores numéricos, soluções do modelo computacional para a componente planar (longitudinal) do campo de velocidade do escoamento superficial, com relação ao nível da água acima do leito do canal superficial de escoamento, valores que permitiram gerar as curvas do gráfico da fig. 3.2.

3.6.2 Estabilização da pressão hidrodinâmica

As combinações de polinômios de aproximação, em elementos finitos, para a solução do problema SCSH, com relação ao escoamento superficial, buscam contornar a possibilidade de ocorrência de travamento na solução, e assegurar sua unicidade e existência (Zienkiewicz & Taylor, 1989; Hughes, 2000), além de garan-

tir convergência. A estabilidade na solução contudo precisa ser assegurada. Esta condição é requisito para que sejam superadas as possíveis ocorrências de poluição da solução do sistema de equações por modos espúrios e oscilações.

A estabilidade da solução associada com o campo de velocidade é assegurada pelo Método CAU. Para a correção hidrodinâmica da pressão do fluido em escoamento livre é necessário, no entanto, a adoção de um método de estabilização adequado.

Correa (2006) sistematizou alguns possíveis métodos de estabilização incorporando controle de modos espúrios da pressão, superando a poluição da solução numérica advinda da adoção de campos descontínuos de interpolação da pressão no domínio de escoamento.

Franca *et al* (1993) consideraram a análise de taxas de convergência para formulações de elementos finitos em que a ordem das funções interpolantes mantém pelo menos uma ordem de diferença entre a combinação polinomial relativa ao campo de velocidade do escoamento e o campo de pressão. A adoção desta relação assegura a possibilidade de uma ampla gama de combinações de interpolação (Hughes, 2000) para os campos de velocidade, e pressão ou carga hidráulica, e, no caso do escoamento superficial do problema aqui considerado, para a posição da superfície livre.

A descontinuidade de funções de interpolação entre elementos dos domínios discretizados, pode resultar em distribuições não suaves de funções descontínuas. Tais arranjos se dão em distribuições semelhantes à conformação típica de tabuleiros de xadrez ("checkerboard"). Este tipo de distribuição, a partir da descontinuidade das funções de aproximação para a pressão, resulta em soluções que comportam modos espúrios, perturbações daquelas funções descontínuas. A adoção de uma fórmula de estabilização considera então o controle destes modos espúrios na solução numérica do problema (Dvorkin, 2001).

Franca *et al* (1993) consideraram que a adoção de funções lineares ou de ordem superior para o campo de velocidades, satisfeita a restrição quanto à ordem

desta aproximação e aquela da pressão, resulta em uma formulação consistente para a estabilização da pressão. No caso do escoamento superficial, a reformulação das formas abstratas dadas pelas eqs. (3.52), (3.56) e (3.59) fornece (Método FHS) uma forma residual, a ser adicionada de forma consistente às correspondentes equações do sistema, eqs. (3.23) e (3.24), em um procedimento semelhante à estabilização associada à convecção dominante:

$$T_{FHS} = -\alpha \sum_{e=1}^{nelm} h_{\Omega^e}^2 \int_{\Omega^e} \nabla q^{h,n+1} \cdot \nabla \hat{q}^h d\Omega^e + \alpha \sum_{e=1}^{nelm} h_{\Omega^e}^2 \int_{\Omega^e} \mathbf{b} \cdot \nabla \hat{q}^h d\Omega^e \quad (3.67)$$

Da eq. (3.67) resulta em obter, para aquele sistema de equações, em representação abstrata, fundamentada na formulação de Galerkin, uma formulação para a estabilização conjunta dos campos de velocidade e de pressão hidrodinâmica:

$$\begin{aligned} & (\psi^h, \phi^{h,n+1}) + d(\psi^h, \phi^{h,n+1}) - \alpha \sum_{e=1}^{nelm} h_{\Omega^e}^2 (\nabla q^{h,n+1}, \nabla \hat{q}^h) + \\ & + \sum_{e=1}^{nelm} \int_{\Omega^e} R(\phi^h) (\tau_s \phi^h \cdot \nabla \psi^h + \tau_c \frac{\phi^h \nabla \phi^h + F_C(\phi^h)}{|\nabla \phi^h|^2} \phi^h \cdot \nabla \psi^h) d\Omega^e \\ & = f(\psi^h) + (\psi^h, \phi^{h,n}) - \alpha \sum_{e=1}^{nelm} h_{\Omega^e}^2 (\mathbf{b}, \nabla \hat{q}^h) \end{aligned} \quad (3.68)$$

onde α é um parâmetro de ajuste livre, sendo exigido que seja somente positivo, e h_{Ω^e} é a dimensão característica do elemento Ω^e .

A fig. 3.4 refere-se ao mesmo exemplo esquematicamente apresentado na fig. 3.1, sendo um gráfico do perfil de distribuição da pressão total, composta pelas parcelas hidrostática e hidrodinâmica, **sem** a consideração dos termos de estabilização do método FHS, ao longo da profundidade do canal superficial, em presença de escoamento livre. Os resultados plotados, nas figs. 3.4 e 3.5, correspondem a simulações de 600 segundos, com intervalos de tempo $\Delta t=0,5$ seg, empregando uma malha de dimensão característica de 0,05 m, com base em uma formulação empregando elementos finitos de menor ordem, P_1P_0 , para ambos os subdomínios de escoamento. As duas curvas da fig. 3.4 são referentes, respecti-

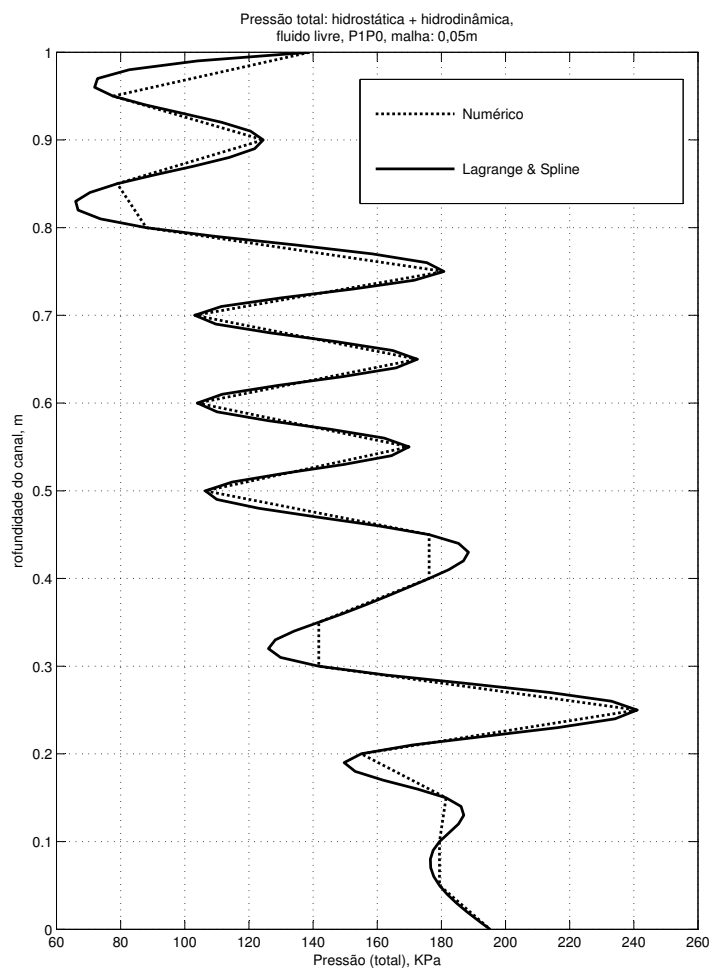


Figura 3.4: Pressão total, perfil não estabilizado, interpolações de Lagrange e Spline (50 pontos), malha: 0,05m

vamente, ao resultado numérico, obtido do modelo computacional, para a interpolação da pressão total, obtida tanto por um polinômio de lagrange como por uma "spline" para 50 pontos de discretização ao longo da profundidade do canal. Estas duas últimas curvas havendo sido geradas pelo aplicativo MatLab, utilizado para plotagem dos gráficos. A oscilação verificada nesta solução é devida à existência de modos espúrios na pressão total.

A incorporação dos termos de estabilização à formulação discreta permite a obtenção de resultados como o plotado na fig. 3.5 para o mesmo exemplo. Nesta figura encontram-se plotadas as curvas referentes ao perfil de pressão total no fluido (água) em escoamento livre no canal superficial, ao longo da profundidade, com relação às soluções obtidas sem (curva tracejada) e com (curva cheia com marcador) estabilização, bem como a curva obtida por interpolação por polinômio de lagrange e spline (estas duas curvas desenvolvidas para 40 pontos de interpolação). É possível perceber uma significativa melhora na qualidade da solução para a pressão total, quanto à solução numérica desenvolvida com e sem a estabilização da pressão total. A relação entre as curvas, com e sem emprego deste procedimento de estabilização (FHS), confirma o controle dos modos espúrios de pressão.

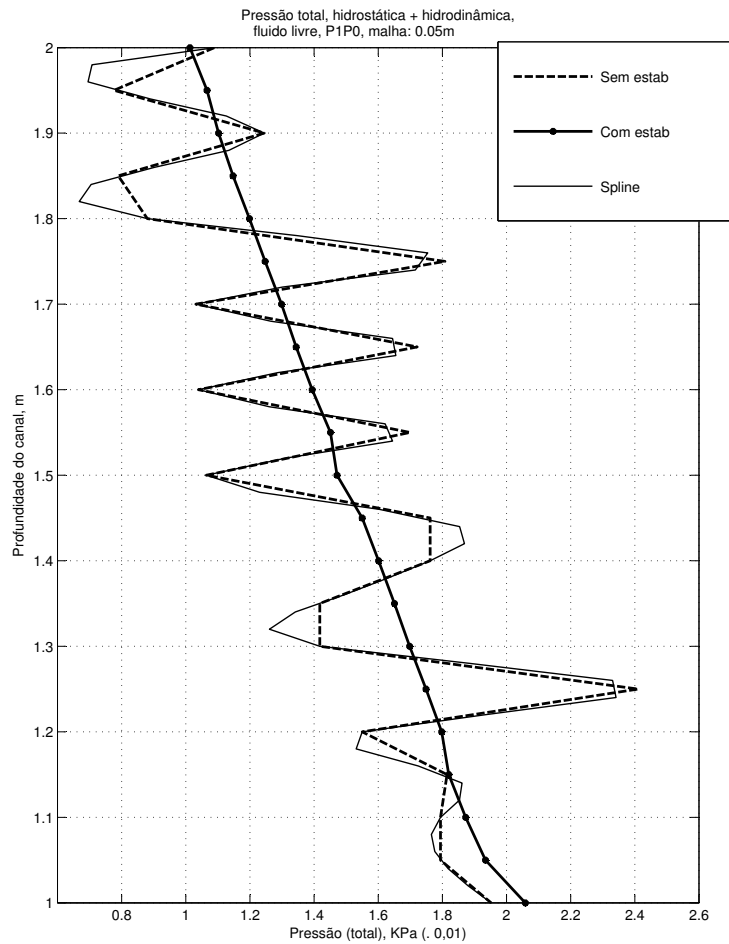


Figura 3.5: Perfis comparados da pressão total, com e sem estabilização, interpolação de Lagrange (40 pontos), malha: 0,05m

3.7 Resultados numéricos: validação do modelo

Nesta etapa de desenvolvimento do modelo computacional, três exemplos de teste de validação foram elaborados. Objetivaram comprovar a ausência de possíveis divergências entre os resultados numéricos obtidos e exemplos já validados da literatura. Foram selecionados exemplos que possuem solução analítica ou que apresentem correlação com resultados experimentais.

O primeiro destes exemplos trata de um escoamento de Pouissouille com solução analítica conhecida, solução que foi verificada ter correspondência com solução experimental, i. é, reproduz experimento efetuado em laboratório com modelo físico. Trata-se do experimento de Beavers & Joseph (1967), que além da solução analítica validada por ensaio experimental, possui solução numérica já publicada (Correa & Loula, 2006).

O segundo exemplo é referente a uma solução de validação do tratamento dado à Equação de Richards, incorporada ao modelo computacional na forma parabólica. Trata-se de um escoamento superficial que percola em região não saturada de um meio poroso, influenciando na elevação do nível do lençol freático subjacente. É um exemplo que possui solução analítica (Gunduz & Aral, 2005), cuja física foi validada com ensaios de campo (Glover, 1978), e que também possui solução numérica anteriormente publicada na literatura.

O terceiro exemplo, desta série, é relativo ao comportamento da superfície livre, em resposta à dinâmica do fluido em escoamento acoplado. A superfície é livre para oscilar sob efeito gravitacional, encontra correspondência com exemplo testado e validado por Casulli & Zanolli (2002), o qual possui solução analítica.

3.7.1 Escoamento de Pouissouille

A avaliação da acurácia do modelo computacional proposto foi desenvolvida verificando-se a correspondência de uma solução do modelo com relação a uma solução padrão, experimental e analítica. Foi solucionado o exemplo clássico de Beavers & Joseph (1967), esquematicamente apresentado na fig. 3.6, um problema

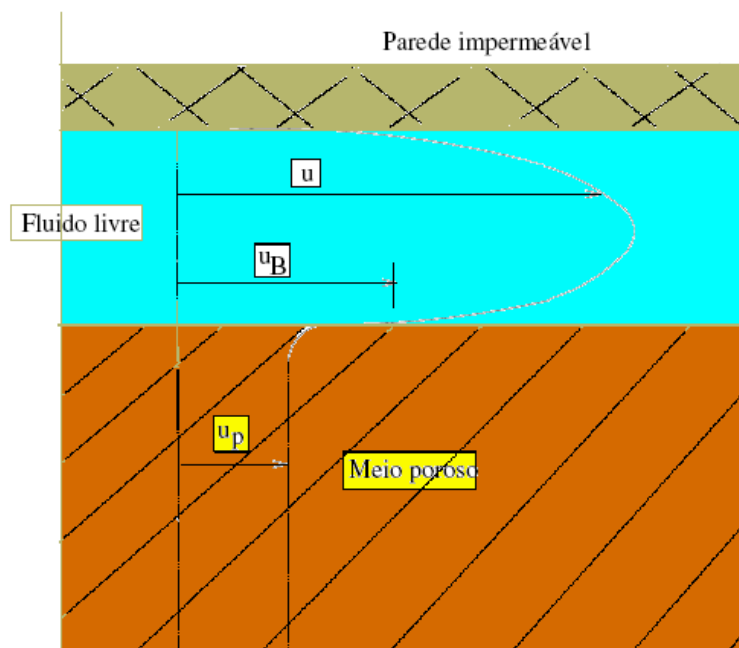


Figura 3.6: Perfil de velocidades, planar, escoamento de Poiseuille: exemplo de Beavers e Joseph

de escoamento de Poiseuille sobre um meio permeável.

