



## APROXIMAÇÃO DE UMA SOLUÇÃO PARA A EQUAÇÃO DE RICHARDS-2D PELO MÉTODO DE VOLUMES FINITOS COM O AUXÍLIO DOS ALGORITMOS DE PICARD-KRYLOV

*APPROACHING A SOLUTION FOR RICHARDS-2D EQUATION BY FINITE VOLUMES METHOD WITH THE AID OF PICARD-KRYLOV ALGORITHMS*

Marcelo Xavier Guterres<sup>1</sup>; João Flávio Vieira Vasconcellos<sup>2</sup>; Antônio José da Silva Neto<sup>2</sup>; Carla Beatriz da Luz Peralta<sup>1</sup>; Luis Gabriel Machado de Freitas Teixeira<sup>1</sup>

Artigo recebido em: 11/11/2016 e Aceito para publicação em: 19/03/2017.

DOI: <http://dx.doi.org/10.14295/ras.v31i2.28671>

**Resumo:** Este artigo propõe-se solucionar a equação de Richards pelo método de volumes finitos em duas dimensões empregando o método de Picard com maior eficiência computacional. Para tanto foram empregadas técnicas iterativas de resolução de sistemas lineares baseadas do espaço de Krylov com matrizes pré-condicionadoras, concomitantemente com auxílio da biblioteca numérica *Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation* (PETSc). Os resultados indicam que quando se resolve a equação de Richards considerando-se o método de PICARD-KRYLOV, não importando o modelo de avaliação do solo, a melhor combinação para resolução dos sistemas lineares é KSPBCGS×PCSOR. Por outro lado, quando se utiliza as equações de van Genuchten (1980) opta-se pela combinação KSPCG×PCSOR. Por fim, o artigo traz contribuições na área da matemática, especificamente em métodos numéricos aplicados na resolução de problemas de fluxo em meios porosos não saturados. Em particular a modelagem proposta também poderá auxiliar no entendimento da recarga de aquíferos subterrâneos

**Palavras-chaves:** Fluidodinâmica computacional. Equação de Richards. Método dos volumes finitos. Picard-Krylov. Meios porosos não saturados.

**Abstract:** This research evaluates the Richards equation through the method of finite volumes in two dimensions making use of the Picard's method with the most computational efficiency. To do so it were used iterative resolution techniques of linear systems based in the space of Krylov with preconditioners matrices, together with the help of the numerical library *Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation* (PETSc). The results show that when solving the Richards equation making use of the method PICARD-KRYLOV, it does not matter the model of soil in evaluation, the best combination to the resolution of the linear systems are KSPBCGS×PCSOR. However, when making use of the equations of van Genuchten (1980) we choose the combination KSPCG×PCSOR. Lastly, the study makes contributions to the field of mathematics, specifically to the methods of applied numbers in the resolution of flow problems in the unsaturated porous media. In particular the proposed modeling might also help in the understanding of the recharge of groundwater aquifers.

**Keywords:** Computational fluid dynamics. Richards' Equation. Finite volumes method. Picard-Krylov. Unsaturated Porous Media.

## 1 INTRODUÇÃO

Os pesquisadores da ciência dos solos há muito tempo se esforçam em descrever o fluxo de fluidos na zona saturada e não saturada de um meio poroso, tendo como

referencial as leis da física e da matemática.

Neste tema, uma das contribuições mais notáveis foi dada por Richards (1931) ao fornecer uma equação diferencial parcial (EDP) para descrever o fluxo de água subterrânea em solo não saturado. Uma forma clássica de apresentação da equação de

<sup>1</sup> Universidade Federal do Pampa. Curso de Engenharia de Produção. E-mails: ([m.guterres@unipampa.edu.br](mailto:m.guterres@unipampa.edu.br), [carlaperalta@unipampa.edu.br](mailto:carlaperalta@unipampa.edu.br), [luisgmdft@gmail.com](mailto:luisgmdft@gmail.com))

<sup>2</sup> Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Instituto Politécnico. E-mails: ([jflavio@iprj.uerj.br](mailto:jflavio@iprj.uerj.br), [ajsneto@iprj.uerj.br](mailto:ajsneto@iprj.uerj.br))

Richards é dada pela equação (1), chamada de forma mista (CELIA *et al.*, 1990).

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_y(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) - \frac{\partial K_z(\psi)}{\partial z} \quad (1)$$

no qual  $x$ ,  $y$  e  $z$  são as coordenadas espaciais [L], sendo que  $z$  é orientada no sentido de cima para baixo, a partir de *Datum* referenciado na superfície superior do solo;  $t$  o tempo [T];  $\theta$  o conteúdo de umidade volumétrico [ $L^3/L^3$ ];  $\psi$  a carga devido à pressão [L];  $K_x$ ,  $K_y$  e  $K_z$  as condutividades hidráulicas não saturadas nas respectivas direções espaciais [L/T]. É importante destacar que a carga hidráulica total no solo é  $h = \psi + z$ . Sendo que  $h$  é positivo se o nível estiver acima do plano de referência padrão (*Datum*), que por convenção é a camada superior do solo, e caso contrário, é negativo. Visto que neste trabalho considerou-se a coordenada de posição  $z$  orientada para baixo, logo se faz necessário que  $h$  seja igual a  $\psi - z$ .

Em razão de (1) ser não linear, a sua resolução analítica é uma tarefa matemática de difícil alcance, a menos que as relações funcionais da condutividade hidráulica com a umidade do solo sejam linearizadas, o que pode levar a uma descrição não acurada do fenômeno em análise. Portanto, aproximações numéricas são tipicamente usadas para este caso. De maneira geral, os métodos de aproximação mais utilizados são: diferenças finitas (MDF), elementos finitos (MEF) e volumes finitos (MVF).

Maliska (2010) destaca que o emprego do MDF, MEF e o MVF para aproximar a solução de uma EDP originam sistemas de equações algébricas lineares ou não lineares. Sendo que a resolução dos mesmos consome em torno de 60% a 70% do tempo necessário para obter a solução do problema em avaliação. Neste sentido, quando se considera a equação de Richards (a equação (1)), a solução da equação discretizada linearizada, obtida pelo emprego de algum método de aproximação de EDPs, necessariamente implica a resolução de um sistema de equações, que pode ser representado inicialmente pela equação algébrica (2).

$$A(\psi^m) \psi^{m+1} = b(\psi^m) \quad (2)$$

em que  $A(\psi) \in \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N$ ,  $b(\psi)$  e  $\psi \in \mathbb{R}^N$ ;  $N$  é a dimensão dos vetores e  $m$  o nível de iteração. Observa-se que  $A(\psi)$  e  $b(\psi)$  são funções matriciais da incógnita  $\psi$  a ser determinada. Uma vez que a matriz  $A(\psi)$  precisa ser invertida diversas vezes durante o processo de obtenção da solução, conseqüentemente, solucionadores eficientes devem ser empregados.

Em suma, visto que a resolução de (2) é a parte que consome o maior tempo de processamento, alguns procedimentos iterativos devem ser adotados. Miller *et al.* (2013) expõem que as técnicas iterativas de resolução de sistemas de equações algébricas lineares do subespaço de Krylov (KSP) combinados com matrizes pré-condicionadoras (PC) são mais eficientes que os métodos diretos tradicionais.

Portanto, o objetivo principal do artigo é responder: *Qual o método de resolução de sistemas de equações algébricas lineares do subespaço de Krylov pré-condicionado que, acoplado as técnicas de Picard, é mais eficiente numericamente e computacionalmente na solução da equação diferencial parcial que modela a predição de fluxo de água em meios não saturados?*

Finalmente, ainda de acordo com Miller *et al.* (2013), a literatura registra que nos últimos 50 anos de pesquisa ocorreram avanços notáveis com a sofisticação nas formulações matemáticas dos modelos mecanicistas de fluxo em meios porosos e dos métodos utilizados para aproximar a solução em tais modelos. Alguns artigos relevantes nesta linha são: Celia *et al.* (1990), Bevilacqua *et al.* (2011), Voullième *et al.* (2013) e Bergamaschi *et al.* (2013).

No entanto, é essencial destacar que de forma distinta aos autores mencionados, neste trabalho empregaram-se técnicas iterativas de resolução de sistemas de equações algébricas

lineares do subespaço de Krylov com matrizes pré-condicionadoras. Este fato possibilitou obter novas contribuições no que diz respeito à modelagem do fluxo na zona saturada e não saturada de um meio poroso. Para tanto, fez-se uso da biblioteca numérica PETSc (*Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation*) (BALAY *et al.*, 2015), que dispõe bibliotecas que permitem a resolução de sistemas lineares e não lineares com o emprego de métodos do subespaço de Krylov combinados com vários pré-condicionadores.

