

MODELAÇÃO NUMÉRICA DA CIRCULAÇÃO DA ÁGUA NO SOLO. O MODELO MOHID.

R. Neves, P. Chambel-Leitão & P.C.Leitão
Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa
ramiro.neves@ist.utl.pt

RESUMO

Os modelos de simulação mais conhecidos (e.g. HYDRUS, MODFLOW, RZWQM, MACRO) foram divulgados principalmente na década de 90. No entanto, o seu desenvolvimento iniciou-se muito antes, quando a capacidade de cálculo era insignificante quando comparada com a actual. Por essa razão esses modelos foram vocacionados para aplicações específicas. A circulação da água no solo rege-se pelas leis gerais da mecânica dos fluidos (conservação da massa, conservação da quantidade de movimento e conservação da energia). É por isso que o modelo MOHID originalmente simulava processos marinhos e agora permite simular a circulação e processos de qualidade da água em barragens, tal como o escoamento em meios não saturados. A estratégia usada no desenvolvimento deste modelo tem por objectivo desenvolver um “laboratório numérico” que permita simular os processos principais, que condicionam o escoamento e a qualidade da água, que ocorrem desde as cabeceiras das bacias hidrográficas até ao oceano. Apresenta-se neste artigo uma validação qualitativa do modelo MOHID comparando os resultados com os do modelo HYDRUS2D para o caso do ensaio descrito em Jury et al. (1991).

SUMMARY

The most popular simulation models (e.g. HYDRUS, MODFLOW, RZWQM, MACRO) were basically disseminated in the nineties. However their development started earlier, when the compute capacity was insignificant when compared with nowadays. For this reason these models were made for specific applications. The water circulation in the soil obeys the general laws of fluid mechanics (mass conservation, momentum conservation and energy conservation). That is why a model like MOHID that originally simulated marine processes, now allows the simulation of water flow and quality processes in reservoirs and water flow in unsaturated media. The strategy used in the development of this model aims the development of a “numerical laboratory” which allows simulating the major processes, which regulate the water flow and quality from the top of the hydrographic basins up to the Oceans. It is presented in this paper a qualitative validation of the model MOHID by comparing its results with results of HYDRUS2D in case of the experiment presented by Jury et al. (1991).

INTRODUÇÃO

Motivação

A circulação da água no solo é uma das áreas centrais da física do solo, constituindo o seu conhecimento o ponto de partida para o estudo dos solutos. A gestão da água e dos sais nas camadas superiores do solo e a sua interacção com a actividade das plantas foi durante anos preocupação quase exclusiva das ciências agrárias. Pelo contrário, a gestão de aquíferos e das águas superficiais eram temas abordados predominantemente pela engenharia dos recursos hídricos, cujas ferramentas só marginalmente ti-

nam em consideração as actividades e os conhecimentos das ciências agrárias.

O aumento contínuo do consumo de água e a utilização massiva de produtos químicos na agricultura criaram problemas de quantidade e/ou de qualidade da água um pouco por todo o mundo, pondo em evidência a necessidade da gestão integrada da quantidade e da qualidade da água. Na Europa são a Holanda e o Reino Unido os países com maiores dificuldades de abastecimento de água potável, apesar de as condições climáticas dos países do sul fazerem supor que seriam estes os primeiros a entrar em situações de ruptura.

A necessidade da gestão integrada da água é a razão de ser da Directiva Quadra da Água, a qual integra outras directivas de âmbito mais res-

trito (e.g. Nitratos, Águas Residuais, Águas Balneares).

O modelo MOHID foi inicialmente desenvolvido para estudar a circulação em zonas costeiras e oceânicas. O desenvolvimento dos computadores, das ferramentas de desenvolvimento da programação e a necessidade de ferramentas de gestão integrada da água levaram os autores do modelo a reorganizá-lo de forma a tratar também o problema da água subterrânea, quer nas camadas superficiais do solo, quer nos aquíferos.