O problema tem uma solução analítica, para a qual estes pesquisadores verificaram validação com soluções experimentais. Para este exemplo foram empregados os dados de Correa & Loula (2006), para um coeficiente de condutividade hidráulica, k , de 10^{-7} m/s, cuja solução é apresentada na fig. 3.7, em que a sim-

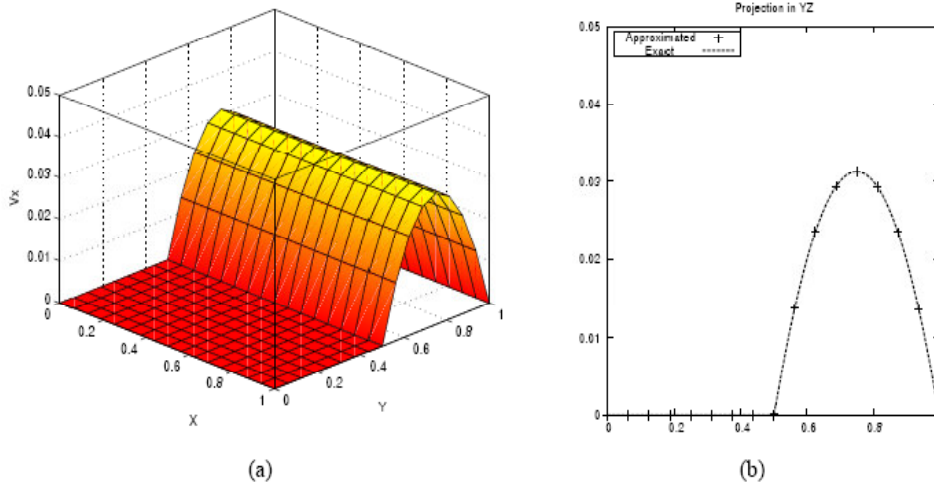


Figura 3.7: Soluções analítica e numérica, escoamento de Pouissouille. Soluções de Beavers e Joseph (exata e experimental), e de Correa e Loula

ulação de fluxo de água foi considerada no sentido da base para o topo da figura. A fig. 3.7a apresenta a solução numérica obtida de Correa & Loula (2006) e a fig. 3.7b correlaciona o perfil desta solução com a exata. O modelo matemático empregado por Correa & Loula (2006) emprega uma combinação da eq. de Stokes com a de incompressibilidade, para o escoamento livre, e das eqs. de Richards e Darcy, para a percolação em meio poroso. A correspondência com o modelo da presente tese foi obtida com a supressão consistente dos termos convectivos.

A discretização em elementos finitos, FEM, foi desenvolvida, para o processamento deste exemplo pelo presente modelo, em 3370 elementos triangulares P_1P_0 , quanto à discretização para ambos os sub-domínios, com 0,05m de dimensão característica, em um intervalo de tempo de 0,1 segundo na evolução da solução. O gráfico da fig. 3.8 corresponde à solução obtida após 200 segs., uma solução

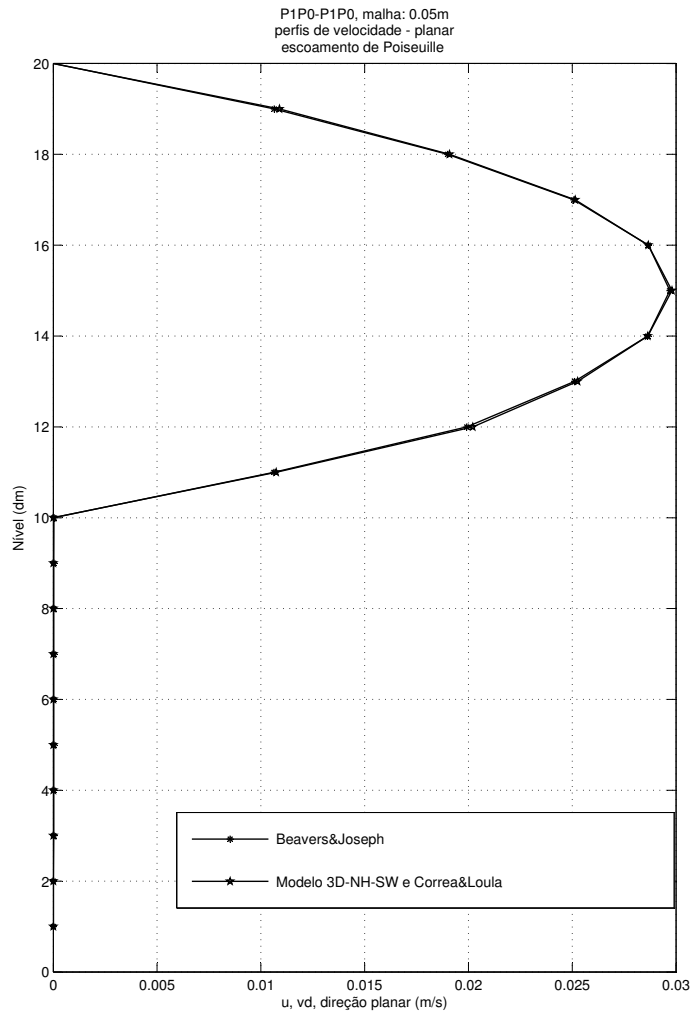


Figura 3.8: Soluções analítica e numérica, problema de Poiseuille: Modelo Proposto e de Beavers e Joseph, seção mediana do canal, malha: 0,05m

para o fluxo plenamente desenvolvido, após ser atingida a condição de escoamento estacionário. O leito do canal foi considerado horizontal e plano, por equivalência com o problema conforme estudado por Beavers e Joseph e por Correa e Loula, e a vazão de entrada, de $0,1 \text{ m}^3/\text{s}$. Esta vazão foi aplicada gradativamente, na seção de entrada do canal superficial de escoamento, em 40 passos de tempo, em presença de superfície livre. Para a simulação deste escoamento foi imposta condição de aderência (componente planar da velocidade, nula) e fixação do nível da superfície

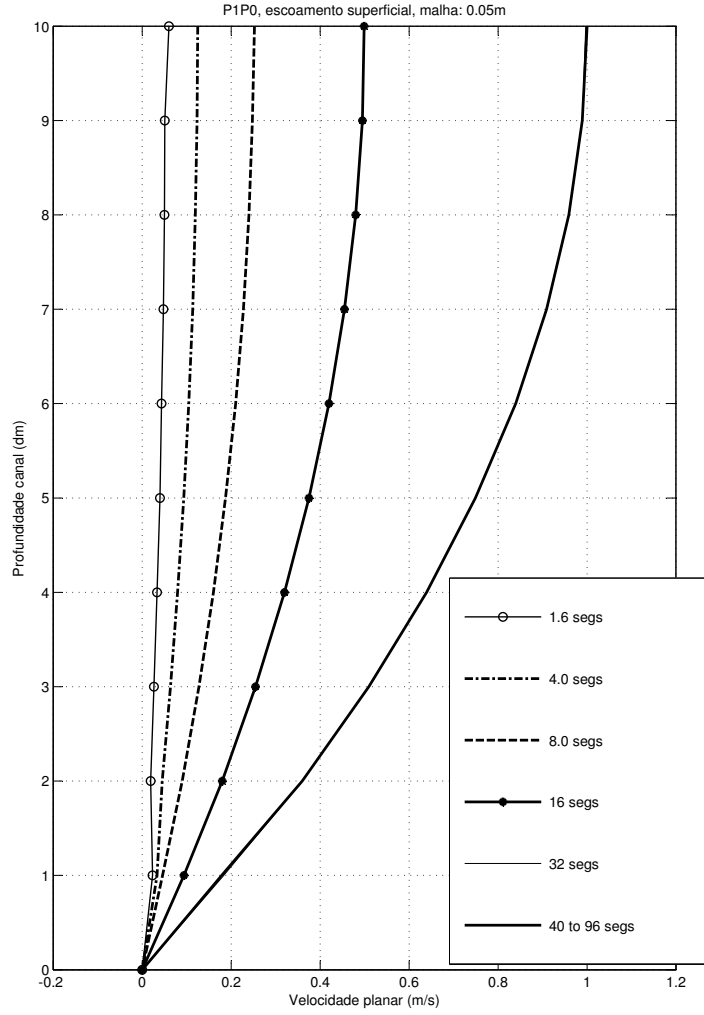


Figura 3.9: Evolução do perfil de velocidade, convergência iterativa, malha: 0,05m

do fluido em contato com a parede impermeável. A direção de fluxo é de montante (à esquerda) para jusante (à direita) do canal de 5m de comprimento, 1m de profundidade, por 1m de largura, do canal de escoamento livre, sobre uma camada de meio poroso não-saturado de 1m de profundidade. O número de Reynolds resultante corresponde a 1240,12.

A solução analítica conforme desenvolvida por Beavers & Joseph (1967) é:

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_B \left(1 + \frac{\alpha_{BJ}}{\sqrt{k}} z\right) + \frac{1}{2\mu} (z^2 + 2\alpha_{BJ} z \sqrt{k}) \nabla P \quad (3.69)$$

onde:

$$\mathbf{u}_B = -\frac{k}{2\mu} \left(\frac{\sigma^2 + 2\alpha_{BJ}\sigma}{1 + \alpha_{BJ}\sigma} \right) \nabla P \quad (3.70)$$

em que:

$$\sigma = \frac{h}{\sqrt{k}} \quad (3.71)$$

em que o gradiente da pressão, ∇P , foi obtido da diferença da pressão entre a seção de entrada e a de saída do canal de escoamento livre, imposta (condição de Dirichlet) com magnitude 0,1 kPa.

A solução obtida com o emprego do modelo computacional, aqui desenvolvido, compara positivamente com a solução exata (analítica), conforme predito, e como obtido por Correa & Loula (2006). A solução exata é obtida pela solução da eq. (3.9), uma EDO, solução dada pelas eqs. (3.69) a (3.71). A fig. 3.8 apresenta a solução numérica para o modelo computacional acoplado aqui proposto, não-hidrostático, com analogia a águas rasas, acoplado a meio poroso não-saturado. As soluções numéricas apresentadas, figs. 3.7 e 3.8, correspondem à analítica (exata) em ambos os gráficos. Ambas as soluções correspondem à plotagem do perfil longitudinal da velocidade planar na seção de saída do escoamento no canal de escoamento livre e no meio poroso. O nível indicado por 20 no gráfico (fig. 3.8) corresponde à posição fixa da barreira superior impermeável do escoamento de Poiseuille, o nível 10 indica a posição da superfície de interface, e o nível 0 é referente à superfície impermeável na porção inferior do meio poroso.

Ainda com relação ao escoamento superficial, um desenvolvimento deste exemplo foi submetido à simulação pelo modelo computacional. Este exemplo possui as mesmas características do submetido a comparação com o de Beavers e Joseph, porém cuidando-se de retirar as restrições devidas à parede impermeável daquele exemplo. Retornou-se então à consideração da superfície superior do fluido como sendo livre, característica do modelo, ajustando-se livremente à evolução do escoamento. A vazão de entrada aplicada na seção à jusante, para a obtenção das curvas plotadas na fig. 3.9 foi de 1,0 m³/s, para a mesma geometria e discretização

do exemplo anterior. Verificamos a evolução escoamento no canal superficial, até atingir a condição de pleno desenvolvimento.

A fig. 3.9 apresenta o comportamento da resposta do fluido em escoamento no canal superficial, em presença de superfície livre na camada superior do fluido, e de interface de acoplamento (transferência de massa) com o meio poroso na camada inferior do fluido. A plotagem associada à referida resposta foi efetuada com relação ao campo de velocidade planar do fluido em escoamento livre na seção de saída, à jusante do canal de escoamento. As curvas plotadas na fig. 3.9 são referentes à evolução deste campo, solução do problema computacional, ao longo de instantes de tempo finais dos intervalos de tempo associados ao problema transiente. A vazão de entrada, à montante do canal de escoamento livre, foi tratada como condição de contorno de Dirichlet, e imposta ao modelo gradativamente, ao longo de 40 passos de tempo iniciais, retroativamente, ou seja, a vazão de saída ao final de cada passo de tempo foi incorporada à fração de vazão de entrada no início do passo de tempo seguinte. Verificou-se então ser viável tratar a simulação do comprimento de desenvolvimento do escoamento por este procedimento. As respostas plotadas na fig. 3.9 foram obtidas, como resultado desta construção de incorporação da vazão ao modelo, tal que esta imposição viabilizou o desenvolvimento do escoamento.

3.7.2 Percolação em meio poroso

O modelo emprega a equação de continuidade (Richard) na forma parabólica, para tratar o fluido no meio poroso, o que é equivalente àquele tratamento dado por Gunduz & Aral (2005), com correspondência com resultado exato (analítico). A única especificidade é que aqueles pesquisadores consideraram a presença de termos de fonte para desenvolver o modelo acoplado sob a abordagem hidrológica. Assim, buscou-se verificar a ocorrência de convergência entre as soluções do presente modelo, do modelo hidrológico daqueles pesquisadores, e com a solução exata. Nesta abordagem, o campo de velocidade darcyniano é, portanto, determinado com base no campo de carga hidráulica no subdomínio determinado pelo meio poroso.

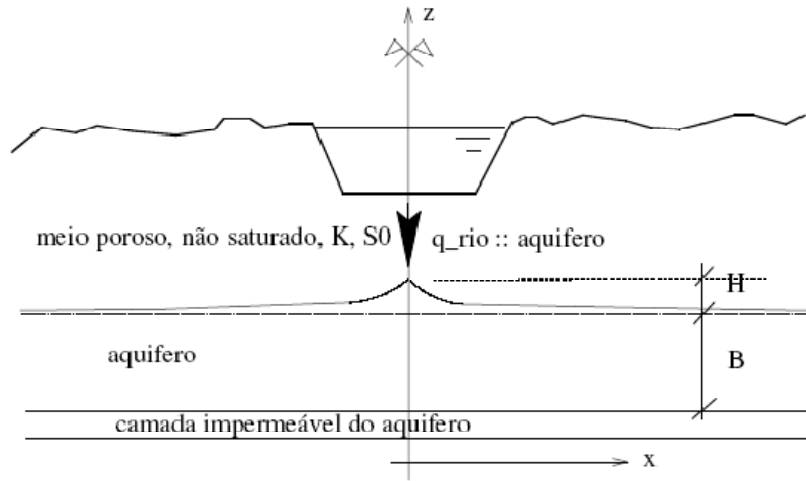


Figura 3.10: Recarga de aquífero: problema de Gunduz e Aral (numérico), e de Glover (analítico e experimental)

O exemplo, esquematicamente apresentado na fig. 3.10, representa a resposta de um aquífero, por meio da elevação do lençol freático, a uma recarga constante a partir da percolação de água de um rio para o meio poroso, através da região não saturada. O evento caracteriza, analiticamente, um problema unidimensional para a análise da elevação do nível do lençol freático, em um meio poroso homogêneo e isotrópico. A equação (2.13) tem solução analítica, sob a incorporação a esta da equação (2.9), e pela consideração das condições inicial e de contorno dadas por:

$$H(x, 0) = 0 \quad (3.72)$$

$$-KB \frac{dH}{dx} \Big|_{x=0} = \frac{q}{2} \quad (3.73)$$

$$H(\infty, t) = 0 \quad (3.74)$$

considerando-se como ∞ uma distância suficientemente grande do eixo da calha do rio, havendo sido arbitrado no modelo 10m. Nestas condições a solução analítica

(Glover, 1978) da equação de Richards 1D sob tratamento parabólico é dada por:

$$H(x, t) = \frac{q}{2\pi KB} \sqrt{\frac{4\pi KBt}{S_0}} \chi \left[\frac{e^{-\chi^2}}{\chi} - \sqrt{\pi} + 2 \int_0^\pi e^{-\xi^2} d\xi \right] \quad (3.75)$$

onde ξ é a variável de integração e a função χ é dada por:

$$\chi = \frac{x}{\sqrt{\frac{4\pi KBt}{S_0}}} \quad (3.76)$$

Para o ponto em que $x=0$, resulta então a solução analítica:

$$H(t) = \frac{q}{2\pi KB} \sqrt{\frac{4\pi KBt}{S_0}} \quad (3.77)$$

Este mesmo exemplo foi considerado para submissão ao código computacional aqui desenvolvido. O processamento da simulação demandou 11.462,063 segs de CPU para processar estes 30 min equivalentes com passo de tempo de 1,0 seg, para uma malha de dimensão característica de 0,10 m, construída com um total de 1.279 elementos, para ambos os subdomínios de escoamento/percolação, elementos tipo P_1P_0 . Os dados empregados foram os mesmos de Gunduz & Aral (2005), e a condição forçante inicial foi introduzida na entrada do canal, para uma vazão equivalente de 1,0 m³/s. A capacidade hidráulica e a condutividade hidráulica foram tomadas como 0,2 e 10⁻⁶. Gunduz & Aral (2005) solucionaram este exemplo por um modelo de escoamento acoplado de abordagem hidrológica. A solução numérica que obtiveram acompanhou a solução analítica com divergência após 20 min. A solução numérica do mesmo problema, em elementos finitos, foi aqui desenvolvida para uma combinação polinomial linear (carga hidráulica) e constante (velocidade darcyniana ou velocidade de infiltração do fluido no meio poroso), ou seja, com emprego de elementos finitos P_1P_0 . A solução numérica, obtida do presente modelo computacional para o escoamento acoplado, foi comparada com a solução analítica dada pela eq. (3.77). As duas curvas encontram-se plotadas na fig. 3.11. Observa-se uma forte concordância das soluções, com o