## 2 MÉTODO DE APROXIMAÇÃO DOS VOLUMES FINITOS

Esta seção apresenta o processo de discretização da equação de Richards bidimensional pelo Método dos Volumes Finitos (MVF). Para tanto, considerou-se a equação (3), na variável  $\psi$ .

$$C(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( K(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) - \frac{\partial K(\psi)}{\partial z} \quad (3)$$

em que  $C(\psi)$  é capacidade hidráulica específica, definida pela relação  $C(\psi) = \frac{d\theta}{d\psi}$  [ $1/L$ ]. No que diz respeito à avaliação da função da condutividade hidráulica  $K = f(\psi)$ , da função do conteúdo de umidade

volumétrico  $\theta = g(\psi)$  e da relação  $C = C(\psi)$ , classicamente são feitas pelas equações de van Genuchten (1980), as equações (4) a (6).

$$\theta(\psi) = \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{[1 + (\alpha|\psi|)^n]^m} \quad (4)$$

$$K(\psi) = K_s \frac{(1 - (\alpha|\psi|)^{n-1} [1 + (\alpha|\psi|)^n]^{-m})^2}{[1 + (\alpha|\psi|)^n]^{m/2}} \quad (5)$$

$$C(\psi) = \frac{\partial \theta}{\partial \psi} = (-m n \alpha^n) \left[ \frac{\theta_s - \theta_r}{(1 + \alpha^n |\psi|^n)^{m+1}} \right] |\psi|^n \psi^{-1} \quad (6)$$

em que  $\theta_s$  é o teor de umidade volumétrico na saturação [ $L^3/L^3$ ];  $K_s$  a condutividade hidráulica saturada [ $L/T$ ];  $\theta_r$  é o teor de umidade volumétrico residual [ $L^3/L^3$ ];  $\alpha$  é a função densidade do tamanho dos poros [ $L^{-1}$ ];  $m, n$  são parâmetros adimensionais do

solo, com  $m = 1 - \frac{1}{n}$ . De maneira similar, outro modelo de relações constitutivas que caracterizam as propriedades do solo são as expressões propostas por Haverkamp *et al.* (1977), as equações (7) a (9)

$$\theta(\psi) = \theta_r + \frac{B(\theta_s - \theta_r)}{B + |\psi|^\lambda} \quad (7)$$

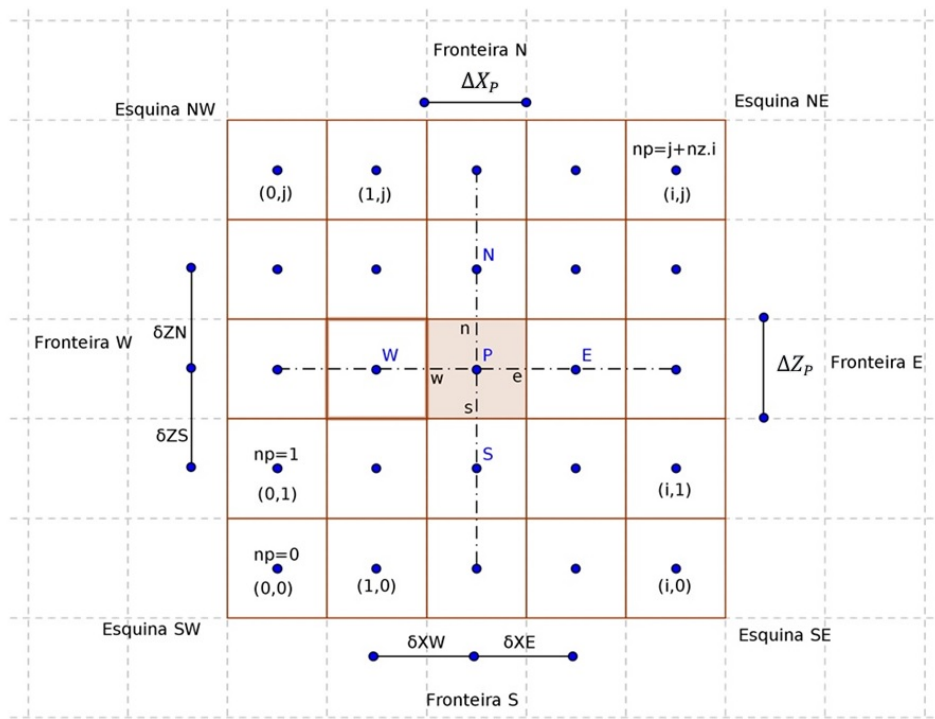
$$K(\psi) = K_s \frac{A}{A + |\psi|^\phi} \quad (8)$$

$$C(\psi) = \frac{d\theta(\ln(\psi))}{d\psi} = - \frac{B(\theta_s - \theta_r)\lambda(\ln|\psi|)^{\lambda-1} \psi^{-1}}{(B + (\ln|\psi|)^\lambda)^2} \quad (9)$$

em que  $A$ ,  $B$  e  $\phi$  são parâmetros adimensionais do solo; e  $\lambda$  é um índice relacionado a distribuição dos poros do solo [L].

Além disso, para auxiliar o entendimento do processo de obtenção das equações aproximadas pelo MVF é apresentada a malha computacional de discretização do domínio físico, a figura 1, com suas respectivas simbologias. No qual  $P$ ,  $S$ ,  $N$ ,  $W$  e  $E$  são os nós da malha

computacional (centroide do volume de controle);  $w$ ,  $e$ ,  $s$  e  $n$  são as interfaces do volume de controle em  $P$ ;  $n_x$  e  $n_z$  são os números totais de volumes de controle na direção  $x$  e  $z$ , respectivamente;  $\Delta Z_P$  e  $\Delta X_P$  são distâncias entre as interfaces (tamanho do volume de controle);  $np = i \times n_z + j$ , é um número que indica qual o volume de controle que está sendo integrado (ordenação), para  $i = 0, 1, \dots, n_x - 1$  e  $j = 0, 1, \dots, n_z - 1$ .



**Figura 1** - Malha computacional  
**Fonte:** Guterres (2013, p. 74)

Inicialmente integra-se cada lado da equação governante (3), sobre cada um dos volumes de controle para os volumes

internos da malha computacional da figura 1. Ou seja, para  $1 \leq i < n_x - 1$  e  $1 \leq j < n_z - 1$ , aplica-se a equação (10).

$$\int_t^{t+1} \int_s^n \int_w^e C(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial t} dx dz dt = \int_t^{t+1} \int_s^n \int_w^e \frac{\partial \psi}{\partial x} \left( K(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) dx dz dt + \int_t^{t+1} \int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial z} \left( K(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) dx dz dt - \int_t^{t+1} \int_s^n \int_w^e \frac{\partial K(\psi)}{\partial z} dx dz dt \quad (10)$$

O resultado da integração é dado pela equação (11) (GUTERRES, 2013, eq. 101, p 77).

A equação (11) pode ser simplificada na equação (12).

$$\begin{aligned}
& - \left( \frac{K_s^{t+1}(\psi_s^{t+1})}{\Delta Z_P \delta Z_S} \right) \psi_s^{t+1} - \left( \frac{K_w^{t+1}(\psi_w^{t+1})}{\Delta X_P \delta X_W} \right) \psi_w^{t+1} + \left( \frac{K_s^{t+1}(\psi_s^{t+1})}{\Delta Z_P \delta Z_S} + \frac{K_w^{t+1}(\psi_w^{t+1})}{\Delta X_P \delta X_W} + \right. \\
& \left. \frac{K_e^{t+1}(\psi_e^{t+1})}{\Delta X_P \delta X_E} + \frac{K_n^{t+1}(\psi_n^{t+1})}{\Delta Z_P \delta Z_N} + \frac{C_p^{t+1}(\psi_p^{t+1})}{\Delta t} \right) \psi_p^{t+1} - \left( \frac{K_e^{t+1}(\psi_e^{t+1})}{\Delta X_P \delta X_E} \right) \psi_e^{t+1} - \\
& - \left( \frac{K_n^{t+1}(\psi_n^{t+1})}{\Delta Z_P \delta Z_N} \right) \psi_n^{t+1} = \frac{C_p^{t+1}(\psi_p^{t+1}) \psi_p^t}{\Delta t} - \frac{K_n^{t+1}(\psi_n^{t+1})}{\Delta Z_P} + \frac{K_s^{t+1}(\psi_s^{t+1})}{\Delta Z_P}
\end{aligned} \tag{11}$$

$$-A_S \psi_s^{t+1} - A_W \psi_w^{t+1} + A_P \psi_p^{t+1} - A_E \psi_e^{t+1} - A_N \psi_n^{t+1} = S_p \tag{12}$$

Cujas expressões dos coeficientes no quadro 1.  $A_S, A_N, A_P, A_W, A_E$  e  $S_p$  estão destacados

$A_S$	$\frac{K_s^{t+1}(\psi_s^{t+1})}{\Delta Z_P \delta Z_S}$	$A_E$	$\frac{K_e^{t+1}(\psi_e^{t+1})}{\Delta X_P \delta X_E}$	$A_P$	$A_S + A_W + A_E + A_N + \frac{C_p^{t+1}(\psi_p^{t+1})}{\Delta t}$
$A_W$	$\frac{K_w^{t+1}(\psi_w^{t+1})}{\Delta X_P \delta X_W}$	$A_N$	$\frac{K_n^{t+1}(\psi_n^{t+1})}{\Delta Z_P \delta Z_N}$	$S_p$	$\frac{C_p^{t+1}(\psi_p^{t+1}) \psi_p^t}{\Delta t} - \frac{K_n^{t+1}(\psi_n^{t+1})}{\Delta Z_P} + \frac{K_s^{t+1}(\psi_s^{t+1})}{\Delta Z_P}$

**Quadro 1** - Coeficientes da equação (11) com referência aos volumes internos da malha computacional  
**Fonte:** Guterres (2013, p. 77).

Com relação à forma final da equação (11), dois pontos são considerados: (i) adotou-se um esquema de interpolação temporal totalmente implícito, que é incondicionalmente estável no passo temporal. Isto quer dizer que o tamanho do passo de tempo não interfere na resolução da equação diferencial, na qual a variável  $\psi$  foi avaliada em  $t + 1$ ; (ii) com relação ao cálculo das derivadas nas faces do volume de controle ( $w, e, s, n$ ), considerou-se um esquema de diferenças centrais, pois é razoável escolher uma função linear entre os pontos nodais, por meio da expansão da série de Taylor, desprezando-se os termos de segunda ordem ou superior.

A equação (11) pode ser definida como a equação algébrica discretizada do fenômeno de fluxo bidimensional de água num meio poroso não saturado. Também se ressalta que o resultado da integração dado pela equação (11) é válido para qualquer volume de controle da malha computacional da figura 1, inclusive para os volumes localizados nas fronteiras do domínio, desde que se respeitem as condições de contorno

fixadas pelo modelo matemático.

Desse modo, na sequência foram obtidas equações algébricas discretizadas para os volumes de controle localizados nas fronteiras. Destaca-se que as equações deduzidas são gerais, visto que são válidas para as condições de contorno do tipo Dirichlet, Neumann ou Robin, independentemente uma da outra.