Especificidade do escoamento nos solos

A circulação da água no solo rege-se pelas leis gerais da mecânica dos fluidos (conservação da massa, conservação da quantidade de movimento e conservação da energia). Tal como nas outras áreas da mecânica dos fluidos, a incapacidade de descrever o detalhe do campo de velocidades é resolvida através da introdução de parâmetros empíricos para o cálculo das forças de resistência ao escoamento. No caso dos solos em regime não saturado, esta parametrização tem ainda a dificuldade adicional de a área efectiva de passagem da água variar com o próprio teor de água. A juntar a esta dificuldade, nos solos não saturados a água está também sujeita a forças devidas à tensão superficial, cuja importância aumenta à medida que os poros de menor diâmetro vão sendo ocupados pelo ar. Por estas razões, a mecânica dos fluidos em solos constitui uma pequena parte do problema da física do solo, advindo a principal dificuldade da obtenção dos parâmetros empíricos que permitem relacionar o teor de água, a força de pressão e a força de resistência ao movimento (que no caso dos solos é tradicionalmente tratada na forma de uma condutividade).

Circulação da água no solo e modelação

A modelação da circulação da água no solo consiste essencialmente na descrição matemática das propriedades hidráulicas do solo, uma vez que as leis de Darcy e a equação de conservação da massa (que, combinadas, dão a equação de Richards) são equações simples.

A lei de Darcy pode ser obtida a partir da equação de Bernoulli generalizada aplicada a condutas em regime laminar, onde o coeficiente de atrito é explicitado a partir da solução de Poiseuille para tubos cilíndricos. Deduzindo a equação dessa forma, verifica-se que a condutividade hidráulica é proporcional ao à quarta potência do diâmetro dos poros e inversamente proporcional à viscosidade da

água, a qual depende essencialmente da temperatura.

O balanço de forças em tubos capilares mostra que a redução da pressão devida à tensão superficial é inversamente proporcional ao diâmetro do poro. Também as forças devidas à adsorção se tornam mais importantes à medida que o teor de água no solo baixa. A curva que relaciona a pressão e a humidade no solo - curva de retenção da água no solo - é uma característica específica de cada tipo de solo.

A especificidade da simulação da circulação da água no solo resulta da necessidade de modelar as curvas de retenção da água e da condutividade hidráulica, envolvendo um conjunto reduzido de parâmetros específicos do solo em estudo.

MODELOS DAS PROPRIEDADES HIDRÁULICAS DO SOLO

Os modelos das propriedades hidráulicas partem de aproximações essencialmente empíricas ou de formulações teóricas baseadas em soluções para escoamentos em geometrias simples. São exemplos de aproximações de cariz empírico os modelos de van Genuchten (1980) e os modelos de Brooks and Corey. O modelo de Mualem (1976) é o mais conhecido de entre os modelos com maior suporte teórico.

Os modelos de van Genuchten e de Brooks & Corey foram incluídos em modelos de simulação da circulação da água no solo, tendo sido também objecto de modelos inversos para a obtenção dos respectivos parâmetros a partir de dados experimentais. As ferramentas de simulação em que foram integrados permitiram a sua disseminação pela comunidade científica, tornando-os modelos standard.

A divulgação dos métodos numéricos iniciada nos anos 90 permitiu o aparecimento de ferramentas de simulação aplicáveis em várias áreas da mecânica dos fluidos. Essa ferramentas poderão incluir facilmente diferentes modelos das propriedades hidráulicas do solo, sendo de esperar que venham a dar visibilidade a modelos menos conhecidos (e.g. Santos & Gonçalves, 1998), desenvolvidos por grupos de investigação com dimensão insuficiente para produzirem as ferramentas de simulação que a sua divulgação requer.