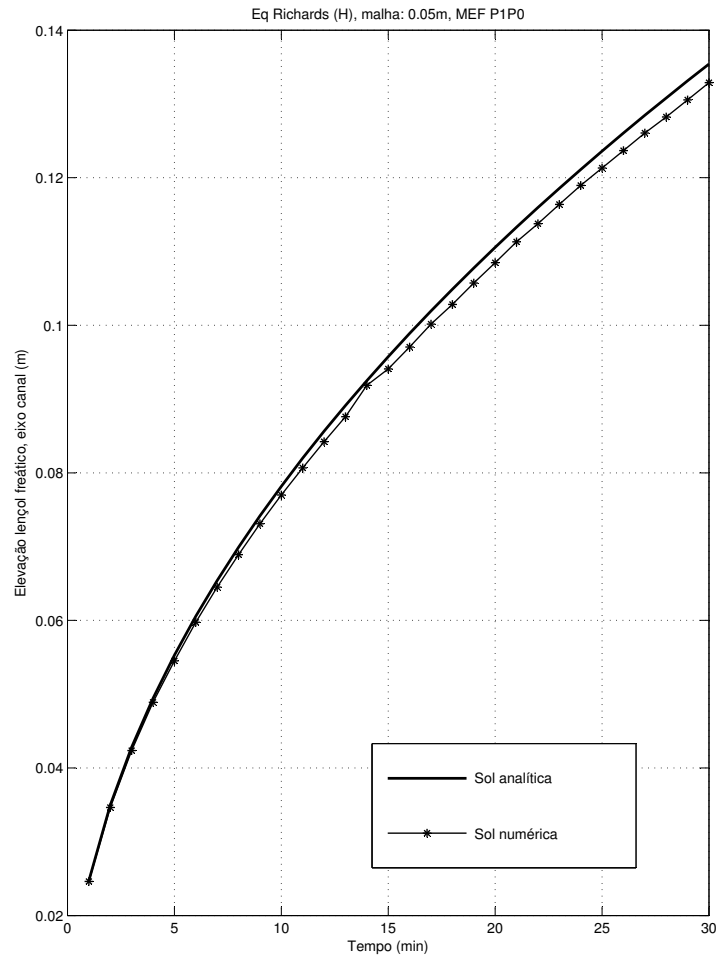


Figura 3.11: Soluções comparadas, analítica e numérica, P1P0, malha:0,05m

comportamento das curvas se aproximando, como em Gunduz & Aral (2005). A diferença entre as soluções do presente modelo e a analítica eleva-se do 10^o min ao 28^o min de 1,19 % para 2,57 % e reduzindo-se a partir daí para 2,53 % ao alcançar a simulação o equivalente a 30 min de tempo real. Um comportamento com melhor performance que o obtido anteriormente (Gunduz & Aral, 2005), em que o ponto final da solução numérica alcança 0,12 m aos 30 min da solução. A solução numérica do presente modelo forneceu 0,132874 m para este mesmo instante, com uma melhora de 83,56 % na solução numérica em relação à analítica.

3.7.3 Evolução da resposta da superfície livre

O modelo de Casulli & Zanolli (2002) foi desenvolvido em diferenças finitas, sendo relativo à oscilação da superfície livre de um cubo de água de arestas 10 m. A superfície do fluido é livre para oscilar, desprezando-se os efeitos viscosos, a permeabilidade do leito e os efeitos de atrito do fluido com o fundo e as laterais deste domínio de contenção. A condição inicial é dada por velocidade zero, sendo a solução condicionada pela posição inicial da superfície livre, $\eta = 0,02x - 0,1$, onde x é a dimensão longitudinal. O particionamento do domínio foi o mesmo adotado por Casulli, de dimensão característica 0,5 m, havendo sido empregados, no presente modelo, elementos finitos P_1P_0 . A simulação foi desenvolvida considerando-se passo (intervalo) de tempo $\Delta t = 0,01s$. A solução foi construída em 10 s de simulação, correspondendo a um tempo de CPU de 12.774,469 s de tempo real, para simulação em arquitetura bi-processada idêntica à supra-citada.

A conservação de massa é uma necessidade para que o modelo computacional apresente compatibilidade com a física do problema, em que não existem fontes ou sumidouros de massa. A simulação de bacias hidrográficas, com redes de canais de escoamento superficial, é uma etapa projetada para seguir o atual desenvolvimento, direcionado à validação numérica do modelo. Para executar esta etapa é necessário assegurar a estabilidade do modelo (já efetuado) e assegurar a conservação da massa.

Estes exemplo - teste permite a verificação da conservação da massa. A fig. 3.12 apresenta a elevação da superfície livre na posição longitudinal $x = 10$ m, em torno de uma posição de equilíbrio. Este resultado compara favoravelmente com aquele previsto pela solução analítica (exata) e com a obtida por Casulli & Zanolli (2002). A amplitude da onda oscilatória correspondente reproduz aquela da solução analítica, validando a hipótese de conservação de massa pelo modelo. É, contudo, constatada uma diferença na frequência de onda, indicando sensibilidade do modelo à escolha do passo de tempo. A solução numérica daqueles pesquisadores, apresenta aproximação maior com relação à solução exata, quanto

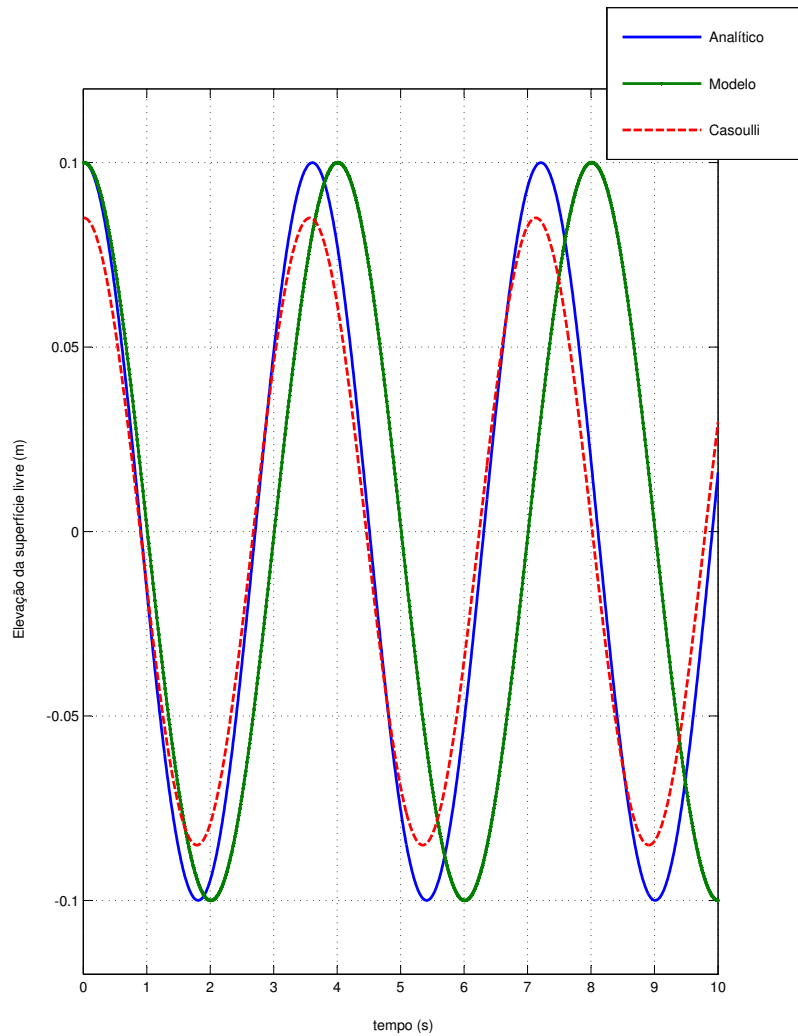


Figura 3.12: Ondulação de baixa amplitude na superfície livre, ponto nodal final, elementos P_1P_0 , malha: 0,5m

à frequência; contudo detectando-se uma diferença significativa (da ordem de 15%), com relação à amplitude, entre aquelas soluções. A solução do presente modelo reproduz a oscilação esperada para o movimento da superfície livre, inicialmente ocupando uma conformação plana inclinada. A resposta deste exemplo, quanto à posição da superfície livre, é um resultado em ausência de dissipação de energia.

Capítulo 4

Implementação Computacional

4.1 Linearização de equações

No tratamento dos termos não-lineares foi adotado o método de Picard, um esquema quase-Newton. Neste procedimento os termos não-lineares são modificados de forma consistente, tal que o respectivo sistema não-linear de equações é linearizado, viabilizando sua solução numérica. No caso deste sistema matricial, contendo termos originalmente não-lineares, associado ao escoamento acoplado,

$$\underline{K}\mathbf{x} = \mathbf{B} \quad (4.1)$$

onde:

$$\underline{K} = (\mathbf{M} + \Delta t(\mathbf{A} + \mathbf{C} + \mathbf{P})) \quad (4.2)$$

em que as matrizes são denominadas: de massa ou transiente, \mathbf{M} (termos associados à evolução temporal do modelo), de rigidez ou de coeficientes (termos associados à evolução convectiva, \mathbf{C} , difusiva, \mathbf{A} , e devido à pressão e superfície livre, \mathbf{P} , do escoamento), e o vetor de forças, ou de termos independentes, \mathbf{F} , sujeito às correções devido às condições de contorno.

O vetor solução do problema fica determinado por:

$$\mathbf{x} = \mathbf{s}^{n+1} \quad (4.3)$$

e o vetor de coeficientes por:

$$\mathbf{B} = \Delta t \mathbf{F} + \mathbf{M} \mathbf{s}^n \quad (4.4)$$

tal que:

$$\underline{F}(\mathbf{x}) = \underline{K} \mathbf{x} - \mathbf{B} = \mathbf{0} \quad (4.5)$$

sendo este algoritmo objeto do procedimento recursivo:

$$\mathbf{s}^{n+1} = \underline{F}(\mathbf{s}^n) \quad (4.6)$$

resolvido de forma iterativa, de acordo com o algoritmo do item 4.2, a seguir.

A abordagem de Picard, como os métodos iterativos tipo Newton, tem por mérito preservar as propriedades e características da função original, relativa aos termos do sistema de equações.

Para uma visão geral do Método de Picard, conforme implementado na formulação deste modelo computacional, no sentido da linearização dos termos não-lineares, foi considerada sua aplicação para estes termos das equações de balanço de momentum, eqs. (3.1) e (3.2), e da equação da posição da superfície livre, eq. (3.4), na forma das eqs. (3.23), (3.24) e (3.26). Na linearização destes termos considerou-se $0 < j \leq 1$ uma partição do intervalo de tempo $\Delta t = t_{n+1} - t_{n+j}$. O desenvolvimento da solução numérica do modelo comporta iterações sucessivas, do interior de cada passo de tempo, tal que neste procedimento foi considerada a linearização daqueles termos.

Genericamente dados dois campos vetoriais quaisquer, \mathbf{s} e \mathbf{r} , e um campo escalar, θ , o termo convectivo geral, presente nas equações de balanço de momentum da parcela superficial do escoamento, pode ser reescrito na forma:

$$\int_{\Omega^e} \mathbf{s}^h \cdot (\mathbf{r}^h \cdot \nabla) \mathbf{r}^h d\Omega^e \equiv \int_{\Omega^e} \mathbf{s}^h \cdot (\mathbf{r}^{h,n+j} \cdot \nabla) \mathbf{r}^{h,n+1} d\Omega^e \quad (4.7)$$

enquanto o termo presente na equação da superfície livre pode ser dado como:

$$\int_{\Omega^e} \nabla_{2D} \cdot \int_h^{\theta^h} \mathbf{s}^h d\Omega^e \equiv \int_{\Omega^e} \nabla_{2D} \cdot \int_h^{\theta^{h,n+j}} \mathbf{s}^{h,n+1} d\Omega^e \quad (4.8)$$

utilizando-se a estimativa no instante n, na iteração j, para a avaliação da solução aproximada no instante n+1. Os termos convectivos no problema SCS, eqs. (3.13) a (3.21), são então dados, pela formulação de Picard, por:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega^e} \hat{\mathbf{u}}^h \cdot (\mathbf{u}^h \cdot \nabla_{2D}) \mathbf{u}^h + \hat{\mathbf{u}}^h \cdot (w^h \frac{\partial}{\partial z}) \mathbf{u}^h d\Omega^e \equiv \\ & \int_{\Omega^e} \hat{\mathbf{u}}^h \cdot (\mathbf{u}^{h,n+j} \cdot \nabla_{2D}) \mathbf{u}^{h,n+1} + \hat{\mathbf{u}}^h \cdot (w^{h,n+j} \frac{\partial}{\partial z}) \mathbf{u}^{h,n+1} d\Omega^e \end{aligned} \quad (4.9)$$

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega^e} \hat{w}^h (\mathbf{u}^h \cdot \nabla_{2D}) w^h + \hat{w}^h (w^h \frac{\partial w^h}{\partial z}) d\Omega^e \equiv \\ & \int_{\Omega^e} \hat{w}^h (\mathbf{u}^{h,n+j} \cdot \nabla_{2D}) w^{h,n+1} + \hat{w}^h (w^{h,n+j} \frac{\partial w^{h,n+1}}{\partial z}) d\Omega^e \end{aligned} \quad (4.10)$$

$$\int_{\Omega^e} \nabla_{2D} \cdot \int_h^{\eta^h} \mathbf{u}^h d\Omega^e \equiv \int_{\Omega^e} \nabla_{2D} \cdot \int_h^{\eta^{h,n+j}} \mathbf{u}^{h,n+1} d\Omega^e \quad (4.11)$$

O tratamento dado aos termos não-lineares, pela ótica do Método de Picard, é o de aproximações sucessivas com minoração do erro de aproximação da solução em cada passo de tempo, condicionando-se esta redução à precisão da estimativa da solução numérica ao final de cada iteração de linearização no interior do intervalo de tempo. O procedimento apresentou-se convergente, tal que (Dahlquist & Björck, 1974),

$$\begin{aligned} \|\mathbf{x}^{n+k} - \mathbf{x}^{n-k+j}\| &= \|\underline{F}(\mathbf{x}^{n+k}) - \underline{F}(\mathbf{x}^{n-k+j})\| \leq m \|\underline{F}(\mathbf{x}^{n+j}) - \underline{F}(\mathbf{x}^n)\| \\ &\Leftrightarrow \|J(\underline{F}(\mathbf{x}))\| \leq m \leq 1 \quad \forall j = 1, \dots, niter \end{aligned} \quad (4.12)$$

onde "niter" é o número máximo de iterações, com $0 < m \leq 1$. Definindo-se:

$$d(\mathbf{x})_{il} = \left[\frac{\partial \underline{F}(\mathbf{x})_i}{\partial \mathbf{x}_l} \right] \quad \forall 1 \leq i, l \leq nmax = ngl * nelm \quad (4.13)$$

onde:

$$\left\| \frac{\partial \underline{F}(\mathbf{x})_i}{\partial \mathbf{x}_l} \right\| \leq m \quad (4.14)$$

então, sendo $d(\mathbf{x})_{il}$ as derivadas parciais da função, \underline{F} , do vetor solução, $\mathbf{x}^{n+k} = \mathbf{s}^{n+k}$ do problema, para k passos de tempo, a matriz Jacobiana da \underline{F} é dada por $J(\underline{F}(\mathbf{x})) = [d(\mathbf{x})_{il}]$, obtendo-se:

$$\mathbf{x} = \underline{F}\mathbf{x} \quad (4.15)$$

sendo então a função \underline{F} uma contração, no sentido do Teorema de Banach, sendo a captura da solução numérica, \mathbf{s}^{n+k} , um problema de ponto fixo.

