

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO  
INSTITUTO DE MATEMÁTICA  
INSTITUTO TERCIO PACITTI DE APLICAÇÕES E PESQUISAS  
COMPUTACIONAIS  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM INFORMÁTICA

AMAURI AGUIAR DE FREITAS

**ANÁLISE E COMPUTAÇÃO DE UM  
MODELO GENERALIZADO DA  
EQUAÇÃO DE RICHARDS**

Rio de Janeiro  
2015

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO  
INSTITUTO DE MATEMÁTICA  
INSTITUTO TÉRCIO PACITTI DE APLICAÇÕES E PESQUISAS  
COMPUTACIONAIS  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM INFORMÁTICA

AMAURI AGUIAR DE FREITAS

**ANÁLISE E COMPUTAÇÃO DE UM  
MODELO GENERALIZADO DA  
EQUAÇÃO DE RICHARDS**

Dissertação de Mestrado submetida ao  
Corpo Docente do Departamento de Ci-  
ência da Computação do Instituto de Ma-  
temática, e Instituto Tércio Pacitti de  
Aplicações e Pesquisas Computacionais da  
Universidade Federal do Rio de Janeiro,  
como parte dos requisitos necessários para  
obtenção do título de Mestre em Informá-  
tica.

Orientador: Marcello Goulart Teixeira

Co-orientador: Daniel Gregorio Alfaro Vigo

Co-orientador: Carlos Alexandre Bastos de Vasconcellos

Rio de Janeiro  
2015

F866a Freitas, Amauri Aguiar de  
Análise e computação de um modelo generalizado da Equação de Richards / Amauri Aguiar de Freitas. – Rio de Janeiro, 2015.  
74 f.:

Orientador: Marcello Goulart Teixeira.  
Co-orientador: Daniel Gregorio Alfaro Vigo.  
Co-orientador: Carlos Alexandre Bastos de Vasconcellos.  
Dissertação (Mestrado em Informática) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Instituto de Matemática, Instituto Tércio Pacitti de Aplicações e Pesquisas Computacionais, Programa de Pós-Graduação em Informática, Rio de Janeiro, 2015.

1. Equação de Richards. 2. Cálculos Fracionários. 3. Infiltração. 4. Materiais Porosos. 5. Difusão Anômala. – Teses. I. Teixeira, Marcello Goulart (Orient.). II. Vigo, Daniel Gregorio Alfaro (Co-orient.). III. Vasconcellos, Carlos Alexandre Bastos de (Co-orient.). IV. Universidade Federal do Rio de Janeiro. V. Título

AMAURI AGUIAR DE FREITAS

**Análise e computação de um modelo generalizado da  
Equação de Richards**

Dissertação de Mestrado submetida ao Corpo Docente do Departamento de Ciência da Computação do Instituto de Matemática, e Instituto Tércio Pacitti de Aplicações e Pesquisas Computacionais da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários para obtenção do título de Mestre em Informática.

Aprovado em: Rio de Janeiro, 07 de Outubro de 2015.



Prof. Dr. Marcello Goulart Teixeira (Orientador)



Prof. Dr. Daniel Gregorio Alfaro Vigo (Co-orientador)



Prof. Dr. Carlos Alexandre Bastos de Vasconcelos (Co-orientador)



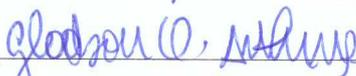
Prof. Dr. Mauro Antonio Rincon



Prof. Dr. I Shih Liu



Prof. Dr. Webe João Mansur



Prof. Dr. Gladson Octaviano Antunes

Rio de Janeiro  
2015

*A Deus, à minha noiva Amanda, à minha sobrinha Lara Aguiar, à minha irmã Lilian e aos meus pais Ivanete e Ari Freitas.*

# AGRADECIMENTOS

Deixo meus agradecimentos a todos aqueles que indireta ou diretamente contribuíram para a confecção deste trabalho, em especial:

Ao professor Marcello Goulart Teixeira por sua orientação, dedicação, apoio, todos os conhecimentos transmitidos e confiança a mim dedicada.

Ao professor Daniel Gregorio Alfaro Vigo pela orientação e colaboração dispensada a este trabalho.

Ao professor Carlos Alexandre Bastos de Vasconcellos pela orientação e dedicação fundamental a este trabalho.

Aos demais professores do Departamento de Ciências da Computação do PPGI-UFRJ pelo incentivo e conhecimentos ministrados.

Aos companheiros de estudo Guilherme Seguro, Gabriel Thomaz, Charles Barros, Bruno Alves, Romulo Brito, Juliana Castanon, Thiago Elias, Thiago Sabatucci, Lucas Ribeiro, Rabi Modesto, Carlos Felipe, Alessandra Sena, Rodrigo Madureira, Rodrigo Veloso, Adriano Alcantara, Mateus Torres, Leandro Justino, Julio Reuther, Felipe Alves, Carla Moraes, Natanael Quintino, Aline Rigueti, Roberta Marins, Fabiano Martins e Ciro Monteiro pela amizade e motivação em todas as horas.

Ao Departamento de Ciências da Computação da Universidade Federal do Rio de Janeiro e ao Programa de Pós-Graduação em Informática que me permitiram realizar este curso.

À minha família que soube me compreender nas horas mais difíceis, sempre me apoiando e incentivando com carinho e dedicação.

A Deus, por me ajudar em todos os desafios de minha vida.

## RESUMO

FREITAS, Amauri Aguiar de. **Análise e computação de um modelo generalizado da Equação de Richards**. 2015. 74 f. Dissertação (Mestrado em Informática) - PPGI, Instituto de Matemática, Instituto Tércio Pacitti de Aplicações e Pesquisas Computacionais, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2015.

A infiltração de água em meios porosos não-saturados é governada pela equação de Richards, que expressa o princípio da conservação de massa e a lei de Buckingham-Darcy. A equação em sua forma clássica tem se mostrado não geral o suficiente no estudo de infiltrações na direção horizontal, apresentando resultados para grandes tempos de simulação que diferem de resultados experimentais para alguns meios porosos. Generalizações para a equação utilizando cálculos fracionários têm surgido e apresentam resultados acurados e condizentes com dados dos meios estudados. Este trabalho apresenta um estudo da equação de Richards nas direções vertical e horizontal utilizando programas computacionais para simular numericamente o escoamento em meios porosos não-saturados através de modelos conservativos de massa. Nas soluções numéricas verticais empregou-se o método de diferenças finitas, no qual as equações foram discretizadas por meio do esquema de Euler centrado no espaço e, ajustando um parâmetro no modelo proposto, é possível usar um esquema explícito, um centrado de Crank-Nicolson ou um implícito no tempo. O sistema de equações algébricas não-lineares tridiagonal resultante foi resolvido pela técnica iterativa de Picard. As aproximações foram comparadas com a solução semi-analítica de Philip, ao simular a infiltração em uma coluna de solo do tipo areia. Os resultados obtidos tanto na forma explícita, na centrada e na implícita mostraram-se acurados e convergentes. Nas soluções numéricas horizontais empregou-se também o método das diferenças finitas, no qual as equações foram discretizadas por meio do esquema de Euler centrado no espaço e usando derivada fracionária e integral fracionária no tempo. Como meio poroso foram usados dados de um bloco de silício que apresenta difusividade retrógrada, diferindo dos resultados clássicos. As aproximações numéricas para este problema foram comparadas com dados experimentais do meio poroso. A principal contribuição deste trabalho é uma alteração do modelo integral fracionária, onde este passa a considerar um passo de tempo adaptativo capaz de tornar o processo de simulação até 900 % mais rápido. O modelo mantém a estabilidade numérica para meios porosos que apresentam difusividade anômala, garante a conservação de massa, converge rapidamente para a solução experimental e fornece resultados acurados com o menor esforço e custo computacional possível.

**Palavras-chave:** Equação de Richards, Cálculos Fracionários, Infiltração, Materiais Porosos, Difusão Anômala.

## ABSTRACT

FREITAS, Amauri Aguiar de. **Análise e computação de um modelo generalizado da Equação de Richards**. 2015. 74 f. Dissertação (Mestrado em Informática) - PPGI, Instituto de Matemática, Instituto Tércio Pacitti, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2015.

The water infiltration in unsaturated porous media is governed by Richards equation, that expresses the principle of mass conservation and the Buckingham-Darcy law. The classic form of the equation has shown not to be general enough in infiltration study in the horizontal direction, presenting results for large simulation times that differ from experimental results in some porous media. Generalizations to the equation using fractional calculations have emerged and have presented accurate and consistent results with experimental data. This paper presents a study of Richards equation in vertical and horizontal directions using computer programs to numerically simulate the flow in unsaturated porous media through mass conservative models. To the numerical solutions for the vertical infiltration problem were used the finite difference method, in which the equations were discretized by a Euler scheme centered in space and, by adjusting a parameter in the proposed model, it is possible to use an explicit, a centered Crank-Nicolson or an implicit scheme on time. The non-linear tridiagonal system of algebraic equations resulting was solved using the Picard iterative technique. The approximations were compared with the Philip's semi-analytical solution, considering the infiltration in a sand type soil column. The results obtained in both explicitly, centered and implicitly scheme showed to be accurate and convergent. In the horizontal numerical solutions it was also employed the finite difference method, in which the equations were discretized using the Euler scheme centered in space and using fractional derivative and fractional integral in time. As porous media were used the data from a siliceous block presenting retrograde diffusivity, differing from classical results. The numerical approximations to this problem were compared with experimental data. The main contribution of this work is a change in the fractional integral model, considering an adaptive time step scheme whose processing time is 900% faster. The model keeps the numerical stability for porous media that present anomalous diffusivity, ensures the mass conservation, converges quickly to the experimental solution and provides accurate results with less effort and computational cost.

**Keywords:** Richards Equation, Fractional Calculus, Infiltration, Porous Materials, Anomalous Diffusion.

## LISTA DE FIGURAS

2.1	Perfil de conteúdo de água típico durante o processo de infiltração em um perfil de solo uniforme de acordo com LIBARDI (2012). . . . .	20
2.2	O gráfico apresenta à aproximação numérica do esquema (2.19) com o parâmetro $a = 0$ (explícito), $a = 0,5$ (Crank-Nicolson - centrado) e $a = 1$ (implícito); em um solo do tipo areia para os tempos de simulação 0, 1 hora, 0, 2 hora e 0, 8 hora. . . . .	28
2.3	Esquema físico do problema de infiltração de água na horizontal em um solo uniforme segundo GEROLYMATOU; VARDOULA-KIS; HILFER (2006) - legendas traduzidas. . . . .	32
3.1	Gráfico apresentando para cada passo de tempo o número de iterações que a técnica de Picard usou para apresentar solução. . . . .	40
4.1	O gráfico a esquerda apresenta à aproximação numérica e a expansão em série de potências para $\gamma = 0,9$ e considerando os 150 primeiros termos da série. Gráfico a direita apresentando os erros máximos em todos os pontos da malha espacial. . . . .	51
4.2	Resultados síncronos para conteúdos volumétricos de umidade $\theta$ para tempo igual a 100 minutos e diferentes ordens de derivadas fracionárias. . . . .	54
4.3	Solução para os tempos 35h, 40h e 50h – Solo Silty Loam, usando a difusividade (4.12), $\Delta t = 1 s$ e $\Delta x = 1 cm$ . . . . .	55
4.4	Soluções para os tempos 450 s, 5370 s, 24210 s, 79770 s e 170430 s – Tijolo de Silício, usando a difusividade $D_\gamma(\theta)$ (4.13), $\Delta t = 30 s$ e $\Delta x = 1 mm$ . . . . .	56
4.5	Soluções para os tempos 450 s, 5370 s, 24210 s, 79770 s e 170430 s – Tijolo de Silício, usando a difusividade $D_\gamma(\theta)$ (4.14), $\Delta t = 30 s$ e $\Delta x = 1 mm$ . . . . .	56
4.6	Soluções para os tempos 450 s, 5370 s, 24210 s, 79770 s e 170430 s – Tijolo de Silício, usando a difusividade $D_\gamma(\theta)$ (4.14), $\Delta t = 30 s$ e $\Delta x = 1 mm$ . . . . .	58
4.7	Soluções para os tempos 450 s, 5370 s, 24210 s, 79770 s e 170430 s – Tijolo de Silício, usando a difusividade $D_\gamma(\theta)$ (4.13), $\Delta t = 30 s$ e $\Delta x = 1 mm$ . . . . .	59
4.8	Soluções para os tempos 450 s, 5370 s, 24210 s, 79770 s e 170430 s – Tijolo de Silício, usando a difusividade $D_\gamma(\theta)$ (4.14), $\Delta t_{inicial} = 30 s$ e $\Delta x = 1 mm$ . . . . .	60

4.9	Número de iterações da técnica de Picard em cada intervalo de tempo ( $\Delta t$ ), usando a difusividade (4.14). . . . .	61
4.10	Soluções para os tempos 450 s, 5370 s, 24210 s, 79770 s e 170430 s – Tijolo de Silício, usando a difusividade $D_\gamma(\theta)$ (4.13), $\Delta t_{inicial} = 30$ s e $\Delta x = 1$ mm. . . . .	62
4.11	Número de iterações da técnica de Picard em cada intervalo de tempo ( $\Delta t$ ), usando a difusividade (4.13). . . . .	63

## LISTA DE TABELAS

2.1	Erros numéricos máximos, usando o esquema (2.19), para os gráficos apresentados na figura 2.2, determinados para os tempos de simulação de 0, 1 hora, 0, 2 hora e 0, 8 hora, usando o esquema numérico em sua forma explícita, centrada de Crank-Nicolson e implícita. Os erros foram calculados considerando as aproximações e as soluções de Philip para cada respectivo tempo de simulação.	29
2.2	Valores do parâmetro $q$ , onde $\lambda = x/t^q$ , encontrados em dados experimentais de infiltração horizontal de água em colunas de solos, listados por PACHEPSKY; TIMLIN; RAWLS (2003) - tabela reproduzida. . . . .	31
4.1	Erros numéricos máximos e ordem de convergência determinados para $\Delta x$ fixo e $\Delta t$ refinando. Parâmetros: $\gamma = 0,9$ , Coluna de solo de $1,2\text{ cm}$ , com $\Delta x$ fixo em $0,0125\text{ cm}$ em uma malha igualmente espaçada, tempo total de simulação de $200\text{ min}$ , com $\Delta t$ variando de $8\text{ min}$ à $0,0625\text{ min}$ igualmente espaçados. . . . .	52
4.2	Erros numéricos máximos e ordem de convergência determinados para $\Delta t$ fixo e $\Delta x$ refinando. Parâmetros: $\gamma = 0,9$ , Coluna de solo de $1,2\text{ cm}$ , com $\Delta t$ fixo em $0,0625\text{ min}$ em uma malha igualmente espaçada, tempo total de simulação de $200\text{ min}$ , com $\Delta x$ variando de $0,10\text{ cm}$ à $0,00625\text{ cm}$ igualmente espaçados. . . . .	52
4.3	Resultados de tempos de convergência e erro médio quadráticos (E.M.Q.) para os tempos $450\text{ s}$ , $5370\text{ s}$ e $24210\text{ s}$ . (E.R.I.F.M.) aqui apresentado como (I.F.M.), (E.R.D.F.) aqui apresentado como (D.F.) e (E.R.I.F.) aqui apresentado como (I.F.). O valor da condição de parada da técnica de Picard foi $e = 10^{-4}$ em todos os testes. . . . .	64

# SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	11
1.1	MOTIVAÇÃO	16
1.2	IMPACTO	17
1.3	OBJETIVOS	17
<b>2</b>	<b>ASPECTOS TEÓRICOS</b>	19
2.1	EQUAÇÃO DE RICHARDS	19
2.1.1	Relações Constitutivas	23
2.1.2	Métodos de solução	24
2.2	SOLUÇÃO NUMÉRICA DA EQUAÇÃO DE RICHARDS UNIDIMENSIONAL VERTICAL	24
2.2.1	Resultados do problema unidimensional vertical	27
2.3	SOLUÇÃO NUMÉRICA DA EQUAÇÃO DE RICHARDS UNIDIMENSIONAL HORIZONTAL	29
2.3.1	Derivada fracionária	32
2.3.2	Integral fracionária	35
<b>3</b>	<b>PROPOSTA DE MODIFICAÇÃO DO MÉTODO</b>	39
3.1	MOTIVAÇÃO PARA MODIFICAÇÕES	39
3.2	MÉTODOS NUMÉRICOS - FORMULAÇÃO FRACIONÁRIA E.R.I.F.M.	42
3.3	ANÁLISE DO MÉTODO	44
<b>4</b>	<b>RESULTADOS OBTIDOS</b>	48
4.1	VERIFICAÇÃO DO CÓDIGO NUMÉRICO - (E.R.I.F.M)	49
4.1.1	Difusão clássica	49
4.1.2	Difusão Anômala	50
4.2	RESULTADOS USANDO DERIVADA FRACIONÁRIA (E.R.D.F.)	53
4.3	RESULTADOS USANDO INTEGRAL FRACIONÁRIA (E.R.I.F.)	57
4.4	RESULTADOS USANDO INTEGRAL FRACIONÁRIA MODIFICADA (E.R.I.F.M.)	59
<b>5</b>	<b>CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS</b>	65
	REFERÊNCIAS	68

# 1 INTRODUÇÃO

A zona vadosa é uma componente do ciclo hidrológico, que influencia diretamente na infiltração, nas águas das chuvas, na evapotranspiração além da recarga de aquíferos. Esta região é delimitada pela parte superior da terra e por baixo pelo nível d'água. O entendimento do movimento da água nesta região e sua quantificação é essencial para a solução de uma variedade de problemas, como: previsão de escoamento a partir de determinados eventos de precipitação para fins de controle de erosão, transporte de sedimentos e controle de inundações, estimativa da disponibilidade de água para o crescimento de plantas, estimativa da recarga de água para o aquífero subterrâneo e avaliação do potencial de contaminação do aquífero devido à migração de substâncias solúveis em água presentes na zona vadosa.

O estudo do movimento da água no solo, por vários anos, tem sido objeto de estudo de muitos cientistas de diversas áreas. Pesquisadores como NIELSEN; VAN GENUCHTEN; BIGGAR (1986) e MILLY (1988) evidenciam que aproximações numéricas de escoamentos em meios porosos não saturados, são aplicados em campos das ciências dos solos, da hidrologia de águas subterrâneas, agricultura, engenharia civil, e as ciências ambientais.

Apesar do estudo desta temática ter começado a mais de um século, foram obtidos melhores resultados a partir da década de 1970 com o uso das soluções numéricas nos computadores.

Em 1928, Richards teorizou a percolação da água em um meio poroso não-saturado, descrevendo o princípio de BUCKINGHAM (1907). Em 1931, usando o princípio da Conservação da Massa, Richards formulou a equação geral do movi-

mento da água em um meio poroso não-saturado RICHARDS (1931).

PHILIP (1958) apresentou a primeira solução semi-analítica para a infiltração vertical da água no solo. FREEZE (1971) apresentou um dos primeiros modelos numéricos de solução da equação de Richards, entretanto, este modelo apresentava dificuldades de convergência e instabilidade numérica.

