

Um problema de valor de contorno não-linear em águas subterrâneas

José Anderson do Nascimento Batista¹
Faculdade de Engenharia Civil, Arquitetura e Urbanismo
Universidade de Campinas

Edson Wendland
Departamento de Hidráulica e Saneamento
Escola de Engenharia de São Carlos
Universidade de São Paulo

Resumo

A proteção contra poluição e a conservação dos mananciais de águas subterrâneas em níveis de cargas hidráulicas elevados tem sido muito buscada no gerenciamento de recursos hídricos, porém ainda pouco estudada na mecânica ambiental. Soluções aproximativas diversas têm sido desenvolvidas na tentativa de estender a modelagem analítica na direção da grande variedade de problemas de escoamento matematicamente descritíveis em águas subterrâneas. Este trabalho equaciona o escoamento horizontal através da fronteira entre a área de afloramento e a área confinada de um aquífero obtendo uma condição de contorno não-linear chamada de condição de Poincaré. A descontinuidade do potencial através da fronteira é especificada pelo pulo de potencial da função linha dublê. A solução do sistema exigiu um algoritmo híbrido que combina o método de Newton-Raphson ao da bisseção. A convergência do processo é sensível à estimativa inicial da solução, porém, em todos os casos estudados, linearizando-se a condição de contorno produziu-se estimativas iniciais que sempre permitiram a convergência da solução. A solução obtida foi validada mediante a avaliação dos erros apenas sobre o contorno.

Palavras-chaves: escoamento em aquíferos; inhomogeneidades; elementos analíticos; condição de Poincaré

Introdução

No campo dos modelos matemáticos de escoamento subterrâneo, a modelagem analítica tem-se desenvolvido com o objetivo de tornar possível a modelagem de áreas abertas e com variações contínuas de propriedades (Strack, 2006). Essa abordagem está crescendo a cada novo problema de valor de contorno caracterizado em Águas Subterrâneas. A condição de contorno de uma área de afloramento expressa uma mudança forçada de escoamento de confinado para livre e vice-versa. Alguns trabalhos dedicados à formulação de problemas de campos potenciais sujeitos a condições de contorno não-lineares desenvolveram soluções exatas para o problema do escoamento potencial de um fluido ao redor de um cilindro poroso (e.g. Von Wolfersdorf e Mönch, 2000). Problemas não-lineares em aquíferos são, ainda, pouco estudados. Fitts e Strack (1996) encontram a solução exata da passagem de um escoamento unidirecional e unidimensional sobre um degrau caracterizado sobre o embasamento do aquífero. Neste trabalho, é abordado de maneira aproximativa um escoamento através de área de afloramento pela sobreposição de funções chamadas de linhas dublês.

1. O Problema Físico

A lei de Darcy fica escrita para um potencial de descarga Φ [L^3T^{-1}] como:

¹ Av. Albert Einstein 951, Caixa Postal 6021, Campinas-SP, Brasil, CEP: 13083-852
Fone: +55(19)3521-2916
Fax: +55(19)3521-2411
E-mail: nbatista@fec.unicamp.br

$$\mathbf{Q} = - \frac{d\phi}{dr} \quad \text{Eq. 1}$$

O potencial expresso pela Eq. 1 descreve, de forma abrangente e indiscriminada, escoamentos livres e confinados. A Eq. 1 é igualmente contínua e diferenciável em todo o aquífero e permite, ainda, que fenômenos de confinamentos locais (Figura 1a), como ocorre em lentes de argila, e de desconfinamentos livres (Figura 1b) sejam tratados sem a necessidade da imposição de condições de contorno. A substituição de Eq. 1 na equação da continuidade da massa,

$$\text{div } \mathbf{Q} = 0,$$

torna o escoamento determinado completamente em termos de Φ , o potencial de descarga em qualquer posição \mathbf{r} pela a seguinte equação governante:

$$\nabla^2 \phi = 0. \quad \text{Eq. 2}$$

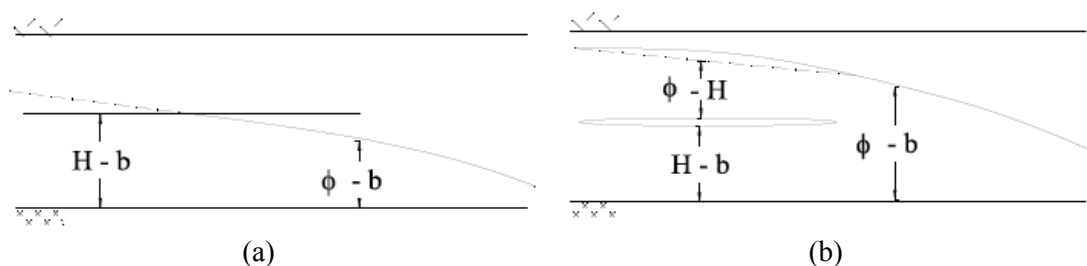


Figura 1 – Esboço do escoamento subterrâneo abrangendo condições livres e confinadas em situações que ocorrem mudanças livres. a) Passagem através de lentes impermeáveis. b) Despressurização em uma camada confinada.