Para tanto, considera-se que a equação (13) seja válida para os volumes de controle  $P$  localizados nas fronteiras:  $S$  com coordenadas  $1 \leq i < nx - 1$  e  $j = 0$ ,  $N$  com coordenadas  $1 \leq i < nx - 1$  e  $j = nz - 1$ ,  $W$  com coordenadas  $i = 0$  e  $1 \leq j < nz - 1$ ,  $E$  com coordenadas  $i = nx - 1$  e  $1 \leq j < nz - 1$ ,  $SW$  com coordenadas  $i = 0$  e  $j = 0$ ,  $SE$  com coordenadas  $i = nx - 1$  e  $j = 0$ ,  $NE$  com coordenadas  $i = nx - 1$  e  $j = nz - 1$  e  $NW$  com coordenadas  $i = 0$  e  $j = nz - 1$ , conforme a malha computacional da figura 1

$$a\psi'_f + b\psi_f = c \tag{13}$$

na qual  $\psi'_f$  é o valor da derivada da variável

$\psi$ ; e  $\psi_f$  é o valor prescrito da variável  $\psi$ ; sendo que  $\psi'_f$  e  $\psi_f$  são avaliadas na face  $f$  externa do volume de controle  $P$  que está

sendo integrado. Os coeficientes  $a$ ,  $b$  e  $c$  são fixados conforme o tipo de condição de contorno. O quadro 2 ilustra os possíveis valores dos coeficientes da equação (13).

Coeficientes	Dirichlet	Neumann	Robin
$a$	0	1	$\neq 0$
$b$	1	0	$\neq 0$
$c$	$cte$	$cte$	$\neq 0$

**Quadro 2** - Valores dos coeficientes  $a$ ,  $b$  e  $c$

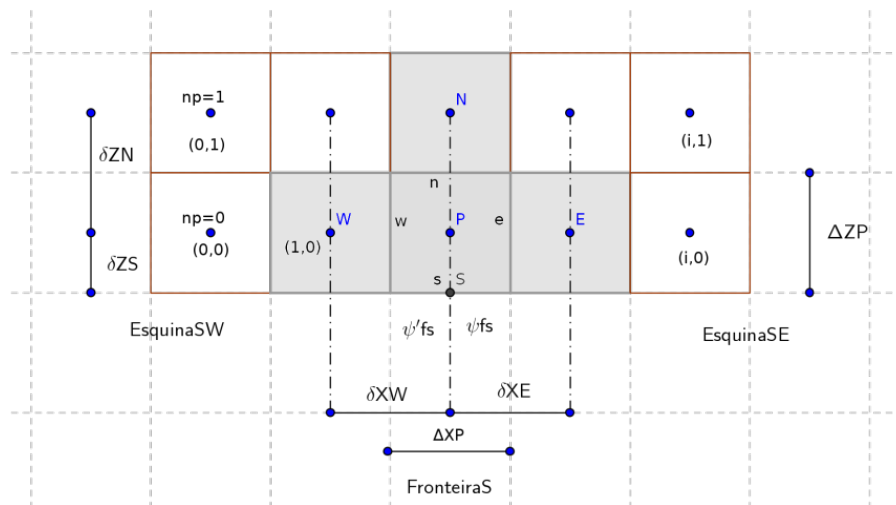
Fonte: Guterres (2013, p. 78)

Nota.  $cte$  representa um número fixo

Ao adotar-se esta estratégia, o que se ganha é um código computacional genérico, pois em tempo de execução, o usuário poderá definir o tipo de condição de contorno (Dirichlet, Neumann ou Robin) para todos os volumes de controle localizados numa determinada fronteira.

Assim sendo, para demonstrar o processo de obtenção das equações algébricas

discretizadas para os volumes de controle localizados nas fronteiras da malha computacional da figura 1, incorporando os conceitos estabelecidos anteriormente, inicialmente consideram-se os volumes de controle da fronteira  $S$ , que possuem coordenadas  $1 \leq i < nx - 1$  e  $j = 0$ . A figura 2 destaca esta região.



**Figura 2** - Volumes de controle da fronteira  $S$

Fonte: Guterres (2013, p. 79)

O valor  $\psi'_{fs}$  da derivada numérica a direita da variável  $\psi$  avaliada na face  $S$  e externa do volume de controle  $P$ , pode ser aproximada pelo quociente diferencial de Newton, conforme a equação (14)

$$\psi'_{fs} = \frac{\psi_P - \psi_{fs}}{\delta Z_S} \quad (14)$$

isolando-se o valor de  $\psi_{fs}$  na equação (14)

obtem-se a equação (15)

$$\psi_{fs} = \psi_P - \psi'_{fs} \delta Z_S \quad (15)$$

e tomando como referência a equação (13) escreve-se

$$a_s \psi'_{fs} + b_s \psi_{fs} = c_s \quad (16)$$

então, substitui-se a equação (15) na equação (16) para obter uma expressão para  $\psi'_{fs}$  que

seja função dos coeficientes  $a_s$ ,  $b_s$  e  $c_s$ , sendo o subscrito  $s$  usado para indicar que os coeficientes ( $a$ ,  $b$  e  $c$ ) correspondem às condições de contorno da fronteira  $S$ .

$$\psi'_{fs} = \frac{c_s}{a_s - b_s \delta Z_S} - \frac{b_s \psi_P}{a_s - b_s \delta Z_S} \quad (17)$$

Por fim, para se obter a equação

$$\begin{aligned} & - \left( \frac{K_w^{t+1}(\psi_w^{t+1})}{\Delta X_P \delta X_W} \right) \psi_w^{t+1} + \left( - \frac{K_{fs}(\psi_{fs}) b_s}{\Delta Z_P (a_s - b_s \delta Z_S)} + \frac{K_w^{t+1}(\psi_w^{t+1})}{\Delta X_P \delta X_W} + \frac{K_e^{t+1}(\psi_e^{t+1})}{\Delta X_P \delta X_E} + \right. \\ & \left. \frac{K_n^{t+1}(\psi_n^{t+1})}{\Delta Z_P \delta Z_N} + \frac{C_p^{t+1}(\psi_p^{t+1})}{\Delta t} \right) \psi_p^{t+1} - \left( \frac{K_e^{t+1}(\psi_e^{t+1})}{\Delta X_P \delta X_E} \right) \psi_e^{t+1} - \left( \frac{K_n^{t+1}(\psi_n^{t+1})}{\Delta Z_P \delta Z_N} \right) \psi_n^{t+1} \\ & = \end{aligned} \quad (18)$$

$$\frac{C_p^{t+1}(\psi_p^{t+1}) \psi_p^t}{\Delta t} - \frac{K_n^{t+1}(\psi_n^{t+1})}{\Delta Z_P} + \frac{K_{fs}(\psi_{fs})}{\Delta Z_P} - \frac{K_{fs}(\psi_{fs}) c_s}{\Delta Z_P (a_s - b_s \delta Z_S)}$$

que é a forma algébrica discretizada da equação (3) válida para os volumes de controle da malha computacional da figura 1, situados na fronteira  $S$  ( $1 \leq i < nx - 1$  e

algébrica discretizada para os volumes de controle da fronteira  $S$ , integra-se novamente a equação (10) no intervalo compreendido pelas coordenadas  $1 \leq i < nx - 1$  e  $j = 0$ , substituindo-se a equação (17) no termo  $\left. \frac{\partial \psi}{\partial z} \right|_S$  que resulta do processo de integração. Com mais algumas manipulações algébricas chega-se na equação (18) (GUTERRES, 2013, eq. 109, p 80).

$j = 0$ ). A equação (3) pode ser reescrita de maneira simplificada, de acordo com a expressão apontada pela equação (19):

$$-A_W \psi_w^{t+1} + A_P \psi_p^{t+1} - A_E \psi_e^{t+1} - A_N \psi_n^{t+1} = S_p \quad (19)$$

sendo que os coeficientes  $A_W$ ,  $A_P$ ,  $A_E$ ,  $A_N$  e  $S_p$  são mostrados no quadro 3.

$A_S$	0	$A_E$	$\frac{K_e^{t+1}(\psi_e^{t+1})}{\Delta X_P \delta X_E}$	$A_P$	$-\frac{K_{fs}(\psi_{fs}) b_s}{\Delta Z_P (a_s - b_s \delta Z_S)} + A_W + A_E + A_N + \frac{C_p^{t+1}(\psi_p^{t+1})}{\Delta t}$
$A_W$	$\frac{K_w^{t+1}(\psi_w^{t+1})}{\Delta X_P \delta X_W}$	$A_N$	$\frac{K_n^{t+1}(\psi_n^{t+1})}{\Delta Z_P \delta Z_N}$	$S_p$	$\frac{C_p^{t+1}(\psi_p^{t+1}) \psi_p^t}{\Delta t} - \frac{K_n^{t+1}(\psi_n^{t+1})}{\Delta Z_P} + \frac{K_{fs}(\psi_{fs})}{\Delta Z_P} - \frac{K_{fs}(\psi_{fs}) c_s}{\Delta Z_P (a_s - b_s \delta Z_S)}$

**Quadro 3** - Coeficientes da equação (3) para os volumes da fronteira  $S$

**Fonte:** Guterres (2013, p. 81)

Para os volumes de controle localizados nas fronteiras  $SW$ ,  $W$ ,  $NW$ ,  $N$ ,  $NE$ ,  $E$  e  $SE$ , com referência a figura 1, os respectivos processos de obtenção das equações algébricas discretizadas encontram-se detalhados no estudo desenvolvido por Guterres (2013).