Desde então, trabalhos como os de NEUMAN (1973); NARASIMHAN; WITHERSPOON (1976); HAVERKAMP et al. (1977); HAYHOE (1978); HAVERKAMP; VAUCLIN (1979); COOLEY (1983); HORNUNG; MESSING (1983) e HUYAKORN; THOMAS; THOMPSON (1984) apresentaram técnicas de solução para o problema, usando o Método das Diferenças Finitas e o Método dos Elementos Finitos, aplicados em duas formas básicas que a equação de Richards admite, conhecidas como “ $\psi$  – based”, “ $\theta$  – based”, onde as variáveis dependentes são a carga devido à pressão ( $\psi$ ) e o conteúdo de umidade ( $\theta$ ), respectivamente. Significativamente, estes trabalhos apresentaram erros globais no balanço de massa próximos de 10%.

Posteriormente, ALLEN; MURPHY (1986) e CELIA; AHUJA; PINDER (1987) apresentaram a forma “*mixed*” da Equação de Richards. Esta forma é matematicamente equivalente as formas básicas anteriores, porém apresentava resultados diferentes de cada uma delas. Os algoritmos usavam aproximações de colocação (método dos elementos finitos) no espaço, sendo que Celia e Pinder ainda aplicaram uma versão com direção alternada. Allen e Murphy chamaram sua aproximação de Método Quasi-Newton enquanto Celia e Pinder referem-se ao método como Método de Picard Modificado. Ambos demonstraram excelente balanço de massa em suas soluções numéricas.

Em 1988, Zarba usou o método iterativo de Picard Modificado com aproxima-

ções com diferenças finitas e elementos finitos no espaço que apresentaram pequenos erros de balanço de massa ZARBA (1988). Entretanto, Celia e outros concluíram que a formulação conservativa de massa não é suficiente para garantir boas soluções numéricas CELIA; BOULOUTAS; ZARBA (1990).

SRIVASTAVA; YEH (1991) Apresentaram uma solução analítica para solos homogêneos e em camadas sujeitas a processos de infiltração, onde esta utiliza o modelo de solo de Gardner que emprega relações constitutivas exponenciais para a condutividade hidráulica e para o conteúdo de umidade. Este foi um dos poucos trabalhos a abordar a dinâmica do solo com comprimento finito.

ZAIDEL; RUSSO (1992) fizeram uma estimativa da condutividade hidráulica para simulações de infiltração em solos inicialmente secos que utilizam o esquema de Ponderação Assintótica baseado no comportamento assintótico da função.

SHORT; DAWES; WHITE (1995) apresentam alguns casos em que os problemas numéricos estão associados à escolha inadequada das funções hidráulicas do solo, principalmente quando as simulações aproximam-se de condições residuais e de saturação.

VASCONCELLOS (2001) mostrou que as soluções validadas destas equações são difíceis de serem obtidas devido à forte não-linearidade entre as funções presentes na mesma. Como faltam soluções analíticas, a validade e acurácia dos diferentes métodos numéricos de solução podem ser avaliados baseados no erro de balanço de massa. Esta é somente uma condição necessária que não é suficiente para assegurar a validade da solução, e apenas será confirmado com base no erro de balanço de massa e na comparação das soluções obtidas por algoritmos diferentes ou dados experimentais.

RAATS (2001) Argumentou que soluções plenamente analíticas para a equação de Richards são necessárias para comparação com resultados de soluções numéricas. Mostrou que essas soluções somente são possíveis quando certas classes de expressões paramétricas que descrevem as propriedades do solo são usadas, assim como nos solos estudados por Green e Ampt, os solos de Brooks-Corey e os solos de Gardner. Além disso, as soluções comumente usadas são empregadas em situações semi-infinitas e na maioria dos casos, é reproduzida a solução permanente.

Uma técnica híbrida numérico-analítica conhecida como Técnica da Transformada Integral Generalizada (TTIG), foi utilizada para simular o transporte de soluto em meios porosos por LIU et al. (2000) e também foi empregada por VASCONCELLOS (2001) para problemas de infiltração vertical da água em solos não saturados e homogêneos, ambos obtendo bons resultados numéricos.

O problema na horizontal é semelhante à equação de difusão e tem aplicação em diversas áreas como: Irrigação na agricultura PACHEPSKY; TIMLIN; RAWLS (2003), biologia NICOLAU; HANCOCK; BURRAGE (2007), mecânica quântica WANG; XU; LI (2009), ciências geofísicas GANTI et al. (2010), dentre outras.

A equação em sua forma horizontal despreza a influência da gravidade e ao introduzir-se a variável de Boltzmann  $\lambda = x/t^{\frac{\gamma}{2}}$ , para  $\gamma = 1$  é possível transformar a Equação Diferencial Parcial (EDP) em uma Equação Diferencial Ordinária (EDO) MILLER; MILLER (1956), que admite solução analítica para o fluxo de água na horizontal em diferentes meios materiais, passando a considerar a distância da frente de molhamento  $x$  se deslocando segundo uma constante  $\lambda$  multiplicada pelo tempo elevado a um fator  $\frac{1}{2}$ .

Entretanto, NIELSEN; BIGGAR; DAVIDSON (1962), RAWLINS; GARDNER (1963), FERGUSON; GARDNER (1963), observaram que para alguns solos

esta solução desvia consideravelmente dos resultados experimentais, indicando que o valor de  $\gamma$  deveria ser menor que um. GUERRINI; SWARTZENDRUBER (1994) e PACHEPSKY; TIMLIN (1998), introduziram uma dependência empírica da difusividade em relação ao tempo e ao espaço na tentativa de generalizar a equação de Richards, conseguiram melhores resultados para alguns solos, porém sem nenhuma interpretação física desta dependência.

PACHEPSKY; TIMLIN; RAWLS (2003) desenvolveram um modelo denominado equação generalizada de Richards, propondo uma interpretação como um modelo de física de partículas de água sendo encaixadas de forma aleatória no meio poroso, segundo uma distribuição de lei de potências. Usou a derivada fracionária de Riemann–Liouville no tempo para representar o fenômeno de difusividade anômala, considerando a possibilidade de uso do valor de  $\gamma \leq 1$ . A busca por tornar a equação de Richards geral o suficiente para meios porosos que apresentam difusividade anômala, continuou com EL ABD; MILCZAREK (2004) usando radiografia dinâmica de neutros, onde obtiveram dados experimentais relativos à cinética do processo de molhagem em dois tipos diferentes de tijolos de construção, o primeiro de barro cozido sugerindo um valor para  $\gamma > 1$  e o outro de silício apontando um valor para  $\gamma < 1$ . Fez uma análise da difusividade hidráulica propondo um ajuste de parâmetros, obtendo assim resultados acurados em comparação com os dados experimentais.

GEROLYMATOU; VARDOULAKIS; HILFER (2006) questionaram a validade numérica dos resultados apontados pelo modelo generalizado de Pashepsky, pois notou que a equação proposta não poderia ser transformada em uma EDO por conta de complicações com a regra do produto fracionária. Fez uma nova proposta usando integral fracionária no tempo chamando-a de equação de Richards fracionária. Aplicou este modelo em aproximações de resultados numéricos comparando-os com os experimentais de El Abd para o bloco de silício com  $\gamma < 1$  obtendo conver-

gência acurada para seu modelo generalizado.

PŁOCINICZAK; OKRASIŃSKA (2013) Construíram um modelo semi-analítico, baseado em um operador integral para o problema de infiltração horizontal com difusividade anômala, em que considerava a equação de Richards escrita na forma da derivada fracionária no tempo. Usaram uma expressão clássica da literatura para a difusividade. Aplicaram seu modelo para aproximar solução numérica para o bloco de silício de El Abd e obteve bons resultados.

SUN et al. (2013) propuseram uma abordagem fractal para a equação de Richards com o objetivo de capturar a difusividade anômala tornando-a generalizada tanto para casos de subdifusividade, ou seja, valores de  $\gamma \leq 1$  quanto para casos de sobredifusividade,  $\gamma > 1$ . Obtiveram soluções analíticas para o problema, considerando dois tipos de difusividades. Uma exponencial e outra considerando uma lei de potência, vastamente conhecidas na literatura como uma tentativa de reduzir a não linearidade das relações constitutivas para difusividade. Mostrou boas soluções numéricas para os blocos de tijolo queimado e de silício de El Abd.

## 1.1 Motivação

A água no solo se encontra geralmente em movimento. Deste modo, quando adicionada uma determinada quantidade de água em um solo, seja através de irrigação ou chuva, esta penetra e redistribui-se em seu interior. Os fenômenos de infiltração e movimento de água no solo, são importantes e tem aplicações práticas em áreas como hidrologia, hidrogeologia, engenharia agrônômica, engenharia de petróleo, engenharia ambiental, ciência dos solos, geofísica e gestão de recursos naturais dentre outros.

## 1.2 Impacto

A maioria dos processos que envolvem a interação da água com o solo e, particularmente, o fluxo de água na zona das raízes da maioria das plantas, ocorrem enquanto o solo está numa condição insaturada. Os processos de fluxo insaturado são, em geral, complicados e difíceis de descrever, quantitativamente, uma vez que implicam em mudanças no estado e conteúdo de água no solo durante o fluxo. Essas mudanças envolvem relações complexas entre a variação de umidade do solo, sucção e condutividade, cujas inter-relações podem ser ainda mais complicadas pela histerese. A formulação e solução de problemas de fluxo insaturados muito frequentemente requerem a utilização de métodos indiretos, com base em técnicas de aproximações numéricas. Por esta razão, o desenvolvimento de métodos rigorosos teóricos e experimentais para o tratamento destes problemas era pouco desenvolvida. Nas últimas décadas, no entanto, o fluxo insaturado tornou-se um dos temas mais importantes e ativos de pesquisas. Este trabalho resulta em avanços teóricos e numéricos significativos, com resultados acurados usando aproximações numéricas para o problema com baixo custo computacional.

## 1.3 Objetivos

Neste trabalho é feito um estudo da equação de Richards unidimensional em duas abordagens. Na vertical serão mostrados resultados para o problema de infiltração de água em areia, pois esse se mostra um dos casos de maior dificuldade de simulação devido à grande não linearidade do problema físico, dado que o processo de infiltração inicial ocorre rapidamente e o solo passa de um estado de umidade residual quase seco, para o estado de completamente encharcado em segundos.

Na horizontal será abordado o campo de cálculos fracionários usando os métodos de derivada fracionária PACHEPSKY; TIMLIN; RAWLS (2003) e integral fracionária GEROLYMATOU; VARDOULAKIS; HILFER (2006). Estes métodos apresentam desempenhos muito lentos, principalmente para grandes tempos de simulações devido ao alto número de operações e termos envolvidos no processo. Como forma de melhorar o desempenho garantindo convergência, será apresentado um modelo integral fracionária modificado com passo de tempo adaptativo, desenvolvido neste trabalho.

## 2 ASPECTOS TEÓRICOS

O processo de infiltração é definido como a entrada de água em um meio poroso inicialmente não saturado, geralmente influenciado por efeitos físicos naturais como a gravidade, gerando uma interface *meio água* a qual é chamada de frente de molhamento, onde o conhecimento desta estrutura é muito importante no processo de predição da propagação da água através do meio.

LIBARDI (2012) mostra num perfil de solo uniforme, a distribuição da água com a profundidade, quando se mantém uma pequena carga hidráulica na superfície do solo, como na figura 2.1. A zona de saturação é uma zona em que o solo está saturado e o conteúdo de água ( $\theta$ ) está constante. A zona de transição é uma região de rápido decréscimo do conteúdo de água. A zona de transmissão é uma porção do perfil onde a água é transmitida com variações muito pequenas no conteúdo de água. Abaixo desta zona de transmissão existe a zona de umedecimento, que é uma região de variação relativamente rápida de conteúdo de água no meio. Por fim tem-se a frente de molhamento que compreende uma pequena região na qual o gradiente de conteúdo de água sofre uma variação bastante abrupta que representa o limite visível da penetração da água.

### 2.1 Equação de Richards

De acordo com a Lei de Darcy, para o fluxo vertical unidimensional, o fluxo volumétrico  $q$  ( $cm^3/cm^2/h$ ), ou ( $cm/h$ ), pode ser escrito como

$$q = -K \left( \frac{\partial \psi}{\partial z} - 1 \right) \quad (2.1)$$

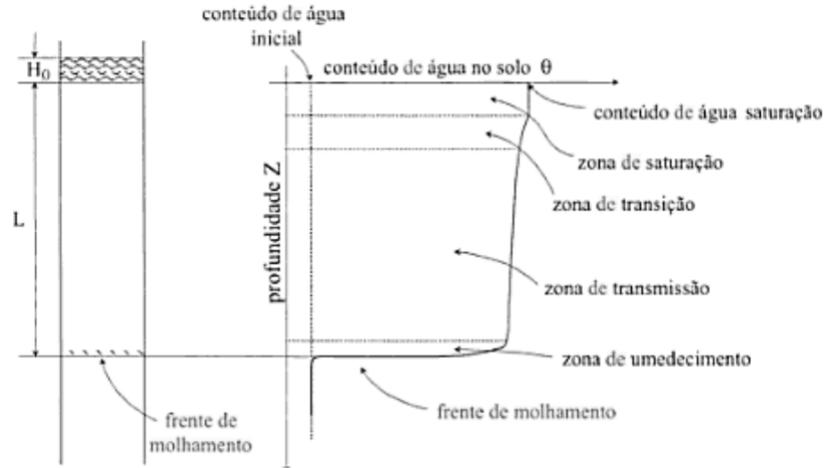


Figura 2.1: Perfil de conteúdo de água típico durante o processo de infiltração em um perfil de solo uniforme de acordo com LIBARDI (2012).

onde  $K$  é a condutividade hidráulica ( $cm/h$ ),  $\psi$  é a poropressão que a água faz no solo (relativa a atmosférica) expressa em ( $cm$ ) de água e  $z$  é a coordenada vertical ( $cm$ ) considerada positiva na direção para baixo.

Buscando uma completa descrição matemática do fluxo não-saturado, aplica-se o princípio da continuidade (Lei da conservação de massa) ( $1/h$ )

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\frac{\partial q}{\partial z} \quad (2.2)$$

onde  $\theta$  é umidade do solo expressa em ( $cm^3/cm^3$ ) e  $t$  é o tempo em horas.

Substituindo (2.1) em (2.2) chega-se a equação diferencial parcial

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[ K \left( \frac{\partial \psi}{\partial z} - 1 \right) \right] \quad (2.3)$$

A equação (2.3) é uma equação diferencial parcial do tipo parabólica de segunda ordem, conhecida como equação de RICHARDS (1931) que é não-linear

pela dependência de  $K$  e  $\psi$  em  $\theta$ . Para prevenir os problemas de duas variáveis  $\theta$  e  $\psi$ , a derivada de  $\theta$  com respeito a  $\psi$  pode ser introduzida, esta é conhecida como capacidade hídrica específica  $C$  ( $1/cm$ ).

$$C = \frac{d\theta}{d\psi} \quad (2.4)$$

Na equação (2.4) foi usada uma derivada total ao invés de uma parcial, pois  $\psi$  é considerada aqui como uma função simples de  $\theta$  (desconsiderada a histerese). Escrevendo

$$\frac{\partial\theta}{\partial t} = \frac{d\theta}{d\psi} \frac{d\psi}{dt} \quad (2.5)$$

e substituindo (2.4) em (2.3) tem-se:

$$C(\psi) \frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[ K(\psi) \left( \frac{\partial\psi}{\partial z} - 1 \right) \right] \quad (2.6)$$

Na equação (2.6) os coeficientes  $C$  e  $K$  são funções da variável dependente  $\psi$ , mas não funções das derivadas  $\frac{\partial\psi}{\partial t}$  e  $\frac{\partial\psi}{\partial z}$ . Escrita nesta forma, a equação (2.6) fornece as bases para a previsão do movimento da água nas camadas do solo, em que estas podem ter diferentes propriedades físicas.

A equação de Richards é o modelo mais usado para representar o fenômeno de infiltração de água no solo e em meios porosos em geral. Considerando a água como um fluido incompressível, o meio poroso isotrópico e homogêneo e baseando-se na conservação de massa e no fluxo dado por Darcy, tem-se a equação diferencial parcial não-linear em três dimensões.

$$C(\psi) \frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ K(\psi) \frac{\partial\psi}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ K(\psi) \frac{\partial\psi}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ K(\psi) \frac{\partial\psi}{\partial z} \right] + \frac{\partial K(\psi)}{\partial z} \quad (2.7)$$

onde a direção vertical  $z$  está orientada para cima. Esta equação pode ser apresentada em três diferentes formas básicas.

A forma baseada em  $\psi$ :

$$C(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ K(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ K(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ K(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial z} \right] + \frac{\partial K(\psi)}{\partial z} \quad (2.8)$$

A forma baseada em  $\theta$ :

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial z} \right] + \frac{\partial K(\theta)}{\partial z} \quad (2.9)$$

onde a função de difusividade hidráulica não-saturada  $D(\theta)$  é

$$D(\theta) = \frac{K(\theta)}{C(\theta)} \quad (2.10)$$

E a forma mista:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ K(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ K(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ K(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial z} \right] + \frac{\partial K(\psi)}{\partial z} \quad (2.11)$$

onde a direção vertical  $z$ , nas três formas básicas, está orientada para cima.

As três formas são matematicamente equivalentes e usando as relações constitutivas do solo para  $\theta$  e  $\psi$  é possível converter uma forma na outra CELIA; BOULOUTAS; ZARBA (1990).

- $x$  e  $y$  - Coordenadas horizontais.
- $z$  - Coordenada vertical orientada para cima.
- $t$  - Tempo.
- $\psi$  - Carga devido à pressão.
- $\theta$  - Conteúdo de umidade volumétrico do solo.
- $C(\psi)$  - Capacidade hídrica específica do solo.
- $K(\psi)$  - Condutividade hidráulica do solo não saturado.
- $D(\theta)$  - Difusividade hidráulica específica do solo.