O modelo MOHID é uma ferramenta de simulação inicialmente desenvolvida para modelar a circulação em zonas costeiras e oceânicas. Ti-

rando partido da experiência obtida na simulação desses sistemas e da capacidade de expansão permitida pelas novas linguagens de programação, esse modelo foi reorganizado de forma a poder resolver diferentes tipos de equações. A circulação da água no solo foi programada de forma a incluir diferentes modelos de propriedades hidráulicas do solo. Por questões de facilidade de validação dos resultados, foi decidido começar por incluir os modelos de van Genuchten. Deste modo é possível validar os resultados comparando-os com o modelo HYDRUS, cuja última versão (Simunek *et al.*, 1994) simula a circulação da água e dos solutos no solo utilizando interfaces gráficas para a entrada de dados e visualização dos resultados.

MODELOS DE SIMULAÇÃO

Os modelos de simulação mais conhecidos (e.g. HYDRUS, MODFLOW, RZWQM, MACRO) foram divulgados principalmente na década de 90. No entanto, o seu desenvolvimento iniciou-se muito antes, numa altura em que a capacidade de cálculo era insignificante quando comparada com a actual. Por essa razão aqueles modelos foram vocacionados para aplicações específicas.

O modelo MODFLOW é mais conhecido na comunidade interessada na modelação de aquíferos (McDonald, 1988). Neste modelo o solo não saturado é aproximado por uma camada porosa homogénea, através da qual passa a água superficial antes de chegar ao aquífero.

O modelo RZWQM (Root Zone Water Quality Model) utilizado na agricultura, tem como principal objectivo simular a zona não saturada onde estão as raízes (DeCoursey *et al.*, 1992). Para este modelo, o lençol freático é uma condição de fronteira inferior. Cameira (1999) utilizou este modelo para simular o transporte de solutos para a toalha freática.

O modelo HYDRUS é também um modelo para a zona não saturada. É menos utilizado em aplicações agrícolas que o RZWQM, mas tem grande divulgação entre a comunidade científica que estuda as ciências do solo. Para isso contribui a grande quantidade de software complementar que o acompanha e o volume de publicações científicas que lhe dão suporte.

O modelo MACRO aborda o problema da infiltração através de macroporos. Este modelo considera explicitamente o escoamento em meio poroso constituído pelos microporos e o escoamento

por gravidade nos macroporos (Jarvis *et al.*, 1994). Esta aproximação, embora mais realista, representa a alteração da aproximação tradicional ao problema. A sua utilização requer modelos específicos das propriedades hidráulicas do solo e, por conseguinte, requer a adesão dos laboratórios envolvidos na determinação dos parâmetros desses modelos.

Estes modelos apresentam em comum o facto de terem sido desenvolvidos por grupos com tradições nas áreas de aplicação respectivas. A aplicação do modelo MOHID à circulação da água no solo aparece como uma extensão da actividade de um grupo de modelação com tradição na simulação do escoamento de águas superficiais. Este modelo usa programação orientada por objectivos e foi estruturada de forma a incluir diferentes formulações. Os resultados apresentados neste artigo foram obtidos usando o conceito clássico de condutividade hidráulica. A consideração explícita de macroporos constituirá um processo adicional cuja inclusão requer a programação de um novo módulo.

O MODELO MOHID

O modelo MOHID foi inicialmente desenvolvido para simulação bidimensional do escoamento de maré em regiões costeiras (Neves, 1985). O âmbito do modelo foi sendo sucessivamente alargado a ondas de Boussinesq (Silva, 1992), à simulação da qualidade da água (Portela, 1996) e a escoamentos tridimensionais (Santos, 1995; Martins, 2000). Actualmente este modelo conta com cerca de uma vintena de utilizadores em 5 instituições.

O elevado número de utilizadores e de processos simulados obrigou à reorganização do código FORTRAN utilizado pelo modelo, de forma a minimizar o esforço de manutenção, tendo sido adoptada uma filosofia de programação orientada por objectos (Miranda *et al.*, 2000). A extensão desta nova versão – MOHID2000 – a escoamento em meios porosos exigiu unicamente programação dos aspectos específicos destes escoamentos (propriedades hidráulicas do solo, condições de fronteira) e adaptação dos métodos numéricos para ter em consideração os efeitos não lineares presentes no solo. No seu conjunto estas adaptações representam menos de 10% do código total.