4.2 Algoritmo computacional

A obtenção da solução do sistema de equações que regem o problema foi fundamentada na idéia de construção de um procedimento iterativo, baseado no Método de Gradientes Conjugados. O alcance da solução numérica previu então a satisfação de um critério de convergência adequado em torno da superfície de acoplamento entre os dois sub-domínios de escoamento. Para desenvolvimento da convergência dos componentes de solução referentes aos subdomínios de escoamento, buscou-se satisfazer tal critério pela consideração da convergência das soluções das equações representativas de ambos sub-domínios de escoamento. Reside então a exigência de convergência na satisfação da continuidade entre o campo de pressão e o campo de carga hidráulica, ao longo da interface de acoplamento. A pressão total no fluido livre foi tratada como composta por duas parcelas, uma hidrostática devido à coluna de água, $\rho_f g(\eta^n - z)$, e outra de correção hidrodinâmica, q^n , isto é:

$$p^n = \rho_f g(\eta^n - z) + q^n, \quad em \partial\Omega_f \quad (4.16)$$

e para o fluido percolando no meio poroso:

$$p_p^n = \rho_f g H^n, \quad em \partial\Omega_p \quad (4.17)$$

onde p_p é a pressão na fase líquida deste fluido. A satisfação da condição física de continuidade da pressão na interface, exige a correspondente satisfação simultânea das equações que governam o problema acoplado. Assim, com relação à interface de acoplamento, para a pressão total no fluido em escoamento superficial livre, p_f , e para a carga hidráulica do fluido em percolação no meio poroso, p_p :

$$p = p_p \quad (4.18)$$

Esta restrição pode ser satisfeita por um processo iterativo, para a j -ésima iteração, no i -ésimo nó da malha, construído como:

$$\rho_f g (\eta_i^{n+j} - z_i) + q_i^{n+j} = \lambda_1, \quad em \partial\Omega_f \cap \partial\Omega_p \quad (4.19)$$

$$\rho_f g H_i^{n+j} = \lambda_2, \quad em \partial\Omega_f \cap \partial\Omega_p \quad (4.20)$$

tal que o critério de convergência entre estas quantidades físicas seja:

$$\frac{|\lambda_2 - \lambda_1|}{\lambda_2} \leq \epsilon, \quad em \partial\Omega_f \cap \partial\Omega_p \quad (4.21)$$

onde ϵ é a tolerância (arbitrária). Neste procedimento, o algoritmo iterativo resulta como:

- Passo 1: Obter $s_1 = r_1 = \lambda_2 - \lambda_1$
- Passo 2: Fazer, para cada iteração, j :
 - Passo 2.1: $H^{n,j+1} = H^{n,j} + \gamma^{j+1} s^j$
 - Passo 2.2: $\gamma^{j+1} = \frac{r^j}{\rho_f g (s^j)^2}$
 - Passo 2.3: $r^{j+1} = r^j - \gamma^j \rho_f g s^j$
 - Passo 2.4: $s^{j+1} = r^j + \frac{r^{j+1}}{r^j} s^j$

- Passo 2.5: Solucionar o sistema matricial, e obter a solução aproximada: $\mathbf{s}^{n,j+1}$, no instante "n", na iteração j+1;
- Passo 2.6: Calcular λ_1^{j+1} e λ_2^{j+1} ;
- Passo 2.7: Testar convergência:
 - Passo 2.7.1: calcular a razão de aproximação pela (4.20);
 - Passo 2.7.2: decidir se o passo anterior atende a tolerância, ϵ ;
 - Passo 2.7.3: Se "não" \rightarrow tolerância não-atendida: volte para o Passo 2;
 - Passo 2.7.4: Se "sim" \rightarrow tolerância atendida.
- Passo 3: Admitir $\mathbf{s}^{n,j+1}$, como solução no instante "n+1".

A atualização da carga hidráulica, no passo 2.1 desse algoritmo, permite a atualização da velocidade darcyniana, pela solução da eq. (3.28), e a atualização da correção hidrodinâmica da pressão no fluido livre; atualizações efetuadas em cada passo de iteração. Estas novas estimativas, na interface de acoplamento, para a velocidade darcyniana, e a parcela hidrodinâmica da pressão total, são incorporadas ao termo \tilde{Q} , da eq. (3.16), e nos termos de pressão das eqs. (3.13) e (3.14). Neste sentido a nova estimativa para a carga hidráulica é incorporada à equação (3.17). Estas revisões de termos em cada incremento iterativo permite a execução do passo 2.5 do algoritmo e nova estimativa, na iteração "j+1", para a aproximação da solução numérica do problema.

O procedimento iterativo desenvolvido neste modelo encontra-se fundamentado em um princípio físico, o de continuidade entre a pressão total no fluido livre e a correspondente pressão (como função da carga hidráulica) no fluido percolante no meio poroso. Esta consideração introduz um avanço sobre o procedimento iterativo usual na literatura (Miglio *et al*, 2003; Discacciati *et al*, 2002; Cai, 2008), em que a atualização da pressão total é efetuada por um multiplicador de lagrange relacionando esta pressão com a correspondente devido à carga hidráulica.

Com relação ao método de solução numérica do sistema de equações, o sistema matricial gerado pela distribuição das contribuições elementares para a mon-

tagem das matrizes deste sistema, se dá segundo os graus de liberdade globais, a partir das matrizes locais referenciadas aos graus de liberdade elementares. A distribuição de elementos matriciais é assim efetuada segundo suas conectividades, ou seja, de acordo com as relações entre os graus de liberdade nodais, referenciados localmente, e seus correspondentes globais, referenciados à malha de elementos finitos de discretização do domínio contínuo.

As matrizes de massa, \mathbf{M} (termos associados à evolução temporal do modelo), de rigidez ou de coeficientes (termos associados à evolução convectiva, \mathbf{C} , difusiva, \mathbf{A} , e devido à pressão e superfície livre), são matrizes esparsas. Possuem poucos elementos não-nulos em relação à totalidade de elementos matriciais. As matrizes só possuem como elementos não nulos aqueles elementos originados pela alocação de contribuições de graus de liberdade nodais, globais, gerados por conectividades com outros elementos finitos da malha discreta. Devido ao seu elevado grau de esparsidade, métodos de solução iterativa do sistema matricial, são mais apropriados que métodos diretos, em termos de eficiência computacional e tempo de CPU.

Dentre os métodos de solução de matrizes esparsas o GMRES, "Generalized Minimal Residual Method", conforme proposto por Saad & Schultz (1986), está entre os que apresentam melhor desempenho teórico para o problema acoplado (Saad, 2001). O GMRES foi, portanto, o método adotado de solução do sistema (algébrico) de equações do problema. Na sua implementação foi adotado, para armazenamento dos termos não-nulos das matrizes, endereçamento de posição (linhas e colunas), e cinco vetores para reinicialização da ortogonalização no GMRES.

A elevada esparsidade do sistema matricial está relacionada com a formulação discreta (em elementos finitos) adotada para o desenvolvimento da solução numérica em espaços discretos, em que cada nó de um elemento com dois (subsuperficial) ou quatro (superficial) graus de liberdade nodais encontra-se conectado a outros (poucos) elementos vizinhos; desta forma fornece somente no máximo duas a quatro contribuições à matriz de coeficientes (rigidez) dentre as $n_x \cdot n_y \cdot n_z \cdot n_{gl}$ possíveis

contribuições nodais globais à matriz, onde n_x , n_y e n_z são respectivamente o número de elementos nas direções coordenadas de um sistema cartesiano de eixos de referência, e n_{gl} o número de graus de liberdade por nó da malha discreta.

4.3 O teste de elementos e de malha

Na seleção de elementos finitos, buscou-se estabelecer um critério para a verificação da capacidade destes elementos em desempenhar com habilidade a captura da incompressibilidade como condição da solução numérica.

No sentido do estabelecimento do supra-referido critério, conceitua-se **consistência** no sentido de que as propriedades dos elementos, adquiridas da combinação de funções aproximantes, induzem a solução numérica a se aproximar da solução exata do problema de forma única (unicidade), reproduzindo a condição cinemática, e simultaneamente, portanto, impedindo a possibilidade de ocorrência de travamento da solução, ou seja, ocorrência de solução identicamente nula.

Utilizando-se o conceito de raio de constrição, r ,

$$r = \frac{n_{eq}}{n_c} \quad (4.22)$$

onde n_{eq} representa o número de graus de liberdade livres, em termos de velocidades, após a imposição das condições de contorno, e n_c o número de graus de liberdade livres, em termos de pressão, associados à restrição de incompressibilidade. Conforme definido por Hughes (2000), consideremos os elementos P_1P_0 , P_2P_0 e P_2P_{1dc} , para aproximação da solução do problema de escoamento acoplado como definido no problema SCSH. As condições de contorno foram definidas como condições de Dirichlet para os campos de pressão ou de velocidade na seção de entrada da vazão (escoamento superficial), ou de percolação (no meio poroso), em termos de magnitude do campo de velocidade ou carga hidráulica impostas. No caso de imposição de pressão ou carga hidráulica, compondo um diferencial de pressão).

Para estas condições aqueles elementos apresentam raios de constrição re-

spectivamente (fig. 4.1):

$$r_{P_1P_0} = 2, r_{P_2P_0} = 6, e r_{P_2P_{1dc}} = 2$$

atendendo a restrição do teste de malha que determina que:

$$n_{eq} \geq 2n_c \tag{4.23}$$

conforme de Hughes (2000), para que seja assegurada a incompressibilidade. Na fig. 4.1 os pontos escuros indicando os graus livres da velocidade, e os claros aqueles de pressão.

A satisfação do teste de malha (Dvorkin, 2001) relaciona-se com os elementos P_1P_0 , P_2P_0 e P_2P_{1dc} , combinações respectivamente linear-constante, quadrática-constante, e quadrática-linear (descontínua para a pressão), elementos utilizados na construção dos espaços de aproximação dos campos de velocidade, pressão e superfície livre, ou velocidade darcyniana e carga hidráulica, respectivamente, no estabelecimento das funções teste, aproximadoras da solução exata do escoamento acoplado.

O atendimento aos critérios do teste de malha indicam consistência entre a formulação discreta das equações variacionais em elementos finitos e a forma contínua das equações variacionais do modelo matemático. Para estas funções, portanto, todos estes elementos apresentam, pela eq. (4.23), consistência nesta aproximação (para a solução numérica) e ausência de trancamento (ou "locking") em seu comportamento. O sucesso na aplicação do teste de malha, para aqueles elementos finitos selecionados para implementação na solução do problema, indica que estes são favoráveis a que seja alcançada condição de consistência, necessária à obtenção de convergência numérica para a solução exata. Para todos estes elementos considerou-se que na superfície de acoplamento entre os dois subdomínios de escoamento as condições de interface atuam no sistema como condições de Dirichlet, sendo incorporados às equações do sistema de equações de forma natural.

A consistência da formulação, relaciona-se portanto com a escolha dos espaços de funções polinomiais de aproximação. Tal escolha determina a viabilidade de solução, e adequada avaliação das magnitudes nodais das incógnitas características do escoamento superficial e da percolação subsuperficial. A verificação deste requisito foi efetuada pela aplicação de teste de malha (e de elementos finitos), conforme em Dvorkin (2001).

4.4 Convergência

O problema em foco, objeto de desenvolvimento do presente modelo computacional, é não-linear, como nas eqs. (3.1), (3.2) e (3.4). Para esta classe de problemas pode não ser assegurada a convergência da solução a partir da verificação de consistência e estabilidade, como em problemas lineares.

Conceituando **estabilidade** no sentido de controlar e reduzir modos espúrios na solução computacional, ocasionados pelo arranjo de graus de liberdade e combinações de polinômios de aproximação introduzidos pela escolha de elementos, ou provenientes de variações direcionais de campos representativos de incógnitas do problema, sendo fontes de instabilidade a serem controladas a convecção dominante ou arranjos oscilatórios nos valores numéricos da pressão ao longo da malha de discretização.

A estabilidade foi implementada no modelo computacional pela adição de forma consistente (sem modificação do problema original, como na introdução de difusão artificial) de termos de controle de oscilações numéricas da solução por meio dos termos advindos do CAU e do FHS, respectivamente para a velocidade e a pressão hidrodinâmica.

Quanto à **convergência**, o conceito foi utilizado com o significado de aproximação sucessiva da solução numérica para a solução exata, com a evolução do problema e em cada iteração, por meio do atendimento ao critério de tolerância (do método de solução iterativa) e por controle e redução de erros numéricos. O "Patch Test", introduzido por Irons & Loikkanen (1983), é um procedimento que

permite verificar a convergência da solução numérica para a exata a partir do processamento pelo modelo de uma malha de pequenas dimensões, simplificada portanto em relação à geometria do problema a processar solução.

Para execução deste teste foi elaborado um exemplo de pequenas dimensões, de escoamento de uma lâmina de água de espessura 20 cm sobre meio poroso não-saturado, sendo considerada a camada superior deste meio, também com 20 cm de espessura, ao longo de um trecho de 20 cm de comprimento, adequado à simulação do problema para uma malha reduzida. Uma vazão inicial de $1,25 \text{ m}^3/\text{s}$ foi imposta na seção de entrada do canal superficial, de área transversal $0,04 \text{ m}^2$, quadrada. O pleno desenvolvimento do escoamento foi fixado em 25 passos de tempo, de um total de 50 passos de tempo de simulação, com intervalo de 0,5 segundos. Foram processadas malhas de 4×4 , 8×8 e 24×24 elementos para cada um dos sub-domínios de escoamento. As três malhas foram elaboradas por combinações de elementos P_1P_0 para os dois sub-domínios. A fig. 4.2 fornece o comportamento do campo de velocidade planar do escoamento superficial, solução obtida com a consideração de estabilização dos campos de velocidade e de pressão, ainda que com baixo número de Reynolds ($\text{Re} = 139$). As curvas plotadas são referentes à magnitude máxima da velocidade planar ao nível da posição correspondente à superfície livre, na seção de saída do escoamento. Há um comportamento assintótico para aquele valor, nas três malhas de discretização.

A convergência e a unicidade da solução são verificadas. As curvas apresentam comportamento linear como esperado, uma vez que o modelo computacional obedece a uma incorporação gradual da solicitação da vazão, com caráter linear. O elevado passo de tempo, da ordem de 60 vezes superior à dimensão característica da malha mais refinada deste teste, permite atribuir a leve oscilação detectada neste refinamento à sua maior sensibilidade à progressão no tempo da solução. Este comportamento contudo não comprometeu a solução final nem o respectivo comportamento assintótico.

É assim possível inferir terem sido atendidas as condições necessárias para

a convergência da solução numérica. Aquelas condições são (i) as inerentes à formulação variacional quanto à relação entre as ordens dos operadores, o que determinou a escolha dos espaços de solução finitos, a (ii) satisfação do "Patch Test", e (iii) a adequação da combinação de polinômios, sendo verificado em especial a de menor ordem, para a modelagem do problema (item 3.7).