### 2.1.1 Relações Constitutivas

As funções  $C(\psi)$ ,  $K(\psi)$  e  $D(\theta)$ , são não-lineares e somente para poucas exceções admitem solução analítica para a equação de Richards. As relações constitutivas entre  $\theta$ ,  $\psi$  e  $K$  descrevem as propriedades do solo e geralmente são dadas por funções experimentais ou analíticas. Existem quatro tipos de relações constitutivas usuais da literatura para diferentes tipos de solos. HAVERKAMP et al. (1977) propuseram dois tipos de relações constitutivas uma para solos arenosos

$$K(\psi) = K_s \frac{A}{A + |\psi|^\vartheta} \quad ; \quad \theta(\psi) = \frac{B(\theta_s - \theta_r)}{B + |\psi|^\zeta} + \theta_r. \quad (2.12)$$

e outra para solos argilosos

$$K(\psi) = K_s \frac{A}{A + |\psi|^\vartheta} \quad ; \quad \theta(\psi) = \frac{B(\theta_s - \theta_r)}{B + (\ln|\psi|)^\zeta} + \theta_r. \quad (2.13)$$

VAN GENUCHTEN (1980) propôs um tipo de relação constitutiva servindo tanto para solos arenosos, quanto para solos argilosos com o mesmo modelo:

$$K(S_e) = K_s S_e^{1/2} \left[ 1 - (1 - S_e^{1/m})^m \right]^2 \quad ; \quad \theta(S_e) = S_e(\theta_s - \theta_r) + \theta_r, \quad (2.14)$$

onde:

$$S_e(\psi) = [1 + (\alpha\psi)^\eta]^{-m} \quad ; \quad m = 1 - \eta^{-1}. \quad (2.15)$$

Os modelos de relações constitutivas propostos por Haverkamp e Van Genuchten são funções obtidas experimentalmente. GARDNER (1958) propôs um modelo analítico com funções exponenciais que apesar de não reproduzirem fielmente o comportamento do solo próximo ao limite de saturação, apresentam acurada representação física do fenômeno e também permitem uma "linearização" da equação de Richards, possibilitando soluções analíticas para a equação de Richards como mostrado nos trabalhos de WARRICK (1975), SRIVASTAVA; YEH (1991), MÄNNICH

(2008), dentre outros.

$$K(\psi) = K_s e^{\alpha\psi} \quad ; \quad \theta(\psi) = (\theta_s - \theta_r) e^{\alpha\psi} + \theta_r, \quad (2.16)$$

onde  $A, B, \rho, \zeta, \eta, m$  são parâmetros adimensionais,  $\alpha[L^{-1}]$  é a função densidade dos tamanhos dos poros,  $\theta_s[L^3/L^3]$  é o conteúdo de umidade saturado,  $\theta_r[L^3/L^3]$  é o conteúdo de umidade residual,  $K_s$  é a condutividade hidráulica saturada e  $S_e$  é a saturação efetiva.

### 2.1.2 Métodos de solução

Nesta seção serão abordadas as formas unidimensionais da equação de Richards, nas direções vertical e horizontal. Como método numérico para aproximação das soluções será usado o método das diferenças finitas (MDF).

## 2.2 Solução numérica da equação de Richards unidimensional vertical

Assumindo-se a equação (2.6) com as devidas considerações e tomando a direção vertical preferencial do escoamento, obtém-se a equação diferencial parcial não-linear, conhecida como equação de Richards na forma baseada em  $\psi$ .

$$C(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[ K(\psi) \left( \frac{\partial \psi}{\partial z} - 1 \right) \right]$$

Tomando a condição inicial:

$$\psi(0, z) = \begin{cases} \psi_1 & \text{se } z = 0 \\ \psi_0 & \text{se } z > 0 \end{cases} \quad (2.17)$$

e as condições de fronteira como:

$$\begin{aligned} \psi(t, 0) &= \psi_1 \quad \text{para } t > 0 \quad \text{e } z = 0 \\ \psi(t, z) &< \infty \quad \text{para } t > 0 \quad \text{e } z \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (2.18)$$

Considerando uma malha espacial igualmente espaçada em intervalos  $\Delta z$  e uma malha similar temporal de intervalos  $\Delta t$ . A equação diferencial parcial (2.6) pode ser aproximada por diferenças finitas da seguinte maneira KUMAR (1998):

$$C_i^{j+a} \frac{\psi_i^{j+1} - \psi_i^j}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta z} \left[ K_{i+1/2}^{j+a} \left( \frac{\psi_{i+1}^{j+a} - \psi_i^{j+a}}{\Delta z} - 1 \right) - K_{i-1/2}^{j+a} \left( \frac{\psi_i^{j+a} - \psi_{i-1}^{j+a}}{\Delta z} - 1 \right) \right] \quad (2.19)$$

onde  $i$  e  $j$  são índices de espaço e tempo respectivamente,  $a$  é um fator de ajuste ( $0 \leq a \leq 1$ ) em que, usando  $a = 0$  tem-se um esquema explícito, para  $a = 0,5$  tem-se o esquema de Crank-Nicolson e tomando  $a = 1$  tem-se um esquema implícito. Portanto,

$$\psi_{i-1}^{j+a} = (1-a)\psi_{i-1}^j + a\psi_{i-1}^{j+1} \quad (2.20a)$$

$$\psi_i^{j+a} = (1-a)\psi_i^j + a\psi_i^{j+1} \quad (2.20b)$$

$$\psi_{i+1}^{j+a} = (1-a)\psi_{i+1}^j + a\psi_{i+1}^{j+1} \quad (2.20c)$$

Os valores de  $C_i^{j+a}$ ,  $K_{i+1/2}^{j+a}$  e  $K_{i-1/2}^{j+a}$  serão aproximados por

$$C_i^{j+a} = (1-a)C_i^j + aC_i^{j+1} = F_1 \quad (2.21a)$$

$$\begin{aligned} K_{i+1/2}^{j+a} &= (1-a)K_{i+1/2}^j + aK_{i+1/2}^{j+1} \\ &= (1-a)\sqrt{K_i^j K_{i+1}^j} + a\sqrt{K_i^{j+1} K_{i+1}^{j+1}} = F_2 \end{aligned} \quad (2.21b)$$

$$\begin{aligned} K_{i-1/2}^{j+a} &= (1-a)K_{i-1/2}^j + aK_{i-1/2}^{j+1} \\ &= (1-a)\sqrt{K_{i-1}^j K_i^j} + a\sqrt{K_{i-1}^{j+1} K_i^{j+1}} = F_3 \end{aligned} \quad (2.21c)$$

As funções não lineares  $K_{i\pm 1/2}^j$  são estimadas por média geométrica como proposto por HAVERKAMP; VAUCLIN (1979).

Substituindo as equações (2.20) e (2.21) em (2.19) tem-se a seguinte equação algébrica linear válida para cada ponto nodal da malha:

$$\begin{aligned}
& - \left[ aF_3 \frac{\Delta t}{(\Delta z)^2} \right] \psi_{i-1}^{j+1} + \left[ F_1 + aF_2 \frac{\Delta t}{(\Delta z)^2} + aF_3 \frac{\Delta t}{(\Delta z)^2} \right] \psi_i^{j+1} - \left[ aF_2 \frac{\Delta t}{(\Delta z)^2} \right] \psi_{i+1}^{j+1} = \\
& \left[ (1-a)F_3 \frac{\Delta t}{(\Delta z)^2} \right] \psi_{i-1}^j + \left[ F_1 - (1-a)F_2 \frac{\Delta t}{(\Delta z)^2} - (1-a)F_3 \frac{\Delta t}{(\Delta z)^2} \right] \psi_i^j \\
& \quad + \left[ (1-a)F_2 \frac{\Delta t}{(\Delta z)^2} \right] \psi_{i+1}^j + (F_3 - F_2) \frac{\Delta t}{\Delta z}
\end{aligned} \tag{2.22}$$

considerando:

$$I = - \left[ aF_3 \frac{\Delta t}{(\Delta z)^2} \right] \tag{2.23a}$$

$$J = + \left[ F_1 + aF_2 \frac{\Delta t}{(\Delta z)^2} + aF_3 \frac{\Delta t}{(\Delta z)^2} \right] \tag{2.23b}$$

$$K = - \left[ aF_2 \frac{\Delta t}{(\Delta z)^2} \right] \tag{2.23c}$$

$$\begin{aligned}
R &= \left[ (1-a)F_3 \frac{\Delta t}{(\Delta z)^2} \right] \psi_{i-1}^j \\
&+ \left[ F_1 - (1-a)F_2 \frac{\Delta t}{(\Delta z)^2} - (1-a)F_3 \frac{\Delta t}{(\Delta z)^2} \right] \psi_i^j \\
&+ \left[ (1-a)F_2 \frac{\Delta t}{(\Delta z)^2} \right] \psi_{i+1}^j + (F_3 - F_2) \frac{\Delta t}{\Delta z}
\end{aligned} \tag{2.23d}$$

Quando a equação (2.22) é aplicada em todos os nós, o resultado é um sistema de equações matricial linear com uma matriz tridiagonal composta por zeros nos

elementos fora das diagonais.

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ I & J & K & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & I & J & K \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \psi_1^{j+1} \\ \psi_2^{j+1} \\ \vdots \\ \psi_{n-1}^{j+1} \\ \psi_n^{j+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R_1 \\ R_2 \\ \vdots \\ R_{n-1} \\ R_n \end{bmatrix} \quad (2.24)$$

para condições de contorno prescritas tem-se  $R_1 = \psi_1^0$  e  $R_n = \psi_n^0$ , durante toda a simulação.

### 2.2.1 Resultados do problema unidimensional vertical

Como forma de testar e validar o modelo numérico apresentado na seção 2.2 que simula a infiltração da água em um solo vertical usando o esquema numérico (2.19). Será apresentada a simulação de infiltração em um solo homogêneo através de gráficos do perfil de umidade do solo (conteúdo de umidade por profundidade) evoluindo com o tempo; além de comparar o modelo com a solução semi analítica proposta por PHILIP (1957).

O problema consiste na simulação da infiltração da água em um solo arenoso não-saturado inicialmente seco, colocado em uma coluna com profundidade  $L = 100$  cm. A sua execução foi feita sob condições de contorno de Dirichlet, com um intervalo de malha espacial de  $\Delta z = 1,0$  cm, o tempo total de simulação foi de 1 hora, e o passo de tempo inicial  $\Delta t$  foi escolhido por tentativa e erro da estabilidade do esquema numérico, que se mostrou estável com passo de tempo  $\Delta t = 0,4$  segundos no caso do esquema explícito,  $\Delta t = 1$  segundo no caso do esquema de Crank-Nicolson e  $\Delta t = 5$  segundos no caso do esquema implícito. Os resultados desta simulação estão na figura 2.2 e na tabela 2.1, onde serão mostrados os perfis de umidade em

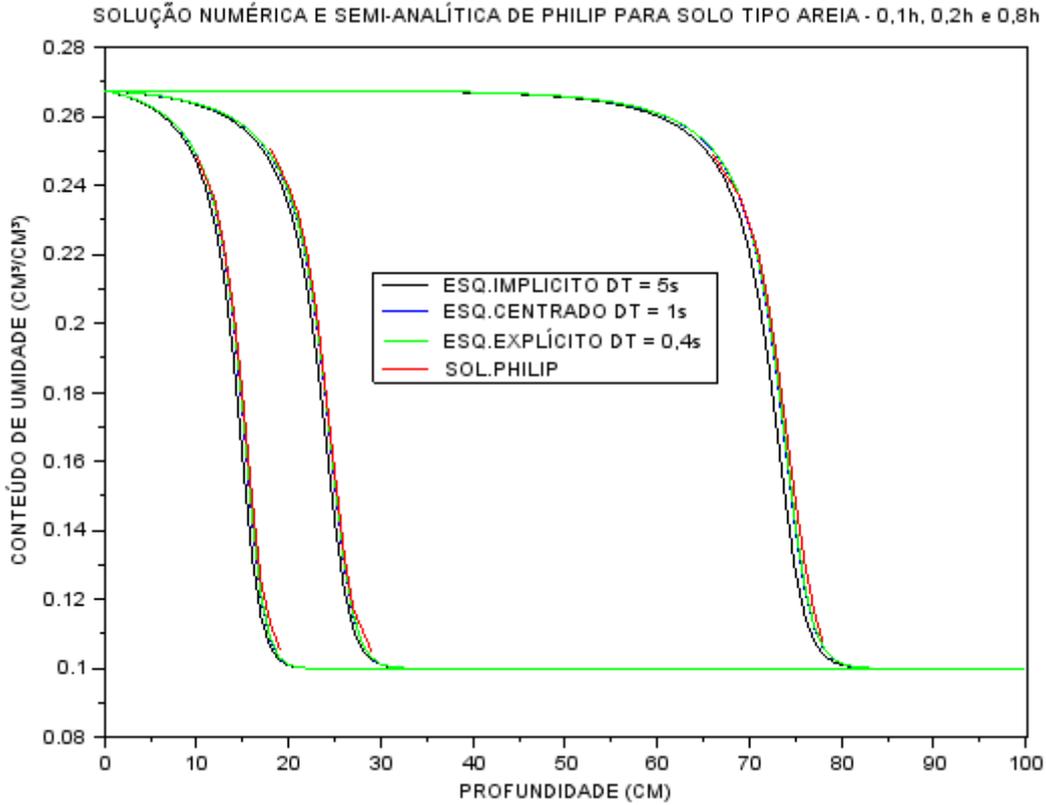


Figura 2.2: O gráfico apresenta à aproximação numérica do esquema (2.19) com o parâmetro  $a = 0$  (explícito),  $a = 0,5$  (Crank-Nicolson - centrado) e  $a = 1$  (implícito); em um solo do tipo areia para os tempos de simulação 0, 1 hora, 0, 2 hora e 0, 8 hora.

três tempos distintos. As condições iniciais e de contorno utilizadas foram:

$$\begin{cases} \psi(z, 0) = -61,50cm & (\theta = 0,100cm^3/cm^3), & 0 < z < 100 \\ \psi(0, t) = -20,73cm & (\theta = 0,267cm^3/cm^3), & t > 0 \\ \psi(100, t) = -61,50cm, & & t > 0 \end{cases} \quad (2.25)$$

As relações constitutivas utilizadas foram as de HAVERKAMP et al. (1977) para solos arenosos (2.12), onde  $K_s = 34$  cm/h,  $A = 1,175 \times 10^6$ ,  $\vartheta = 4,74$ ,  $\theta_s = 0,287$ ,  $\theta_r = 0,075$ ,  $B = 1,611 \times 10^6$  e  $\zeta = 3,96$ . O parâmetro  $a$  do esquema foi ajustado para explícito ( $a = 0$ ), Crank-Nicolson ( $a = 0,5$ ) e implícito ( $a = 1$ ) e os resultados foram comparados com a solução semi-analítica de Philip.

<b>Erros Máximos</b>	<b>0,1 h</b>	<b>0,2 h</b>	<b>0,8 h</b>
<b>Explícito</b>	0,004686	0,003951	0,006962
<b>Crank-Nicolson</b>	0,005850	0,004168	0,008290
<b>Implícito</b>	0,018232	0,014514	0,022262

Tabela 2.1: Erros numéricos máximos, usando o esquema (2.19), para os gráficos apresentados na figura 2.2, determinados para os tempos de simulação de 0,1 hora, 0,2 hora e 0,8 hora, usando o esquema numérico em sua forma explícita, centrada de Crank-Nicolson e implícita. Os erros foram calculados considerando as aproximações e as soluções de Philip para cada respectivo tempo de simulação.

A tabela 2.1 e a figura 2.2 apresentam os perfis de conteúdos de água aproximados com o esquema explícito, centrado de Crank-Nicolson e implícito e compara com os resultados de Philip, nos tempos  $t = 0,1$  h,  $0,2$  h e  $0,8$  h respectivamente. Em todos os casos, a taxa de avanço da frente de molhamento foi particularmente bem descrita. Todos os esquemas numéricos apresentaram resultados comparáveis que não são significativamente diferentes das soluções semi-analíticas de Philip.

É possível observar que o esquema explícito apresentou melhores resultados com os perfis de umidades de Philip em comparação com os esquemas implícito e o centrado de Crank-Nicolson. Entretanto, o esquema implícito é preferível em vista da estabilidade e da possibilidade de uso de um passo de tempo maior, tornando o custo computacional baixo, além também de possibilitar uma flexibilidade em resolver problemas de fluxo em meios saturados e insaturados, quando estes devem ser considerados simultaneamente.

### 2.3 Solução numérica da equação de Richards unidimensional horizontal

Considerando o solo como um meio poroso isotrópico e homogêneo, a água como um fluido incompressível e tomando a direção horizontal do escoamento,

obtém-se a equação diferencial parcial não-linear, conhecida como equação de Richards na forma baseada em  $\theta$  (umidade). Veja o esquema da figura 2.3

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) \quad (2.26)$$

em que a condição inicial é:

$$\theta(0, x) = \begin{cases} \theta_1 & \text{se } x = 0 \\ \theta_0 & \text{se } x > 0 \end{cases} \quad (2.27)$$

e as condições de fronteira são:

$$\begin{aligned} \theta(t, 0) &= \theta_1 \quad \text{para } t > 0 \quad \text{e } x = 0 \\ \theta(t, x) &< \infty \quad \text{para } t > 0 \quad \text{e } x \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (2.28)$$

PHILIP (1957) obteve solução analítica para a equação (2.26), com a introdução da variável de Boltzmann  $\lambda = x/t^{1/2}$ , que torna a equação (2.26) em uma equação diferencial ordinária (EDO),

$$-\frac{\lambda}{2} \frac{d\theta}{d\lambda} = \frac{d}{d\lambda} \left[ D(\theta) \frac{d\theta}{d\lambda} \right] \quad (2.29)$$

possibilitando a determinação da difusividade  $D(\theta)$  como:

$$D(\theta) = -\frac{1}{2} \frac{d\lambda}{d\theta} \int_{\theta_i}^{\theta} \lambda(\theta) d\theta \quad (2.30)$$

onde  $\theta_i$  é o conteúdo de umidade inicial.

Os métodos numéricos usando cálculos fracionários que serão apresentados a seguir são formas de generalizar a equação de Richards. PACHEPSKY; TIMLIN; RAWLS (2003) mostraram evidências de que a equação de Richards clássica não é geral o suficiente para representar o fenômeno de infiltração da água em diferentes tipos de solos, como mostra a tabela 2.2. As evidências apontam que a variável clássica de Boltzmann  $\lambda = x/t^{1/2}$ , deveria ser modificada para  $\xi = x/t^q$ , onde  $\xi \equiv \lambda$ ,  $q = \gamma/2$  e  $\gamma \leq 1$ .

Fonte dos dados	Solo	$q$
Gardner e Widtsoe (1921)	Name and texture not reported	0.417
Nielsen et al. (1962)	Columbia silt loam wet at - 50 mb	0.402
	Columbia silt loam wet at - 100 mb	0.425
	Columbia silt loam wet with oil at - 2 mb	0.480
	Columbia silt loam wet with oil at - 38 mb	0.440
	Hesperia sandy loam at - 2 mb	0.440
	Hesperia sandy loam at - 50 mb	0.384
	Hesperia sandy loam wet at - 100 mb	0.344
Rawlins e Gardner (1963)	Salkum silty clay loam, $\theta = 0.51$	0.439
	Salkum silty clay loam, $\theta = 0.50$	0.430
	Salkum silty clay loam, $\theta = 0.48$	0.437
	Salkum silty clay loam, $\theta = 0.45$	0.467
	Salkum silty clay loam, $\theta = 0.40$	0.479
	Salkum silty clay loam, $\theta = 0.05$	0.461
Ferguson e Gardner (1963)	Salkum silty clay loam, $\theta = 0.05$	0.454
	Salkum silty clay loam, $\theta = 0.10$	0.453
	Salkum silty clay loam, $\theta = 0.15$	0.452
	Salkum silty clay loam, $\theta = 0.20$	0.452
	Salkum silty clay loam, $\theta = 0.25$	0.452
	Salkum silty clay loam, $\theta = 0.30$	0.454
	Salkum silty clay loam, $\theta = 0.35$	0.458
	Salkum silty clay loam, $\theta = 0.40$	0.465

Tabela 2.2: Valores do parâmetro  $q$ , onde  $\lambda = x/t^q$ , encontrados em dados experimentais de infiltração horizontal de água em colunas de solos, listados por PACHEPSKY; TIMLIN; RAWLS (2003) - tabela reproduzida.

