

Pesquisa e Ensino em Ciências Exatas e da Natureza 6(edição especial 1): e1875 (2022) Research and Teaching in Exact and Natural Sciences

ARTIGO

ISSN 2526-8236 (edição online) **Pesquisa e Ensino em Ciências Exatas e da Natureza** ©2022 UFCG / CFP / UACEN

Avaliação de métodos iterativos aplicados à equação de Richards com diferentes níveis de saturação

Mario Jorge dos Reis Moura¹, Renan de Souza Teixeira² & Wilian Jeronimo dos Santos²

(1) Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional. BR-465, Km 07, 23890-000, Seropédica, Rio de Janeiro, Brasil. E-mail: mariomoura@ufrrj.br

(2) Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Departamento de Matemática. BR-465, Km 07, 23890-000, Seropédica, Rio de Janeiro, Brasil. E-mails: rsteixeira@ufrrj.br, wilianj@ufrrj.br

Mario J.R.M. *et al.* (2022) Avaliação de métodos iterativos aplicados à equação de Richards com diferentes níveis de saturação. *Pesquisa e Ensino em Ciências Exatas e da Natureza*, 6(edição especial 1): e1875. http://dx.doi.org/10.29215/pecen.v6i1.1875

Editora acadêmica: Claudia Mazza Dias. Recebido: 26 janeiro 2022. Aceito: 16 junho 2022. Publicado: 24 agosto 2022.

Resumo: Os recursos hídricos desempenham um importante papel na agricultura e no meio ambiente. Sistemas de irrigação e os processos de infiltração determinam a quantidade de água armazenada no solo, essencial para o crescimento de plantas e vegetais. O presente trabalho tem como objetivos resolver a equação de Richards e fazer um estudo comparativo de um escoamento em meio poroso não-saturado, aplicando diferentes esquemas iterativos, considerando diferentes níveis de saturação. Foram feitas comparações entre as soluções obtidas, número de iterações durante o processo iterativo e taxas de convergência, empregando os métodos de Picard, Picard Modificado e Newton-Raphson. As soluções obtidas pelo esquema de Picard Modificado possuem taxas de convergência melhores para condições iniciais de solos mais secos, e as do método de Newton-Raphson são as mais precisas em todos os níveis de saturação dos solos trabalhados.

Palavras-chave: Modelagem Matemática, Método de Picard, Método de Picard Modificado, Método de Newton-Raphson, Equação de Richards.

Evaluation of iterative methods applied to Richards equation with different saturation levels

Abstract: Water resources play an important role in agriculture and the environment. Irrigation systems and infiltration processes determine the amount of water stored in the soil, which is essential for plant and vegetable growth. The present work aims to solve Richards' equation (one-dimensional case) and to produce a comparative study of a non-saturated porous medium flow, applying different iterative schemes, considering different initial conditions of humidity, that is, different levels of saturation. Comparisons between the obtained solutions, number of iterations during the iterative process and convergence rates were made, using Picard, Modified Picard and Newton-Raphson methods. The solutions of drier soils, and those obtained by the Newton-Raphson method are the most accurate at all soil saturation levels worked on.

Key words: Mathematical modeling, Picard method, Modified Picard method, Newton-Raphson method, Richards equation.

Introdução

O fenômeno de infiltração hídrica em meios porosos não-saturados tem um papel fundamental na produção agrícola e industrial, pois vegetais e legumes cultivados dependem da disponibilização de água em quantidades ideais no solo. A irrigação é uma aplicação relevante de tal fenômeno (Farthing & Ogden, 2017).

Simulações numéricas são úteis para descrever os perfis de umidade em meios porosos e compreender a dinâmica do processo de infiltração. A modelagem envolve a resolução numérica da equação de Richards, uma equação diferencial parcial não-linear, cuja solução analítica é possível apenas para casos particulares (Celia *et al.*, 1990). Portanto, métodos numéricos são empregados para resolver tal problema (Farthing & Ogden, 2017).

De acordo com Vereecken *et al.* (2019), os estudos de Celia *et al.* (1990) contribuíram para os avanços em modelagem em Ciência do Solo, pois os esquemas numéricos propostos são capazes de gerar perfis de umidade com boa conservação de massa, sendo popularmente empregados até os dias atuais. Na década de 90, Celia *et al.* (1990) resolveram a equação de Richards usando os métodos de elementos finitos e diferenças finitas como aproximações no espaço, e o método de Euler implícito como aproximação temporal, gerando, portanto, um sistema de equações não-lineares, sendo resolvido iterativamente pelos métodos de Picard e Picard modificado.