Segundo Strack (1981), o potencial para representar ambas as situações é dado pela seguinte expressão:

$$\Phi = K(\phi - b)(H - b) - \frac{1}{2} K(H - b). \quad \text{Eq. 3}$$

Áreas de afloramento impõem que na fronteira entre as partes encoberta e descoberta haja mudança de escoamento, seja de livre para confinado, seja de confinado para livre (Figura 2).

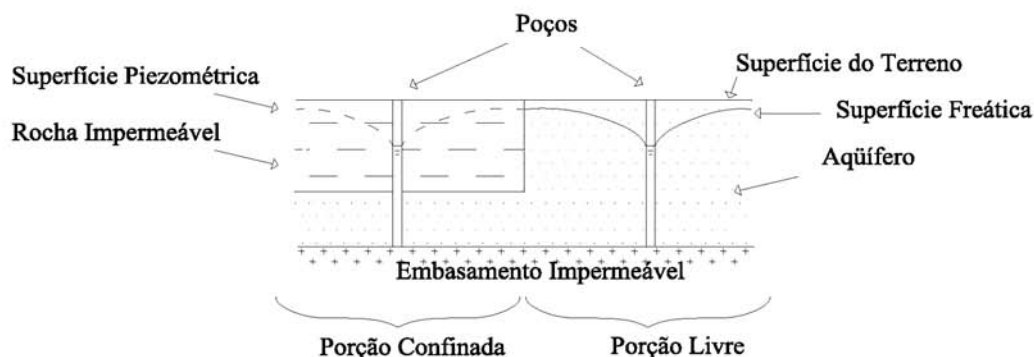


Figura 2- Perfil esquemático da fronteira entre uma região confinada e livre de um aquífero.

Esse escoamento deve satisfazer ao equilíbrio de descarga ($Q^l = Q^c$) e ao equilíbrio de cargas ($\phi^l = \phi^c$)

na fronteira entre a porção livre e a confinada (Γ). A definição de potencial de descarga da Eq. 3 fornece a igualdade de cargas e fluxo na fronteira entre a porção livre (l) e a porção confinada (c) com as seguintes expressões:

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(\frac{\phi^c + \frac{1}{2}KH^2}{KH} \right)^2 \Big|_{\Gamma_1} = \frac{2\phi^l}{K} \Big|_{\Gamma_1} \\ \frac{\partial \phi^l}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{\Gamma_2} = \frac{\partial \phi^c}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{\Gamma_2} \end{array} \right. \quad \text{Eq. 4}$$

Logo, a equação de Laplace e as condições de contorno da Eq. 4 são que caracterizam o problema do escoamento em áreas de afloramento. Um problema de equação governante linear e condições de contorno não-lineares quadrático denominadas de condições de Poincaré.

2. Método de Solução

A solução do problema do escoamento com fronteiras entre áreas livres e confinadas é obtida definindo-se uma variável chamada “pulo no potencial”. A Eq. 3 demonstra que um mesmo valor de carga hidráulica em um ponto qualquer da fronteira de uma inomogeneidade ($K^+ \neq K^-$, $b^+ \neq b^-$ ou $H^+ \neq H^-$) se analisado imediatamente dentro (ϕ^+) e imediatamente fora da fronteira (ϕ^-), sendo $\phi^+ = \phi^-$, produz diferentes potenciais, cuja diferença é chamada pulo no potencial, $\Phi^+ - \Phi^- \neq 0$. Strack e Haitjema (1981) formularam o uso de uma função linha dublê (função dublê integrada em um segmento de reta) para reproduzir o pulo de potencial necessário para equilibrar as cargas através de uma inomogeneidade, $\phi^+ = \phi^-$. Seja um potencial complexo dado pelo dublê