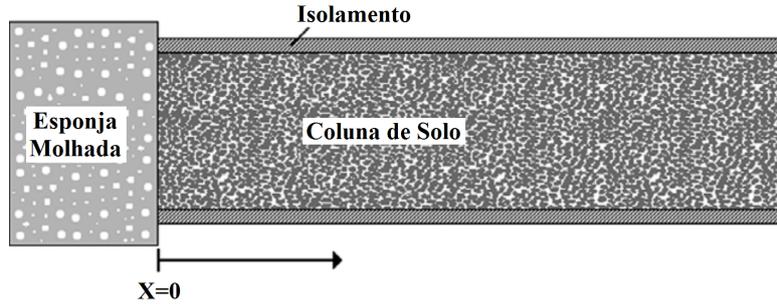


Figura 2.3: Esquema físico do problema de infiltração de água na horizontal em um solo uniforme segundo GEROLYMATOU; VARDOULAKIS; HILFER (2006) - legendas traduzidas.

### 2.3.1 Derivada fracionária

PACHEPSKY; TIMLIN; RAWLS (2003) propuseram um modelo em que substituem a derivada temporal clássica por uma derivada de ordem fracionária no tempo, buscando tornar a equação de Richards geral para todos os meios porosos.

$$\frac{\partial^\gamma \theta}{\partial t^\gamma} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_\gamma(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) \quad (2.31)$$

onde  $\gamma$  é a ordem da derivada fracionária e  $D_\gamma$  a difusividade fracionária. A ordem  $\gamma$  deve ser menor ou igual a um, para  $\gamma = 1$  a equação se transforma na clássica de Richards.

Introduzindo uma variável análoga a de Boltzmann  $\xi = x/t^{\gamma/2}$ , é possível transformar a equação (2.31) em uma equação diferencial ordinária (EDO), que se reduz a equação (2.29) quando  $\gamma = 1$ :

$$\frac{\Gamma(1 - \gamma/2)}{\Gamma(1 - 3\gamma/2)} \xi \frac{d\theta}{d\xi} = \frac{d}{d\xi} \left[ D_\gamma \frac{d\theta}{d\xi} \right] \quad (2.32)$$

em que  $\Gamma$  é a função Gamma.

A equação (2.32) pode ser rearranjada para se obter a difusividade fracionária

$D_\gamma$  dependente de  $\xi(\theta)$ .

$$D_\gamma(\theta) = \frac{\Gamma(1 - \gamma/2)}{\Gamma(1 - 3\gamma/2)} \frac{d\xi}{d\theta} \int_{\theta_i}^{\theta} \xi(\theta) d\theta \quad (2.33)$$

onde  $\theta_i$  é o conteúdo inicial de água, quando  $\gamma = 1$ , essa equação se reduz a equação (2.30) de PHILIP (1955).

A aproximação numérica para a derivada fracionária apresentada por Pachepsky, considera a função  $\theta(t)$  definida nos tempos  $t_0 = 0$ ,  $t_1 = \Delta t$ ,  $t_2 = 2\Delta t$ ,  $\dots$ ,  $t_n = n\Delta t$ , e suave em  $t = 0$ , fazendo a seguinte aproximação:

$$\frac{\partial^\gamma \theta}{\partial t^\gamma} \approx \frac{\theta^n - c_1 \theta^{n-1} - c_2 \theta^{n-2} - c_3 \theta^{n-3} - \dots - c_{n-1} \theta^1 - c_n \theta^0}{(\Delta t)^\gamma} \quad (2.34)$$

onde  $\theta^n$  é o valor de  $\theta$  no tempo  $t_n$ ,  $\theta^{n-1}$  é o valor de  $\theta$  no tempo  $t_{n-1}$ , etc. Os coeficientes  $c_j$ ,  $j = 1, 2, 3, \dots$ , dependem da ordem da diferenciação fracionária:

$$c_j = (-1)^{j-1} \frac{\gamma(\gamma-1)\dots(\gamma-j+1)}{1 \cdot 2 \cdot \dots \cdot j} \quad (2.35)$$

A característica mais importante da aproximação da derivada fracional (2.34) é a incorporação dos valores da variável dependente  $\theta$  não somente no tempo corrente e no anterior  $t_n$  e  $t_{n-1}$ , como é usualmente feito nas derivadas de primeira ordem, mas em todos os tempos nodais  $t_n, t_{n-1}, t_{n-2}, \dots, t_1, t_0$ .

Usando a equação (2.34) se obtém uma aproximação em diferenças finitas implícitas centrado no espaço para a equação (2.31) dado por

$$\frac{\theta_i^n - \sum_{j=1}^n c_j \theta_i^{n-j}}{(\Delta t)^\gamma} = \frac{\frac{1}{2} [D(\theta_{i+1}^n) + D(\theta_i^n)] \frac{\theta_{i+1}^n - \theta_i^n}{\Delta x} - \frac{1}{2} [D(\theta_i^n) + D(\theta_{i-1}^n)] \frac{\theta_i^n - \theta_{i-1}^n}{\Delta x}}{\Delta x} \quad (2.36)$$

onde o índice subscripto  $i$  denota valores de  $\theta$  em  $x = x_i = i\Delta x$ ,  $i = 1, 2, \dots, M - 1$  nós da malha espacial, o índice sobrescrito  $n$  indica a posição da simulação na

malha temporal e a função não linear  $D(\theta_i^n)$  é estimada usando média aritmética. Este esquema é transformado em um sistema de equações tridiagonal não linear com respeito a  $\theta_i^n$ , para  $i = 1, 2, \dots, M - 1$ .

$$\begin{aligned} \frac{D(\theta_{i-1}^n) + D(\theta_i^n)}{2(\Delta x)^2} \theta_{i-1}^n - \left[ \frac{D(\theta_{i-1}^n) + 2D(\theta_i^n) + D(\theta_{i+1}^n)}{2(\Delta x)^2} + \frac{1}{(\Delta t)^\gamma} \right] \theta_i^n \\ + \frac{D(\theta_{i+1}^n) + D(\theta_i^n)}{2(\Delta x)^2} \theta_{i+1}^n = - \frac{\sum_{j=1}^n c_j \theta_i^{n-j}}{(\Delta t)^\gamma} \end{aligned} \quad (2.37)$$

Existem ainda duas equações que surgem das condições de fronteira, que resultam em um sistema com  $M + 1$  equações que podem ser resolvidas usando a técnica de Picard modificado para não linearidade.

Considerando:

$$I = \frac{D(\theta_{i-1}^n) + D(\theta_i^n)}{2(\Delta x)^2} \quad (2.38a)$$

$$J = - \left[ \frac{D(\theta_{i-1}^n) + 2D(\theta_i^n) + D(\theta_{i+1}^n)}{2(\Delta x)^2} + \frac{1}{(\Delta t)^\gamma} \right] \quad (2.38b)$$

$$K = \frac{D(\theta_{i+1}^n) + D(\theta_i^n)}{2(\Delta x)^2} \quad (2.38c)$$

$$R = - \frac{\sum_{j=1}^n c_j \theta_i^{n-j}}{(\Delta t)^\gamma} \quad (2.38d)$$

Quando a equação (2.37) é aplicada em todos os nós, o resultado é um sistema de equações matricial não linear com uma matriz tridiagonal composta de zeros nos elementos fora das diagonais, como em (2.24). Para condições de contorno prescritas tem-se  $R_1 = \theta_1^0$  e  $R_n = \theta_n^0$ , durante toda a simulação.

### 2.3.2 Integral fracionária

Outro modelo que usa cálculos fracionários e busca generalizar a equação de Richards é o modelo proposto por GEROLYMATOU; VARDOULAKIS; HILFER (2006) em que é apresentado um modelo baseado em integral fracionária, pois em seu trabalho levanta o questionamento quanto a validade do trabalho de PACHEPSKY; TIMLIN; RAWLS (2003), principalmente em relação a possibilidade da transformação da E.D.P. em E.D.O. usando a regra da cadeia para cálculos fracionários no modelo derivada fracionária. Aponta ainda, que devido a opção do modelo se basear em uma derivada, este passa a depender de uma condição inicial do tipo integral, qual não é usada pelo autor e não é fácil de ser obtida experimentalmente, além de violar a conservação de probabilidade intrínseca ao método.

Buscando evitar estes problemas e generalizar a equação de Richards, o autor propôs um modelo usando a integral fracionária, onde reescreveu a equação clássica de Richards 2.26 na **forma integral**

$$\theta(t, x) = \theta(0, x) + \int_0^t \frac{\partial}{\partial x} \left( D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) dt \quad (2.39)$$

e substituindo a integral clássica pela **integral fracionária** (2.40)

$$I_{a+}^{\gamma} f(t) = \frac{1}{\Gamma(\gamma)} \int_a^t (t-u)^{\gamma-1} f(u) du \quad (2.40)$$

de ordem  $\gamma$ , chega-se em um modelo fracionário,

$$\theta(t, x) = \theta(0, x) + I_{0+}^{\gamma} \frac{\partial}{\partial x} \left( D_{\gamma}(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) \quad (2.41)$$

qual denominou **Equação de Richards Fracional** (neste trabalho chamada por Equação de Richards na forma Integral Fracionária - E.R.I.F.) de ordem  $\gamma$ , para  $0 < \gamma \leq 1$ , no caso de  $\gamma = 1$  tem-se a equação clássica de Richards (2.39). Para expressão de  $D_{\gamma}$ , optou por usar modelos exponenciais clássicos de difusividade.

Para a solução numérica da equação (2.41) foi usado um algoritmo de Adams-Bashforth-Moulton DIETHELM; FREED (1999), modificado para não linearidade e obteve um equação fraca singular de Volterra do segundo tipo:

$$\theta(t, x) = \theta(0, x) + \frac{1}{\Gamma(\gamma)} \int_0^t (t-u)^{\gamma-1} \frac{\partial}{\partial x} \left( D_\gamma(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) du \quad (2.42)$$

Considerando uma malha temporal igualmente espaçada com passo de tempo  $\mathbf{h}$ , obteve solução numérica dada por

$$\theta_{n+1}(x) = \theta(0, x) + \frac{1}{\Gamma(\gamma)} \left( \sum_{j=0}^n a_{j,n+1} F(t_j, x, \theta_j(x)) + a_{n+1,n+1} F(t_{n+1}, x, \theta_{n+1}(x)) \right) \quad (2.43)$$

esta equação é não linear e para sua solução foi empregado o método iterativo de Newton-Raphson com preditor inicial  $\theta_{n+1}^P$  dado pela relação

$$\theta_{n+1}^P(x) = \theta(0, x) + \frac{1}{\Gamma(\gamma)} \sum_{j=0}^n b_{j,n+1} F(t_j, x, \theta_j(x)) \quad (2.44)$$

onde

$$F(t, x, \theta) = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_\gamma(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) \quad (2.45)$$

Note que a avaliação da função em cada instante de tempo  $t_{n+1}$  requer o conhecimento de todo o passado histórico da simulação. Isto reflete a não-localidade da integral fracionária.

Os pesos de integração para o preditor são avaliados pela expressão

$$b_{j,n+1} = \frac{h^\gamma}{\gamma} ((n+1-j)^\gamma - (n-j)^\gamma) \quad (2.46)$$

enquanto que para o corretor tem-se

$$a_{0,n+1} = \frac{h^\gamma}{\gamma(\gamma+1)} (n^{\gamma+1} - (n-\gamma)(n+1)^\gamma) \quad (2.47)$$

$$a_{n+1,n+1} = \frac{h^\gamma}{\gamma(\gamma+1)} \quad (2.48)$$

e para  $1 \leq j \leq n$

$$a_{j,n+1} = \frac{h^\gamma}{\gamma(\gamma+1)} \left( (n-j+2)^{\gamma+1} - 2(n-j+1)^{\gamma+1} + (n-j)^{\gamma+1} \right) \quad (2.49)$$

Com respeito ao espaço o autor usou elementos finitos com funções de bases quadráticas.

Considerando uma malha espacial igualmente distribuída, onde o índice subscrito  $i$  denota valores de  $\theta$  em  $x_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, M-1$  nós da malha, o índice sobrescrito  $n$  indica a posição da simulação na malha temporal e a função não linear  $D(\theta_i^n)$  é estimada usando média aritmética. Este esquema é transformado em um sistema de equações tridiagonal não linear com respeito a  $\theta_i^n$ , para  $i = 1, 2, \dots, M-1$ , em que substituindo (2.45) em (2.43), chega-se em um esquema centrado no espaço dado por:

$$\begin{aligned} & \frac{a_{n+1,n+1}}{2h^2\Gamma(\gamma)} [D(\theta_i^{n+1}) + D(\theta_{i-1}^{n+1})] \cdot \theta_{i-1}^{n+1} \\ & - \left\{ \frac{a_{n+1,n+1}}{2h^2\Gamma(\gamma)} [D(\theta_{i-1}^{n+1}) + 2D(\theta_i^{n+1} + D(\theta_{i+1}^{n+1}))] + 1 \right\} \cdot \theta_i^{n+1} \\ & + \frac{a_{n+1,n+1}}{2h^2\Gamma(\gamma)} [D(\theta_{i+1}^{n+1}) + D(\theta_i^{n+1})] \cdot \theta_{i+1}^{n+1} = \\ & -\theta_i^0 - \sum_{j=0}^n \frac{a_{j,n+1}}{2h^2\Gamma(\gamma)} \{ [D(\theta_{i+1}^j) + D(\theta_i^j)] (\theta_{i+1}^j - \theta_i^j) - [D(\theta_i^j) + D(\theta_{i-1}^j)] (\theta_i^j - \theta_{i-1}^j) \} \end{aligned} \quad (2.50)$$

Existem ainda duas equações relativas as condições de fronteira, gerando assim um sistema com  $M+1$  equações que pode ser resolvido usando a técnica de Picard modificado para não linearidade ou mesmo o método iterativo de Newton-Raphson.

Tomando:

$$I = \frac{a_{n+1,n+1}}{2h^2\Gamma(\gamma)} [D(\theta_i^{n+1}) + D(\theta_{i-1}^{n+1})] \quad (2.51a)$$

$$J = - \left\{ \frac{a_{n+1,n+1}}{2h^2\Gamma(\gamma)} [D(\theta_{i-1}^{n+1}) + 2D(\theta_i^{n+1}) + D(\theta_{i+1}^{n+1})] + 1 \right\} \quad (2.51b)$$

$$K = + \frac{a_{n+1,n+1}}{2h^2\Gamma(\gamma)} [D(\theta_{i+1}^{n+1}) + D(\theta_i^{n+1})] \quad (2.51c)$$

$$R = -\theta_i^0 - \sum_{j=0}^n \frac{a_{j,n+1}}{2h^2\Gamma(\gamma)} \{ [D(\theta_{i+1}^j) + D(\theta_i^j)] (\theta_{i+1}^j - \theta_i^j) - [D(\theta_i^j) + D(\theta_{i-1}^j)] (\theta_i^j - \theta_{i-1}^j) \} \quad (2.51d)$$

Quando a equação (2.50) é aplicada em todos os nós, o resultado é um sistema de equações matricial não linear com uma matriz tridiagonal composta de zeros nos elementos fora das diagonais, como em (2.24). Para condições de contorno prescritas tem-se  $R_1 = \theta_1^0$  e  $R_n = \theta_n^0$ , durante toda a simulação.

No presente trabalho foi feita a reprodução do algoritmo numérico e resultados do artigo de GEROLYMATOU; VARDOULAKIS; HILFER (2006), porém com algumas pequenas alterações, a primeira é quanto a escolha do método iterativo para solução do sistema não linear que neste trabalho optou-se por usar a técnica de Picard. A segunda é quanto a escolha do método das diferenças finitas visto que o autor usou o método dos elementos finitos. Entretanto estas escolhas não geram custo computacional nem piores resultados numéricos, dado que o problema é unidimensional e a técnica de Picard chega a encontrar soluções ótimas com apenas uma iteração. Esta discussão será novamente abordada no capítulo 3 e na seção 3.3.

### 3 PROPOSTA DE MODIFICAÇÃO DO MÉTODO

A equação de Richards é altamente não-linear CELIA; BOULOUTAS; ZARBA (1990); métodos que buscam aproximações numéricas para o problema, em geral usam passos de tempo pequenos para garantir a convergência. Neste trabalho é usada a técnica de Picard para soluções do sistema não-linear atrelado. Na figura 3.1 é possível observar o número de iterações por passo de tempo apresentados por esta técnica, quando da aproximação de soluções em reprodução ao artigo de Gerolymatou, onde foi usado o método da integral fracionária apresentado no capítulo 2.3.2. Observe que para os tempos iniciais de simulação a técnica é mais exigida que nos tempos seguintes, e em algumas partes chega a determinar soluções com apenas uma iteração.

Considerando a necessidade de se obter aproximações numéricas com os menores custo e tempo computacionais possíveis, é proposto neste trabalho um modelo modificado da **Equação de Richards Fracionária** de GEROLYMATOU; VARDOULAKIS; HILFER (2006), chamada aqui por **Equação de Richards na forma Integral Fracionária Modificado** - (E.R.I.F.M). Esta alteração no esquema considera um passo de tempo adaptativo de forma que seja possível usar um tamanho de passo que melhor se adapte a cada etapa da simulação, obtendo resultados para simulações longas com o menor custo computacional possível.

#### 3.1 Motivação para modificações

Como motivação da construção do método será brevemente apresentada a ideia por traz do clássico algoritmo de Adams-Bashforth-Moulton para equações de

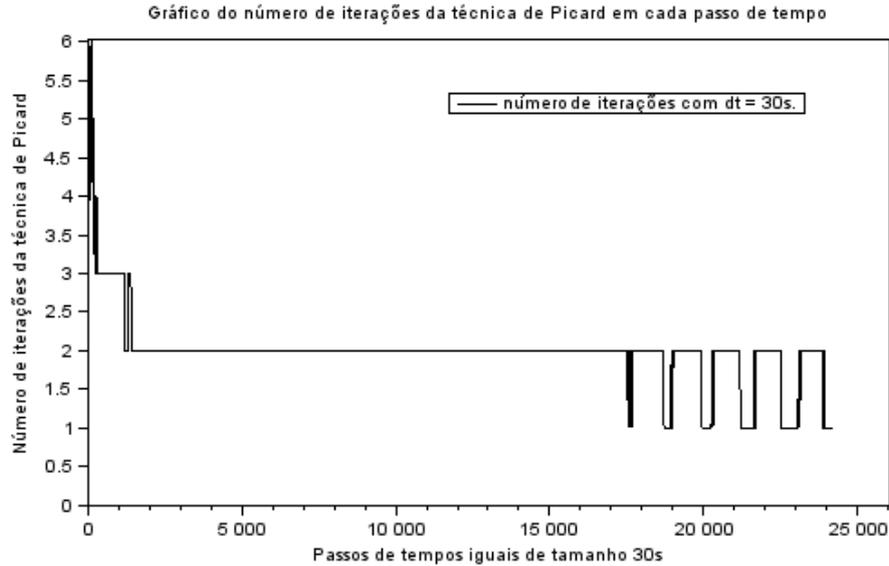


Figura 3.1: Gráfico apresentando para cada passo de tempo o número de iterações que a técnica de Picard usou para apresentar solução.

primeira ordem. Inicialmente será abordado um problema de valor inicial de uma equação diferencial de primeira ordem.

$$Dy(x) = f(x, y(x)) \quad (3.1a)$$

$$y(0) = y_0 \quad (3.1b)$$

assumindo que a função  $y$  tem solução única existente em um intervalo  $[0, T]$ , será usado a técnica do preditor corretor de Adams-Bashforth-Moulton e considerada uma malha sem a necessidade de ser igualmente espaçada, como indicado no trabalho de HAIER; NØRSETT; WANNER (1993), onde  $\{t_j = (t_{j+1} - t_j); j = 0, 1, \dots, N\}$  para algum inteiro  $N$ .