A equação de Richards governa o fenômeno de infiltração hídrica em meios porosos, descrevendo matematicamente o movimento da água no solo (Vereecken *et al.*, 2019). Ela pode ser escrita nas formas *h* (em termos de carga hidráulica), θ (em termos de umidade) e *mista*. A forma *h* da equação de Richards e o problema abordado são

$$C(h)\frac{\partial h}{\partial t} - \overrightarrow{\nabla} \cdot \left[K(h)\overrightarrow{\nabla}h\right] - \frac{\partial K(h)}{\partial z} = 0$$
$$h(L,t) = h_t \quad \text{e} \quad h(0,t) = h_f$$
$$h(z,0) = h_0$$

onde z é a coordenada vertical, positiva para cima; t é o tempo; h é a carga hidráulica; K(h) é a função de condutividade hidráulica; $C(h) = \partial \theta / \partial h$ é a função de capacidade hídrica específica; θ é a umidade; h_0 é a condição inicial de umidade do solo; h_t e h_f são as condições de contorno no topo e no fundo da coluna de solo. A solução numérica produzida se reflete em um perfil de umidade, que guarda uma relação entre a carga hidráulica h em função da profundidade z do solo.

Já a forma mista da equação de Richards e o problema abordado são dados por

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} - \vec{\nabla} \cdot \left[K(h) \vec{\nabla} h \right] - \frac{\partial K(h)}{\partial z} = 0,$$

$$h(L,t) = h_t \quad \text{e} \quad h(0,t) = h_f$$

$$h(z,0) = h_0$$

onde a equação na forma *mista* gera perfis de umidade com a mesma relação entre carga hidráulica e profundidade da forma *h*. A diferença é que neste caso a equação de Richards goza da propriedade de conservação de massa, ou seja, mesmo trabalhando com grandes passos de tempo, as simulações são capazes de descrever a umidade no solo de forma acurada (Celia *et al.*, 1990). Todas as considerações feitas para a forma *h* valem aqui.

No trabalho em questão, foram adotadas as formas h e *mista*, que são mencionadas pelos autores Farthing & Ogden (2017), Bouchemella *et al.* (2015) e Celia *et al.* (1990),

discutindo e avaliando as vantagens na aplicação das distintas formas da equação quanto a estabilidade, eficiência e convergência.

A equação de Richards depende da condutividade hidráulica, que é função da umidade ou da carga hidráulica e, portanto, também responsável pelo caráter não-linear do fenômeno e da equação. Logo, é necessário adotar um modelo de condutividade hidráulica para ser viável uma solução numérica para a equação diferencial. O modelo de Haverkamp *et al.* (1977) foi empregado, contendo representações analíticas que relacionam a condutividade hidráulica, umidade e carga hidráulica.

Foram feitas simulações do fenômeno de infiltração hídrica unidimensional em meio poroso não-saturado, via equação de Richards nas formas *h* e *mista*, usando parâmetros de solo reportados por Haverkamp *et al.* (1977) no trabalho de Celia *et al.* (1990). A adoção do modelo de Haverkamp é justificada pelo fato das implementações usadas neste trabalho terem sido feitas seguindo o esquema de Celia *et al.* (1990), que também fez uso de tal modelo. Em adição, com a finalidade de estudar a viabilidade dos códigos computacionais em gerar soluções, foi feita uma comparação qualitativa com as soluções reportadas por Celia *et al.* (1990), utilizando para tal os mesmos passos de tempo, número de pontos na malha e tempo de infiltração nas simulações. Em seguida, foram gerados os perfis de umidade considerando três níveis de saturação distintos, e a diferença entre este trabalho e o de Celia *et al.* (1990) é que neste último só foi considerado um nível de saturação de solo (-61,5cm). Os resultados dos esquemas numéricos de Picard, Picard modificado e Newton-Raphson foram comparados entre si no que diz respeito à soluções geradas, erros e número de iterações para o processo de convergência, para os três níveis de saturação.