$$\Omega_d = \frac{1}{2\pi} \frac{s}{z - z_0}, \quad \text{Eq. 5}$$

que é uma função que atende a equação de Laplace, sendo s o número complexo que fornece a intensidade e o sentido do dublê e Ω_d o potencial complexo cuja parte real vale Φ e a parte imaginária vale Ψ . Logo, pelo teorema de Cauchy e pela lei de Darcy, diz-se que se Φ é o potencial de descarga, então Ψ é a função de corrente do escoamento. Uma linha dublê é expressa pela integral de Cauchy sobre a função dublê como:

$$\Omega_{ld} = -\frac{1}{2\pi i} \int_{-1}^{+1} \frac{\lambda(\Delta)}{Z - \Delta} d\Delta, \quad \text{Eq. 6}$$

sendo que Z e Δ são, respectivamente, as coordenadas planas horizontais complexas locais sobre o domínio e sobre o segmento tais que as extremidades da linha dublê recaiam sobre o eixo dos reais entre -1 e $+1$; o termo λ/i é a função que distribui o esforço do dublê ao longo do segmento.

Strack (1989) e Janković e Barnes (1999) apresentam representações polinomiais do esforço λ em $Z=\Delta$, respectivamente na forma lagrangeana e na forma chebysheviana; e a solução da integral da Eq. 6. A aplicação da função em contornos é feita em segmentos de linhas retas definidas pelas coordenadas locais Z e Δ .

A expressão que define o contorno é obtida definindo-se uma grandeza chamada

transmissividade como a variável tal que:

$$T = Kh, \quad \text{Eq. 7}$$

em que h assume o valor de $h = \phi - b$ no caso do escoamento estar livre e $h = H - b$ no caso do escoamento estar confinado, tem-se $T^+ = K^+ h^+$ imediatamente dentro da fronteira (+) e $T^- = K^- h^-$ imediatamente fora dela (-). Aplicando-se a condição de contorno ao redor da fronteira de forma geral, seja dentro livre ou confinado e fora a alternativa oposta produz-se:

$$\frac{\Phi^+ + \frac{1}{2}K^+(H^+ - b^+)^2}{K^+(H^+ - b^+)} + b^+ = \frac{\Phi^- + \frac{1}{2}K^-(H^- - b^-)^2}{K^-(H^- - b^-)} + b^-.$$

Utilizando-se a definição de transmissividade (Eq. 7), esta equação torna-se:

$$\frac{\Phi^+ + \frac{1}{2}T^+(H^+ - b^+)}{T^+} + b^+ = \frac{\Phi^- + \frac{1}{2}T^-(H^- - b^-)}{T^-} + b^-.$$

Após isolar o pulo no potencial, $\Phi^+ - \Phi^-$, e atribuir-lhe a variável λ , tem-se:

$$\lambda = \frac{T^+ - T^-}{T^-} \Phi^- - \frac{T^+}{2} (H^- + b^- - H^+ - b^+), \quad \text{Eq. 8}$$

em que a variável H define a elevação do topo do aquífero com a possibilidade de $H = \phi$ se o escoamento tornar-se livre. Depois da expressão Eq. 8 ser avaliada em tantos pontos da fronteira (M) quantos forem os coeficientes de todos os elementos da fronteira (N) produz-se um sistema de equações $M \times N$, com $M = N$. A situação de escoamento livre ($H = \phi$) torna o sistema de equações Eq. 8 não-linear, pois pela definição de transmissividade (Eq. 7) e pela definição de potencial em zonas livre (Eq. 3) tem-se:

$$T = \sqrt{2K\Phi}. \quad \text{Eq. 9}$$

Isso torna a Eq. 8 um sistema de equações não-lineares singular, pois a Eq. 9 não pode ser avaliada em estimativas de solução em que $\Phi < 0$. Métodos numéricos para resolver sistemas não-lineares singulares sofrem com regiões com gradientes muito grandes, ou mal definidos. Os métodos newtonianos, como métodos que utilizam os gradientes do sistema, formulam a solução do sistema por expressões da seguinte forma:

$$\mathbf{a}_k = \mathbf{a}_{k-1} + \mathbf{W} \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}_{k-1})$$