A ideia básica é assumir ser possível calcular aproximações  $y_j \approx y(t_j)$  ( $j = 1, 2, \dots, k$ ), e tentar obter aproximações para  $y_{k+1}$  por meio da equação

$$y(t_{k+1}) = y(t_k) + \int_{t_k}^{t_{k+1}} f(z, y(z)) dz. \quad (3.2)$$

Esta equação decorre da integração de (3.1) no intervalo  $[t_k, t_{k+1}]$ . Não se conhece exatamente o lado direito da expressão (3.2) além de uma aproximação para  $y(t_k)$ , chamado aqui por  $y_k$ . A integral será então substituída pela fórmula da quadratura trapezoidal de dois pontos

$$\int_a^b g(z)dz \approx \frac{b-a}{2}(g(a) + g(b)), \quad (3.3)$$

que oferece uma equação para a aproximação da incógnita  $y_{k+1}$ , dada por

$$y_{k+1} = y_k + \frac{t_{k+1} - t_k}{2}(f(t_k, y(t_k)) + f(t_{k+1}, y(t_{k+1}))), \quad (3.4)$$

onde, novamente substituindo  $y(t_k)$  e  $y(t_{k+1})$ , por suas respectivas aproximações  $y_k$  e  $y_{k+1}$ , chega-se na equação de passo único implícito do método de Adams-Moulton, dada por

$$y_{k+1} = y_k + \frac{t_{k+1} - t_k}{2}(f(t_k, y_k) + f(t_{k+1}, y_{k+1})). \quad (3.5)$$

O problema com esta equação é que a incógnita  $y_{k+1}$  aparece em ambos os lados, e devido a não linearidade natural de  $f$ , em geral, não é possível obter solução direta para  $y_{k+1}$ . Desta forma deve-se usar (3.5) em um processo iterativo, inserindo uma aproximação preliminar para  $y_{k+1}$  no lado direito, chamada aqui por  $y_{k+1}^P$  preditor, obtido de maneira similar, substituindo a fórmula da quadratura trapezoidal pela regra do retângulo

$$\int_a^b g(z)dz \approx (b-a)g(a), \quad (3.6)$$

dando o método explícito (Euler avançado ou Método de Adams-Bashforth de passo único)

$$y_{k+1}^P = y_k + (t_{k+1} - t_k)f(t_k, y_k). \quad (3.7)$$

onde é conhecido pelo trabalho de HAIER; NØRSETT; WANNER (1993) que o processo definido por (3.7) e

$$y_{k+1} = y_k + \frac{(t_{k+1} - t_k)}{2}(f(t_k, y_k) + f(t_{k+1}, y_{k+1}^P)), \quad (3.8)$$

Conhecido como técnica de passo único de Adams-Bashforth-Moulton, é convergente de ordem 2, isto é

$$\max_{j=1,2,\dots,N} |y(t_j) - y_j| = O(h^2). \quad (3.9)$$

Esse método se comporta de maneira satisfatória do ponto de vista de sua estabilidade numérica HAIRER; WANNER (1991). É dito ser um método do tipo preditor corretor com avaliação, qual deveria ser iniciado calculando o preditor (3.7), avaliar  $f(t_{k+1}, y_{k+1}^P)$ , usar esta aproximação para calcular o corretor (3.8) e finalmente avaliar  $f(t_{k+1}, y_{k+1})$ . Esse resultado deve ser guardado para futuro uso em um próximo passo da iteração.

### 3.2 Métodos Numéricos - Formulação Fracionária E.R.I.F.M.

Introduzidos estes conceitos, são apresentadas agora as ideias essenciais do problema de ordem fracionária com algumas modificações. Busca-se escrever a equação de Richards na forma integral, como em (3.2), porém considerando um intervalo de integração começando em 0 e não em  $t_k$ . Esta é uma consequência da estrutura de não-localidade do operador diferencial de ordem fracionária. Isso não causa maiores problemas em generalizar o método de Adams. O procedimento a ser realizado é substituir a integral pela fórmula da quadratura trapezoidal, assim usa-se os nós  $t_j$  ( $j = 0, 1, \dots, k + 1$ ) e interpretar a função  $(t_{k+1} - \cdot)^{\gamma-1}$  como uma função peso para a integral, ou seja, aplicar a aproximação

$$\int_0^{t_{k+1}} (t_{k+1} - z)^{\gamma-1} g(z) dz \approx \int_0^{t_{k+1}} (t_{k+1} - z)^{\gamma-1} \tilde{g}_{k+1}(z) dz \quad (3.10)$$

onde  $\gamma$  é a ordem fracionária e  $\tilde{g}_{k+1}$  é um interpolador linear para  $g$  com nós tomados em  $t_j$ ,  $j = 0, 1, 2, \dots, k + 1$ .

Os pesos da fórmula da quadratura trapezoidal podem ser representados por um somatório dos valores das funções pesos do integrante  $g$ , tomados nos pontos  $t_j$ .

Assim escreve-se a integral do lado direito de (3.10) como

$$\int_0^{t_{k+1}} (t_{k+1} - z)^{\gamma-1} \tilde{g}_{k+1}(z) dz = \sum_{j=0}^{k+1} a_{j,k+1} g(t_j) \quad (3.11)$$

onde

$$a_{j,k+1} = \int_0^{t_{k+1}} (t_{k+1} - z)^{\gamma-1} \phi_{j,k+1}(z) dz \quad (3.12)$$

e

$$\phi_{j,k+1}(z) = \begin{cases} (z - t_{j-1})/(t_j - t_{j-1}) & \text{se } t_{j-1} < z \leq t_j, \\ (t_{j+1} - z)/(t_{j+1} - t_j) & \text{se } t_j < z < t_{j+1}, \\ 0 & \text{c.c.} \end{cases} \quad (3.13)$$

Observe que a função  $\phi_{j,k+1}$  satisfaz

$$\phi_{j,k+1}(t_\mu) = \begin{cases} 0 & \text{se } j \neq \mu, \\ 1 & \text{se } j = \mu, \end{cases} \quad (3.14)$$

que é contínua e linear por partes com extremidades nos nós  $t_\mu$  e sendo integrada como indicado em (3.12), obtém-se, para um  $t_j$  arbitrário:

$$a_{j,k+1} = \begin{cases} \frac{(t_{k+1} - t_1)^{\gamma+1} + t_{k+1}^\gamma [\gamma t_1 + t_1 - t_{k+1}]}{t_1 \gamma (\gamma + 1)} & \text{se } j = 0; \\ \frac{(t_{k+1} - t_{j-1})^{\gamma+1} + (t_{k+1} - t_j)^\gamma [\gamma (t_{j-1} - t_j) + t_{j-1} - t_{k+1}]}{(t_j - t_{j-1}) \gamma (\gamma + 1)} + \\ \frac{(t_{k+1} - t_{j+1})^{\gamma+1} - (t_{k+1} - t_j)^\gamma [\gamma (t_j - t_{j+1}) - t_{j+1} + t_{k+1}]}{(t_{j+1} - t_j) \gamma (\gamma + 1)} & \text{se } 1 \leq j \leq k; \\ \frac{(t_{k+1} - t_k)^\gamma}{\gamma (\gamma + 1)} & \text{se } j = k + 1. \end{cases} \quad (3.15)$$

Assim a expressão do corretor será:

$$y_{k+1} = y_0 + \frac{1}{\Gamma(\gamma)} \left( \sum_{j=0}^k a_{j,k+1} f(t_j, y_j) + a_{k+1,k+1} f(t_{k+1}, y_{k+1}^P) \right) \quad (3.16)$$

Para a determinação do preditor  $y_{k+1}^P$ , basta substituir a integral do lado direito de (3.2) pela regra do retângulo

$$\int_0^{t_{k+1}} (t_{k+1} - z)^{\gamma-1} g(z) dz \approx \sum_{j=0}^k b_{j,k+1} g(t_j), \quad (3.17)$$

onde

$$b_{j,k+1} = \int_{t_j}^{t_{j+1}} (t_{k+1} - z)^{\gamma-1} dz \approx \frac{(t_{k+1} - t_j)^\gamma - (t_{k+1} - t_{j+1})^\gamma}{\gamma} \quad (3.18)$$

Vale lembrar que neste caso as funções  $\phi_{kj}$  usadas no preditor não são do tipo chapéu e sim constantes por partes, sendo 1 em  $[t_j, t_{j+1}]$  e 0 nas outras partes do intervalo  $[0, t_{k+1}]$ . Assim o preditor  $y_{k+1}^P$  determinado pelo método de Adams-Bashforth-Moulton fracionário é:

$$y_{k+1}^P = y_0 + \frac{1}{\Gamma(\gamma)} \sum_{j=0}^k b_{j,k+1} f(t_j, y_j). \quad (3.19)$$

Aplicando-se a equação (3.16) em todos os nós, tem-se como resultado um sistema de equações matricial não linear com uma matriz tridiagonal composta de zeros nos elementos fora das diagonais, como em (2.24). Vale ressaltar que o método aqui descrito não necessita de uma malha temporal igualmente espaçada e que a aplicação das modificações afetam apenas os cálculos das equações (2.46), (2.47), (2.48) e (2.49). Assim o esquema desenvolvido com estas alterações é similar ao esquema apresentado em (2.50) e (2.51), porém com uso das equações (3.15).

### 3.3 Análise do método

Descrevendo as principais propriedades do algoritmo, é possível notar que o comportamento do método é independente do parâmetro  $\gamma$  e ele se comporta de uma forma muito semelhante ao método de Adams-Bashforth-Moulton clássico

de passo único (isto é, o caso onde  $\gamma = 1$ ). Portanto, a combinação do esquema de Adams-Bashforth-Moulton fracionário descrito com a sua versão clássica é uma ideia muito natural quando o conjunto de equações a serem resolvidas consiste de equações diferenciais de primeira ordem combinadas com equações diferenciais de ordem fracionária. Vale lembrar que esse método pode ser generalizado para incluir equações de ordem mais fracionais, mesmo que a ordem dos operadores diferenciais envolvidas variem de equação para equação.

**Estabilidade:** A análise de estabilidade é muito importante ao implementar um método em um computador com aritmética de precisão finita, pois deve-se levar em conta os efeitos decorrentes dos erros por truncamento. Sabe-se HAIRER; WANNER (1991) que o método clássico de Adams-Bashforth-Moulton, é útil para solucionar problemas com equações de primeira ordem, pois suas propriedades de estabilidade permitem uma aplicação confiável sem indevida propagação de erros de arredondamento e sua implementação não exige um consumo extremo de tempo. A partir dos resultados de LUBICH (1986), observa-se que as propriedades do método permanecem inalteradas quando se compara a versão fracionária do algoritmo com a clássica. Ficando claro que o comportamento do método não depende da ordem dos operadores diferenciais envolvidos.

**Convergência:** É claro que somente a estabilidade não é suficiente para afirmar que a solução numérica é uma boa aproximação para a solução exata. Deve-se analisar os erros na estimativa do problema, isto é, a questão da convergência. No contexto, pode-se usar algumas técnicas padrões de análise LINZ (1985) e DIETHELM (2010).

Seja  $0 < \gamma$  e assumindo  $D_{*0}^\gamma y \in C^2[0, T]$  para algum  $T$  apropriado. Então,

$$\max_{0 \leq j \leq N} |y(t_j) - y_j| = \begin{cases} O(h^2) & \text{se } \gamma \geq 1, \\ O(h^{1+\gamma}) & \text{se } \gamma < 1, \end{cases} \quad (3.20)$$

onde  $\gamma$  representa a ordem do operador integral fracionário  $D_{*0}^\gamma$ ,  $h = (y(t_{j+1}) - y(t_j))$

e considerando os nós  $j$  não necessariamente espaçados igualmente.

Observa-se que a ordem de convergência depende de  $\gamma$ , e esta é uma função não-decrescente de  $\gamma$ . Isto se deve ao fato da discretização do operador integral, que se comporta de forma mais suave, permitindo uma aproximação com uma acurácia maior quando  $\gamma$  cresce. Em contrapartida, o chamado método direto como o método de diferenças atrasadas de DIETHELM (1997) usa uma abordagem diferente; como o nome sugere ele discretiza diretamente o operador no problema de valor inicial. As propriedades suaves deste operador e a maneira fácil dele ser aproximado se deteriora com  $\gamma$  crescendo, e então conclui-se que a ordem de convergência do método de DIETHELM (1997) é uma função não-crescente de  $\gamma$ ; em particular a convergência não é alcançada para  $\gamma \geq 2$ . Esta é uma distinta vantagem do esquema de Adams apresentado aqui que é convergente para todo  $\gamma > 0$ .

Uma objeção contra a utilização do esquema de Adams-Moulton-Bashforth pode ser o ritmo muito lento de convergência se  $\gamma$  está próximo de 0. No entanto, uma verificação cuidadosa do erro de aproximação revela um fato que é bem conhecido na análise de erros para métodos desta forma para equações de primeira ordem: a aplicação da fórmula corretor melhora a precisão da sua entrada (o preditor) por um fator de  $h^\gamma$  até uma ordem de  $O(h^2)$ , ou seja, uma saturação é alcançada. Assim, é possível se substituir a estrutura de PACA, (Preditor Avaliador Corretor Avaliador) simples por um método P(AC) $^\mu$ A, ou seja, através da introdução de iterações de correção adicionais ( $\mu$ ).

Uma observação interessante é que, escolhendo um número maior de iterações de correção, essencialmente se deixa inalterada a complexidade computacional do algoritmo DIETHELM (2010). Uma iteração do corretor é da forma:

$$y_{j+1}^l = y_0 + \frac{h^\gamma}{\Gamma(\gamma + 2)} f(t_{j+1}, y_{j+1}^{l-1}) + \frac{h^\gamma}{\Gamma(\gamma + 2)} \sum_{r=0}^j a_{r,j+1} f(t_r, y_r) \quad (3.21)$$

Aqui  $y_{j+1}^l$  denota a aproximação após  $l$  etapas de correção,  $y_{j+1}^0 = y_{j+1}^P$  é o preditor e  $y_{j+1} := y_{j+1}^\mu$  é a aproximação final após  $\mu$  etapas de correção que será usada. Essa expressão pode ser reescrita como

$$y_{j+1}^l = \beta_{j+1} + \frac{h^\gamma}{\Gamma(\gamma + 2)} f(t_{j+1}, y_{j+1}^{l-1}) \quad (3.22)$$

onde

$$\beta_{j+1} = y_0 + \frac{h^\gamma}{\Gamma(\gamma + 2)} \sum_{r=0}^j a_{r,j+1} f(t_r, y_r) \quad (3.23)$$

é independente de  $l$ . Assim, a complexidade aritmética total do corretor no passo  $(j + 1)$  (saindo de  $t_j$  para  $t_{j+1}$ ) é  $O(j)$ , para o cálculo de  $\beta_{j+1}$  é acrescentado  $O(\mu)$  para o passo  $\mu$  do corretor, onde (sendo  $\mu$  constante) é assintoticamente o mesmo que a complexidade no caso  $\mu = 1$ .

A aproximação obtida pelo método P(AC) $^\mu$ A descrito acima, satisfaz

$$\max_{0 \leq j \leq N} |y(t_j) - y_j| = O(h^q) \quad (3.24)$$

onde,  $q = \min\{2, 1 + \mu\gamma\}$ ,  $N$  é o número de nós da malha e  $y(t_j)$  e  $y_j$  são soluções aproximadas e exatas de  $y$  respectivamente. Para mais detalhes da análise de erros do esquema delineado, veja DIETHELM (2003).

Nos resultados apresentados pelo algoritmo referente ao esquema (E.R.I.F.M) proposto neste trabalho na subseção 3.2, é utilizado uma aproximação para o preditor de uma maneira similar e bem próxima do método P(AC) $^\mu$ A, onde é usado como preditor a última solução encontrada pelo método. Esta técnica será apresentada em detalhes no capítulo 4.

## 4 RESULTADOS OBTIDOS

Neste capítulo serão apresentados resultados obtidos com os diversos códigos descritos neste trabalho. Inicialmente será apresentada uma verificação do código numérico (E.R.I.F.M), considerando uma aproximação linear da equação de Richards em sua forma horizontal, tornando a difusividade constante.

Será simulado computacionalmente um experimento de infiltração de água na horizontal apresentado por EL ABD; MILCZAREK (2004), em um bloco de construção feito de silício, qual apresenta uma difusão anômala diferindo dos resultados apontados pela forma clássica da equação de Richards. Serão apresentados resultados com os códigos computacionais usando cálculos fracionários descritos neste trabalho, que são: Equação de Richards usando derivada fracionária (E.R.D.F.) de PACHEPSKY; TIMLIN; RAWLS (2003), Equação de Richards usando integral fracionária (E.R.I.F.) de GEROLYMATOU; VARDOULAKIS; HILFER (2006) e o Equação de Richards usando integral fracionária modificado (E.R.I.F.M.), que otimiza e reduz o custo computacional do modelo integral fracionária.

Para o caso de infiltração de água na vertical, foi apresentado na seção 2.2.1, os resultados para um solo do tipo areia, que apresenta uma alta não linearidade nas aproximações das soluções numéricas. O algoritmo empregado é baseado no trabalho de KUMAR (1998) que possibilita a escolha do tipo de esquema a ser usado variando entre explícito, centrado e implícito com o ajuste de um parâmetro.

## 4.1 Verificação do código numérico - (E.R.I.F.M)

Nesta seção o código numérico será verificado por comparação com resultados analíticos para ambos  $\gamma = 1$  e  $\gamma < 1$  casos das equações lineares clássicas e fracionárias, respectivamente:

$$\theta(t, x) = \theta(0, x) + D_1 I_{0+}^1 \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2}, \quad (4.1)$$

$$\theta(t, x) = \theta(0, x) + D_\gamma I_{0+}^\gamma \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2}. \quad (4.2)$$

onde  $D_1$  e  $D_\gamma$  são coeficientes de difusão constantes. Foram estimados os valores  $D_1 = 24 \times 10^{-5} \text{cm}^2 \text{min}^{-1}$  e  $D_\gamma = 24 \times 10^{-5} \text{cm}^2 \text{min}^{-\gamma}$ , correspondendo a aproximadamente  $\theta = 0,3$  em  $D(\theta) = C_0 e^{c\theta}$ , onde  $C_0$  e  $c$  são constantes e  $C_0 = 4 \times 10^{-6} \text{cm}^2 \text{min}^{-1}$  e  $c = 13,6$  para o caso clássico e  $C_0 = 4 \times 10^{-6} \text{cm}^2 \text{min}^{-\gamma}$  e  $c = 13,6$  para o caso fracionário.