Metodologia

Para a equação de Richards ser resolvida, é necessário adotar um modelo de condutividade hidráulica. O modelo de Haverkamp *et al.* (1977) é utilizado, descrevendo as relações entre $\theta \in K$ como funções da carga hidráulica *h*, a saber

$$\Theta(h) = \frac{\alpha(\theta_s - \theta_r)}{\alpha + |h|^{\beta}} + \theta_r \quad e \quad K(h) = K_s \frac{A}{A + |h|^{\gamma}}$$

onde α , β , γ e A são constantes empíricas; $K_s[LT^{-1}]$ é a condutividade hidráulica de saturação do solo.

A investigação realizada tem caráter comparativo. Foram geradas as soluções da equação de Richards na forma *h* através das técnicas iterativas de Picard e de Newton-Raphson. Também foi gerada a solução da equação de Richards na forma *mista* pelo método de Picard Modificado. Em ambos os casos, o método das diferenças finitas e o método de Euler implícito foram adotados como aproximações no domínio espacial e temporal, respectivamente. Os esquemas numéricos de Picard e Picard modificado são tradicionalmente adotados na resolução numérica da equação de Richards nas formas *h* e *mista*, respectivamente, também utilizados por Celia *et al.* (1990). Já o método de Newton-Raphson é conhecido por sua convergência quadrática, e as comparações feitas neste trabalho se refletem na viabilidade de tais esquemas produzirem soluções para os três casos apresentados na seção seguinte, considerando solos com diferentes níveis de saturação.

Para ser possível a simulação, foram necessários os parâmetros do solo e as condições iniciais e de contorno. De acordo com o problema reportado por Haverkamp *et al.* (1977),

 $\alpha = 1,611.10^6$, $\theta_s = 0,287$, $\theta_r = 0,075$, $\beta = 3,96$, $K_s = 0,00944 \ cm/s$, $A = 1,175.10^6$ e $\gamma = 4,74$. Considerou-se uma coluna de solo de 40 cm de profundidade, com condição inicial $h_0 = -61,5 \ cm$, condições de contorno $h_t = -20,7 \ cm$ e $h_f = -61,5 \ cm$. O tempo de simulação foi de 360 segundos, repetindo o que foi feito em Celia *et al.* (1990). Tempos maiores de simulação são possíveis, desde que as soluções produzidas sejam monotônicas e não oscilatórias. As soluções também foram geradas para solos com menores níveis de saturação, a saber $h_0 = -200 \ e -800 \ cm$. Subentende-se que quanto menor (mais negativo) for o nível de saturação no solo, mais seco ele estará inicialmente.

Resultados e discussão

O estudo foi dividido em três casos, levando-se em conta os diferentes níveis de saturação do solo em questão, de acordo com a Tabela 1. Foram feitas as análises de

	Caso 1	Caso 2	Caso 3
h_0*	-61,5	-200	-800
h_t *	-20,7	-20,7	-20,7
h_f^*	-61,5	-200	-800
Δt^{**}	1	0,0001	0,0001
Δz^*	1	1	1

Tabela 1: Condições dos problemas e parâmetros numéricos das simulações

Nota: * As unidades de medidas são dadas em *cm*. Nota: ** As unidades de medidas são dadas em *s*.

número de iterações do processo de convergência e do comportamento do erro para as diferentes condições iniciais. Para o nível de saturação de solo $h_0 = -61,5 \ cm$, adotouse espaçamento de malha $\Delta z = 1 \ cm$ e passo de tempo $\Delta t = 1s$ em todos os processos iterativos. Já para as condições iniciais de umidade de solo $h_0 = -200$ e $-800 \ cm$, o espaçamento de malha também foi $\Delta z = 1 \ cm$. Entretanto, em tais situações o passo de tempo usado foi $\Delta t = 0,0001s$, haja vista que o método de Newton-Raphson tem convergência condicionada a passos de tempo muito pequenos quando se considera menores saturações do solo. Para as soluções simuladas e o número de iterações para o processo de convergência, o critério de parada adotado foi uma tolerância de 10^{-8} . Já para análise do erro, um número máximo de iterações (200) foi fixado. Matematicamente, o cálculo do erro foi feito considerando o máximo entre as normas infinitas da carga hidráulica e do resíduo em relação à iteração anterior. Em termos de convergência, tanto o resíduo quanto a diferença entre cada iteração se aproximam de zero para ambas as técnicas iterativas.