sendo \mathbf{a}_k a estimativa do vetor solução no passo k , \mathbf{f} o vetor da função cuja raiz é desejada ($\mathbf{f} = \mathbf{A}\mathbf{a} - \mathbf{b}$, com \mathbf{A} para a matriz de coeficientes e \mathbf{b} para o vetor independente) e \mathbf{W} o controle de passo do processo iterativo baseado no gradiente da função \mathbf{f} . No caso do método de Newton-Raphson, \mathbf{W} vale menos o inverso da matriz jacobiana, $-\mathbf{J}^{-1}$. Por outro lado, o método da bisseção é amplamente aceito como método de solução e possui convergência incondicional, mas lenta. Alternativamente, em problemas não-lineares da área de Engenharia, a rápida convergência dos métodos de gradientes tem sido associada com freqüência à possibilidade de escapar de singularidades do método da bisseção (e.g. Parida e Gupta, 2007). Numa tentativa de substituir as estimativas singulares, foi elaborado um algoritmo que utiliza o método de Newton-Raphson mas recorre ao método de bisseção sempre que 1)

a estimativa (\mathbf{a}_k) levar algum elemento da função (\mathbf{f}) _{i} , para qualquer $i \leq M$, a cortar o eixo zero, seja do positivo para o negativo, seja o contrário; ou 2) a tentativa (\mathbf{x}_k) leva Φ ao valor de $\Phi < 0$ e a transmissividade (T) a um valor fora do conjunto dos números reais (Eq. 9). O algoritmo foi concebido da seguinte maneira:

- 1) Adote a solução inicial (\mathbf{a}_0).
- 2) Estime as raízes (\mathbf{a}_1) da função (\mathbf{f}) pelo método de Newton-Raphson.
- 3) Se a k -ésima estimativa de \mathbf{a} faz alguma componente de \mathbf{f} mudar de sinal e, portanto, $[\mathbf{f}(\mathbf{a}_k)]_i * [\mathbf{f}(\mathbf{a}_{k-1})]_i < 0$ para qualquer $i \leq M$ ou a função \mathbf{f} for singular em \mathbf{a}_k , então estime as raízes entre \mathbf{a}_k e \mathbf{a}_{k-1} com $\mathbf{a}_{k+1} \leftarrow 0,5 * \mathbf{a}_{k-1} + 0,5 * \mathbf{a}_k$.
- 4) Repita o passo 3) até que \mathbf{a}_k e \mathbf{a}_{k-1} produzam $[\mathbf{f}(\mathbf{a}_k)]_i * [\mathbf{f}(\mathbf{a}_{k-1})]_i \geq 0$ para todo $i \leq M$ e que a função \mathbf{f} seja avaliada somente com componentes reais e finitas.
- 5) Se $\|\mathbf{f}\|$ for maior que o valor tolerado e a quantidade de estimativas (k) for menor que a tolerada, prossiga a partir do passo 2, senão pare.

Esse algoritmo parte da solução inicial para obter estimativas pelo método de Newton. Mediante a mudança de sinal ou a presença de singularidade nas componentes da função, um falso método de bisseção ($\mathbf{a} \leftarrow 0,5 * \mathbf{a}_{k-1} + 0,5 * \mathbf{a}_k$) é acionado no item 3 do algoritmo. O método recebe esse nome devido à semelhança com o mecanismo do método da bisseção e à utilidade diferenciada do método para distanciar a avaliação da raiz ao invés de aproximá-la, como estabelece o método da bisseção canônico. Trabalhos recentes voltados para aumento da taxa de convergência de processos iterativos para solução de sistemas não-lineares afirmam que a combinação de métodos newtonianos ao método de bisseção produz resíduos de estimativas, $(\mathbf{a}_k)_i - (\mathbf{a}_{k-1})_i$ para qualquer $i \leq M$, a taxas quadráticas (Wu e Fu, 2001) e cúbicas (Parida e Gupta, 2007), dependendo do comportamento do controle de passos. Em ambos os trabalhos, Wu e Fu (2001) e Parida e Gupta (2007), foram estudadas funções de uma variável apenas.

3. Resultados e Discussões

Foi elaborado um problema hipotético em que um campo de escoamento unidirecional produzido a uma distância infinita atravessa uma inhomogeneidade definida em uma área finita. As unidades de comprimento e de tempo são fictícias e são: “u” para a unidade de comprimento [L] e “t” para a unidade de tempo [T]. Portanto, as unidades de carga hidráulica, ϕ [L], cota de elevação do topo, H [L] e da base, b [L], são dadas por “u”. A condutividade hidráulica, K [LT⁻¹], é dada por “u/t”. A inhomogeneidade apresenta uma redução na cota de elevação do topo do aquífero (Figura 3). O escoamento ocorre livre fora da inhomogeneidade (assinalada com sobrescritos “-”) e passa a confinado dentro da inhomogeneidade (assinalada com sobrescritos “+”).