As condições iniciais

$$\theta(0, x) = \begin{cases} \theta_1 & \text{se } x = 0 \\ \theta_0 & \text{se } x > 0 \end{cases} \quad (4.3)$$

e de contorno são

$$\theta(t, 0) = \theta_1 \quad \text{para } t > 0, \quad x = 0 \quad (4.4)$$

e

$$\theta(t, x) < \infty \quad \text{para } t > 0, \quad x \rightarrow \infty \quad (4.5)$$

### 4.1.1 Difusão clássica

A solução analítica de (4.1) é

$$\theta(t, x) = B_1 \cdot \text{erfc} \left( \sqrt{\frac{x^2}{4D_1 t}} \right) + B_2 \quad (4.6)$$

Para os valores das condições iniciais e de contorno foram escolhidos  $\theta_0 = 0,1$  e  $\theta_1 = 0,5$ , isto torna os valores de  $B_1$  e  $B_2$  fixos e constantes

$$B_1 = 0,4 \quad B_2 = 0,1 \quad (4.7)$$

O conteúdo volumétrico de água tomado como uma função similar a variável  $\xi = x/t^{1/2}$ , foi avaliado para os resultados numérico e analítico. A diferença máxima entre as soluções numéricas e analíticas foi igual a  $1,5 \times 10^{-4}$ , considerando um solo de comprimento  $1,2 \text{ cm}$ , durante um tempo total de  $200 \text{ min}$ , considerando uma malha espacial com intervalos  $\Delta x = 0,04 \text{ cm}$  e uma malha temporal com intervalos  $\Delta t = 0,125 \text{ min}$ .

#### 4.1.2 Difusão Anômala

A solução analítica de (4.2) é

$$\theta(t, x) = B_3 \cdot H_{1,1}^{1,0} \left( \sqrt{\frac{x^2}{D_\gamma t^\gamma}} \left| \begin{matrix} (1, \gamma/2) \\ (0, 1) \end{matrix} \right. \right) + B_4 \quad (4.8)$$

onde  $H_{1,1}^{1,0}(z)$  é uma função de FOX segundo BRAAKSMA (1962-1964) definida pela série

$$H_{1,1}^{1,0} \left( z \left| \begin{matrix} (1, \gamma/2) \\ (0, 1) \end{matrix} \right. \right) = \sum_{v=0}^{\infty} \frac{1}{\Gamma(1 - \gamma v/2)} \frac{(-1)^v z^v}{v!} \quad (4.9)$$

para  $\gamma = 1$  esta se reduz a função de erro complementar *erfc*. Escolhendo novamente  $\theta_0 = 0,1$  e  $\theta_1 = 0,5$ , tem-se

$$B_3 = 0,4 \quad B_4 = 0,1 \quad (4.10)$$

A série de potências (4.9) converge lentamente, se mostrando útil numericamente para argumentos pequenos. O erro máximo entre a solução numérica e a série de potências é igual a  $1,1 \times 10^{-4}$  considerando-se os 150 primeiros termos da série,  $\Delta x = 0,025 \text{ cm}$  e  $\Delta t = 0,25 \text{ min}$ .

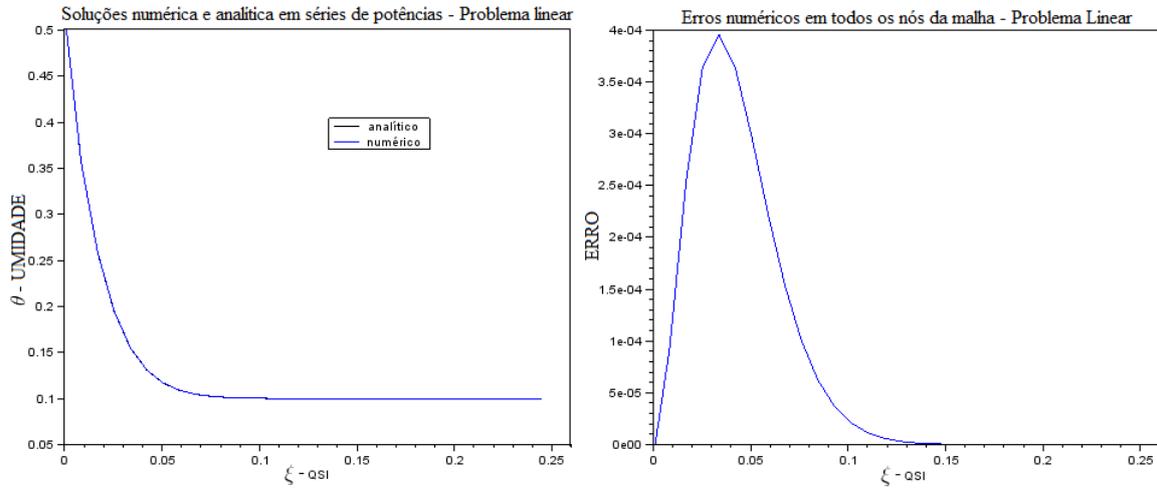


Figura 4.1: O gráfico a esquerda apresenta à aproximação numérica e a expansão em série de potências para  $\gamma = 0,9$  e considerando os 150 primeiros termos da série. Gráfico a direita apresentando os erros máximos em todos os pontos da malha espacial.

Na figura 4.1 é apresentada uma comparação das aproximações numéricas com a expansão em série de potências para argumentos pequenos usando  $\gamma = 0,9$ .

Como forma de verificar os algoritmos numéricos desenvolvidos usando (4.2) e (4.8), considerou-se um solo hipotético de parâmetros:  $\gamma = 0,9$ , coluna de solo de  $1,2\text{ cm}$ , malha espacial com  $\Delta x$  variando de  $0,10\text{ cm}$  à  $0,00625\text{ cm}$ , tempo de simulação de  $200\text{ min}$ , com  $\Delta t$  variando de  $8\text{ min}$  à  $0,0625\text{ min}$  e ambas as malhas foram igualmente espaçadas.

Nas tabelas 4.1 e 4.2 são analisados os erros máximos e as ordens de convergência para as variáveis independentes do problema  $\mathbf{t}$  e  $\mathbf{x}$ , tomando valores pequenos. Para analisar a ordem de convergência com respeito a  $\Delta x$  foi fixado um  $\Delta t$  suficientemente pequeno e estudado o erro máximo e a ordem quando  $\Delta x$  decresce, vide tabela 4.2. Para analisar a ordem de convergência com respeito a  $\Delta t$  foi fixado um  $\Delta x$  suficientemente pequeno e estudado o erro máximo e a ordem de convergência

$\Delta x$ fixo	$\Delta t$	Erro	Ordem ( $q_t$ )
0,0125	8	0,0041458	0,9880095
	4	0,0020902	0,9787603
	2	0,0010606	0,9786664
	1	0,0005382	0,9919806
	0,5	0,0002706	1,0258207
	0,25	0,0001329	1,0861065
	0,125	0,0000626	1,1200938
	0,0625	0,0000288	

Tabela 4.1: Erros numéricos máximos e ordem de convergência determinados para  $\Delta x$  fixo e  $\Delta t$  refinando. Parâmetros:  $\gamma = 0,9$ , Coluna de solo de  $1,2\text{ cm}$ , com  $\Delta x$  fixo em  $0,0125\text{ cm}$  em uma malha igualmente espaçada, tempo total de simulação de  $200\text{ min}$ , com  $\Delta t$  variando de  $8\text{ min}$  à  $0,0625\text{ min}$  igualmente espaçados.

$\Delta t$ fixo	$\Delta x$	Erro	Ordem ( $q_x$ )
0,0625	0,10	0,0015384	2,0628691
	0,05	0,0003682	2,4625696
	0,025	0,0000668	1,2137793
	0,0125	0,0000288	0,3259300
	0,00625	0,0000361	

Tabela 4.2: Erros numéricos máximos e ordem de convergência determinados para  $\Delta t$  fixo e  $\Delta x$  refinando. Parâmetros:  $\gamma = 0,9$ , Coluna de solo de  $1,2\text{ cm}$ , com  $\Delta t$  fixo em  $0,0625\text{ min}$  em uma malha igualmente espaçada, tempo total de simulação de  $200\text{ min}$ , com  $\Delta x$  variando de  $0,10\text{ cm}$  à  $0,00625\text{ cm}$  igualmente espaçados.

quando  $\Delta t$  decresce, vide tabela 4.1.

Para o cálculo da ordem de convergência considerou-se o erro  $E_i$  para um dado tamanho de passo de tempo  $\Delta t_i$  como sendo  $E_i \simeq C(\Delta t_i)^q$ , e para um erro  $E_{i+1}$  de um passo de tempo  $\Delta t_{i+1}$  tem-se  $E_{i+1} \simeq C(\Delta t_{i+1})^q$ , sendo  $q$  a ordem dos erros. Para  $q = q_t$  temos  $q_t \simeq \frac{\log\left(\frac{E_{i+1}}{E_i}\right)}{\log\left(\frac{\Delta t_{i+1}}{\Delta t_i}\right)}$ , ao comparar os erros  $E$  com o refinamento da malha em  $t$  tomados de dois em dois. Para  $q = q_x$  a ordem dos erros será  $q_x \simeq \frac{\log\left(\frac{E_{i+1}}{E_i}\right)}{\log\left(\frac{\Delta x_{i+1}}{\Delta x_i}\right)}$  ao comparar os erros  $E$  com o refinamento da malha em  $x$  tomados de dois em dois.

## 4.2 Resultados usando derivada fracionária (E.R.D.F.)

Como forma de testar e validar o modelo numérico apresentado na seção 2.3.1, será apresentada a simulação de infiltração da água em um solo horizontal classificado como do tipo "Silty Loam" por EVANGELIDES; ARAMPATZIS; TZIMOPOULOS (2010) e um bloco de silício estudado por EL ABD; MILCZAREK (2004), usando o algoritmo numérico (??). Ambos os meios porosos apresentam o fenômeno de difusividade anômala. Seus resultados de aproximações numéricas para a infiltração horizontal diferem da solução clássica de Richards, ou  $\gamma = 1$ , assim será determinado para cada caso o mais apropriado valor de  $\gamma < 1$ , qual melhor se adéque as soluções experimentais apresentadas.

Como forma de determinar o valor de  $\gamma$  apropriado para cada meio poroso, fez-se a regressão linear para diferentes dados experimentais considerando diferentes tempos de infiltração  $t$  e as respectivas distâncias das frentes de molhamento  $x$  do mesmo meio. Foi comparada a inclinação da reta que melhor se ajustou aos dados experimentais, com a variável análoga de Boltzmann reescrita na forma semelhante à equação reduzida da reta.

$$\xi = x/t^{\gamma/2} \Leftrightarrow x = \xi \times t^{\gamma/2} \Leftrightarrow \ln(x) = \ln(\xi) + \frac{\gamma}{2}\ln(t) \quad (4.11)$$

É possível observar na figura 4.2 o comportamento da infiltração para um meio poroso genérico, onde à medida que o valor de  $\gamma$  difere de 1 a infiltração ocorre de maneira retrograda para o mesmo tempo de simulação. Vale ressaltar que este efeito do método é percebido para longos tempos de simulação, nos iniciais esta não difere muito dos resultados analíticos, clássicos nem dos experimentais.

Como resultado de validação foi usado um solo classificado como "Silty Loam". São apresentadas na figura 4.3, as soluções clássica, fracionária e experimental,

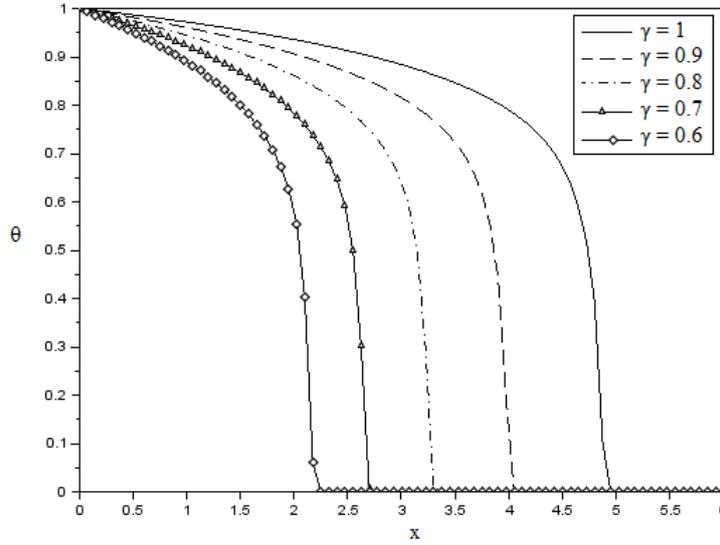


Figura 4.2: Resultados síncronos para conteúdos volumétricos de umidade  $\theta$  para tempo igual a 100 minutos e diferentes ordens de derivadas fracionárias.

usando a expressão para a difusividade fracionária adaptada do trabalho de EVANGELIDES; ARAMPATZIS; TZIMOPOULOS (2010)

$$D_{\gamma}(\theta_x) = \left( \frac{\Gamma(1 - \frac{\gamma}{2})}{\Gamma(1 - 3\frac{\gamma}{2})} \right) \frac{1 + \left( \tan\left(-\frac{\theta_x + \theta_0}{a}\right) \right)^2}{ab} \left[ \frac{c}{b}(\theta_x + \theta_i) + \frac{a}{b} \ln \left( \frac{|\cos\left(\frac{\theta_i + \theta_0}{a}\right)|}{|\cos\left(\frac{\theta_x + \theta_0}{a}\right)|} \right) \right] \quad (4.12)$$

onde  $a = 0,3857$ ,  $b = 13,5987$ ,  $c = -24,3048$ ,  $\theta_i = 0,0175 [cm^3/cm^3]$ ,  $\theta_0 = 0,295 [cm^3/cm^3]$  e  $\gamma = 0,99$ , sendo este último obtido por regressão linear para este solo.

No segundo resultado simulou-se a infiltração de água em um tijolo de silício estudado por EL ABD; MILCZAREK (2004), que também apresenta o fenômeno de difusividade anômala. São apresentadas as soluções clássica, derivada fracionária e experimental, usando duas diferentes difusividades fracionárias. A primeira expressão apresentada por SUN et al. (2013)

$$D_{\gamma}(\theta) = C_0 \times \theta^n \quad (4.13)$$

onde  $C_0 = 0,93$ ,  $n = 8,2$ ,  $\Delta t = 0,30 s$ ,  $\Delta x = 1 mm$  e  $\gamma = 0,86$ , este último também

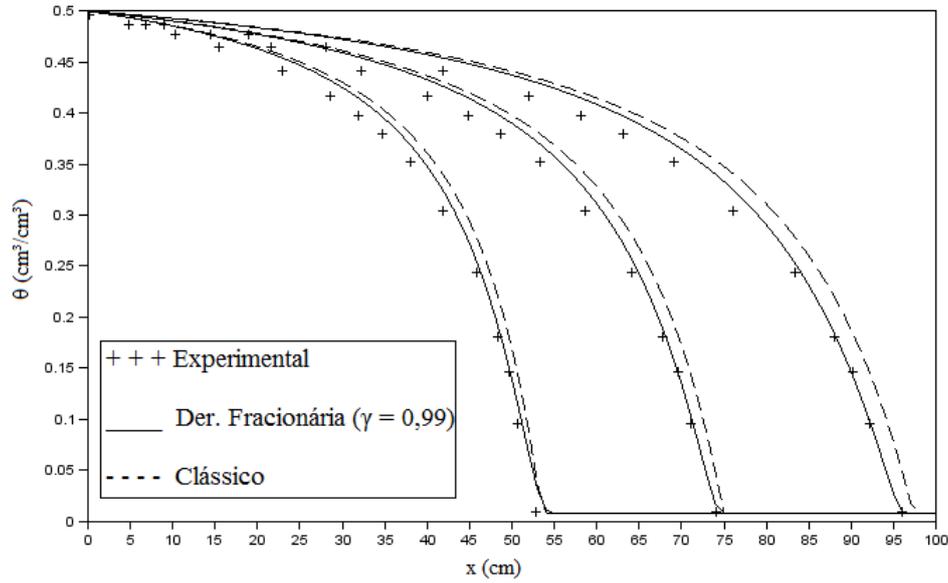


Figura 4.3: Solução para os tempos 35h, 40h e 50h – Solo Silty Loam, usando a difusividade (4.12),  $\Delta t = 1 s$  e  $\Delta x = 1 cm$ .

obtido por regressão linear para dados do tijolo e  $C_0$  ajustado para os dois primeiros resultados experimentais. Pode-se observar os resultados para esta expressão de difusividade na figura 4.4.

Para a segunda expressão da difusividade fracionária apresentada por GEROLYMATOU; VARDOULAKIS; HILFER (2006)

$$D_\gamma(\theta) = C_0 \left(1 - A \frac{\theta}{\theta_s}\right)^{2 - \frac{4}{\gamma}} \left[ \frac{1 - A}{A} \log \left(1 - A \frac{\theta}{\theta_s}\right) + \frac{\theta}{\theta_s} \right] \quad (4.14)$$

onde  $C_0 = 5 \times 10^{-4}$ ,  $A = 0,97$ ,  $\theta_s = 1$ ,  $\Delta t = 0,30 s$  e  $\gamma = 0,86$ . Pode-se observar os resultados para esta segunda expressão de difusividade na figura 4.5.

Observa-se nas figuras 4.4 e 4.5 que a correspondência dos resultados numéricos em relação aos experimentais é melhor nos pontos iniciais ( $x < 40 cm$ ) e para  $D_\gamma(\theta)$  (4.14) os dados perdem precisão quando se aumenta a distância ( $x > 70 cm$ ),

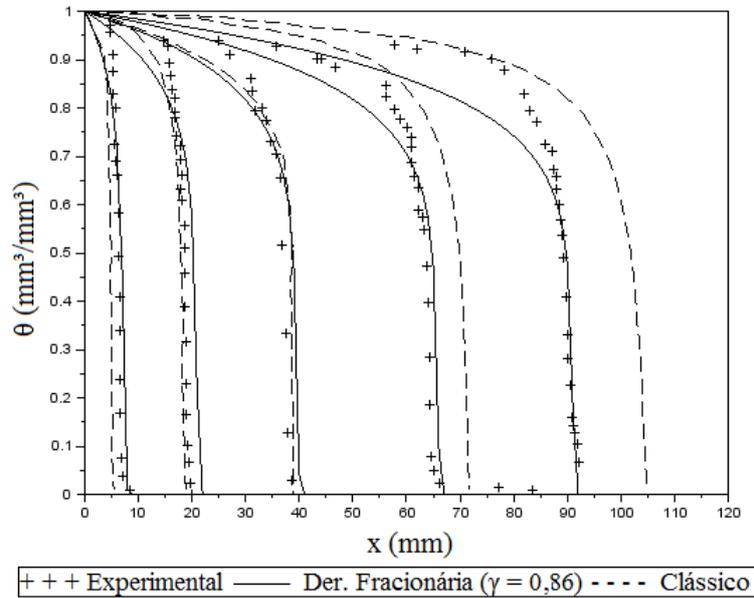


Figura 4.4: Soluções para os tempos  $450\text{ s}$ ,  $5370\text{ s}$ ,  $24210\text{ s}$ ,  $79770\text{ s}$  e  $170430\text{ s}$  – Tijolo de Silício, usando a difusividade  $D_\gamma(\theta)$  (4.13),  $\Delta t = 30\text{ s}$  e  $\Delta x = 1\text{ mm}$ .