No que diz respeito ao cálculo da condutividade hidráulica nas interfaces  $K_s(\psi_s)$ ,  $K_n(\psi_n)$ ,  $K_w(\psi_w)$  e  $K_e(\psi_e)$ , utiliza-se a média geométrica como recomendam os

autores Haverkamp e Vauclin (1979) e Vasconcellos e Amorim (2001). Ou seja, dado dois volumes de controle que possuem uma interface em comum, o valor da condutividade hidráulica na interface de contato, será o produto dos valores das condutividades hidráulicas avaliadas no centroide dos dois volumes de controle utilizados no cálculo elevado ao inverso do número de condutividades empregadas na estimativa. Sendo o cálculo efetuado pelas equações (20)

(a), 20 (b), 20 (c) e 20 (d).

$$\begin{aligned}
 K_n(\psi_n) &= \sqrt{K_N(\psi_N)K_P(\psi_P)} & (a) & & K_s(\psi_s) &= \sqrt{K_P(\psi_P)K_S(\psi_S)} & (b) \\
 K_w(\psi_w) &= \sqrt{K_P(\psi_P)K_W(\psi_W)} & (c) & & K_e(\psi_e) &= \sqrt{K_E(\psi_E)K_P(\psi_P)} & (d)
 \end{aligned}
 \tag{20}$$

Para finalizar o processo de aproximação de uma solução particular, para o problema de predição do fluxo de água em meios porosos não saturados, pelo MVF, deve-se resolver a equação (12) para todos os volumes de controle da malha computacional da figura 1, observando as condições de contorno nas fronteiras. Para tanto, a literatura indica que o método mais recorrente é o de aproximações sucessivas de Picard (CELIA *et al.*, 1990; BEVILACQUA *et al.*, 2011; BERGAMASCHI *et al.*, 2013).

## 2.1 Sistemas de equações algébricas e o código PETSc

O acoplamento das diferentes

equações deduzidas na seção anterior pelo MVF implica um sistema linear pentadiagonal (MALISKA, 2010). Contudo, como o problema que está sendo resolvido é não linear, o sistema resultante terá a seguinte forma:  $A(\psi^m)\psi^{m+1} = b(\psi^m)$  (equação (2)). Ou seja, os coeficientes da matriz  $A$  não são constantes, pois os mesmos são dependentes da variável  $\psi^m$  e deve ser atualizada ao longo das iterações. Um possível tratamento desta não linearidade é a aplicação do método de Picard (GOTTARDI e VENUTELLI, 1993; LEHMANN e ACKERER, 1998). O algoritmo 1 mostra a sistemática de cálculo pelo método de Picard.

### Algoritmo 1: método de Picard

- 1  $\rightarrow$  fixar  $\psi^0$
- 2  $\rightarrow$  para  $m = 0$  até o número máximo iterações pré-fixada realizar
  - 2.1  $\rightarrow$  computar  $A(\psi^m)$
  - 2.2  $\rightarrow$  resolver  $A(\psi^m)\psi^{m+1} = b$
  - 2.3  $\rightarrow$  testar,  $|\psi^{m+1} - \psi^m| \leq$  tolerância pré-fixada, fim para
  - 2.4  $\rightarrow$  atribuir  $\psi^m = \psi^{m+1}$

O número de linhas da matriz  $A(\psi)$  é igual ao número de nós do sistema de discretização espacial. Levando-se em conta que o número de nós pode ser da ordem de dezenas de milhares para uma aplicação em duas dimensões e da ordem de milhões para uma aplicação tridimensional e considerando-se que a matriz  $A^{-1}(\psi)$  precisa ser computada muitas vezes, torna-se fundamental empregar métodos otimizados para realizar tarefa de inversão. Benzi (2002), Carvalho e Gratton (2009), e Miller *et al.* (2013) referem-se que os métodos do subespaço de Krylov, combinados com pré-condicionadores, são técnicas apropriadas para a resolução de sistemas lineares e não lineares de grande porte.

Segundo Carvalho e Gratton (2009) a ideia principal dos métodos do subespaço de Krylov consiste em selecionar uma aproximação  $x_k$  dentro do chamado subespaço de procura de Krylov  $K(A, r) \equiv \{r, Ar, A^2r, \dots, A^{k-1}r\}$ . Por sua vez o subespaço de procura de Krylov é obtido por  $K_k(A, r_0) \equiv \{r_0, Ar_0, A^2r_0, \dots, A^{k-1}r_0\}$ . No qual  $K_k(A, r_0)$  representa o subespaço de Krylov de dimensão  $K$  gerado por  $A$  e  $r_0$ . Tal que  $r_0 = b - Ax_0$  denota o resíduo da solução inicial. Uma aproximação  $x_k$  é considerada ótima se o resíduo for ortogonal ao subespaço de  $K_k(A, r_0)$ , ou seja  $b - Ax_k \perp K_k$ .

Em virtude do número de combinações lineares dos vetores sobre o lado esquerdo do subespaço de Krylov ser menor



que a do espaço de completo, isto resulta em um tempo menor para aproximar a solução do sistema de equações. Esta eficiência é percebida quando comparada aos dos métodos tradicionais, tais como a eliminação Gaussiana, as fatorações LU e o método de Cholesky. Em geral, os métodos iterativos do subespaço de Krylov com pré-condicionadores possuem uma complexidade matemática de difícil compreensão. Além disto, as suas respectivas implementações computacionais não são triviais. Para tanto,

uma maneira de contornar o referido problema consiste em utilizar estruturas de dados e rotinas para aplicações científicas, as chamadas bibliotecas computacionais. Por esse motivo, optou-se pela PETSc (BALAY *et al.*, 2015), que vem sendo usada em aplicações de larga escala que envolvem a resolução de equações diferenciais parciais (EDP) ou problemas semelhantes. De maneira resumida, para a resolução da equação de Richards usando a PETSc considerou-se as etapas definidas pelo algoritmo 2.

### Algoritmo 2: Resolução da equação de Richards com a PETSc

- 1 → Inicialização da PETSc:  
`PetscInitialize(&argc,&args,(char *)0,help)`
  - 2 → Definição das variáveis:  
vetor  $b$  do lado direito do sistema  $A\psi = b$ :  
`VecCreate(PETSC_COMM_WORLD,&b)`  
vetor  $\psi$  definido como a solução aproximada do sistema  $A\psi = b$ :  
`VecCreate(PETSC_COMM_WORLD,&\psi)`
  - 3 → Inicialização da matriz  $A$  da equação de Richards:  
`MatCreate(PETSC_COMM_WORLD,&A)`  
`ComputeMatrix(A,grid2d,psi_ant,&user,&valor);`
  - 4 → Inicialização do vetor  $b$  com as condições de contorno:  
`ComputeRHS(b,psi_o,psi_ant,grid2d,&user,&valor);`
  - 5 → Resolução do sistema linear  $A\psi = b$  por um método do subespaço de Krylov pré-condicionado:  
`KSPSolve(ksp,b,psi);`
  - 6 → Verificação da norma do erro da solução  $\|\psi^{m+1} - \psi^m\|_2$ :  
`VecNorm(residuo,NORM_2,&num);`
- OBS: os comandos da PETSc listados no algoritmo 2 são apenas amostras da sintaxe da biblioteca.

Com relação ao passo 5 do algoritmo 2, os métodos do subespaço de Krylov disponibilizados pela PETSc e utilizados nos experimentos numéricos propostos neste

estudo, são os reportados pelo quadro 4. A estrutura da Matriz  $A$ , proveniente da discretização do MVF pode ser avaliada em Guterres (2013, p. 91).

Sigla	Nome	Sigla	Nome
KSPBCGS	gradientes biconjugados estabilizado	KSPBICG	gradientes biconjugados
KSPCG	gradientes conjugados	KSPCGNE	gradientes conjugados baseado nas equações normais
KSPCGS	gradientes conjugados quadrado	KSPCR	resíduos conjugados
KSPFGMRES	resíduos mínimos generalizado flexível	KSPGCR	resíduos conjugados generalizado
KSPGMRES	resíduos mínimos generalizado	KSPLGMRES	resíduos mínimos generalizado relaxado
KSPLSQR	equações esparsas e mínimos quadrados	KSPMINRES	resíduos mínimos
KSPSYMMQ	solução de sistemas equações lineares esparsos indefinidos	KSPTFQMR	resíduo quase mínimo sem transpostas

**Quadro 4** - Métodos do subespaço de Krylov disponíveis na PETSc  
**Fonte:** (BALAY *et al.*, 2015)

De modo igual, o quadro 5 aponta alguns dos principais pré-condicionadores disponíveis no banco de dados da PETSc e que

foram empregados na resolução do sistema linear do passo 5 do Algoritmo 2.

Sigla	Descrição
PCJACOBI	Jacobi ou diagonal
PCBJACOBI	bloco de Jacobi
PCSOR	sobre-relaxação simétrica
PCMG	pré-condicionador multigrid

**Quadro 5** - Pré-condicionadores disponíveis na PETSc  
**Fonte:** (BALAY *et al.*, 2015)

Por último, é importante evidenciar que os métodos do subespaço de Krylov devem ser utilizados em conjunto com pré-condicionadores para que tenham um melhor desempenho. Deste modo, uma importante referência sobre pré-condicionadores é o artigo de Benzi (2002), esclarecendo que um pré-condicionador é uma matriz que transforma um sistema em outro com propriedades mais favoráveis para a solução iterativa. A técnica de pré-condicionamento é utilizada para melhorar as propriedades espectrais da matriz, ou no caso da matriz ser simétrica positiva definida, para aproximar os autovalores do valor unitário.

### 3 VALIDAÇÃO DO MODELO

Esta seção descreve alguns testes numéricos realizados para certificar a qualidade do esquema numérico adotado e do código computacional desenvolvido em C++/PETSc. Para tanto, foram utilizados problemas-testes clássicos da literatura, a saber: as soluções semi-analíticas de Philip (1957) e Tracy (2006); e as soluções numéricas de Celia *et al.* (1990) e Juncu *et al.* (2012). Para todos os casos testados as soluções aproximadas da equação (3) pelo MVF, obtidas pelo programa computacional, convergiram para as soluções dos autores citados.