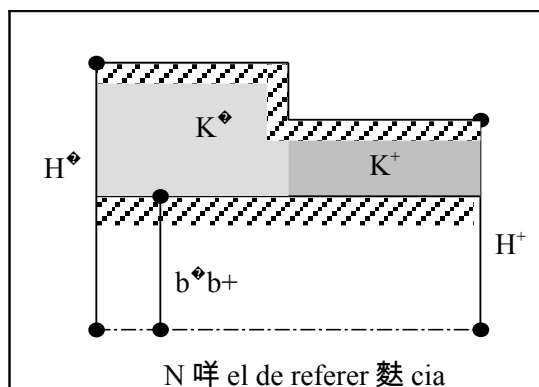


Figura 3 – Corte esquemático da inhomogeneidade do primeiro problema

Foram estudadas três configurações de elevação do topo para esse primeiro problema, conforme

resumidas na Tabela 1. Em todas elas as condutividades hidráulicas são iguais.

Tabela 1 – Parâmetros hidrogeológicos do aquífero para o primeiro problema.

Configuração 1		Configuração 2		Configuração 3	
$K^- = 1,0u/t$	$K^+ = K^-$	$K^- = 1,0u/t$	$K^+ = K^-$	$K^- = 1,0u/t$	$K^+ = K^-$
$b^- = -1,0u$	$b^+ = -1,0u$	$b^- = -1,0u$	$b^+ = -1,0u$	$b^- = -1,0u$	$b^+ = -1,0u$
$H^- = 9,5u$	$H^+ = 8,5u$	$H^- = 9,5u$	$H^+ = 1,1u$	$H^- = 9,5u$	$H^+ = 0,1u$

Pela definição da Eq. 7, uma diferença de transmissividade devido a $\phi^+ - b^+ \neq \phi^- - b^-$ pode ser convertida em uma outra devida a $K^{*+} \neq K^{*-}$. Assim, quando o escoamento é confinado, $\phi \geq H$, tem-se:

$$\frac{K^{*+}}{K^{*-}} = \frac{H^+ - b^+}{H^- - b^-}.$$

A solução inicial de cada configuração é obtida da linearização da transmissividade assumindo $K^{*+} = K^+$ e $K^{*-} = K^+(H^- - b^-)/(H^+ - b^+)$ com $H^- = H^+$. Cada simulação foi obtida por quatro linhas duplês (Eq. 6) que geraram um sistema matricial não-linear do tipo da Eq. 8 com sete equações e sete incógnitas. Em cada configuração da cota de elevação do topo a evolução o processo converge para a solução conforme ilustrado na Figura 4.

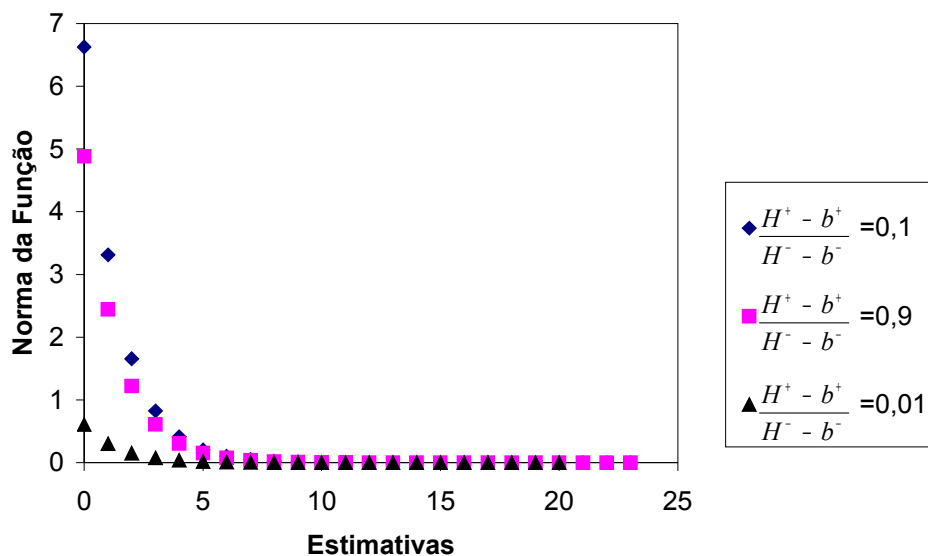


Figura 4 – Evolução da solução do primeiro problema.