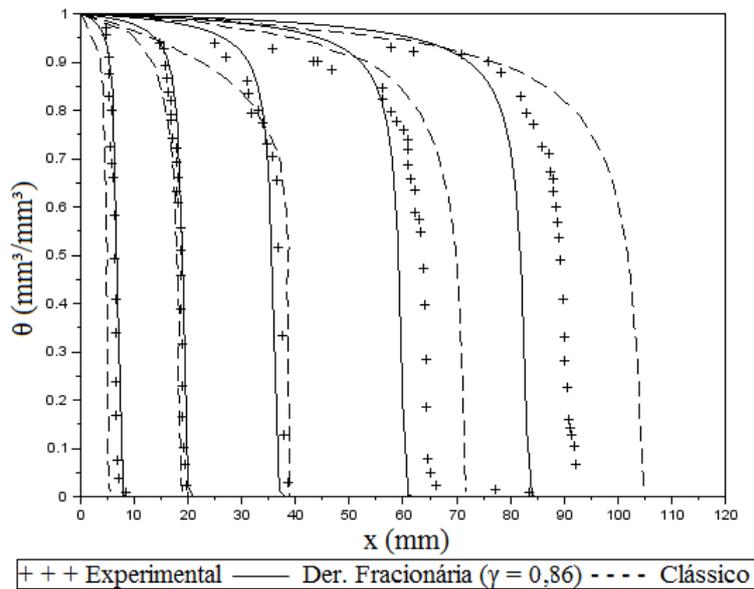


Figura 4.5: Soluções para os tempos  $450\text{ s}$ ,  $5370\text{ s}$ ,  $24210\text{ s}$ ,  $79770\text{ s}$  e  $170430\text{ s}$  – Tijolo de Silício, usando a difusividade  $D_\gamma(\theta)$  (4.14),  $\Delta t = 30\text{ s}$  e  $\Delta x = 1\text{ mm}$ .

este fato pode ser devido a inexatidão nos dados de ajuste das difusividades não completamente especificados nos trabalhos de referências. No entanto, os resultados obtidos com a derivada fracionária mostraram boa correspondência, resolvendo o problema de infiltração horizontal com difusividade anômala, mostrou resultados consistentes com dados experimentais do fenômeno e melhores que os resultados clássicos já apresentados. Portanto, o método apresentado contendo a derivada fracionária como estimativa temporal apresenta-se como uma solução numérica eficaz para o problema do fluxo de água na horizontal em meios não-saturados.

### 4.3 Resultados usando integral fracionária (E.R.I.F.)

Como forma de testar e validar o algoritmo implementado, serão apresentadas duas simulações de infiltração na horizontal, usando como meio poroso o tijolo e silício, que apresenta o fenômeno de difusividade anômala, de EL ABD; MILC-ZAREK (2004), com aplicações do modelo numérico Equação de Richards usando Integral Fracionária (E.R.I.F.) de GEROLYMATOU; VARDOULAKIS; HILFER (2006), que considera uma malha espacial igualmente distribuída.

No primeiro exemplo apresentado na figura 4.6, são apresentadas as soluções clássica, integral fracionária e dados experimental do tijolo, usando a expressão para a difusividade fracionária apresentada por GEROLYMATOU; VARDOULAKIS; HILFER (2006), equação (4.14). Usando  $C_0 = 5 \times 10^{-4}$ ,  $A = 0,97$ ,  $\theta_s = 1$  e  $\gamma = 0,86$ , sendo  $\gamma$  obtido por regressão linear dos dados experimentais de infiltração e  $C_0$  ajustado pelo deslocamento da frente de molhamento dos dois tempos iniciais de infiltração.

Foram obtidos bons resultados numéricos para os tempos iniciais da infiltração, porém com um custo computacional muito elevado, dado pelas diversas

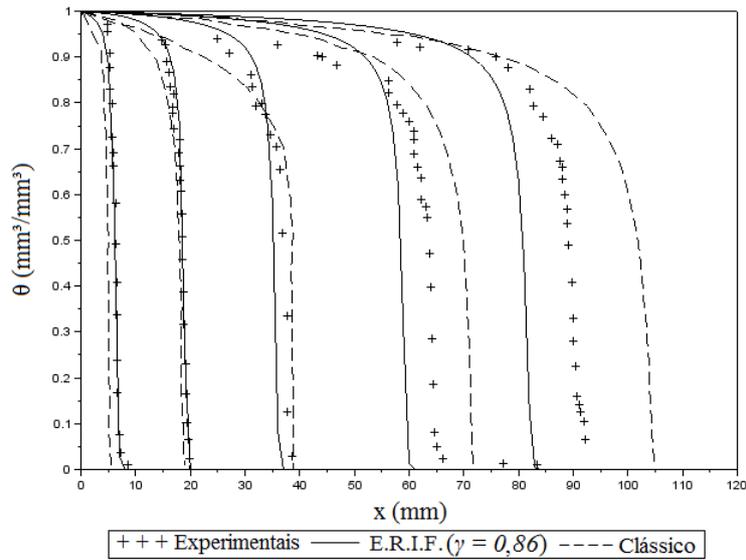


Figura 4.6: Soluções para os tempos  $450\text{ s}$ ,  $5370\text{ s}$ ,  $24210\text{ s}$ ,  $79770\text{ s}$  e  $170430\text{ s}$  – Tijolo de Silício, usando a difusividade  $D_\gamma(\theta)$  (4.14),  $\Delta t = 30\text{ s}$  e  $\Delta x = 1\text{ mm}$ .

operações presentes na determinação da difusividade e o elevado e crescente número de operações presentes na consideração de todas as soluções anteriores para aproximação dos novos resultados de simulação. Vale ressaltar que as aproximações aqui apresentadas diferem dos resultados apresentados pelo autor em sua obra, pois o mesmo não deixa claro os valores usados em seu parâmetro de ajuste  $C_0$ .

Para este segundo resultado apresentado na figura 4.7, foi usado o mesmo tijolo de silício que apresenta difusividade anômala. São apresentadas as soluções clássica, integral fracionária e experimental, usando a expressão para a difusividade  $D_\gamma(\theta)$  dada por SUN et al. (2013), equação (4.13). Usando  $C_0 = 0,93$ ,  $n = 8,2$  e  $\gamma = 0,86$ , com  $C_0$  e  $n$  ajustados considerando os dois resultados experimentais iniciais de  $450\text{ s}$  e  $5370\text{ s}$  e  $\gamma$  obtido por regressão linear. Foi usado o modelo integral fracionária de GEROLYMATOU; VARDOULAKIS; HILFER (2006), considerando um passo de tempo constante  $\Delta t$  de  $30\text{ s}$ . Vale ressaltar que devido ao menor número de operações presentes na difusividade exponencial (4.13) o custo computacional

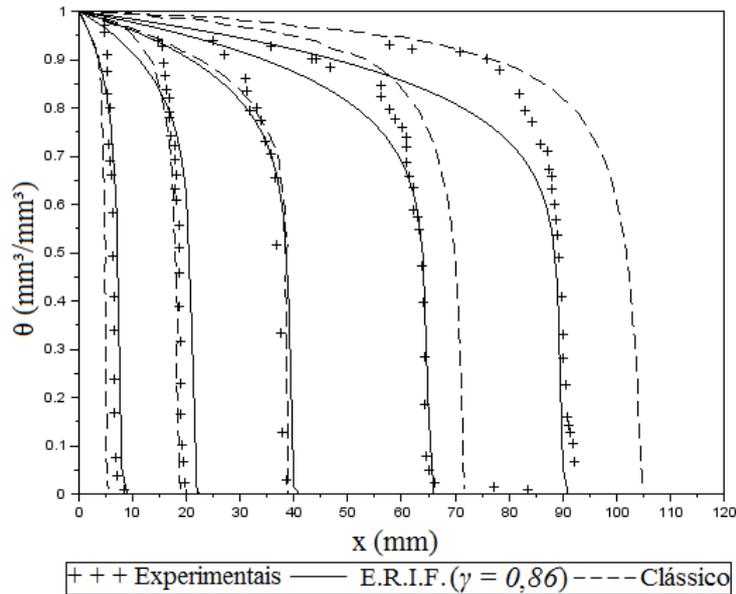


Figura 4.7: Soluções para os tempos  $450\text{ s}$ ,  $5370\text{ s}$ ,  $24210\text{ s}$ ,  $79770\text{ s}$  e  $170430\text{ s}$  – Tijolo de Silício, usando a difusividade  $D_\gamma(\theta)$  (4.13),  $\Delta t = 30\text{ s}$  e  $\Delta x = 1\text{ mm}$ .

foi menor que usando a difusividade proposta pelo autor (4.14), como mostra a tabela 4.3, entretanto ainda demandando um longo tempo e custo computacional na obtenção das aproximações numéricas.

#### 4.4 Resultados usando integral fracionária modificada (E.R.I.F.M.)

Serão apresentadas duas simulações de infiltração na horizontal, com aplicações do modelo numérico Equação de Richards usando Integral Fracionária Modificada (E.R.I.F.M.), que considera o uso do passo de tempo adaptativo.

Neste primeiro exemplo apresentado na figura 4.8 usou-se os dados do tijolo de silício estudado por EL ABD; MILCZAREK (2004). São apresentadas as soluções clássica, integral fracionária modificada e dados experimental do tijolo, usando a

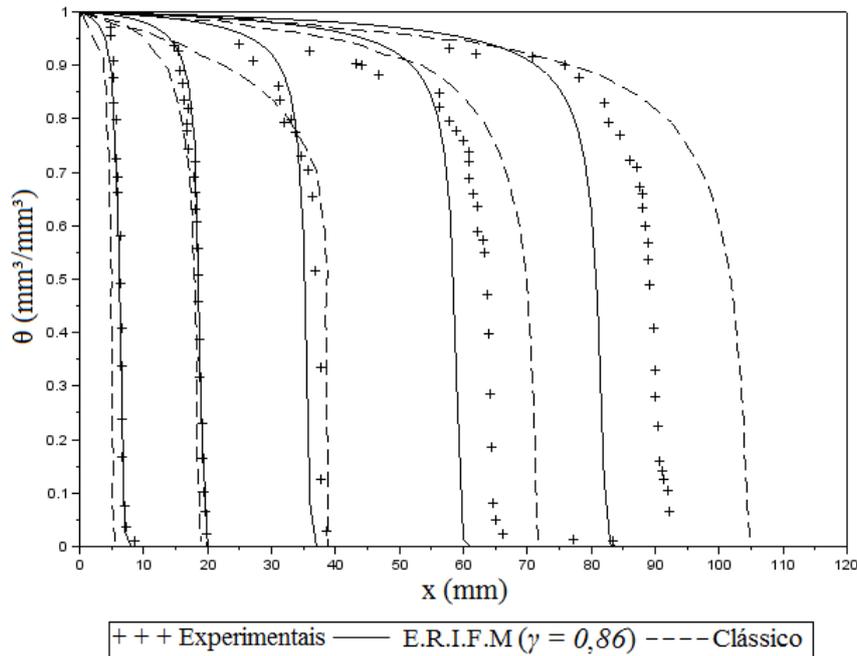


Figura 4.8: Soluções para os tempos  $450\text{ s}$ ,  $5370\text{ s}$ ,  $24210\text{ s}$ ,  $79770\text{ s}$  e  $170430\text{ s}$  – Tijolo de Silício, usando a difusividade  $D_\gamma(\theta)$  (4.14),  $\Delta t_{inicial} = 30\text{ s}$  e  $\Delta x = 1\text{ mm}$ .

expressão para a difusividade fracionária apresentada por GEROLYMATOU; VARDOULAKIS; HILFER (2006), equação (4.14). Sendo  $C_0 = 5 \times 10^{-4}$ ,  $A = 0,97$ ,  $\theta_s = 1$  e  $\gamma = 0,86$ , este último obtido por regressão linear a partir dos dados experimentais de infiltração e  $C_0$  ajustado para os dois tempos iniciais de infiltração.

Foram obtidos resultados numéricos bons para os tempos iniciais da infiltração, porém com um custo computacional ainda elevado, dado pelas diversas operações presentes na determinação da difusividade. Na figura 4.9, é possível observar o comportamento do processo de linearização da técnica de Picard para o tempo de convergência de  $170430\text{ s}$ , onde o eixo horizontal representa todo o tempo discreto de simulação e o eixo vertical apresenta os respectivos números de iterações usados em cada etapa de tempo.

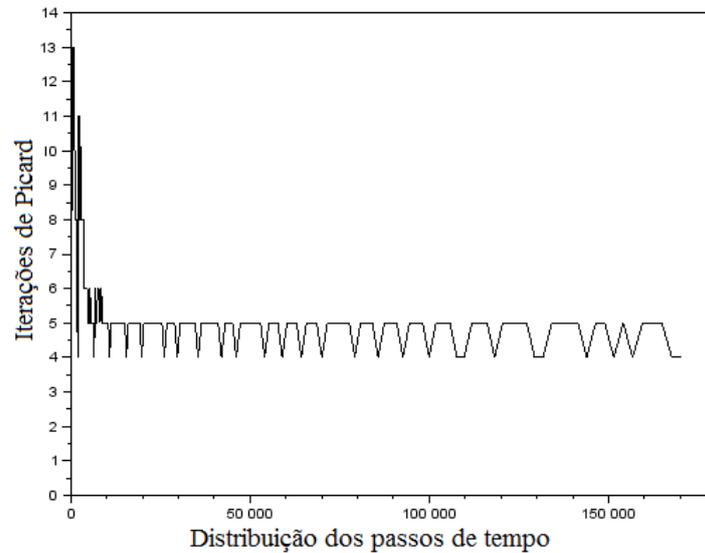


Figura 4.9: Número de iterações da técnica de Picard em cada intervalo de tempo ( $\Delta t$ ), usando a difusividade (4.14).

Neste segundo resultado apresentado na figura 4.10, usou-se o mesmo tijolo de silício que apresenta difusividade anômala. São apresentadas as soluções clássica, integral fracionária modificada e experimental, usando a expressão para a difusividade fracionária dada por SUN et al. (2013), equação (4.13). Onde  $C_0 = 0,93$ ,  $n = 8,2$  e  $\gamma = 0,86$ , com  $C_0$  e  $n$  ajustados considerando os dois resultados experimentais iniciais de 450 s, 5370 s e  $\gamma$  obtido por regressão linear.

Para as simulações apresentadas nas figuras 4.8 e 4.10, foi usado o modelo integral fracionária modificado, considerando um passo de tempo adaptativo orientado ao número de iterações da técnica de Picard, começando com um tamanho de 30 s e este sendo reajustado para o valor atual acrescido de 200 s em cada etapa de linearização, sempre que o número de iterações da técnica de Picard for menor que cinco.

Com o novo algoritmo se conseguiu o objetivo de reduzir o tempo computa-

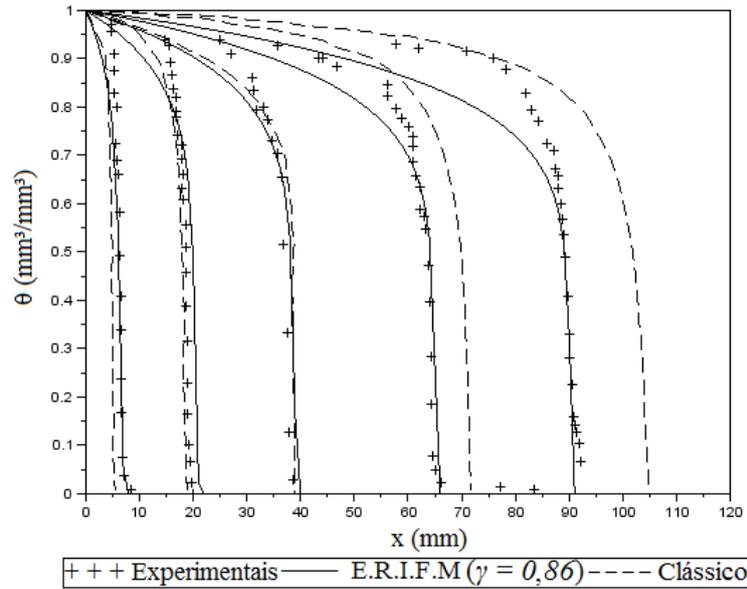


Figura 4.10: Soluções para os tempos  $450\text{ s}$ ,  $5370\text{ s}$ ,  $24210\text{ s}$ ,  $79770\text{ s}$  e  $170430\text{ s}$  – Tijolo de Silício, usando a difusividade  $D_\gamma(\theta)$  (4.13),  $\Delta t_{inicial} = 30\text{ s}$  e  $\Delta x = 1\text{ mm}$ .

cional para um tempo total de  $1,96 \times 10^2\text{ s}$  ou  $3,27\text{ min}$ , enquanto o modelo Integral fracionária, com passos de tempo constates de tamanho  $30\text{ s}$ , consumiu um tempo maior que  $2,16 \times 10^5\text{ s}$  ou  $60\text{ horas}$ .

Na figura 4.11, observa-se o comportamento do processo de linearização da técnica de Picard para o tempo de convergência de  $170430\text{ s}$ . O eixo horizontal representa o tempo de simulação e o eixo vertical apresenta os números de iterações usados em cada etapa de linearização. Observando as figuras 4.9 e 4.11, pode-se notar que os tempos iniciais de simulação, exigem mais iterações da técnica de Picard.

Como forma de avaliar os resultados obtidos, são apresentados os erros médios quadráticos (E.M.Q.) das simulações em relação aos dados experimentais do tijolo de silício de EL ABD; MILCZAREK (2004). Na tabela 4.3 constam resultados de

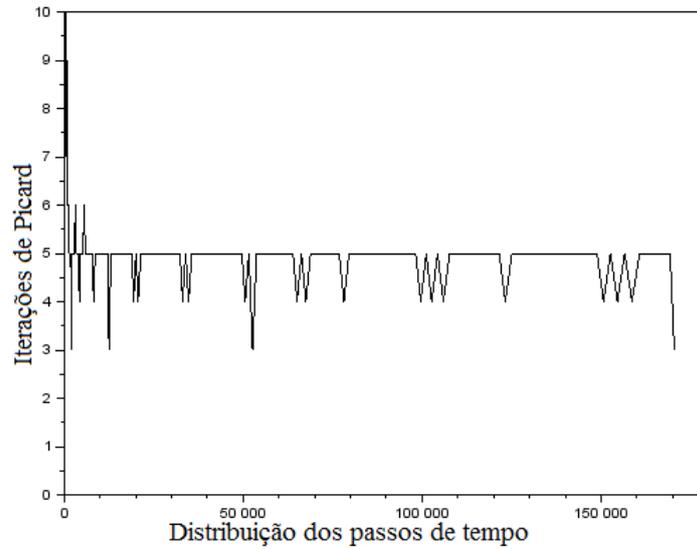


Figura 4.11: Número de iterações da técnica de Picard em cada intervalo de tempo ( $\Delta t$ ), usando a difusividade (4.13).

tempo de convergência e erros médios quadráticos, para três tempos de infiltração 450 s, 5370 s e 24210 s avaliados para os três modelos numéricos, E.R.D.F., E.R.I.F. e E.R.I.F.M., em todos com as duas expressões de difusividade  $D_\gamma(\theta)$  apresentadas em (4.14) e (4.13).