Em simultâneo foram desenvolvidos módulos específicos para a simulação de escoamentos em barragens. No seu conjunto estes desenvolvi-

mentos têm como objectivo a construção de um “laboratório numérico” que permita a simulação do ciclo da água entre a infiltração no solo e a dispersão no oceano, tendo em vista a gestão integrada de bacias hidrográficas prevista na Directiva Quadro da Água.

Organização do sistema MOHID

O sistema MOHID2000 está dividido em três grandes classes: (i) propriedades do escoamento, (ii) transporte de propriedades pelo escoamento e (iii) transformações das propriedades transportadas. A classe das propriedades do escoamento é a base de todo o sistema, calculando, no caso dos solos, o teor de água, os fluxos de água, a pressão e a condutividade hidráulica em cada ponto da malha. O transporte - euleriano e/ou lagrangeano - utiliza estas propriedades para a simulação da advecção/difusão de solutos (e de material particulado no caso de escoamentos superficiais). As transformações sofridas pelas propriedades são tratadas por uma classe específica, a qual inclui toda a actividade biológica e química. No caso dos solos, esta classe incluirá a actividade das raízes e os processos de adsorção/desorção. O processo de fertilização do solo é tratado como uma condição de fronteira, do mesmo modo que a rega.

A discretização das equações é feita usando o método dos volumes finitos. Neste método, as leis que regem os processos que se pretende simular são aplicadas directamente a um volume de controle. O transporte é usado na forma da divergência dos fluxos advectivo e difusivo, garantindo automaticamente a conservação das propriedades transportadas (Adcroft *et al.*, 1997). O formalismo lagrangeano usa o mesmo conceito de volume finito. Neste caso o fluxo advectivo é nulo e o fluxo difusivo traduz-se no aumento da dimensão dos volumes transportados (Leitão, 1997). O formalismo lagrangeano é particularmente adaptado à simulação da dispersão de contaminantes com origem em fontes pontuais, uma vez que não tem os problemas de difusão numérica associadas ao cálculo do termo advectivo do formalismo euleriano.

Equações do modelo MOHID

De um modo geral, o cálculo do escoamento baseia-se nas equações de conservação da massa e da quantidade de movimento. No caso dos solos admite-se as forças de inércia são nulas, havendo, por conseguinte, equilíbrio entre as forças de pressão, gravíticas e viscosas. Recorrendo ao conceito de condutividade, a equação de con-

servação da quantidade de movimento transforma-se na equação de Darcy, que, substituída na equação da conservação da massa, dá origem à chamada equação de Richards (Eq. 1)

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint \theta dV = \iint (-k \bar{V}(h+z) \cdot \vec{n}) dA + S$$

Equação 1. Forma integral da equação de Richards

em que q é o teor de água volúmico, V é o volume de integração cuja superfície é A , n é a normal exterior à superfície do volume, k é a condutividade hidráulica, h é a pressão, z é a coordenada vertical, t o tempo e S representa a adição ou extracção local de água (e.g. adição devida a macroporos ou extracção pelas raízes).

Pode-se deduzir a partir da equação de van Genuchten da curva de retenção da água (1980), a relação entre a pressão e o teor volúmico de água, obtendo-se a Eq. 2

$$h(\theta) = - \frac{\left(S_e^{-\frac{1}{m}} - 1 \right)^{\frac{1}{n}}}{\alpha}$$

Equação 2. Equação da função de retenção da água do solo (van Genuchten)

em que h é a pressão, a e n são parâmetros, q é o teor volúmico de água no solo, q_s o valor de q na saturação, q_r o valor de q residual e ainda

$$m = 1 - 1/n \quad , \quad n > 1$$

$$S_e = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r}$$

Esta equação é fortemente não linear, exigindo um processo iterativo de resolução em regime não estacionário. A condutividade hidráulica, também segundo van Genuchten (1980) é dada pela Eq. 3, sendo S_e o conteúdo efectivo do solo, como acima, L um parâmetro e k_s a condutividade saturada.