Para ilustrar, toma-se como referência a solução semi-analítica de Philip (1957), que foi utilizada por Vasconcellos (2001), Kumar (1998), entre outros. A figura 3(a) mostra a evolução de três perfis de umidade  $\theta$  distintos, obtidos pelo código, sendo a respectiva

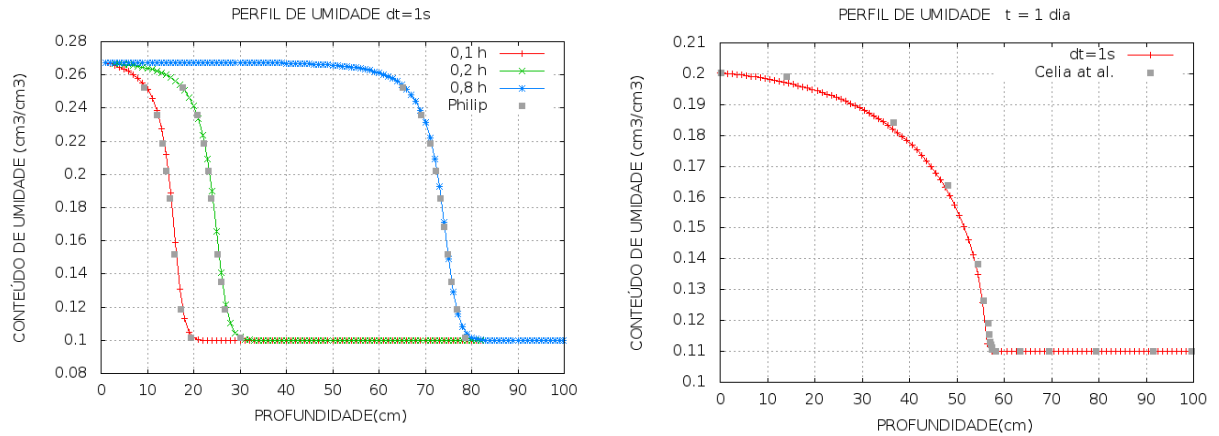
solução semi-analítica de Philip (1957) identificada por pontos. Ao interpretar as curvas da figura 3(a), fica evidente que cada solução numérica obtida pelo programa computacional converge para a solução de Philip (1957), visto que os formatos e as sobreposições das frentes de molhamento são coincidentes.

Outro exemplo ilustrativo do processo de validação foi a replicação do experimento computacional de Celia *et al.* (1990), visto que o mesmo é um dos mais influentes da literatura, devido às importantes contribuições dadas por estes pesquisadores. Sendo assim, a figura 3(b) mostra a simulação realizada pelos autores e por Celia *et al.* (1990). Verifica-se que as soluções 1D obtidas, tendo como referência o trabalho de Guterres (2013), indicam ser equivalentes ao modelo de Celia *et al.* (1990).

Porém, uma vez que a proposta de modelagem neste trabalho foi à avaliação do fluxo em 2D, considerou-se para o problema de Celia *et al.* (1990) um domínio de fluxo como um retângulo de dimensões de  $10\text{ cm} \times 100\text{ cm}$ . E uma malha computacional de  $100 \times 10$  volumes de controle na direção vertical e horizontal respectivamente, com o passo de tempo da simulação fixado em  $\Delta t = 1\text{ s}$ , sem fluxo nas fronteiras  $W$  e  $E$ .

Igualmente as figuras 4(a) e 4(b) indicam que o resultado do modelo bidimensional corresponde ao modelo unidimensional. As pequenas diferenças encontradas entre as soluções numéricas do modelo computacional desenvolvido, com os problemas unidimensionais utilizados para a validação, podem ser oriundas das diferenças

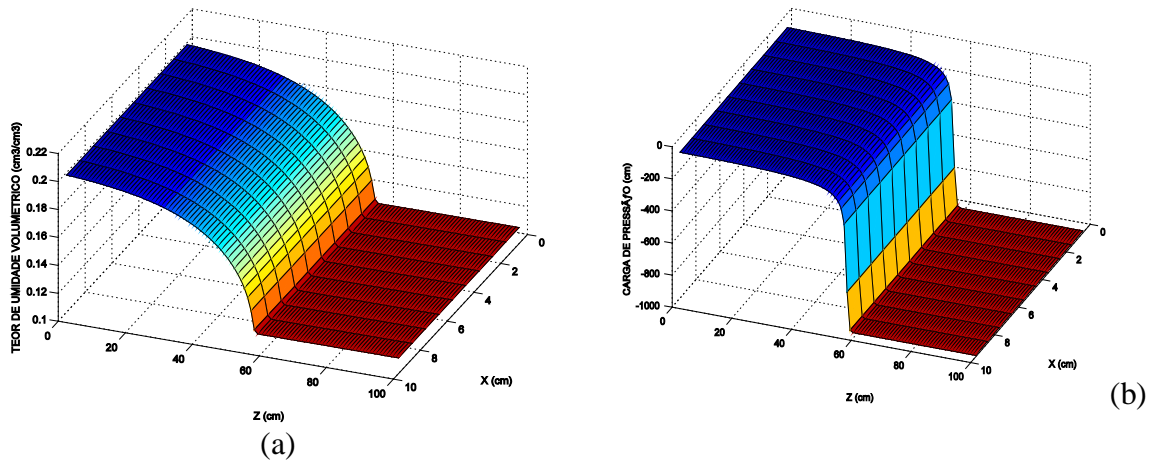
entre as geometrias computacionais e dos métodos utilizados em cada código.



(a) solução semi-analítica de Philip (1957)

(b) Solução numérica de Celia *et al.* (1990)

**Figura 3** - Frentes de molhamento calculadas pelo modelo computacional

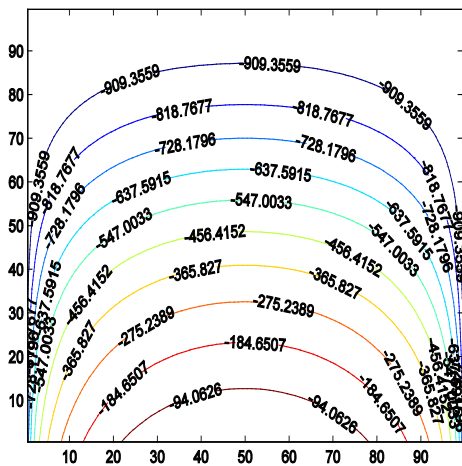


**Figura 4** - Superfícies de  $\theta$  (a) e  $\psi$  (b) calculadas pelo modelo computacional para o problema de Celia *et al.* (1990)

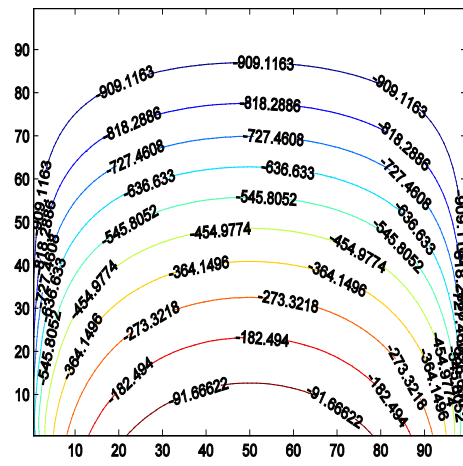
Finalmente, para validar o modelo de fluxo bidimensional foram realizados testes com o objetivo de comparar as soluções aproximadas pelo modelo, com a solução analítica de Tracy (2006). Para tanto, a situação física simulada foi sugerida por Szymkiewicz (2012), que considera o domínio de fluxo um quadrado com  $L_z = 100\text{ cm}$  por  $L_x = 100\text{ cm}$ , e solo com os parâmetros hidráulicos definidos pelo modelo de Gardner (TRACY, 2006; SZYMKIEWICZ, 2012). Vale ressaltar que a proposta de Tracy (2006) foi adaptada por Szymkiewicz (2012), que incluiu na condição

de contorno da aresta superior do quadrado uma distribuição sinusoidal.

Para validação utilizou-se uma malha computacional de  $100 \times 100$  volumes de controle na direção vertical e horizontal respectivamente, com o passo de tempo da simulação fixado em  $\Delta t = 1\text{ s}$ . As figuras 5(a) e 5(b) destacam a comparação entre a solução analítica de Tracy (2006) e a solução numérica do código em termos da carga devido à pressão, no tempo  $t = 720\text{ s}$ . Igualmente, os resultados certificam a acurácia e precisão do código computacional e do modelo matemático em processo de validação.



(a) isolinhas da solução analítica



(b) isolinhas da solução numérica

**Figura 5** - Comparação entre a solução analítica de Tracy (2006) e a solução numérica do modelo

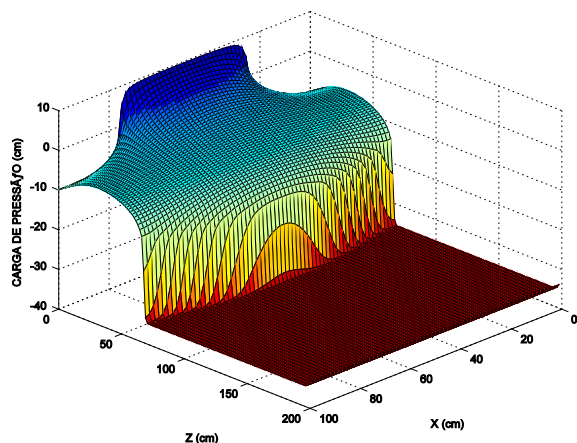
Os problemas testes de fluxo bidimensional em meio poroso variavelmente saturado propostos por Juncu *et al.* (2012) e apresentados na sequência foram escolhidos para validar o modelo matemático e computacional em análise, pelo fato do autor citado ter adotado uma metodologia parecida com a proposta neste artigo. Ou seja, aproximação numérica que utiliza o método implícito para a discretização temporal, o método de volumes finitos para a discretização espacial e problemas testes que simulam infiltração 2D com resultados numéricos comparados em aproximações realizadas no subespaço de Krylov e pré-condicionadores de Picard.