Nota-se que o tempo de simulação computacional é sempre muito menor em todos os casos onde foi usada a Equação de Richards com Integral Fracionária Modificada (E.R.I.F.M.) com passo de tempo adaptativo.

Para o cálculo dos erros médios quadráticos (E.M.Q.) foram comparados os resultados aproximados como os dados experimentais de infiltração e foi usada a expressão apresentada na equação (4.15), onde  $nno$  é o número total de nós na malha espacial,  $\theta_{ap(i)}$  é o valor aproximado da umidade em cada nó da malha e  $\theta_{ex(i)}$

Métodos	Tempos (s)			E.M.Q. (mm)		
	450s	5370s	24210s	450s	5370s	24210s
I.F.M. - $D_\gamma$ (4.13)	0,483	4,711	20,251	0.078	0.033	0.040
I.F. - $D_\gamma$ (4.13)	2,715	158,521	3393,248	0,033	0,048	0,058
D.F. - $D_\gamma$ (4.13)	2,873	11.827	133,746	0.034	0.049	0.059
I.F.M. - $D_\gamma$ (4.14)	22,561	136,500	488,983	0.036	0.028	0.078
I.F. - $D_\gamma$ (4.14)	39,768	2515,876	49458,009	0,025	0,023	0,062
D.F. - $D_\gamma$ (4.14)	26,430	136,299	550,739	0.024	0.025	0.060

Tabela 4.3: Resultados de tempos de convergência e erro médio quadráticos (E.M.Q.) para os tempos 450 s, 5370 s e 24210 s. (E.R.I.F.M.) aqui apresentado como (I.F.M.), (E.R.D.F.) aqui apresentado como (D.F.) e (E.R.I.F.) aqui apresentado como (I.F.). O valor da condição de parada da técnica de Picard foi  $e = 10^{-4}$  em todos os testes.

é o valor experimental da umidade em cada nó da malha.

$$EMQ = \sqrt{\frac{\sum_1^{nno} (\theta_{ap(i)} - \theta_{ex(i)})^2}{nno}} \quad (4.15)$$

## 5 CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

Este trabalho apresentou um levantamento e estudo numérico unidimensional do processo de infiltração de água em meio poroso, descrito pela equação de Richards. Foi usado o Método das Diferenças Finitas e Cálculos fracionários.

Na abordagem do problema vertical foi reproduzido um esquema numérico de KUMAR (1998), onde ajustando um parâmetro  $a$  é possível se ter os seguintes esquema numéricos: para  $a = 0$  esquema explícito, para  $a = 0,5$  esquema centrado de Crank-Nicolson e para  $a = 1$  esquema implícito.

Como resultado da abordagem na direção vertical, foi realizado um experimento numérico onde foram mostrados resultados para o problema de infiltração de água em um solo do tipo areia. Esta simulação mostra a grande não linearidade do problema físico, pois o processo de infiltração ocorre rapidamente e o solo passa de um estado de praticamente seco, para o estado de completamente encharcado em segundos. Na tabela 2.1 e na figura 2.2 foram apresentados os perfis de conteúdos de água aproximados com o esquema explícito, centrado de Crank-Nicolson e implícito, sendo ambos comparados com os resultados de Philip nos tempos de  $t = 0,1 h$ ,  $0,2 h$  e  $0,8 h$  respectivamente. Em todos os casos a taxa de avanço da frente de molhamento foi particularmente bem descrita. Todos os esquemas numéricos apresentaram resultados comparáveis que não são significativamente diferentes das soluções semi-analíticas de Philip. Foi observado que o esquema explícito apresentou melhores resultados com os perfis de umidades de Philip em comparação com os esquemas implícitos e o centrado de Crank-Nicolson. Entretanto, o esquema implícito é preferível em vista da estabilidade e da possibilidade de uso de um passo de tempo maior, tornando o custo computacional baixo.

A tabela 2.2 apresenta evidências de que a equação de Richards não é geral o suficiente para representar fielmente o fenômeno de infiltração de água em todos os tipos de meios porosos, em especial na infiltração horizontal. Neste trabalho foram reproduzidas as soluções para este tipo de problema usando a derivada de ordem fracionária de PACHEPSKY; TIMLIN; RAWLS (2003) e usando a integral de ordem fracionária de GEROLYMATOU; VARDOULAKIS; HILFER (2006), porém ambos os métodos numéricos apresentam baixo desempenho e elevado custo computacional. A principal contribuição deste trabalho foi a modificação do modelo integral fracionária, propondo o uso de uma malha numérica temporal não igualmente espaçada, proporcionando o uso de um passo de tempo adaptativo que contribuiu com melhor desempenho, custo computacional e resultados acurados em comparação com os modelos derivada e integral fracionária, como mostrado na tabela 4.3.

Como resultados da abordagem na direção horizontal, empregou-se o uso cálculos fracionários usando os métodos de derivada fracionária, integral fracionária e integral fracionária modificada com passo de tempo adaptativo, aplicados em um tijolo de silício estudado por EL ABD; MILCZAREK (2004), que apresenta o fenômeno de difusividade anômala. Foram apresentadas as soluções clássica, integral fracionária, derivada fracionária, integral fracionária modificada e dados experimental do tijolo, usando duas diferentes expressões para a difusividade fracionária uma dada por GEROLYMATOU; VARDOULAKIS; HILFER (2006) e outra dada por SUN et al. (2013). A tabela 4.3 mostra como o algoritmo modificado (E.R.I.F.M.), proposto neste trabalho conseguiu o objetivo de reduzir o tempo computacional para um tempo total de  $1,96 \times 10^2 s$  ou  $3,27 min$ , enquanto o modelo Integral fracionária, com passos de tempo constantes de tamanho  $30 s$ , consumiu um tempo maior que  $2,16 \times 10^5 s$  ou  $60 horas$ . Na tabela, constam resultados de tempo de convergência e erros médios quadráticos, para três tempos de infiltração  $450 s$ ,  $5370 s$  e  $24210 s$  avaliados para os três modelos numéricos, E.R.D.F., E.R.I.F. e E.R.I.F.M., em ambos as duas expressões de difusividade  $D_\gamma(\theta)$  apresentadas em (4.14) e (4.13), foram

empregadas e nota-se como o tempo de simulação computacional é sempre muito menor em todos os casos onde foi usado o esquema modificado E.R.I.F.M.

Como forma de validar os resultados apresentados com o método modificado proposto, foi apresentada uma abordagem de um caso linear na seção 4.1 e os resultados foram apresentados nas tabelas 4.1, 4.2 e na figura 4.1, mostrando acurácia e convergência nas aproximações condizentes com o problema proposto. O problema de subdifusividade (ou difusão retrograda) não é o único apresentado em meios porosos, existe também o problema de sobredifusividade como apresentado em EL ABD; MILCZAREK (2004), onde o meio apresenta dados experimentais para a frente de molhamento além de onde a solução clássica indica que deveria estar a infiltração, estes casos são propostos aqui como trabalhos futuros à serem discutidos e validados com o emprego do modelo aqui proposto.

O processo de determinação do melhor valor de  $\gamma$  para o meio poroso (que é a ordem fracionária do método), é dado por regressão linear como descrito na equação (4.11). Porém, sendo tomados os dados experimentais da frente de molhamento de dois em dois ou de três em três obtém-se valores diferentes para  $\gamma$ , fato que indica uma possível variação deste parâmetro dentro da simulação. Uma proposta de trabalho futuro seria um modelo contemplando o  $\gamma$  adaptativo, de forma a verificar se a variação deste termo de fato implica em melhores resultados numéricos para o problema físico.

O processo de construção das soluções numéricas usando cálculos fracionários envolvem uma quantidade crescente de termos proporcionais ao tempo de simulação, uma proposta de trabalho futuro seria também o estudo e implementação de um truncamento do método para um determinado tempo de simulação, ou mesmo uma maneira diferente de estimar os termos de menor influência nos métodos, sem demandar um custo computacional elevado.

## REFERÊNCIAS

ALLEN, M. B.; MURPHY, C. L. A finite-element collocation method for variably saturated flow in two space dimensions. **Water Resources Research**, Washington, v. 22, n. 11, p. 1537–1542, 1986.

BRAAKSMA, B. L. J. Asymptotic expansions and analytic continuations for a class of Barnes-integrals. **Compositio Mathematica**, Dordrecht, v. 15, p. 239–341, 1962-1964.

BUCKINGHAM, E. **Studies on the movement of soil moisture**. Washington: Government Printing Office, 1907.

CELIA, M. A.; AHUJA, L. R.; PINDER, G. F. Orthogonal collocation and alternating-direction procedures for unsaturated flow problems. **Advances in Water Resources**, Southampton, v. 10, n. 4, p. 178 – 187, 1987.

CELIA, M. A.; BOULOUTAS, E. T.; ZARBA, R. L. A general mass-conservative numerical solution for the unsaturated flow equation. **Water Resources Research**, Washington, v. 26, n. 7, p. 1483–1496, 1990.

COOLEY, R. L. Some new procedures for numerical solution of variably saturated flow problems. **Water Resources Research**, Washington, v. 19, n. 5, p. 1271–1285, 1983.

DIETHELM, K. An algorithm for the numerical solution of differential equations of fractional order. **Electronic Transactions on Numerical Analysis**, [S.l.], v. 5, p. 1–6, 1997.

DIETHELM, K. Efficient solution of multi-term fractional differential equations using P(EC)mE methods. **Computing**, [S.l.], v. 71, n. 4, p. 305–319, 2003.

DIETHELM, K. **The analysis of fractional differential equations:** an application-oriented exposition using differential operators of caputo type. Berlin: Springer, 2010. (Lecture Notes in Mathematics, 2004).

DIETHELM, K.; FREED, A. D. On the solution of nonlinear fractional-order differential equations used in the modeling of viscoplasticity. In: KEIL, F. et al. (Ed.). **Scientific Computing in Chemical Engineering II:** computational fluid dynamics, reaction engineering, and molecular properties. Berlin: Springer, 1999. p. 217–224.

EL ABD, A. E.-G.; MILCZAREK, J. J. Neutron radiography study of water absorption in porous building materials: anomalous diffusion analysis. **Journal of Physics D: Applied Physics**, London, v. 37, n. 16, p. 2305–2313, 2004.

EVANGELIDES, C.; ARAMPATZIS, G.; TZIMOPOULOS, C. Estimation of soil moisture profile and diffusivity using simple laboratory procedures. **Soil science**, Baltimore, v. 175, n. 3, p. 118–127, 2010.

FERGUSON, H.; GARDNER, W. H. Diffusion theory applied to water flow data obtained using gamma ray absorption. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v. 27, n. 3, p. 243–246, 1963.

FREEZE, R. A. Three-dimensional, transient, saturated-unsaturated flow in a groundwater basin. **Water Resources Research**, Washington, v. 7, n. 2, p. 347–366, 1971.

GANTI, V. et al. Normal and anomalous diffusion of gravel tracer particles in rivers. **Journal of Geophysical Research: Earth Surface**, Hoboken, v. 115, n. F2, p. 1–12, 2010.

GARDNER, W. Some steady-state solutions of the unsaturated moisture flow equation with application to evaporation from a water table. **Soil Science**, Baltimore, v. 85, p. 228–232, 1958.

GEROLYMATOU, E.; VARDOULAKIS, I.; HILFER, R. Modelling infiltration by means of a nonlinear fractional diffusion model. **Journal of Physics D: Applied Physics**, London, v. 39, n. 18, p. 4104–4110, 2006.

GUERRINI, I. A.; SWARTZENDRUBER, D. Fractal characteristics of the horizontal movement of water in soils. **Fractals**, [S.l.], v. 2, n. 03, p. 465–468, 1994.

HAIER, E.; NØRSETT, S.; WANNER, G. **Solving Ordinary Differential Equations I: nonstiff problems**. Berlin: Springer, 1993. (Springer Series in Computational Mathematics, v. 8).

HAIRER, E.; WANNER, G. **Solving Ordinary Differential Equations II: stiff and differential-algebraic problems**. Berlin: Springer, 1991. (Springer Series in Computational Mathematics, v. 1).

HAVERKAMP, R. et al. A comparison of numerical simulation models for one-dimensional infiltration. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v. 41, n. 2, p. 285–294, 1977.

HAVERKAMP, R.; VAUCLIN, M. A note on estimating finite difference interblock hydraulic conductivity values for transient unsaturated flow problems. **Water Resources Research**, Washington, v. 15, n. 1, p. 181–187, 1979.

HAYHOE, H. Study of the relative efficiency of finite difference and Galerkin techniques for modeling soil-water transfer. **Water Resources Research**, Washington, v. 14, n. 1, p. 97–102, 1978.

HORNUNG, U.; MESSING, W. Truncation errors in the numerical solution of horizontal diffusion in saturated/unsaturated media. **Advances in Water Resources**, Southampton, v. 6, n. 3, p. 165 – 168, 1983.

HUYAKORN, P. S.; THOMAS, S. D.; THOMPSON, B. M. Techniques for making finite elements competitive in modeling flow in variably saturated porous media. **Water Resources Research**, Washington, v. 20, n. 8, p. 1099–1115, 1984.

KUMAR, C. P. A numerical simulation model for one-dimensional infiltration. **ISH Journal of Hydraulic Engineering**, New York, v. 4, n. 1, p. 5–15, 1998.

LIBARDI, P. L. **Dinâmica da água no solo**. São Paulo: Edusp, 2012. (Acadêmica, v. 61).

LINZ, P. **Analytical and numerical methods for Volterra equations**. Philadelphia: SIAM, 1985. (SIAM Studies in Applied Mathematics, v. 7).

LIU, C. et al. Use of the generalized integral transform method for solving equations of solute transport in porous media. **Advances in Water Resources**, Southampton, v. 23, n. 5, p. 483–492, 2000.

LUBICH, C. Discretized fractional calculus. **SIAM Journal Mathematical Analysis**, Philadelphia, v. 17, n. 3, p. 704–719, 1986.

MÄNNICH, M. **Desenvolvimento de soluções analíticas e numéricas da equação de Richards**. 2008. Dissertação de Mestrado — (Engenharia de Recursos Hídricos e Ambiental)-Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2008. 115 f.

MILLER, E.; MILLER, R. Physical theory for capillary flow phenomena. **Journal of Applied Physics**, New York, v. 27, n. 4, p. 324–332, 1956.

MILLY, P. C. D. Advances in modeling of water in the unsaturated zone. **Transport in Porous Media**, Dordrecht, v. 3, n. 5, p. 491–514, 1988.

NARASIMHAN, T. N.; WI-THERSPOON, P. A. An integrated finite difference method for analyzing fluid flow in porous media. **Water Resources Research**, Washington, v. 12, n. 1, p. 57–64, 1976.

NEUMAN, S. P. Saturated-unsaturated seepage by finite elements. **Journal of the Hydraulics Division**, New York, v. 99, p. 2233–2250, 1973.

NICOLAU, D. V.; HANCOCK, J. F.; BURRAGE, K. Sources of anomalous diffusion on cell membranes: a monte carlo study. **Biophysical Journal**, New York, v. 92, n. 6, p. 1975–1987, 2007.

NIELSEN, D. R.; BIGGAR, J. W.; DAVIDSON, J. M. Experimental consideration of diffusion analysis in unsaturated flow problems. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v. 26, n. 2, p. 107–111, 1962.

NIELSEN, D. R.; VAN GENUCHTEN, M. T.; BIGGAR, J. W. Water flow and solute transport processes in the unsaturated zone. **Water Resources Research**, Washington, v. 22, n. 9S, p. 89S–108S, 1986.

PACHEPSKY, Y.; TIMLIN, D. Water transport in soils as in fractal media. **Journal of Hydrology**, Amsterdam, v. 204, n. 1, p. 98–107, 1998.

PACHEPSKY, Y.; TIMLIN, D.; RAWLS, W. Generalized Richards' equation to simulate water transport in unsaturated soils. **Journal of Hydrology**, Amsterdam, v. 272, n. 1–4, p. 3–13, 2003.

PHILIP, J. Numerical solution of equations of the diffusion type with diffusivity concentration-dependent. **Transactions of the Faraday Society**, London, v. 51, p. 885–892, 1955.

PHILIP, J. The theory of infiltration: 1. the infiltration equation and its solution. **Soil Science**, Baltimore, v. 83, n. 5, p. 345–358, 1957.

PHILIP, J. The theory of infiltration: 6 effect of water depth over soil. **Soil Science**, Baltimore, v. 85, n. 5, p. 278–286, 1958.

PŁOCINICZAK, Ł.; OKRASIŃSKA, H. Approximate self-similar solutions to a nonlinear diffusion equation with time-fractional derivative. **Physica D: Nonlinear Phenomena**, Amsterdam, v. 261, p. 85–91, 2013.

RAATS, P. A. Developments in soil–water physics since the mid 1960s. **Geoderma**, Amsterdam, v. 100, n. 3–4, p. 355–387, 2001.

RAWLINS, S. L.; GARDNER, W. H. A test of the validity of the diffusion equation for unsaturated flow of soil water. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v. 27, n. 5, p. 507–511, 1963.

RICHARDS, L. A. Capillary conduction of liquids through porous mediums. **Journal of Applied Physics**, New York, v. 1, n. 5, p. 318–333, 1931.

SHORT, D.; DAWES, W. R.; WHITE, I. The practicability of using Richards' equation for general purpose soil-water dynamics models. **Environment International**, New York, v. 21, n. 5, p. 723 – 730, 1995.

SRIVASTAVA, R.; YEH, T.-C. J. Analytical solutions for one-dimensional, transient infiltration toward the water table in homogeneous and layered soils. **Water Resources Research**, Washington, v. 27, n. 5, p. 753–762, 1991.

SUN, H. et al. A fractal Richards' equation to capture the non-Boltzmann scaling of water transport in unsaturated media. **Advances in Water Resources**, Southampton, v. 52, p. 292–295, 2013.

VAN GENUCHTEN, M. T. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v. 44, n. 5, p. 892–898, 1980.

VASCONCELLOS, C. A. B. **Simulação numérica de escoamentos em meios porosos não saturados**. 2001. Dissertação de Mestrado — Instituto Militar de Engenharia, Rio de Janeiro, 2001. 134-f.

WANG, S.; XU, M.; LI, X. Green's function of time fractional diffusion equation and its applications in fractional quantum mechanics. **Nonlinear Analysis: Real World Applications**, Oxford, v. 10, n. 2, p. 1081–1086, 2009.

WARRICK, A. W. Analytical solutions to the one-dimensional linearized moisture flow equation for arbitrary input. **Soil Science**, Baltimore, v. 120, p. 79–84, 1975.

ZAIDEL, J.; RUSSO, D. Estimation of finite difference interblock conductivities for simulation of infiltration into initially dry soils. **Water Resources Research**, Washington, v. 28, n. 9, p. 2285–2295, 1992.

ZARBA, R. L. **A numerical investigation of unsaturated flow**. 1988. Dissertação de Mestrado — (Civil Engineering)-Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, 1988.