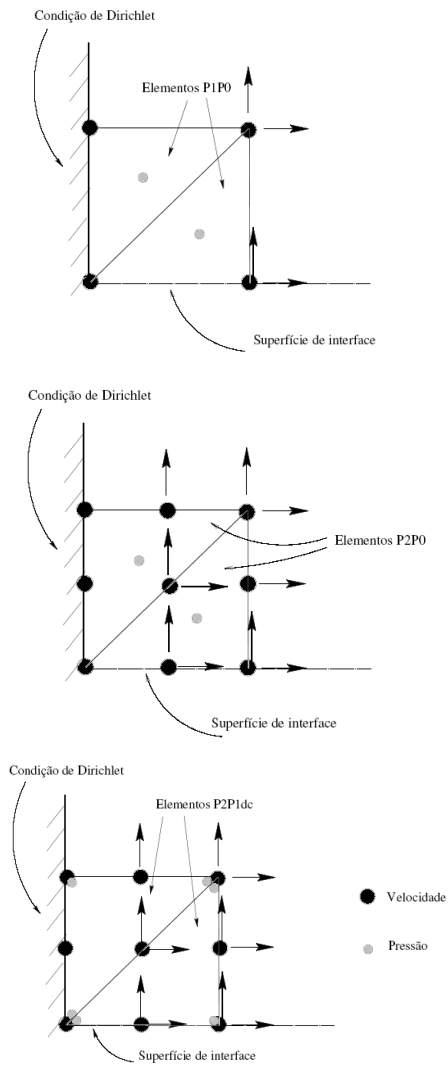


Figura 4.1: Teste de malha: descrição esquemática para elementos P1P0, P2P0 e P2P1dc

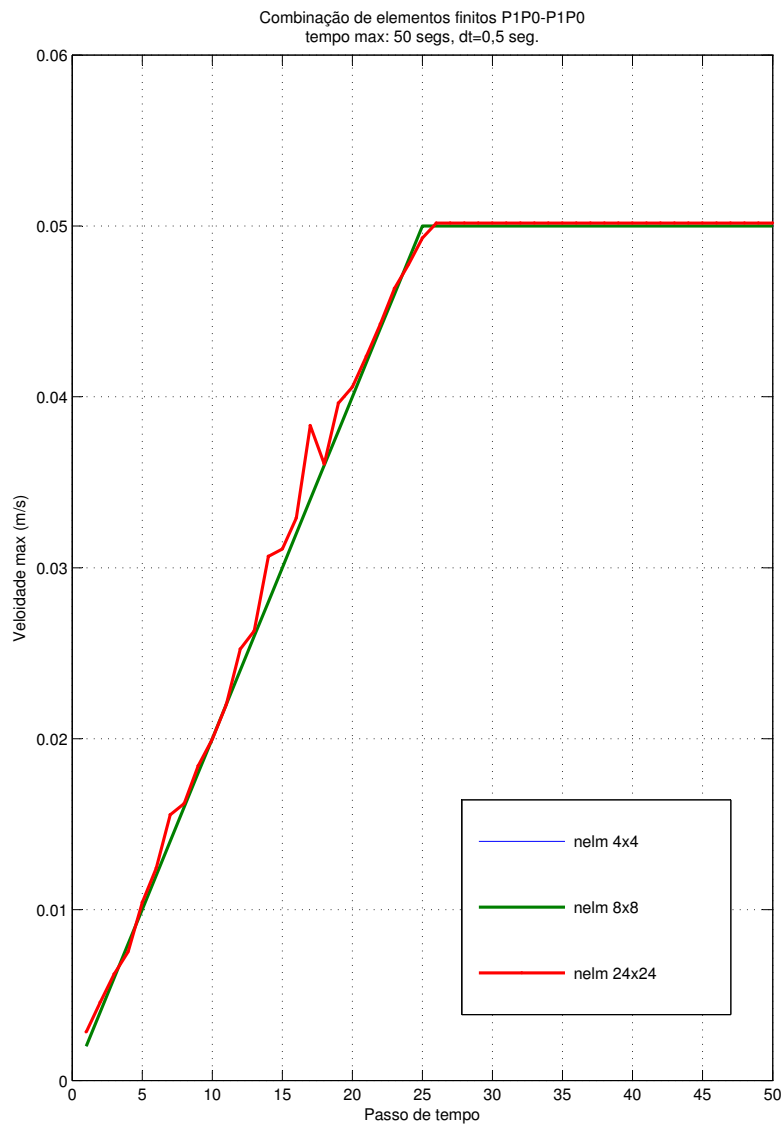


Figura 4.2: "Patch Test": convergência para velocidade máxima, combo P1P0-P1P0

Capítulo 5

Aplicações e Comentários

Algumas aplicações foram efetuadas, objetivando analisar o desempenho e a eficiência do modelo computacional. Foram consideradas a conservação da massa em regime de escoamento acoplado, o atendimento à continuidade entre os campos de pressão e de carga hidráulica, a influência da percolação em meio poroso sobre o escoamento superficial, e a eficiência da formulação em elementos finitos em descrever o escoamento acoplado.

5.1 Conservação de massa

A conservação da massa foi atendida para o caso de superfície livre em oscilação livre, para um fluido ideal não viscoso, sem consideração de acoplamento entre sistemas de escoamento. Contudo, é necessário assegurar a satisfação desta condição cinemática para o presente problema de escoamento acoplado.

O primeiro destes testes, portanto, buscou verificar o comportamento do escoamento livre com relação à conservação de massa. Esta verificação busca validar a correspondência entre a física do problema e o modelo matemático proposto.

A simulação computacional considerou um canal superficial, de escoamento livre com um comprimento de 3 m, com 1 m de profundidade (seção transversal de 1 m²), sobre meio poroso com 1 m de profundidade, na seção à jusante do escoamento. A vazão de entrada no canal foi adotada em 1,0 m³/s, caracterizando então comportamento de dominância da convecção. Nesta simulação o canal tem

um aclave (elevação no leito) de 3 %, positivo entre as seções de entrada e de saída do escoamento no canal superficial.

Este exemplo corresponde a 600 segundos (numéricos), com intervalo de tempo de 0,5 segundos. A solução foi obtida por processamento em uma arquitetura de CPU com dois processadores Pentium 4, cada qual com um "clock" de 3.00 GHz. A malha adotada corresponde a uma discretização de elementos finitos P_1P_0 , para ambos subdomínios de escoamento, em elementos de dimensão característica de 0,05 m, resultando em 2770 elementos P_1P_0 para o meio superficial e 2670 elementos para o subsuperficial. A solução numérica, para a verificação da conservação de massa, foi obtida em um tempo de CPU de 21.264,766 segundos.

As figs. 5.1 e 5.2 apresentam o comportamento da superfície livre do fluido em escoamento no canal superficial, visualizando-se no topo do gráfico da fig. 5.1 o perfil desta superfície, juntamente com o perfil do leito (não dependente do tempo) do canal, ambos em vista transversal, este último na parte inferior do gráfico.

A fig. 5.1 apresenta o comportamento da superfície livre, após 200 segundos de simulação, após ser alcançada condição de estacionaridade da solução pelo modelo computacional. Na fig. 5.2 contém, em escala ampliada, o gráfico do movimento oscilatório da superfície livre, verificando-se comportamento de ausência de acumulação ou redução de massa, sendo visível o perfil longitudinal desta superfície.

Ambos os gráficos, figs. 5.1 e 5.2, permitem inferir a ausência de ganho ou perda de massa na solução numérica do problema, ainda que em presença do movimento oscilatório da superfície superior (interface com a atmosfera) do fluido em escoamento livre, movimento induzido pela dinâmica do escoamento deste fluido.

A geometria plana em aclave (do leito do canal), deste domínio de escoamento é um aspecto forçante do mesmo. Verifica-se neste exemplo a conservação de massa da solução numérica obtida com emprego do modelo computacional. A idéia é que a elevação na inclinação do leito do canal pudesse induzir acumulações de massa da água em escoamento pelo modelo ou uma perda de massa devido a um

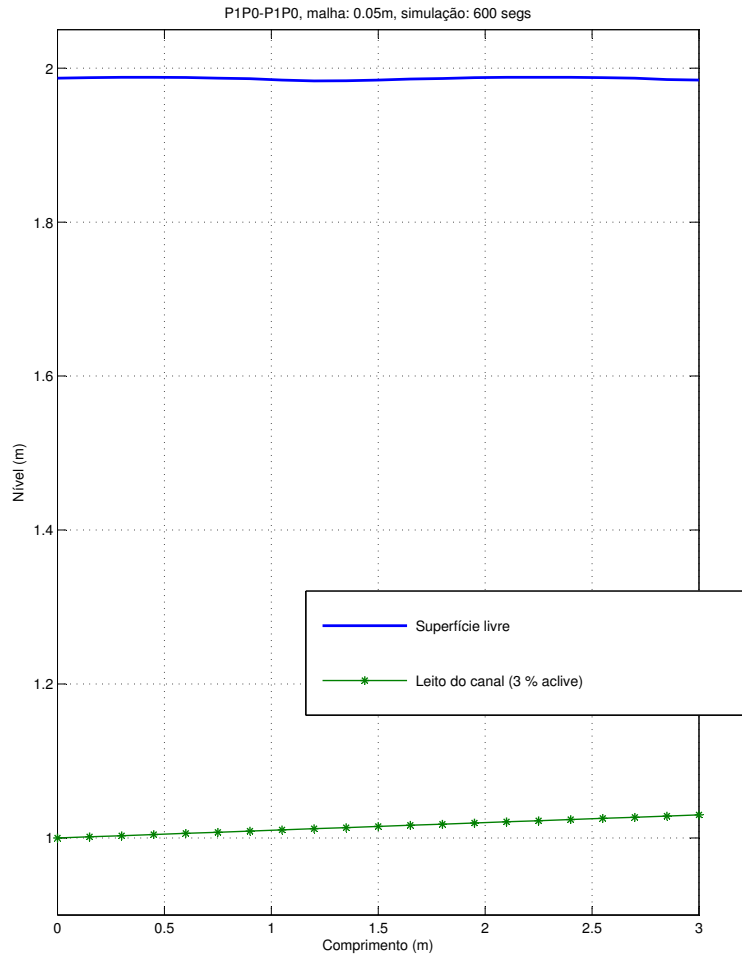


Figura 5.1: Perfis: superfície livre e leito do canal, alicive 3% canal: 3m x 1m x 1m, malha: 0,05m

retroescoamento induzido por aquele alicive. Nenhum destes distúrbios no escoamento foram detectados, indicando que o modelo foi bem sucedido em satisfazer este teste.

O atendimento a esta condição de conservação de massa é consequência do atendimento à condição de incompressibilidade, da qual a equação de posição da superfície livre é obtida. A percolação do fluido do meio superficial para o sub-superficial ocorre devido à continuidade do fluido em escoamento, e a variação de

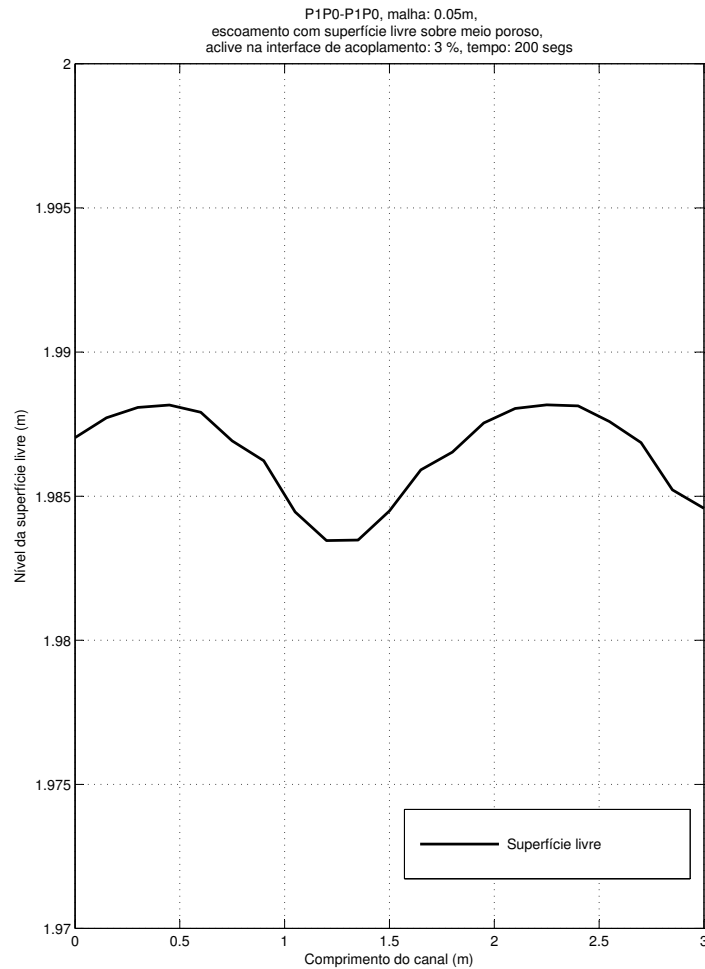


Figura 5.2: Perfil magnificado da superfície livre, canal: 3m x 1m x 1m, malha: 0,05m

posição da superfície livre é também uma resposta a esta continuidade.

5.2 Continuidade da condição de interface de pressão

Quanto ao vínculo, i.é, identidade entre a pressão total no fluido em escoamento livre, no sub-domínio determinado pelo canal superficial de escoamento, e a pressão capilar, obtida da transformação hidráulica para a dimensão de pressão, trata-se de uma condição associada à continuidade do fluido e do escoamento na

interface entre os dois sub-domínios. Em virtude desta restrição a identidade entre as pressões nestes meios de escoamento é uma exigência física.

Nesta verificação, foi considerado o mesmo exemplo da seção anterior, i.é, canal superficial de comprimento de 3 m, com 1 m de profundidade (seção transversal de 1 m²), sobre meio poroso com 1 m de profundidade, com vazão de entrada neste canal de 1,0 m³/s, em presença de um aclave, no leito deste canal, de 3 %, da seção de entrada para a de saída do escoamento.

A fig. 5.3 corresponde a 200 s de simulação computacional, para intervalo de tempo de 0,5 segundos. Para uma malha de discretização de elementos finitos P_1P_0 , para ambos subdomínios de escoamento, composta de 2770 elementos P_1P_0 para o meio superficial e 2670 elementos para o subsuperficial, este gráfico, fig. 5.3, apresenta gráfico correspondente à plotagem conjunta da solução numérica da pressão total no fluido em escoamento livre, em relação ao campo de carga hidráulica, transformado para pressão do fluido nos poros.

Para que o tratamento dado à equação de Richards tenha validade, sendo compatível com a consideração de continuidade do campo de pressão total no fluido em escoamento livre, em relação ao campo de carga hidráulica, em torno da interface de acoplamento, deve haver continuidade no perfil conjunto de pressão total e carga hidráulica. A continuidade entre estas quantidades físicas é verificada, bem como o comportamento linear para a pressão total no fluido em escoamento livre, e parabólico para a pressão devida à carga hidráulica. Verificou-se ainda a identidade, em torno da interface de acoplamento, entre a pressão capilar ($\psi = H = p_c/\rho g$) para o fluido em percolação no meio poroso, e a pressão total no fluido livre.