Com a finalidade de validar as simulações, as soluções geradas pelos métodos iterativos de Picard e Picard Modificado foram comparadas qualitativamente, através de um software que captura os pontos das figuras contendo as soluções obtidas por Celia *et al.* (1990), considerando-se para as simulações, em ambos os casos, espaçamento de malha $\Delta z = 1 \ cm$, condição inicial $h_0 = -61,5 \ cm$, condições de contorno $h_t = -20,7 \ cm$ e $h_f = -61,5 \ cm$ e tempo de simulação de 360 segundos. Não foi possível validar qualitativamente as soluções vindas do método de Newton-Raphson, pois Celia *et al.* (1990) não usou tal esquema. O código foi desenvolvido e implementado pelos autores deste trabalho, em linguagem FORTRAN, sem a utilização de pacotes. As discretizações da equação de Richards nas formas *h* e *mista* podem ser consultadas em Celia *et al.* (1990), e para

o esquema de Newton-Raphson, as equações discretizadas na formulação *h* são reescritas de forma a ser possível montar a matriz Jacobiana e resolver o sistema iterativamente.

De acordo com as Figuras 1(a) e 1(b), as soluções conseguiram capturar os pontos dos perfis de umidade gerados por Celia *et al.* (1990), o que demonstra a viabilidade das simulações em descrever o movimento da água com os parâmetros dados, para diferentes passos de tempo Δt .



(a) Simulações (Picard) vs Celia et al. (b) Simulações (Picard Mod.) vs Celia et (1990) al. (1990)

Figura 1: Validação das simulações. Fonte: autores

As soluções simuladas para as diferentes técnicas iterativas estão muito próximas umas das outras, e portanto elas conseguem captar os pontos dos perfis de umidade razoavelmente, com exceção do método de Picard, cuja solução não convergiu sob condição de solo mais seco, como mostram as Figuras 2 e 3. A divergência do método de Picard em condição de solo mais seco pode estar atrelada ao fato da equação de Richards na forma h não gozar da propriedade de conservação de massa, podendo ocasionar efeitos consideráveis no início da simulação, já que neste instante a descontinuidade entre a condição inicial e a condição de contorno é muito pronunciada, gerando um gradiente de umidade muito íngreme, englobando erros durante o processo iterativo, não sendo possível, consequentemente, gerar solução em tal nível de saturação.



Figura 2: Soluções simuladas para nível de saturação $h_0 = -61,5 \ cm$ (caso 1). Fonte: autores

Em termos de análise de convergência das soluções, foram gerados os gráficos do número de iterações em função dos passos de tempo físico, além do comportamento do erro em função das iterações no primeiro passo de tempo físico, levando-se em conta os diferentes níveis de saturação do solo.

5

Moura et al. (2022) / Pesquisa e Ensino em Ciências Exatas e da Natureza, 6(edição especial 1):



Figura 3: Soluções simuladas para condições iniciais de solos mais secos. Fonte: autores

Pelas Figuras 4(a) e 4(b), o método de Picard foi a técnica iterativa com pior taxa de convergência e que precisou de um número maior de iterações, principalmente ao considerarmos os primeiros passos de tempo físico, o que podem ser indicativos da dificuldade do método de Picard em lidar com a descontinuidade no início do processo de infiltração, além da não conservação de massa inerente. O método se estabilizou a partir do 11º passo de tempo físico, ao passo que o método de Picard Modificado mostrou tal comportamento a partir do 8º passo de tempo físico, ambos requerendo 11 iterações a partir daí. Em adição, a solução obtida pelo método de Newton-Raphson tem melhor taxa de convergência, precisando de 7 iterações para atingir erro com precisão de máquina, exigindo um número menor (e praticamente constante) de iterações durante os passos de tempo físico. Já o método de Newton, atingindo erro com precisão de máquina com 13 iterações. Também, o método de Picard precisou de aproximadamente 60 iterações para atingir erro com precisão de máquina com 13 iterações. Também, o método de Picard precisou de aproximadamente 60 iterações para atingir erro com precisão de máquina com 13 iterações de máquina, mas apesar disso a técnica iterativa se mostrou mais precisa que o método de Picard Modificado.