As estimativas iniciais produziram diferentes normas iniciais $\|f_0\|$. A Configuração 2 foi a que produziu a maior norma inicial. Embora a Configuração 1 tenha sido a de menor diferença de transmissividades, não foi a de menor norma inicial. Por outro lado, a maior diferença de transmissividades (Configuração 3) produziu a menor norma inicial. Isso aconteceu porque a redução de transmissividade na inhomogeneidade reduz a vazão através da fronteira, que se reflete em um aumento da carga hidráulica no domínio. Com isso, as condutividades hidráulicas (K^+ e K^-) calculadas para a condição semelhante da Configuração 3 guardaram uma melhor equivalência com as transmissividades das espessuras resultantes da simulação (se $H^+ \leq \phi^+$, $h^+ = H^+ - b^+$, senão $h^+ = \phi^+ - b^+$; se $H^- \leq \phi^-$, $h^- = H^- - b^-$, senão $h^- = \phi^- - b^-$). As cargas hidráulicas (ϕ) se posicionaram em cotas

mais próximas do topo do aquífero (H^+) e da inhomogeneidade (H). Os experimentos demonstraram que mesmo o processo iniciando a diferentes distâncias da solução e percorrendo quantidades de passos diferentes, a ordem de convergência permaneceu a mesma. Nas três simulações a ordem de convergência m do processo de solução, tal que $\|\mathbf{f}_n\| = K\|\mathbf{f}_{n-1}\|^m$, sendo $\|\mathbf{f}_n\|$ a norma da função vetorial \mathbf{f} no passo n , foi aproximadamente linear, igual a um a uma constante de proporcionalidade $K=0,5$.

4. Conclusões

As condições de contorno do escoamento em áreas de afloramento demonstram a dependência não-linear das variáveis do escoamento em relação às transmissividades dentro e fora de inhomogeneidades. Matematicamente, o escoamento por inhomogeneidades que forçam o escoamento a mudar entre livre e confinado recai em um problema de valor de contorno não-linear expresso pela condição de Poincaré para a equação diferencial linear de Laplace. Assim, este trabalho descreve o escoamento horizontal em áreas de afloramento por intermédio de e de uma condição de contorno não-linear classificada como condição de Poincaré. A implementação da solução deste problema exigiu a elaboração de um algoritmo iterativo híbrido que combina o método de Newton-Raphson ao da bisseção. Análises de sensibilidade foram obtidas a partir de um problema hipotético. Foram resolvidas três situações de mudança de escoamento forçada a partir de condições iniciais obtidas por intermédio de uma equivalência hidráulica aparente na transmissividade. O comportamento do processo iterativo demonstrou-se convergente a uma razão constante e igual a $1/2$ e sempre estável.

A validação da solução é garantida porque a função linha duplê satisfaz a equação governante (equação de Laplace) e, também, pelo ajuste obtido para as condições de contorno. A aplicação das condições de Poincaré em problemas práticos em trabalhos futuros permitirá avaliar questões transfronteiriças como a interferência bilateral do bombeamento de áreas de afloramento e de áreas confinadas.

Agradecimentos: os autores agradecem à FAPESP pelos fundos concedidos ao processo 06/57242-2

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Fitts, C.R. e Strack, O.D.L. Analytic solutions for unconfined groundwater flow over a stepped base, *J. of Hydrology*, n177, 1996, pp65-76.
- Janković I. and Barnes R. High-order line elements in modeling two-dimensional groundwater flow. *J. Hydrology*, v226, 1999, pp211-223
- P.K. Parida e D.K. Gupta, A cubic convergent iterative method for enclosing simple roots of nonlinear equations, *Applied Mathematics and Computation*, v187, n2, 2007, pp1544-1551
- Strack, O.D.L. Flow in aquifers with clay lamina, 1. The comprehensive potential. *Water Resources Research*, v17, n4, 1981, pp985-992;
- Strack O.D.L. The Development of New Analytic Elements for Transient Flow and Multiaquifer Flow. *Ground Water*, v44, n1, 2006, pp91-98
- Strack, O.D.L. e Haitjema, H.M. Modeling double aquifer flow using a comprehensive potential and distributed singularities 2. Solution for inhomogeneous permabilities. *Water Resour. Res.*, v17, n5, 1981, pp1551-1560.
- Von Wolfersdorf, L. e Mönch, W. Potential flow past a porous circular cylinder, *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, v80, 2000, pp. 457-471
- X. Wu e D. Fu, New high order convergence iteration methods without employing derivatives for solving nonlinear equations, *Computers and Mathematics with Applications*, v41, 2001, pp. 489-495.