5.3 Influência da percolação em meio poroso sobre o escoamento superficial

Na verificação da sensibilidade do escoamento superficial à influência do acoplamento com a percolação em meio poroso, foi efetuada simulação do es-

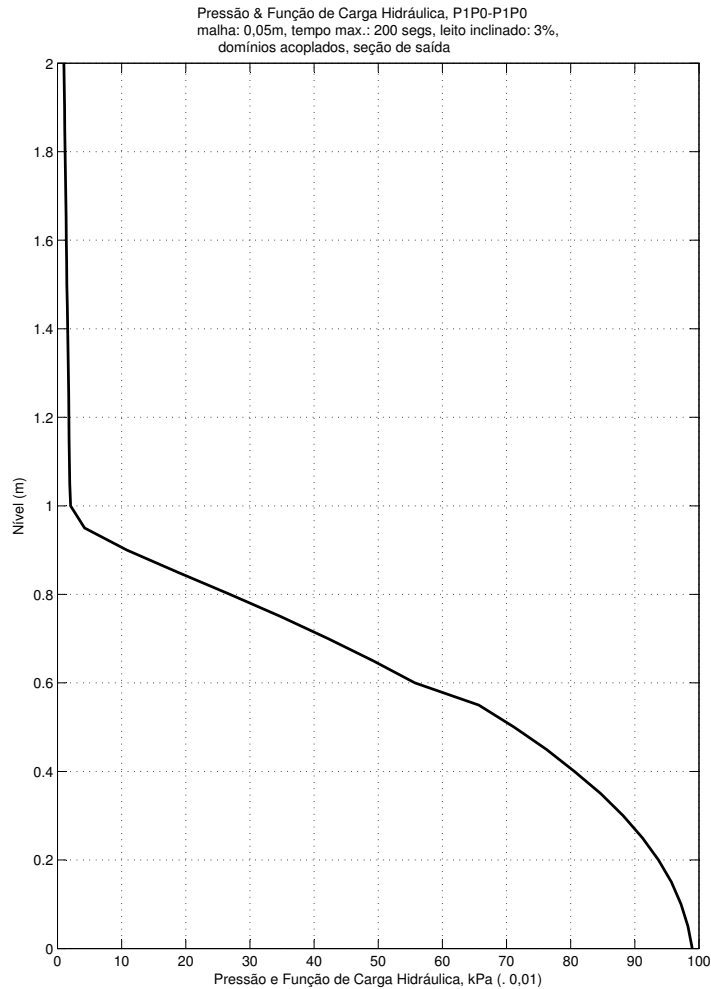


Figura 5.3: Convergência entre pressão total no fluido livre e função de carga hidráulica, seção final, malha: 0,05m

coamento acoplado, considerando-se a variação do parâmetro adimensional, α_{BJ} , dentro da faixa de valores usual na literatura.

Foi considerado o mesmo exemplo anteriormente adotado, para um escoamento de Pouissouille, no ítem 3.7.1. Para a verificação aqui pertinente, quanto à influência da variação da magnitude deste parâmetro, α_{BJ} , sobre o escoamento superficial, foi considerado um canal de 5 m de comprimento, profundidade de 1 m, seção transversal de $1,0 \text{ m}^2$, sobre meio poroso subsuperficial, não-saturado, de

1 m de espessura. A vazão de entrada na seção de entrada do canal superficial foi tomada com $1,0 \text{ m}^3/\text{s}$. Ambos os sub-domínios foram discretizados com emprego de 3370 elementos finitos P_1P_0 . A capacidade hidráulica foi tomada como sendo de 0,2 e a condutividade hidráulica foi fixada em 10^{-2} m/s . Os resultados plotados, fig. 5.4, correspondem a 200 s de simulação com passo de tempo de 0,1 s.

Foram efetuadas simulações relacionadas com a variação da magnitude do parâmetro adimensional, entre 0,1 e 4,3. Os resultados numéricos desenvolvidos para este problema de escoamento acoplado, superficial - subsuperficial, indicaram, para a adoção de parâmetro adimensional de avaliação da descontinuidade da tensão de cisalhamento no fluido na interface de acoplamento, um comportamento diferenciado com relação à literatura e às características específicas da percolação de fluido em meio poroso, conforme de Jäger & Mikelić (2000) e Deng & Martinez (2005).

Dentre as restrições em torno da superfície de interface, pela qual se dá a troca de massa entre os meios de escoamento, a condição de salto na tensão de cisalhamento está associada, conforme postulado por Beavers e Joseph, ao parâmetro adimensional, α_{BJ} .

À luz da composição da solução por duas parcelas, eq. (3.69) e (3.70), verifica-se ser a primeira associada à influência da estrutura do material e da condutividade hidráulica sobre o comportamento do fluido livre (com relação à velocidade planar), e a segunda relacionando a influência da posição da lâmina de fluido em escoamento livre sobre a magnitude da velocidade planar. A composição destas parcelas, quanto à solução da eq. (3.69), indica que uma elevação na magnitude do parâmetro adimensional influencia no arraste sobre as lâminas horizontais de fluido em escoamento livre, reduzindo a magnitude da velocidade planar, por outro lado, uma elevação do afastamento relativo das lâminas de fluido, com relação à superfície de interface e à superfície impermeável, resulta em uma elevação na magnitude da velocidade planar do fluido, conforme na fig. 5.4.

O resultado do balanço entre aquelas duas componentes (parcelas) da solução

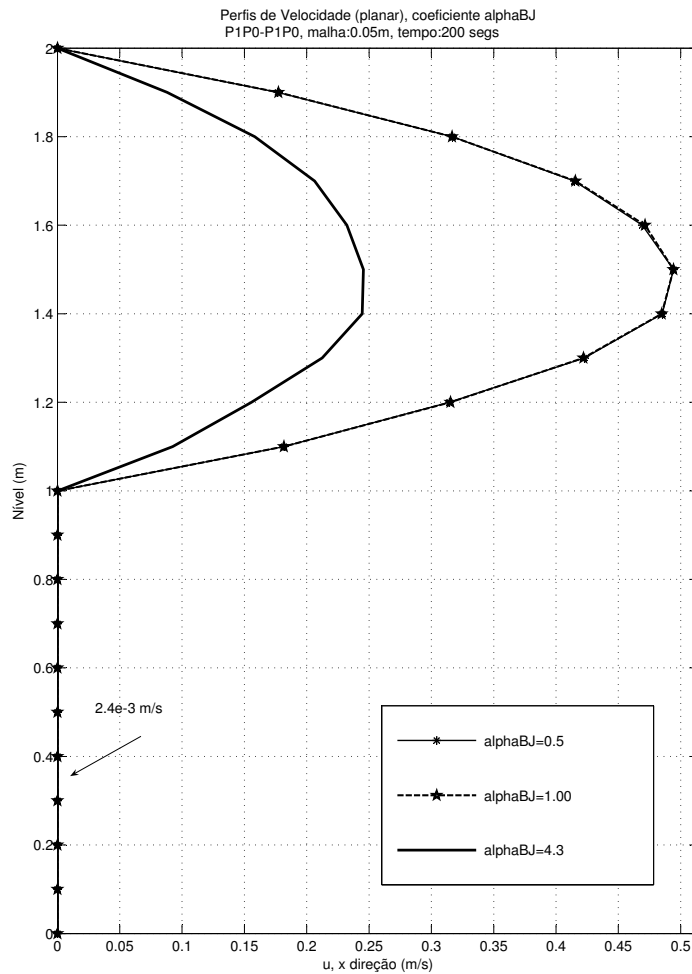


Figura 5.4: Influência do parâmetro de Beavers e Joseph: perfil de velocidade, malha: 0,05m

analítica foi verificada numericamente pelo presente modelo, avaliando-se o resultado da elevação da magnitude do parâmetro α_{BJ} , dentro da faixa de valores deduzida por Beavers & Joseph (1967), entre um valor mínimo, de 0,1, e um máximo determinado como sendo de 4,3.

Verificamos uma redução na magnitude do campo de velocidade planar com a elevação da magnitude do parâmetro adimensional, para lâminas de fluido de maior afastamento da superfície de acoplamento. Este resultado indica não ser viável

considerar um valor "médio" para α_{BJ} corresponde à faixa de valores determinada por Beavers & Joseph (1967). O valor uniforme unitário como representativo deste parâmetro, tem sido usual na literatura especializada. Aqueles pesquisadores (Beavers & Joseph, 1967) realizaram experimentos de percolação do fluido por meio poroso, em que este meio era um bloco de metal poroso, confeccionado por um de dois tipos de material, ou óxido de alumínio ou óxido de níquel, ambos de estrutura porosa. A necessidade de se considerar o tipo de material e suas propriedades, com relação ao estabelecimento do valor deste parâmetro, deve considerar que há influência significativa no desenvolvimento do comportamento do fluido livre devido à condição de não aderência, sendo este parâmetro característico do material que compõe a estrutura sólida do meio poroso, em acordo com o comportamento previsto por estes pesquisadores.

5.4 Eficiência da combinação de elementos finitos de menor ordem

Considerando os dados do exemplo do ítem 5.3, anterior, para um escoamento acoplado em presença de superfície livre, para o escoamento superficial, em presença de termos convectivos, foram efetuadas simulações com diferentes combinações de elementos finitos. A fig. 5.5 apresenta as curvas de resposta na seção de saída do sistema acoplado, correspondente a um corte vertical deste sistema na posição a jusante do escoamento superficial. Foram adotadas, para o escoamento superficial, combinações dos campos velocidade - pressão desenvolvidas com elementos P_1P_0 , P_2P_0 , e P_2P_{1dc} , mantida a combinação polinomial tipo P_1P_0 para a aproximação da solução no meio poroso, para o par de incógnitas carga hidráulica - velocidade darcyniana.

As curvas apresentadas correspondem às respostas do modelo para a velocidade planar superficial e darcyniana no meio poroso. Na fig. 5.5, o meio subsuperficial fica determinado entre os níveis 0,0 m e 1,0 m do gráfico, e o escoamento livre para os níveis 1,0 m a 2,0 m. Cada uma das curvas corresponde a uma das combinações polinomiais empregadas no modelo, para malha de dimensão carac-

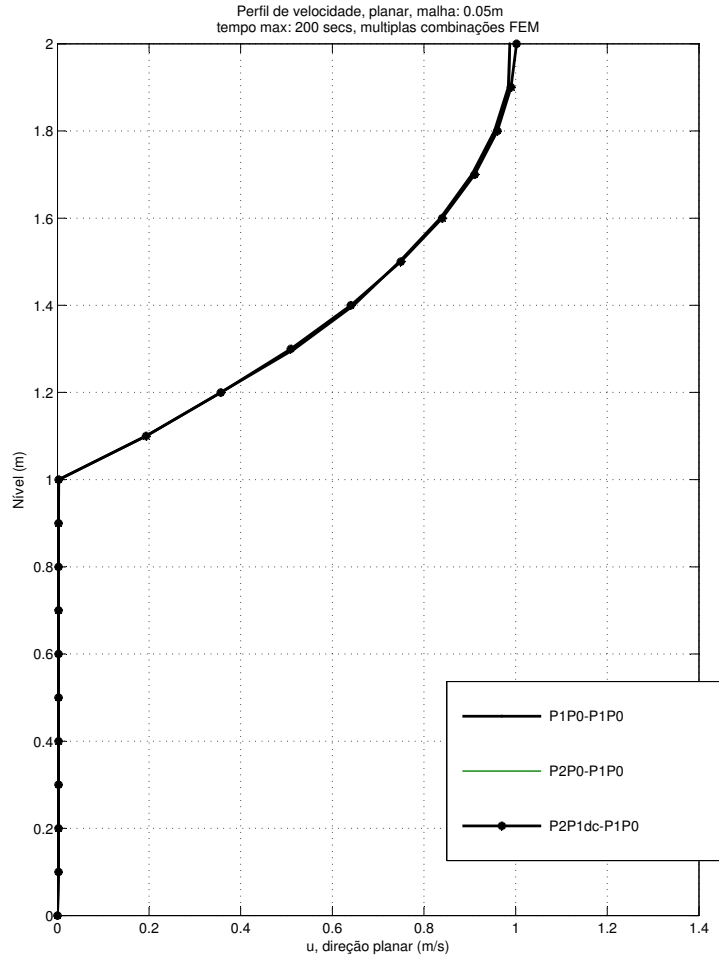


Figura 5.5: Perfis de velocidade planar, fluido livre, elementos P_1P_0 , P_2P_0 , e P_2P_{1dc} , malha: 0,05m

terística 0,05m. A combinação de elementos finitos $P_2P_{1dc} - P_1P_0$ apresenta boa aproximação devido ao tratamento da equação de Richards na forma parabólica, conforme adotado. Observamos uma convergência dos resultados numéricos, como plotado na fig. 5.5, para estas três aproximações em elementos finitos.

Em valores numéricos, os dados apresentam diferença máxima observada no campo de velocidade na superfície livre de 1,49% entre as soluções obtidas com a combinação de polinômios P_2P_{1dc} (1,00197 m/s) e a do elemento P_1P_0 (0,987311

m/s). Abaixo desta superfície esta diferença é menor que 0,64% (0,990116 m/s e 0,983787 m/s, respectivamente). Os dados numéricos para aquelas três curvas são fornecidos na tab. 2 do anexo, para valores a cada 0,10m de profundidade, com relação ao fluido em escoamento livre.

O erro relativo, assim verificado, apresenta-se relacionado à oscilação física da superfície livre como um ajuste natural intrínseco da posição da superfície livre devido à incompressibilidade da água. É necessário ainda considerar a baixa ordem na aproximação introduzida pelo elemento P_1P_0 quando comparada à ao elemento P_2P_{1dc} , em que para o elemento P_1P_0 a combinação polinomial de menor ordem reduz a quantidade de informação na solução do problema quando comparado aos elementos de funções de aproximação quadráticas.

Entretanto o elemento finito de menor ordem adotado, elemento P_1P_0 , tem excelente acurácia na captura da solução e pela sua ordem de combinação polinomial reduz o esforço computacional na aquisição da solução do problema; na tab. 5.1 é fornecida uma correlação de desempenho da eficiência do processamento destas combinações de elementos, quanto aos tempos de uso de CPU, para uma tolerância de erro arbitrada em 0,1 e passo de tempo de 0,1 s.

As simulações foram efetuadas em um computador de dois processadores Pentium IV de 3 GHz cada, montados em placa-mãe (Intel 865) de duas ancoragens de processadores. O desempenho eficiente da combinação de elementos P_1P_0 é verificada em ambos os sub-domínios de escoamento do problema acoplado. A exceção para esta solução ocorre na região da superfície livre, de característica oscilatória. Uma malha de discretização construída em elementos de menor ordem com refinamento local na região da superfície livre, em elementos finitos P_1P_0 pode superar este conflito entre melhor eficiência computacional e magnitude de informação na solução numérica, reduzindo este erro numérico. A tab. 3, no anexo, fornece os valores numéricos para estas curvas, com e sem refinamento da malha na região da superfície livre, demonstrando a eficiência desta técnica e da combinação de elementos finitos de menor ordem na aquisição da solução numérica, para o

Tabela 5.1: Tempo de uso de CPU, combinações: P_1P_0 - P_1P_0 , P_2P_0 - P_1P_0 , P_2P_{1dc} - P_1P_0 , $\Delta t = 0,10\text{secs}$

<i>Combinacao polinomial</i>	<i>Malha (m)</i>	<i>Uso de CPU (s)</i>	<i>Equacoes</i>	<i>Iteracoes (\approx por Δt)</i>
P1P0-P1P0	0,05	1.575,078	13.345	4
P2P0-P1P0	0,05	5.607,359	49.425	5
P2P1dc-P1P0	0,05	24.134,016	56.185	14
P1P0-P1P0	0,025	27.644,703	92.888	11
P1P0-P1P0	0,05 com refino local	3.773,938	15.969	8

presente modelo computacional.

Considerando estes resultados, para a finalidade deste trabalho, a verificação da validade do modelo de acoplamento proposto com uma formulação estabilizada de elementos finitos de menor ordem pode ser considerada como alcançada.