Deste modo, considerou-se dentre as experiências simuladas por Juncu *et al.* (2012), duas em particular. A primeira experiência avalia uma situação de escoamento bidimensional em uma amostra de solo de geometria retangular com dimensões de 2,0 m de altura por 1,0 m de comprimento, com as condições iniciais de

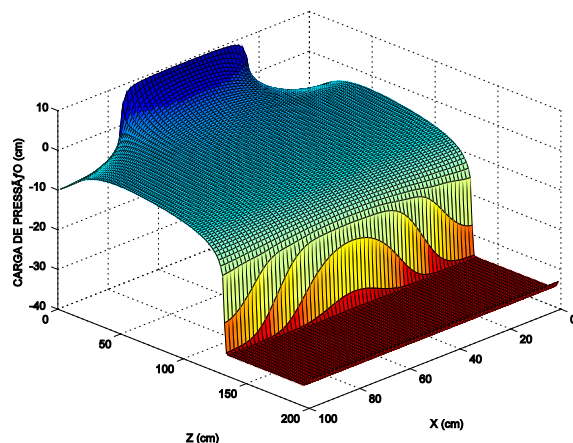
contorno estabelecidas pelas equações 2a, 2b, 2c e 2d do artigo de Juncu *et al.* (2012). Para completar o modelo de fluxo, as relações constitutivas que caracterizam as propriedades do solo são as do modelo de Van Genuchten (1980), cujos parâmetros são os de Tocci (1998), apontados na linha 2 da tabela 4 do texto original de Juncu *et al.* (2012).

A figura 6 mostra os resultados obtidos pelo código em validação para a primeira experiência.

Os resultados alcançados nas simulações dos experimentos 1 e 2 são compatíveis aos obtidos por Juncu *et al.* (2012, p. 41). O que certifica a acurácia e precisão do método aplicado para predição do fluxo bidimensional. Muito embora se ressalte que não foi realizada uma avaliação estatística, porque os resultados apresentados por Juncu *et al.* (2012) não permitem tal inferência. Visto que os seus resultados são apenas gráficos.



(a) tempo 0,5 h

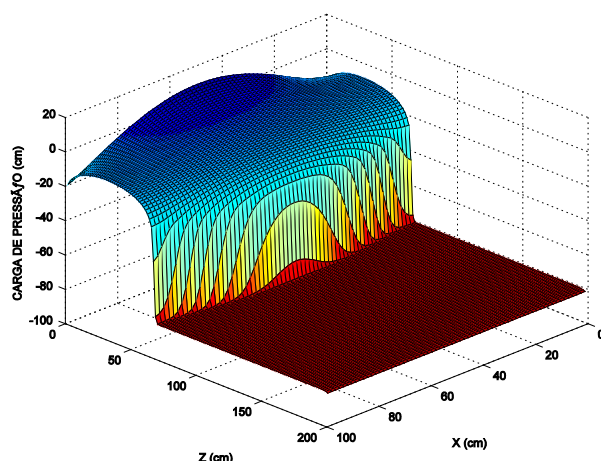


(b) tempo 1,0 h

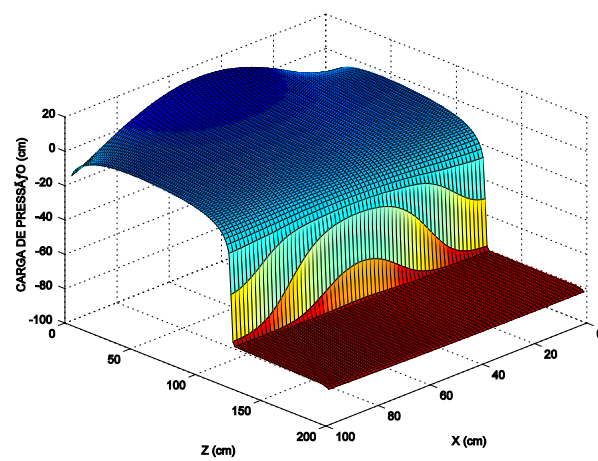
**Figura 6** - Isolinhas da  $\psi$  calculadas pelo modelo computacional, correspondente a experiência 1 de Juncu *et al.* (2012)

A segunda experiência simula o mesmo problema, todavia considera os parâmetros do solo caracterizados por Durner

*et al.* (2008), assinalados na linha 3 da tabela 4 de Juncu *et al.* (2012).



(a) tempo 0,75 h



(b) tempo 1,5 h

**Figura 7** - Isolinhas da  $\psi$  calculadas pelo modelo computacional, correspondente a experiência 2 de Juncu *et al.* (2012)

#### 4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Esta seção apresenta o desempenho numérico e computacional dos algoritmos PICARD-KRYLOV-PC empregados no processo de obtenção da solução numérica da equação de Richards para determinados problemas. São testadas cinquenta combinações entre os quatorze métodos iterativos de Krylov (KSP) do quadro 4 e os

quatro pré-condicionadores (PC) dentro da técnica de Picard, do quadro 5, conforme descritos em Guterres (2013, p. 125).

Os casos simulados constituem-se basicamente de problemas de infiltração em dois perfis de solos homogêneos, no qual as especificações das propriedades hidráulicas foram obtidas em Bunsri *et al.* (2009) e organizados na tabela 1.

**Tabela 1-** Valores dos parâmetros das amostras de solo de Bunsri *et al.* (2009)

Solo	$Ks(cm/s)$	$\theta_r$	$\theta_s$	$\alpha(cm^{-1})$	$n$	$A$	$\phi$	$B$	$\lambda$
<i>Topsoil</i>	1,83889	0,04	0,42	0,0249	1,6740	$8,27 \times 10^3$	2,3181	$1,20 \times 10^2$	1,1045
<i>Sand</i>	$\sqrt[10^{-4}]{1,79611}$ $\sqrt[10^{-3}]{}$	0,07	0,30	0,0446	2,1636	$4,04 \times 10^4$	3,4765	$6,83 \times 10^5$	4,2424

Fonte: (BUNSRI *et al.*, 2009)

O primeiro perfil de solo simulado, designado por IA, considerou a infiltração de água numa coluna com dimensões  $L_z = 100\text{ cm}$  e  $L_x = 10\text{ cm}$ , preenchida com o solo

*Topsoil* (vide tabela 1), na qual a condição inicial e as duas condições de contorno do tipo Dirichlet são fixadas pelas equações (21):

$$\begin{cases} \psi(z, 0) = -700,0\text{ cm}, & 0 < z < 100\text{ cm} \\ \psi(0, t) = -10,0\text{ cm}, & t > 0 \\ \psi(100, t) = -700,0\text{ cm}, & t > 0 \end{cases} \quad (21)$$

sendo que o fenômeno físico IA foi investigado durante um período de tempo de 6 h.

quadrado com  $L_z = 100\text{ cm}$  e  $L_x = 100\text{ cm}$ , mas com o solo *Sand* (vide tabela 1). As condições iniciais e de contorno são as estabelecidas pelas equações (22):

O segundo perfil de solo, nomeado de IB, considerou o domínio de fluxo, um

$$\begin{cases} t = 0, & \theta(x, z, 0) = 0,111 & 0 < x, z < 100\text{ cm} \\ z = 0, & \theta(x, 0, t) = 0,300 & 0 < x < 100\text{ cm}, & t > 0 \\ z = L_z, & \theta(x, L_z, t) = 0,111 & 0 < x < 100\text{ cm}, & t > 0 \\ x = 0, & \theta(0, z, t) = 0,300 & 0 < z < 100\text{ cm}, & t > 0 \\ x = L_x, & \theta(L_x, z, t) = 0,111 & 0 < z < 100\text{ cm}, & t > 0 \end{cases} \quad (22)$$

e o comportamento do fluxo de água medido para um período de tempo de 6 min.

relativa de convergência (redução relativa na norma residual)  $r_{tol} = 1 \times 10^{-9}$ ; tolerância do método iterativo de Picard  $r_{pic} = 1 \times 10^{-6}$ ; tolerância absoluta de convergência (tamanho absoluto da norma residual)  $r_{abs} = 1 \times 10^{-50}$ ; número máximo de iterações  $n_{iter} = 10.000$ .

Logo os diferentes experimentos numéricos simulados procuraram avaliar a influência das equações de van Genuchten (1980) e Haverkamp *et al.* (1977), no desempenho dos algoritmos PICARD-KRYLOV-PC quando aplicados na resolução da equação de Richards, considerando-se o mesmo tipo de solo.

#### 4.1 Experimento 1

Para interpretação dos resultados numéricos as seguintes variáveis foram computadas: tempo de processamento em segundos (*CPUs*), teor médio de umidade volumétrico ( $\bar{\theta}$ ), carga média devida à pressão ( $\bar{\psi}$ ); erro da solução numérica (*esn*) e número de iterações ( $n_{iter}$ ). Com relação à análise da convergência dos métodos iterativos os seguintes critérios foram fixados: tolerância

O experimento 1 considera o problema IA (coluna preenchida com o solo *Topsoil*), cuja finalidade foi um estudo de malha e tempo, a fim de se obter valores de referência para  $\bar{\theta}$  e  $\bar{\psi}$ , calculados conforme as equações 23 (a) e 23 (b).

$$\bar{\theta} = \frac{1}{N_z} \sum_{j=1}^{N_z} \theta_j \quad (a) \quad \bar{\psi} = \frac{1}{N_z} \sum_{j=1}^{N_z} \psi_j \quad (b) \quad (23)$$

sendo  $\psi_j$  e  $\theta_j$  os valores das variáveis de interesse no centroide do volume de controle  $j$  da solução numérica; e  $N_z$  o número de volumes de controle da malha computacional na direção vertical. Por sua vez, o modelo para avaliação da função da condutividade hidráulica não saturada  $K(\psi)$  e da função do conteúdo de umidade volumétrica  $\theta(\psi)$  foi de van Genuchten (1980), uma vez que, à luz da teoria, é o modelo que melhor estima as propriedades físicas em questão, e por não provocar instabilidades numéricas no modelo matemático de fluxo.

Guterres (2013, p. 130, tabela 28) apresenta o estudo completo de refinamento de malha *versus* passo de tempo do problema IA. Como resultado tem-se que  $\bar{\theta}$  está convergindo para o valor 0,1373, enquanto  $\bar{\psi}$  para o valor  $-593,2 \text{ cm}$ . Logo estes valores foram tomados como referência para os experimentos numéricos seguintes.