(a) N° de iterações para cada passo de (b) Erro para o primeiro passo de tempo tempo físico físico

Figura 4: Análise de convergência para o caso 1. Fonte: autores

Analisando as Figuras 5(a) e 5(b), todas as técnicas iterativas demandaram um número baixo de iterações em função dos passos de tempo físico, permanecendo praticamente constantes. Tal observação pode ser explicada considerando o passo de tempo menor, demandando um número menor de iterações no processo de convergência. Entretanto, comparativamente, o método de Picard precisou de um número maior de iterações até o 36º passo de tempo físico, se igualando ao método de Newton-Raphson a partir daí, com

4 iterações. Ainda nas Figuras 5(a) e 5(b), é interessante ressaltar que o método de Picard Modificado necessitou de um número menor (e constante) de iterações para cada passo de tempo físico, apresentando a melhor taxa de convergência dentre as técnicas iterativas. Entretanto, é mais impreciso que os métodos de Newton-Raphson e Picard, que possuem erros com precisão de máquina de mesma ordem de grandeza.

Já para o caso em que o solo está mais seco, o método de Picard não convergiu, provavelmente devido à grande descontinuidade existente entre as condições inicial e de contorno. Pelas Figuras 6(a) e 6(b), o método de Newton-Raphson possui pior taxa de convergência quando se compara com o método de Picard Modificado, gerando, entretanto, resultados mais precisos. Em relação ao número de iterações para o processo de convergência, novamente o método de Picard Modificado manteve comportamento constante durante toda a simulação, precisando de 3 iterações em cada passo de tempo físico para atingir a tolerância estipulada.



(a) N° de iterações para cada passo de (b) Erro para o primeiro passo de tempo tempo físico físico

Figura 5: Análise de convergência para o caso 2. Fonte: autores



(a) N° de iterações para cada passo de (b) Erro para o primeiro passo de tempo tempo físico físico

Figura 6: Análise de convergência para o caso 3. Fonte: autores

Isso pode ser explicado pelo fato de que a equação de Richards na forma *mista* tem a propriedade de conservação de massa, e como o passo de tempo adotado é pequeno, a simulação foi capaz de capturar os pontos do perfil de umidade às custas de menos iterações, mesmo sob condições de solos mais secos. Já o método de Newton-Raphson é mais sensível em lidar com situações mais extremas, onde a descontinuidade existente no início do processo de infiltração pode ser a responsável pelo número maior de iterações.

Considerando todas as técnicas iterativas estudadas neste trabalho, o comportamento do decaimento do erro é mais acelerado a partir do segundo passo de tempo físico, já que o impacto no número de iterações é maior no primeiro passo de tempo.

Conclusões

A técnica iterativa de Picard não é indicada para condições iniciais de solos muito secos, já que as soluções convergiram somente nos casos 1 e 2, apresentando as piores taxas de convergência em ambas as situações. Já os métodos de Picard Modificado e Newton-Raphson geraram os melhores resultados, independente da condição de saturação do solo adotada neste trabalho. Para solos mais secos, o método de Picard Modificado apresentou taxas de convergência melhores. Todavia, os erros nas aproximações são ligeiramente maiores do que aqueles atrelados ao método de Newton-Raphson. Por outro lado, apesar de possuir taxas de convergência piores para solos inicialmente mais secos, o método de Newton-Raphson gerou resultados mais precisos para todos os níveis de saturação de solo trabalhados. É importante ressaltar que para condições iniciais de solos mais secos, o método de Newton-Raphson só convergiu para pequenos passos de tempo, o que envolve maior esforço computacional. Também, os parâmetros do modelo de Haverkamp *et al.* (1977) adotados neste trabalho são característicos de um solo arenoso, homogêneo e isotrópico.

Agradecimentos

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

Referências

- Bouchemella, S., Séridi, A. & Alimi-Ichola, I. (2015) Numerical simulation of water flow in unsaturated soils: comparative study of different forms of Richards's equation. *European Journal of Environmental and Civil Engineering*, 19, 1-26.
- Celia, M. A., Boulotas, E. T. & Zarba, R. L. (1990) A general mass-conservative numerical solution for the unsaturated flow equation. *Water resources research*, 26, 1483-1496.
- Farthing, M. W. & Ogden, F. L. (2017) Numerical solution of Richards' equation: A review of advances and challenges. *Soil Science Society of America Journal*, 81, 1257-1269.
- Haverkamp, R., Vauclin, M., Touma, J., Wierenga, P. J. & Vachaud, G. (1977) A comparison of numerical simulation models for one-dimensional infiltration. *Soil Science Society of America Journal*, 41, 285-294.
- Vereecken, H. et al. (2019) Infiltration from the pedon to global grid scales: An overview and outlook for land surface modelling. Vadose Zone Journal, 18, 1-53.