5.5 Performance computacional

O modelo computacional possui, com relação ao tempo de utilização de CPU, um crescimento de comportamento exponencial com relação ao refinamento da malha. Na fig. 5.6 é apresentado um conjunto de curvas, relacionando estes parâmetros. Os tempos de CPU e refinamento da malha são relativos aos processamentos dos resultados obtidos pelo exemplo de superfície de acoplamento senoidal, entre os dois sub-domínios de escoamento. A primeira curva correlaciona as variáveis tempo de CPU e malha, para determinação deste comportamento, quanto às discretizações do domínio de escoamento-percolação por elementos finitos P_1P_0 e P_2P_{1dc} , para o sub-domínio superficial, e P_1P_0 , para o sub-domínio sub-superficial. A segunda curva foi obtida para uma discretização do domínio de escoamento-percolação por elementos finitos P_1P_0 , para o sub-domínio superficial, e P_2P_0 , para o sub-domínio sub-superficial. Ambas as curvas, relativas às discretizações desenvolvidas com elementos $P_1P_0 - P_1P_0$ e $P_2P_{1dc} - P_1P_0$, de crescimento do tempo de processamento com a elevação do refinamento da malha, são

análogas apresentando tempo de uso de CPU equivalentes, com diferenças inferiores a 0,1%. A curva correspondente ao modelo $P_1P_0 - P_2P_0$ apresenta um incremento do tempo de CPU para processamento do modelo computacional, com a elevação do refinamento da malha, inicialmente em magnitude de 14,24%. Este comportamento, magnitude de uso de CPU superior àquela das duas primeiras curvas, apresenta redução desta variável, com relação ao refinamento da malha, na ordem de 6,05 % para a malha de 20.059 elementos (dimensão característica 0,025m).

As malhas processadas têm dimensão característica (maior dimensão do elemento discreto) de 0,10m, 0,05m, 0,033m e 0,025m, correspondendo respectivamente a 1.259, a 5.023, 11.377 e 20.059 elementos finitos. As simulações foram efetuadas em duas máquinas biprocessadas: a primeira com dois processadores independentes Pentium 4 de 3,0 GHz, montados em placa-mãe de duas ancorragens de processadores, e a segunda com um processador Centrino 2 Duo de 2,66 GHz. O desempenho do código não apresentou diferenças relevantes quanto ao tempo de processamento; da tab. 5.1, o emprego de combinação de elementos finitos $P_2P_{1dc} - P_1P_0$, para malha de 0,05m de dimensão característica, com relação à combinação $P_1P_0 - P_1P_0$, para malha de maior refinamento, de dimensão 0,025m, fornece uma diferença de tempo de CPU de 12,7% a favor da primeira combinação, porém para a mesma malha, o desempenho dos elementos P_1P_0 é fortemente favorável, com uma economia de 93,47% no tempo de processamento. O refinamento local da malha, na região da superfície livre do escoamento superficial, com combinação de elementos P_1P_0 , fornece um ganho de qualidade da solução a um custo de elevação do tempo de uso de CPU de 58,26 % para o mesmo combo $P_1P_0 - P_1P_0$, sem refino de malha, porém ainda com ganho de tempo de processamento de 82,61 % em relação aos elementos $P_2P_{1dc} - P_1P_0$.

Com relação às taxas de convergência, avaliou-se este desempenho para o erro de convergência entre a pressão total (no fluido livre) e a carga hidráulica. A fig. 5.7 fornece as curvas para os modelos em elementos finitos desenvolvidos com

emprego de combinações polinomiais P_2P_{1dc} (descontínuo, para o meio superficial) - P_1P_0 (meio subsuperficial), e P_1P_0 (para ambos os subdomínios), respectivamente. São detectadas taxas de 1:2,0024 e 1:2,0059 para aquelas combinações de elementos finitos. As taxas apresentadas graficamente, correspondentes à aproximação da solução com referência a esta variável por combinação polinomial linear-constante (elemento finito P1P0), para a modelagem da percolação no meio subsuperficial, com relação respectivamente à adoção de elementos P_1P_0 e P_2P_{1dc} para a modelagem do escoamento no meio superficial, permite avaliar como sendo um ganho o emprego do elemento de menor ordem, para este sub-domínio.

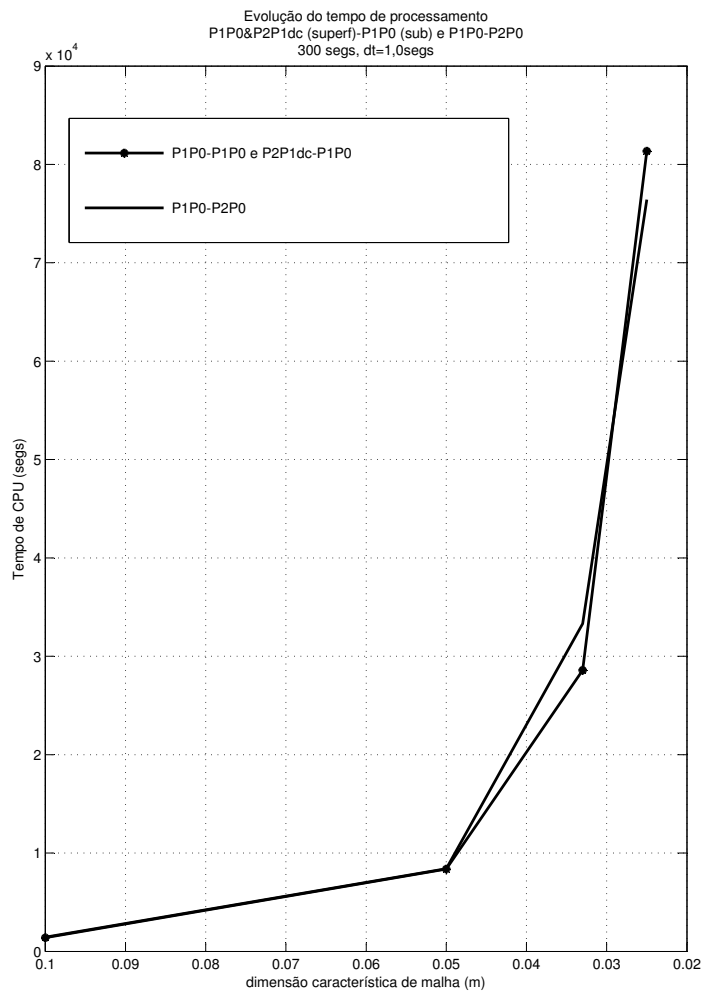


Figura 5.6: Evolução do tempo de processamento, modelos $P_1P_0-P_1P_0$, $P_2P_0-P_1P_0$, e $P_2P_{1dc}-P_1P_0$

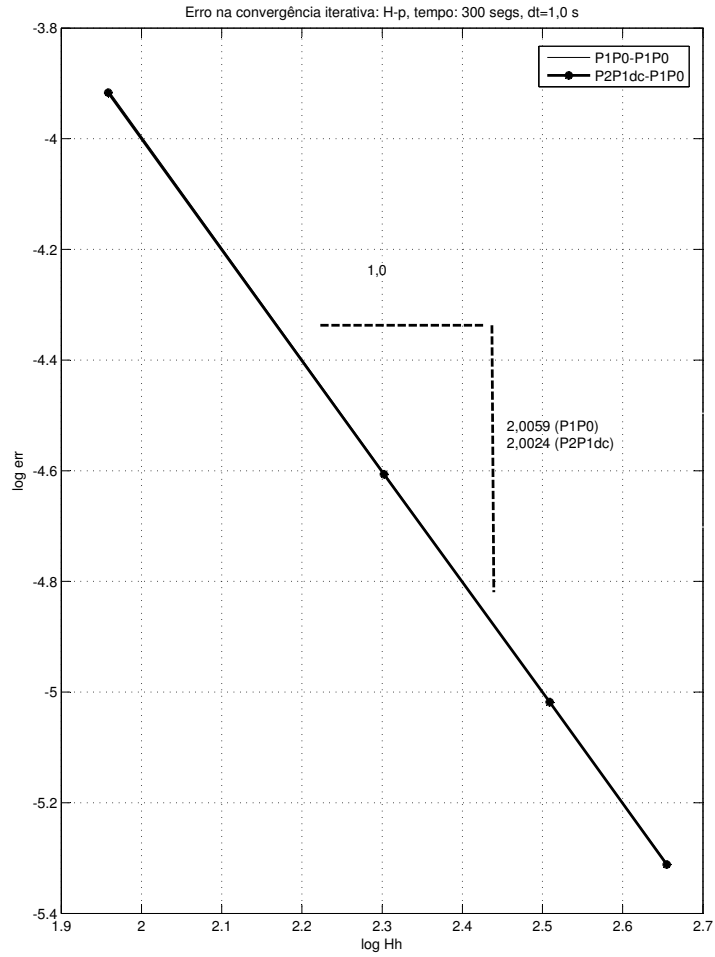


Figura 5.7: Taxa de convergência: erro na carga hidráulica, modelos $P_1P_0-P_1P_0$ e $P_2P_{1dc}-P_1P_0$

Capítulo 6

Conclusões e Trabalhos Futuros

6.1 Conclusões

O modelo computacional estabelecido no presente trabalho apresenta soluções eficientes, em tempo finito, e economicamente viáveis de serem alcançadas.

O modelo matemático, que fundamenta o desenvolvimento da formulação discreta em elementos finitos, apresenta consistência com o problema físico que busca descrever. A descrição do problema de escoamento acoplado, pelo modelo matemático, permite determinar funções, valores numéricos, e evolução espaço-temporal, para as variáveis primitivas do problema, em termos discretos, superando a dificuldade de descrição de variáveis como valores médios, característica da abordagem hidrológica.

A adoção de um método de estabilização, CAU, para tratamento de campos de velocidade de elevada magnitude e de variação no gradiente do campo de velocidade, permite descrever com acurácia o escoamento, superando-se eventual poluição da solução numérica por estas perturbações e permitindo controlar oscilações espúrias na descrição do comportamento destas variáveis. Além deste procedimento o uso do FHS como método de estabilização da solução em termos de pressão permite o controle de modos espúrios que viriam, se não controlados, a poluir a solução numérica comprometendo a descrição computacional do problema de escoamento acoplado.

A escolha dos espaços de elementos finitos, e das correspondentes com-

binacões de polinômios de aproximação para a estimativa da solução numérica, apresentou-se eficiente, sendo satisfeitos os testes de elementos e de malha, para os elementos P_1P_0 , P_2P_0 e P_2P_{1dc} . O emprego de combinações de elementos finitos de menor ordem, para a modelagem do problema, apresentou taxas de convergência numérica adequadas, e tempo de processamento reduzido em relação a combinações de elementos de ordem superior, apresentando eficiência na convergência para a mesma solução numérica.

O emprego da equação de Richards na forma parabólica permitiu reduzir a complexidade do problema acoplado, sendo compatível com a continuidade entre os campos de pressão total no fluido em escoamento livre e de carga hidráulica, na interface de acoplamento.

O desenvolvimento do modelo computacional e o estudo da solução numérica do problema permitiram avaliar a influência da posição da superfície livre sobre o atendimento (ou satisfação) à condição de incompressibilidade, no sentido da conservação da massa. Esta condição cinemática foi verificada, com a superfície livre apresentando movimento oscilatório associado à mecânica do fluido em escoamento, e ajustando-se à variação de massa do fluido no sentido de assegurar a conservação da massa.

Com relação aos resultados obtidos do processamento de exemplos pelo modelo computacional, as soluções espelham aquelas da literatura quando comparadas com os exemplos processados por Casulli & Zanolli (2002) (para a vínculo entre a superfície livre e a incompressibilidade - conservação de massa), por Gunduz & Aral (2005) (para o meio subsuperficial, quanto ao comportamento do modelo com relação à carga hidráulica) e por Beavers & Joseph (1967) (para o escoamento acoplado superficial - subsuperficial). Este último exemplo foi também reproduzido por Correa (2006), na forma de um escoamento acoplado modelado pelas equações de Richards e Darcy e pelas equações de conservação de massa e Stokes. Quanto a esta última equação, sua reprodução no presente modelo foi alcançada pela supressão das parcelas de termos convectivos da equação de Navier-Stokes. Estes dois

últimos exemplos encontram respaldo em soluções experimentais, o que assegura a reprodução pelo modelo computacional de condições físicas reais.

A formulação de elementos finitos considerada, com emprego de elementos triangulares P_1P_0 (pressão descontínua), P_2P_0 (idem) e P_2P_{1dc} (pressão linear descontínua), para o escoamento superficial, e de elementos P_1P_0 (carga hidráulica contínua, linear) e P_2P_0 (idem quadrática), para a percolação subsuperficial, com estabilização conforme adotado, mostrou a viabilidade de aquisição de resultados consistentes com o problema físico. Sob a ótica numérica as soluções desenvolvidas com esta formulação apresentaram-se estáveis, consistentes, sendo verificada convergência da solução para as diversas combinações de elementos finitos testadas. Assim, é possível concluir que o modelo fornece soluções numéricas que, para os exemplos abordados são, cada qual, existentes e únicas. Esta consideração encontra respaldo e verifica as afirmações de Gresho & Sani (2000); Dvorkin (2001); Hanert *et al* (2002), com relação à empregabilidade daquelas combinações polinomiais, introduzidas por elementos finitos de menor ordem.

É possível, com base nos resultados numéricos, afirmar que a escolha de combinações polinomiais de funções aproximantes para a solução numérica computacional, caracteriza um vínculo entre a formulação consistente, a estabilidade da solução e sua convergência, apesar de ser o problema não-linear. A aquisição da solução numérica foi alcançada sem possibilidade de ocorrência de travamento da solução. Sendo assegurada a convergência, o método iterativo resulta em um problema numérico de ponto fixo, com aproximação da solução numérica para a solução exata, ao longo do processo de marcha no tempo.

A escolha de um elemento que não atende à condição de LBB, o elemento P_1P_0 , para comparação com os resultados obtidos por emprego de elementos LBB estáveis, como o P_2P_0 e o P_2P_{1dc} , atendeu à expectativa de não necessidade de consideração desta condição de estabilidade. As soluções verificaram as indicações da literatura de não ser a LBB uma condição necessária. Em sendo atendida esta condição é assegurada a estabilidade, no sentido da formulação em elementos

finitos, da solução, porém na sua ausência é possível obter soluções estáveis e convergentes, como verificado no presente trabalho.

6.2 Trabalhos futuros: rumos da pesquisa

Alguns desdobramentos e indicações de continuidade da presente pesquisa têm sido considerados para continuidade de suas atividades. De imediato a consideração da paralelização do código computacional, com a solução em tempo finito e limitado, de problemas plenamente tridimensionais para ambos os sistemas de escoamento acoplados. A expectativa é que este desenvolvimento permitirá aprofundar o emprego do modelo a problemas de maior complexidade.

O modelo computacional apresenta um potencial de aprofundamento de pesquisas no sentido teórico que apresenta-se bastante rico, quanto a:

1. Refinamento do método iterativo de solução, com emprego de outros procedimentos numéricos que não o fundamentado em gradientes conjugados, ou no GMRES, e estudo comparado da eficiência computacional relativa aos métodos assim obtidos;
2. Ainda com relação ao procedimento iterativo de satisfação do critério de convergência, buscar explorar simultaneamente outras formas de restrição de continuidade entre a pressão e a carga hidráulica, analisando os erros embutidos e a influência sobre a qualidade da solução numérica do problema;
3. Aprofundar a análise da influência da condição de não aderência sobre a solução numérica, inclusive sobre a pressão total no fluido, testando-se esta condição e sua influência contra outros critérios de não aderência como as condições de Saffmann e de Brinkman (1947);
4. Explorar a relação da composição adotada da pressão total no fluido livre, e do critério de convergência do procedimento iterativo, contra o critério de convergência na forma de um multiplicador de Lagrange, conforme adotado por Miglio *et al* (2003) e por Cai (2008), testando-se a eficiência computacional e a qualidade da solução;

5. Expandir o conjunto de métodos de estabilização numérica, tanto para problemas advectivo dominantes como para o controle de modos da pressão, correlacionando a precisão, eficiência computacional, e influência sobre o desempenho do modelo computacional contra problemas da literatura já testados;

6. Aprofundar o teste de diversas combinações de elementos finitos, tanto LBB como não LBB estáveis, aprofundando o verificado quanto à robustez do modelo, e a qualidade das soluções assim obtidas;

7. Efetuar modificação do tratamento dado à equação de Richards e a sua relação de solução com a de Darcy, verificando-se o ganho associado com esta abordagem contra o problema de ponto-de-sela relacionado.