## 4.2 Experimento 2

O experimento 2 investiga a influência das equações de van Genuchten (1980) e Haverkamp *et al.* (1977), no desempenho dos algoritmos PICARD-KRYLOV-PC quando aplicados na resolução da equação de Richards, considerando-se o mesmo tipo de solo. Ou seja, resolveu-se o modelo de fluxo alterando-se as relações constitutivas que caracterizam as propriedades do solo.

Assim, os resultados da simulação do problema IA (coluna preenchida com o solo *Topsoil*), correspondentes a uma malha computacional de  $100 \times 10$  volumes de controle na direção vertical e horizontal respectivamente, com o passo de tempo da simulação fixado em  $\Delta t = 1 \text{ s}$ , são apresentados na tabela 2. Em Guterres (2013, p. 133) têm-se os resultados de todas as simulações realizadas.

**Tabela 2 - Avaliação dos algoritmos PICARD-KRYLOV-PC do experimento 2**

Modelo	KSP	PC	$\bar{\psi}$ (cm)	esn	CPU (s)
van Genuchten (1980)	KSPCG	PCSOR	-595,278	3,5037E-03	461
van Genuchten (1980)	KSPBCGS	PCSOR	-595,279	3,5039E-03	500
van Genuchten (1980)	KSPCGNE	PCSOR	-595,280	3,5062E-03	519
van Genuchten (1980)	KSPCGS	PCMG	-595,278	3,5037E-03	561
van Genuchten (1980)	KSPCG	PCMG	-595,279	3,5041E-03	562
Haverkamp <i>et al.</i> (1977)	KSPGCR	PCSOR	-278,983	5,2970E-01	273
Haverkamp <i>et al.</i> (1977)	KSPBCGS	PCSOR	-278,983	5,2970E-01	299
Haverkamp <i>et al.</i> (1977)	KSPGMRES	PCSOR	-278,983	5,2970E-01	308
Haverkamp <i>et al.</i> (1977)	KSPFGMRE	PCSOR	-278,983	5,2970E-01	323
Haverkamp <i>et al.</i> (1977)	$\tilde{K}$ SPCG	PCMG	-278,983	5,2970E-01	330

Fonte: Guterres (2013, p. 133)

É importante mencionar que os erros das soluções (*esn*) foram calculados para o valor de referência de  $\bar{\psi} = -593,2 \text{ cm}$ . Portanto, levando-se em conta os resultados numéricos da solução da equação de Richards com o modelo de van Genuchten (1980), todas as soluções convergiram para o valor de referência com um erro médio da ordem de

0,35%. Por outro lado, as respostas obtidas para o problema de fluxo em análise, com a utilização das equações de Haverkamp *et al.* (1977) apresentaram um erro médio aproximado de 52,97%. Este fato se deve porque, segundo Bunsri *et al.* (2009), o modelo de Haverkamp *et al.* (1977) para o solo em questão não obteve um bom ajuste estatístico, por consequência, não foi capaz de



explicar corretamente os valores observados em laboratório.

As considerações preliminares a partir da análise dos resultados do experimento 2 podem ser resumidas como: (i) *o modelo de fluxo combinado com as relações constitutivas de Haverkamp et al. (1977) converge mais rapidamente para a solução numérica da equação de Richards. Ao contrário, quando associado com as equações de van Genuchten (1980) é mais lento;* (ii) *dos pré-condicionadores utilizados no experimento 2, o SOR é o que mais acelera o processo de obtenção da solução numérica da equação de Richards;* (iii) *a combinação KSPBCGS×PCSOR foi a mais eficiente para avaliação de fluxo de água, independentemente do modelo de avaliação do solo, pois esta combinação esteve sempre entre os melhores resultados.*

No que diz respeito ao número de iterações em função dos passos de tempo para a combinação KSPBCGS×PCSOR, o número necessário para obter a convergência é maior para o modelo de Haverkamp et al. (1977), quando comparado com o modelo de van Genuchten (1980). Observou-se ainda que no período inicial ocorreu um número elevado de iterações devido à descontinuidade da condição inicial. Porém, com o avanço no tempo, o número de iterações se manteve estável. Também se constatou que o número total de sistemas lineares resolvidos por passo de tempo é maior para o modelo de

Haverkamp et al. (1977). Apesar desses fatos, o modelo de fluxo com as equações Haverkamp et al. (1977) convergiu mais rapidamente para a solução numérica da equação de Richards. Isto provavelmente se deve por que as expressões de Haverkamp et al. (1977) são mais simples de ser avaliadas do que as de van Genuchten (1980).

### 4.3 Experimento 3

Para compreender melhor os resultados do experimento 2, foram realizados dois novos testes. O experimento 3(a) que avaliou PICARD-KRYLOV-PC para o problema de Haverkamp et al. (1977). E o experimento 3(b) que levou em consideração o problema de Phoon et al. (2007). Estes foram escolhidos por terem soluções semi-analíticas de referência e, portanto, pode-se comparar as respostas de PICARD-KRYLOV-PC com as soluções de Philip (1957) e Warrick et al. (1985).

Para o experimento 3(a) o processo de infiltração de água no solo foi avaliado durante um tempo total de 0,8 h, com relação ao experimento 3(b) o tempo de simulação foi de 1,5 h.

A tabela 3 ilustra de forma resumida as combinações PICARD-KRYLOV-PC com melhor desempenho computacional, no critério menor tempo de CPU necessário para obter a solução numérica da equação de Richards para os experimentos 3(a) e 3(b).

**Tabela 3** - Avaliação dos algoritmos PICARD-KRYLOV-PC do experimento 3

Modelo	KSP	PC	CPU (s)
experimento 3a	KSPCG	PCSOR	61
experimento 3a	KSPCGS	PCSOR	67
experimento 3a	KSPBCGS	PCSOR	68
experimento 3a	KSPGMRES	PCSOR	70
experimento 3a	KSPTFQMR	PCSOR	71
experimento 3b	KSPFGMRES	PCSOR	114
experimento 3b	KSPCG	PCSOR	118
experimento 3b	KSPTFQMR	PCSOR	119
experimento 3b	KSPBCGS	PCSOR	120
experimento 3b	KSPCR	PCSOR	120

Fonte: Guterres (2013, p. 139)

Em Guterres (2013, p. 139) têm-se os resultados de todas as simulações realizadas.



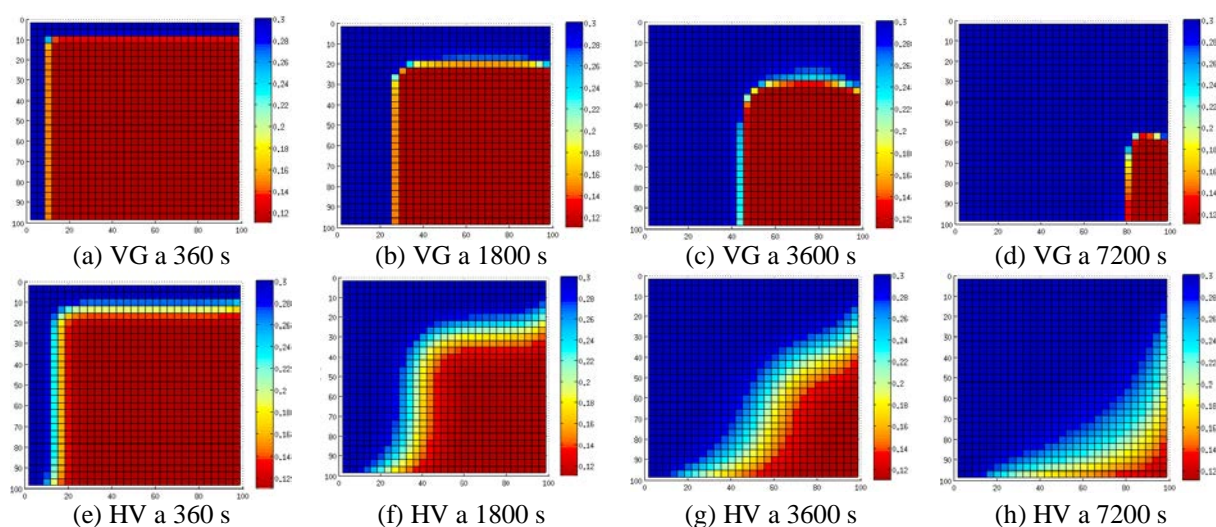
De modo geral, com base nos resultados do experimento 3 pode-se concluir que: (i) a combinação *KSPBCGS*×*PCSOR* novamente foi a mais eficiente na estimativa do movimento de água, independentemente do modelo de avaliação do solo e da física do problema simulado, pois esta combinação esteve sempre entre os melhores resultados; (ii) o tipo de solo e as condições físicas impostas podem influenciar o desempenho das combinações *PICARD-KRYLOV-PC*; (iii) de maneira idêntica ao experimento 2 da seção 4.2 o *SOR* é o pré-condicionador que mais acelera o processo de obtenção da solução numérica da equação de Richards, não sendo influenciado pelo modelo de avaliação do solo e pela física do problema simulado;

Por fim, todas as combinações *PICARD-KRYLOV-PC* apresentaram

elevada concordância com as soluções semi-analítica de Philip (1957) e Warrick *et al.* (1985).

#### 4.4 Experimento 4

O experimento 4 simula o problema IB (coluna preenchida com o solo *Sand*), especificado no início da seção. Neste sentido, as figuras 8(a) - 8(h) retratam a evolução das frentes de molhamento para os modelos de van Genuchten (1980) (VG) e Haverkamp *et al.* (1977) (HV), para uma malha computacional de  $30 \times 30$  volumes de controle na direção vertical e horizontal respectivamente, com o passo de tempo da simulação fixado em  $\Delta t = 1s$ , em diferentes tempos, quando aproximados pelo esquema numérico.