8. Estabelecer novo(s) método(s) numérico(s) de satisfação da condição cinemática de incompressibilidade e da conservação da massa, relacionando estas condições à variação da posição da superfície livre, e verificar o atendimento destas condições físicas contra outras variáveis do problema, efetuando uma análise de sensibilidade das variáveis às restrições e à física do problema;

9. Efetuar uma análise de elementos finitos para o problema não-linear, transiente, convectivo dominante, estabelecendo as taxas de convergência teóricas, ótimas, para este problema.

Na frente de trabalho de aplicações, à solução e/ou estudos de casos da realidade objetiva, tais procedimentos de desenvolvimento deverão viabilizar a consideração de pesquisas futuras, a saber:

1. Aplicação do modelo computacional a trechos de bacias hidrográficas reais, contribuindo ao estudo da perenização de bacias hidrográficas;

2. Investigação de bacias hidrográficas quanto à disponibilidade hídrica anual, contribuindo ao estudo da conservação de recursos hídricos;

3. Solução do modelo correlacionando seus resultados com dados reais, relacionados à variação temporal da posição do lençol freático de reservatórios sub-superficiais, contribuindo ao estudo dos processos envolvidos na recarga de aquíferos;

4. Integração com modelo de transporte de substâncias, com aplicação à

investigação de intrusão salina;

5. Incorporação de equações descritivas de processos relacionados ao ciclo da água, viabilizando a aplicação do modelo à modelagem do ciclo da água e processos de evapo-transpiração;

6. Desenvolvimento de atividades de investigação de parâmetros geofísicos, efetuando uma contribuição ao estudo da influência de características de solos brasileiros.

Referências Bibliográficas

- Babuska, I., 1971. “Errors bounds for finite element method”. *Numerical Methods* 16, 322–333.
- Beavers, G., Joseph, D., 1967. “Boundary conditions at a naturally permeable wall”. *Journal of Fluid Mechanics* (30), 197–207.
- Braga, B., Hespanhol, I., Conejo, J., *et al*, 2002. *Engenharia Ambiental*, 2nd Edição. Pearson Education do Brasil.
- Brezzi, F., 1974. “On the existence, uniqueness and approximation of saddle-points problems arising from Lagrange multipliers”. *RAIRO Revuèe Française d’Automatiquie* 2, 129–151.
- Brinkman, H., 1947. “A calculation of the viscous force exerted by a flowing fluid on a dense swarm of particles”. *Applied Scientific Research* (1), 27–34.
- Brooks, A., Hughes, T., 1982. “Streamline upwind Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations”. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 32, 199–259.
- Cai, M., 2008. “*Modelling and numerical simulation of the coupling of surface flow with subsurface flow*”. Ph.D. thesis, Hong Kong University of Science and Technology.
- Casulli, V., Zanolli, V., 2002. “Semi-Implicit Numerical Modeling of Nonhydrostatic Free-Surface Flows for Environmental Problems”. *Mathematical and Computer Modelling* 36, 1131–1149.

- Correa, M., Loula, A., 2006. “A stabilized continuous lagrangian based mixed finite element method for coupling stokes and darcy flows”. In: *Proceedings of XXVII Iberian Latin American Congress on Computational Mechanics*. Bélem, Brasil.
- Correa, M. R., 2006. “*Métodos de Elementos Finitos Estabilizados para Escoamentos de Darcy e de Stokes-Darcy Acoplados*”. Ph.D. thesis, Laboratório Nacional de Computação Científica.
- Dahlquist, G., Björck, A., 1974. “Numerical Methods”. In: Sperandio, D., Mendes, J., Silva, L. M. (Eds.), *Cálculo Numérico*, 1st Edição. Chapter 4, Pearson Prentice House Press.
- Deng, C., Martinez, D. M., 2005. “Viscous flow in a channel partially filled with a porous medium and with wall suction”. *Chemical Engineering Science* 60, 329–336.
- Discacciati, M., Miglio, E., Quarteroni, A., 2002. “Mathematical and numerical models for coupling surface and groundwater flows”. *Applied Numerical Mathematics* (43), 57–74.
- Donea, J., Huerta, A., 2003. *Finite element methods for flow problems*, 1st Edição. John Wiley and Sons Publishing.
- Dvorkin, E., 2001. “On the convergence of incompressible finite element formulations”. *Engineering Computations* 18 (3-4), 539–556.
- Dvorkin, E., Goldschmit, M., 2006. “*Nonlinear continua*”, 1st Edição. vol.15, Springer - Computational Fluid and Solid Mechanics, Springer Verlag.
- E. Hanert, V. Legat, E. D., 2002. “A comparison of three finite elements to solve the linear shallow water equations”. *Ocean Modelling* 5, 17–45.
- Franca, L., Hughes, T., Stenberg, R., 1993. “Stabilized Finite Element Methods for the Stokes Problem”. In: Gunzburger, M., Nicolaidis, R. (Eds.), *Incompressible*

- Computational Fluid Dynamics*, 1st Edição. Chapter 4, Cambridge University Press.
- Galeão, A., Almeida, R., Malta, S., A.F.D.Loula, 2004. “Finite element analysis of convection-dominated reaction-diffusion problems”. *Applied Numerical Mathematics* (48), 205–222.
- Galeão, A., DoCarmo, E., 1988. “A consistent upwind Petrov-Galerkin method for convection-dominated problems”. *Computational Methods in Applied Mechanics and Engineering* (68), 83–95.
- Galeão, A. C. N. R., Bevilacqua, L., Costa, F. P., 2007. “A stabilized model for convective dominant flow for coupling of Navier-Stokes and Darcy equations”. In: *XXVIII CILAMCE Proceedings*. Porto, Portugal, p. 193.
- Galeão, A. C. N. R., Bevilacqua, L., Costa, F. P., 2008. “Stabilized P1P0 finite element approximations of coupled free surface to porous media subsurface flow problems”. In: *Proceedings of the 8th World Congress on Computational Mechanics WCCM8 of the IACM*. Veneza, Itália.
- Gallagher, R., Carey, G., Oden, J., Zienkiewicz, O., 1985. “Newer and newer elements for incompressible flow”. In: Fortin, M., Fortin, A. (Eds.), *Finite Elements in Fluids, vol.6*, 1st Edição. Chapter 7, Jown Wiley and Sons Publishing.
- Glover, R., 1978. “Transient ground water hydraulics”. Monography, cited by Gunduz and Aral, 2005.
- Gresho, P., Sani, R., 2000. *Incompressible flow and the finite element method*, 3rd Edição. John Wiley and Sons ltd.
- Gunduz, O., Aral, M., 2005. “River networks and groundwater flow: a simultaneous solution of a coupled system”. *Journal of hydrology* (301), 216–234.
- Hanert, E., Legat, V., Deleersnijder, E., 2002. “A comparison of three finite elements to solve the linear shallow water equations”. *Ocean Modelling* 5, 17–35.

- Hanspal, N. S., Waghode, A. N., Nassehi, V., Wakeman, R. J., 2006. “Numerical analysis of coupled Stokes/Darcy flows in industrial filtrations”. *Transport in Porous Media* 64, 73–101.
- Hughes, T., 2000. “*The finite element method*”, 1st Edição. Dovers Publications.
- Irons, B., Loikkanen, M., 1983. “An engineer’s defense of the Patch Test”. *International Journal of Numerical Methods in Engineering* 19 (9), 1391–1401.
- Jäger, W., Mikelić, A., 2000. “On the interface boundary condition of Beavers, Joseph, and Saffman”. *SIAM J. Appl. Math.* 60, 1111–1127.
- Kesavan, S., 1989. *Topics in Functional Analysis and Applications*, 1st Edição. John Wiley and Sons ltd.
- Kubik, J., Cieszko, M., 2005. “Analysis of matching conditions at the boundary surface of a fluid-saturated porous solid and a bulk fluid: the use of Lagrange multipliers”. *Continuum Mechanics Thermodynamics* 4 (17), 351–359.
- Ladyshenskaya, O., 1969. *The mathematical theory of viscous incompressible flow*, 2nd Edição. Gordon and Breach Science Publisher.
- Lapidus, L., Pinder, G., 1999. “*Numerical solution of partial differential equations in science and engineering*”, 2nd Edição.
- Lemos, M. J. S., 2005. “Turbulent kinetic energy distribution across the interface between a porous medium and a clear region”. *Heat and Mass Transport* 32, 107–115.
- Lin, Y., Medina-Jr., M., 2003. “Incorporating transient storage in conjunctive stream aquifer modeling”. *Advances in Water Resources* (26), 1001–1029.
- Miglio, E., Quarteroni, A., Saleri, F., 2003. “Coupling of free surface and groundwater flows”. *Computer and Fluids* (32), 73–83.

- Panday, S., Huyakorn, S., 2004. “A fully coupled physically-based spatially-distributed model for evaluating surface/subsurface flow”. *Advances in Water Resources* (27), 361–382.
- Peterson, D., Wilson, J., 1988. “Variably saturated flow between streams and aquifers”. *Technical Completion Reports* (233), 1–23.
- Pironneau, O., Hecht, H., Hyrac, A. L., Ohtsuka, K., 2005. “*Freefem++: the book*”, 1st Edição. Universitee Pierre et Marie Currie - Laboratoire Jacques-Louis Lion, UPMC-LJLL Press.
- Rao, S., 1989. *The finite element method in engineering*, 2nd Edição. Pergamon Press.
- Riessenauer, A., 1963. “Methods of solving problems of multidimensional, partially saturated steady flow in soils”. *Journal of Geophysical Research* 20 (68), 5725–5733.
- Runkel, R. L., McKnight, D. M., Rajaram, H., 2003. “Modelling hyporheic zone processes”. *Advances in water research* 26 (9), 901–905.
- Saad, Y., 2001. “*Iterative methods for sparse linear systems*”, 2nd Edição. SIAM Editions.
- Saad, Y., Schultz, M., 1986. “GMRES: A generalized minimal residual for solving nonsymmetric linear systems”. *SIAM Journal of Scientific Stat. Computing* 7 (3), 856–869.
- Sophocleous, M., 2002. “Interactions between groundwater and surface water: the state of the science”. *Hydrology Journal* 10, 52–67.
- Stephens, D., 1996. *Vadose zone hydrology*, 1st Edição. CRC Press-Lewis Publishers.
- Tanehill, J., Anderson, D., Pletcher, R., 1997. *Computational fluid mechanics and heat transfer*, 2nd Edição. Taylor and Francis Publisher.

- Weill, S., Mouche, E., Patlin, J., 2001. “A generalized Richards equation for surface/subsurface flow modelling”. *Journal of Hydrology* 366, 9–20.
- Winter, T., 1995. “Recent advances in understanding the interaction of groundwater and surface water”. *Rev Geophysics (Suppl)*, 985–994.
- Zienkiewicz, O., Taylor, R., 1989. “*The finite element method*”, 4th Edição. MacGraw-Hill Eds.

.1 Apêndice: Tabelas de Dados

São apresentadas a seguir as tabelas referidas nos Capítulos 3 e 5, contendo dados brutos referentes a resultados de simulações numéricas.

Tabela 1: Magnitude do perfil de velocidade, malha: 0,05m, $\Delta t = 0,10$ s

<i>Nivel</i> (m)	<i>SemCAU</i> 10segs	<i>SemCAU</i> 50segs	<i>SemCAU</i> 100segs	<i>ComCAU</i> 100segs
1,00	3,93388	6,50388	6.74297	5.00721
0,95	3.60878	6.34321	6.41998	4.98535
0,90	3.49358	5.5571	5.56352	4.94447
0,85	3.73789	5.436	5.80002	4.88146
0,80	3.65831	4.99636	5.44296	4.807
0,75	3.49919	5.83941	5.83103	4.68746
0,70	3.2313	5.09493	5.31023	4.54864
0,65	3.30151	5.42789	5.30206	4.38788
0,60	2.69896	4.41558	3.76685	4.20116
0,55	2.62243	3.63253	3.68063	3.98617
0,50	2.08118	3.69917	3.48526	3.74998
0,45	1.92129	3.53745	2.98621	3.48364
0,40	1.91729	3.04965	2.99507	3.20563
0,35	1.819	2.96997	3.17677	2.88562
0,30	1.77333	2.66469	2.3387	2.53705
0,25	1.25204	2.68598	2.50678	2.17383
0,20	0.96431	1.91156	2.21076	1.80222
0,15	0.75206	1.69627	1.61617	1.39607
0,10	0.483563	1.51376	1.24172	0.95805
0,05	0.163121	0.566321	0.583254	0.492618
0,00	-2.30204e-033	6.40564e-033	6.86076e-033	2.02314e-029

Tabela 2: Perfis de velocidade planar, malha: 0,05m, $P_1P_0-P_1P_0$, $P_2P_0-P_1P_0$, e $P_2P_{1dc}-P_1P_0$, $\Delta t = 0,10$ s

<i>Nivel da</i> <i>agua(m)</i>	<i>Combo</i> $P_1P_0 - P_1P_0$	<i>Combo</i> $P_2P_0 - P_1P_0$	<i>Combo</i> $P_2P_{1dc} - P_1P_0$
1,00	0.987311	0.988022	1.00197
0,90	0.983787	0.986542	0.990116
0,80	0.953839	0.957512	0.960102
0,70	0.904473	0.907531	0.910591
0,60	0.835842	0.837558	0.839922
0,50	0.746345	0.747552	0.749363
0,40	0.646568	0.642941	0.640238
0,30	0.517507	0.51235	0.50921
0,20	0.356214	0.35834	0.356528
0,10	0.193762	0.19134	0.193748
0,00	2.37087e-03	2.4e-03	2.64758e-03

Tabela 3: Velocidade planar, malha: 0,05m, P1P0-P1P0, refinamento da malha, $\Delta t = 0,10$ s

<i>Nivel da agua(m)</i>	<i>Com refinamento</i>	<i>Sem refinamento</i>
1,00	0.998281	0.997379
0,95	0.995381	0.997398
0,90	0.987188	0.987477
0,85	0.976213	0.975158
0,80	0.957794	0.957248
0,75	0.933884	0.933539
0,70	0.90766	0.906161
0,65	0.876241	0.875677
0,60	0.837398	0.836231
0,55	0.795664	0.793638
0,50	0.74765	0.746966
0,45	0.697487	0.698204
0,40	0.642823	0.642267
0,35	0.580463	0.580476
0,30	0.512499	0.513177
0,25	0.442934	0.4451
0,20	0.358052	0.358983
0,15	0.276817	0.276718
0,10	0.191631	0.191525
0,05	0.100431	0.101714
0,00	3.43773e-029	3.93323e-029
-0,05	2.83551e-029	2.87039e-029
-0,10	2.63532e-029	2.52319e-029
-0,15	2.54283e-029	2.36277e-029
-0,20	2.48955e-029	2.27036e-029
-0,25	2.45491e-029	2.21027e-029
-0,30	2.43058e-029	2.16808e-029
-0,35	2.41255e-029	2.13681e-029
-0,40	2.39866e-029	2.11272e-029
-0,45	2.38763e-029	2.09359e-029
-0,50	2.37866e-029	2.07803e-029
-0,55	2.37122e-029	2.06512e-029
-0,60	2.36495e-029	2.05425e-029
-0,65	2.35959e-029	2.04496e-029
-0,70	2.35496e-029	2.03693e-029
-0,75	2.35092e-029	2.02992e-029
-0,80	2.34737e-029	2.02376e-029
-0,85	2.34421e-029	2.01828e-029
-0,90	2.34139e-029	2.0134e-029
-0,95	2.33886e-029	2.009e-029
-1,00	2.33657e-029	2.00504e-029

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](#)