**Figura 8** - Evolução do teor de umidade volumétrica do experimento IB

Para avaliar-se o desempenho numérico dos algoritmos *PICARD-KRYLOV-PC*, quando empregados na solução do problema em questão, arbitrou-se uma malha computacional de  $n_z = 100$  e  $n_x = 100$  volumes de controle,

respectivamente, e um passo de tempo de  $\Delta t = 1s$ , durante um período de tempo de  $6 \text{ min}$ . Os principais tempos de execução obtidos são mostrados na tabela 4, e os demais podem ser conferidos em Guterres (2013, p. 147).

**Tabela 4** - Avaliação dos algoritmos PICARD-KRYLOV-PC do experimento 4

Modelo	<i>KSP</i>	<i>PC</i>	<i>CPU</i>
van Genuchten (VG)	KSPCG	PCSOR	167
van Genuchten (VG)	KSPCR	PCSOR	186
van Genuchten (VG)	KSPGCR	PCSOR	193
van Genuchten (VG)	KSPCGS	PCSOR	195
van Genuchten (VG)	KSPBCGS	PCSOR	201
Haverkamp <i>et al.</i> (HV)	KSPFGMRES	PCSOR	90
Haverkamp <i>et al.</i> (HV)	KSPCG	PCSOR	94
Haverkamp <i>et al.</i> (HV)	KSPBCGS	PCSOR	103
Haverkamp <i>et al.</i> (HV)	KSPCR	PCSOR	104
Haverkamp <i>et al.</i> (HV)	KSPGCR	PCSOR	106

Fonte: Guterres (2013, p. 147)

Os resultados do experimento 4 identicamente aos experimentos anteriores, apontam que o pré-condicionador SOR é o mais eficiente no processamento de uma solução para a equação de Richards. Do mesmo modo, o método do subespaço de Krylov KSPBCGS obteve uma boa performance, independentemente das equações de Haverkamp *et al.* (1977) e van Genuchten (1980), pois este método esteve sempre entre os melhores resultados.

## 5 CONCLUSÃO

Tendo como referência os resultados dos diferentes experimentos numéricos que simularam situações de infiltração de água em duas dimensões, com o objetivo de avaliar o uso de técnicas de resolução de sistemas de equações algébricas lineares do subespaço de Krylov pré-condicionado, vinculados ao método de Picard, quando empregados na aproximação numérica de soluções da equação de Richards 2D, discretizada espacialmente pelo MVF e temporalmente por um método implícito, conclui-se que a solução do modelo de fluxo, independentemente dos modelos empíricos de Haverkamp *et al.* (1977) ou de van Genuchten (1980) acoplados, para serem solucionados em tempos computacionais aceitáveis, o sistema linear deve ser resolvido pela combinação KSPBCGS×PCSOR. Uma vez que, para todos os testes realizados, esta combinação esteve sempre entre os melhores resultados.

Por outro lado, caso o modelo de fluxo seja resolvido apenas com as equações de van Genuchten (1980), uma escolha apropriada da combinação PICARD-KRYLOV-PC seria a KSPCG×PCSOR.

Considerando-se as combinações de PICARD-KRYLOV-PC com menor desempenho nos testes realizados por Guterres (2013), no que diz respeito ao tempo de processamento em segundos (*CPUs*), caso a equação de Richards seja resolvida exclusivamente com o modelo de Haverkamp *et al.* (1977), a melhor média de performance com a escolha adequada da combinação foi 37 vezes superior. Da mesma forma, com o modelo de van Genuchten (1980) a melhor média pode chegar a 4 vezes.

Destaca-se também que ao se adotar a biblioteca numérica PETSc, fundamentada em práticas modernas de engenharia de software, viabilizou-se uma integração eficiente entre hardware e algoritmo numérico desenvolvido, contribuindo na área da modelagem de fluxo de água em meios porosos.

Por fim, considerando o objeto de pesquisa do artigo a equação de Richards, a abordagem de resolução mais comum tem sido associar a técnica de Picard com um método direto de resolução do sistema linear, por exemplo, a eliminação gaussiana. Entretanto, existe uma lacuna aberta na teoria sobre como se comportam as técnicas de Picard quando combinadas com métodos de subespaço de Krylov com pré-condicionamento. Neste sentido, os resultados

preliminares apresentados apontam que a metodologia desenvolvida no artigo pode ser uma boa alternativa na busca do entendimento dos fenômenos de fluxo em meios porosos não saturados, inclusive na modelagem da recarga de aquíferos subterrâneos.

## AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem a FAPERJ, CNPq e CAPES.

## REFERÊNCIAS

- BALAY, S. *et al.* **PETSc Web page**, <http://www.mcs.anl.gov/petsc>, 2015.
- BENZI, M. **Preconditioning techniques for large linear systems: a survey**. Journal of computational Physics, v. 182, n. 2, p. 418-477, 2002.
- BERGAMASCHI, L.; BRU, R.; MARTINEZ, A.; MAS, J.; PUTTI, M. **Low-rank update of preconditioners for the nonlinear Richards equation**. Mathematical and Computer Modelling, v. 57, n. 7, p. 1933-1941, 2013.
- BEVILACQUA, I.; CANONE, D.; FERRARIS, S. **Acceleration techniques for the iterative resolution of the Richards equation by the finite volume method**. International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering, v. 27, n. 8, p. 1309-1320, 2011.
- BUNSRI T.; SIVAKUMAR M.; HAGARE D. **Applications of Hydraulic Properties Models on Microscopic Flow in Unsaturated Porous Media**. Journal of Applied Fluid Mechanics, v. 2, n. 2, p. 1-11, 2009.
- CARVALHO, L. M.; GRATTON, S. **Avanços em métodos de Krylov para solução de sistemas lineares de grande porte**. Notas em matemática aplicada, v. 42, 2009.
- CELIA, M.; BOULOUTAS, E. T.; ZARBA, R. L. **General mass-conservative numerical solution for the unsaturated flow equation**. Water Resources Research, v. 26, n. 7, p. 1483-1496, 1990.
- DURNER, W.; JANSEN, U.; IDEN, S. C. **Effective hydraulic properties of layered soils at the lysimeter scale determined by inverse modelling**. European Journal of Soil Science, v. 59, n. 1, p. 114-124, 2008.
- GOTTARDI, G.; VENUTELLI, M. **Richards: Computer program for the numerical simulation of one-dimensional infiltration into unsaturated soil**. Computers & Geosciences, v. 19, n. 9, p. 1239-1266, 1993.
- GUTERRES, M. X. **Avaliação dos Algoritmos de Picard-Krylov e Newton-Krylov na Solução da Equação de Richards**. 2013. 189 f. Tese (Doutorado em Modelagem Computacional), Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto Politécnico, Nova Friburgo. 2013.
- HAVERKAMP, R.; VAUCLIN, M. **A note on estimating finite difference interblock hydraulic conductivity values for transient unsaturated flow problems**. Water Resources Research, v. 15, n. 1, p. 181-187, 1979.
- HAVERKAMP, R.; VAUCLIN, M.; TOUMA J.; WIERENGA, P; VACHAUD, G. **A comparison of numerical simulation models for one-dimensional infiltration**. Soil Science Society of America Journal, v. 41, n. 2, p. 285-294, 1977.
- JUNCU G.; NICOLA A.; POPA C. **Nonlinear multigrid methods for numerical solution for the variably saturated flow equation in two space dimensions**. Transport in porous media, v. 91, n. 1, p. 35-47, 2012.
- KUMAR C. **A Numerical Simulation Model For One-Dimensional Infiltration**. ISH Journal of Hydraulic Engineering, v. 4, n. 1, p. 5-15, 1998.
- LEHMANN, F.; ACKERER, P. H. **Comparison of iterative methods for improved solutions of the fluid flow equation in partially saturated porous media**. Transport in Porous Media, v. 31, n. 3, p. 275-292, 1998.
- MALISKA, C. R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional**. 2. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2010.
- MILLER, C. T. *et al.* **Numerical simulation of water resources problems: Models, methods, and trends**. Advances in Water Resources, v. 51, p. 405-437, 2013.

- PHILIP J. **Theory of Infiltration: 1. the Infiltration Equation and Its Solution.** Soil Science, v. 83, n. 5, p. 345-358, 1957.
- PHOON, K. K.; TAN T. S.; CHONG P.C. **Numerical simulation of Richards equation in partially saturated porous media: under-relaxion and mass balance.** Geotechnical and Geological Engineering, v. 25, n. 5, p. 525-541, 2007.
- RICHARDS, L. A. **Capillary conduction of liquids through porous mediums.** Journal of Applied Physics, v. 1, n. 5, p. 318-333, 1931.
- SZYMKIEWICZ A. **Modeling Water Flow in Unsaturated Porous Media: Accounting for Nonlinear Permeability and Material Heterogeneity.** Springer Science & Business Media, 2012.
- TOCCI, M. D., KELLEY, C. T., MILLER, C. T., KEES, C. E.. **Inexact Newton methods and the method of lines for solving Richards' equation in two space dimensions.** Computational Geosciences, v. 2, n. 4, p. 291-309, 1998.
- TRACY, F. T. **Clean two-and three-dimensional analytical solutions of Richards' equation for testing numerical solvers.** Water Resources Research, v. 42, n. 8, 2006.
- VAN GENUCHTEN, M. Th. **A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils.** Soil science society of America journal, v. 44, n. 5, p. 892-898, 1980.
- VASCONCELLS C. A. B. **Simulação numérica de escoamentos de meios porosos não-saturados.** Dissertação de mestrado, Instituto Militar de Engenharia do Rio de Janeiro, 2001.
- VASCONCELLS, C. A. B.; AMORIM, J. C. C. **Numerical simulation of unsaturated flow in porous media using a mass-conservative model.** In: 16th Brazilian congress of mechanical engineering, v. 8, p. 139-148, 2001.
- VOULLIÈME, C. D.; NAVARRO, G. P.; MURILLO J.; **Verification, conservation, stability and efficiency of a finite volume method for the 1D Richards equation.** Journal of Hydrology, v. 480, p. 69-84, 2013.
- WARRICK A. LOMEM D.; YATES S. **A generalized solution to infiltration.** Soil Science Society of America Journal, v. 49, n. 1, p. 34-38, 1985.