A resolução numérica destas equações tem como principais dificuldades a não linearidade das propriedades hidráulicas do solo e a definição da malha de cálculo. Esta última, bem como

a visualização dos resultados, são particularmente trabalhosas no caso tridimensional.

$$k(\theta) = k_s S_e^L \left(1 - \left(1 - S_e^{\frac{1}{m}} \right)^m \right)^2$$

Equação 3. Equação da função de condutividade hidráulica da água do solo (van Genuchten, 1980)

Malha de cálculo e discretização espacial

Como referido acima, o sistema MOHID é baseado no método dos volumes finitos. Neste tipo de metodologia o domínio que se pretende estudar é subdividido numa série de volumes de controle de dimensões finitas (volumes finitos) de forma arbitrária. O uso de malhas estruturadas origina modelos de cálculo rápidos e simplifica a definição da malha de cálculo e a visualização dos resultados. Os modelos baseados no método dos elementos finitos (e.g. HYDRUS) são mais flexíveis em termos de definição de geometrias complexas mas apresentam algumas dificuldades numéricas evitadas pelas malhas estruturadas.

A menor flexibilidade das malhas estruturadas na definição de geometrias complexas pode ser minimizada recorrendo a malhas de passo variável e/ou a submodelos locais.

A Fig. 1 mostra duas malhas de cálculo usadas pelo modelo MOHID. Em perspectiva vê-se uma malha tridimensional formada por volumes finitos paralelepípedicos. Em projecção vê-se um sector de uma malha definida por trapézios. A Fig. 2 mostra os pontos de cálculo das grandezas na malha. As grandezas escalares (q , h e k) são calculadas no centro dos volumes e os fluxos nas faces (malha descentrada do tipo C, Arakawa & Lamb, 1977).

Os valores de k necessários ao cálculo dos fluxos nas faces são obtidos por interpolação linear dos valores nos centros das células adjacentes. Os gradientes necessários ao cálculo dos fluxos sobre as faces são calculados usando os valores no interior dos volumes adjacentes à face.

Discretização Temporal

A discretização temporal é a mais delicada nos modelos de circulação de água no solo em regime de não-saturação devido à não linearidade das propriedades hidráulicas do solo. Este problema é particularmente importante no caso de regime não-estacionário, onde todos os parâmetros têm que ser recalculados em todos os passos de tempo.

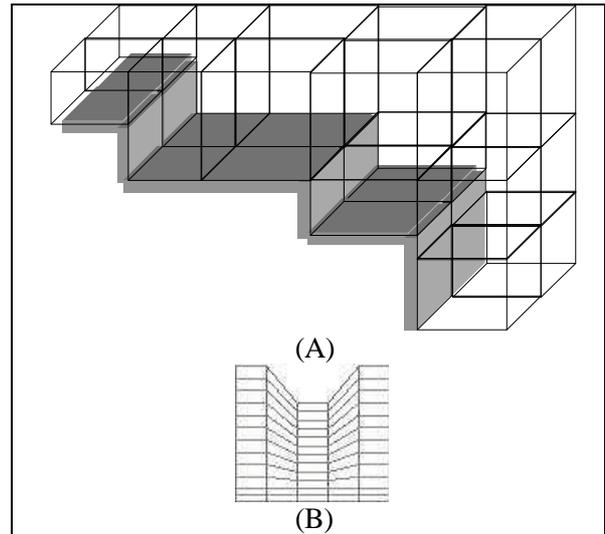


Figura 1. Vista 3D de uma malha cartesiana que acompanha uma camada impermeável irregular (A) e vista em projecção de uma malha de um solo com topografia irregular (B)

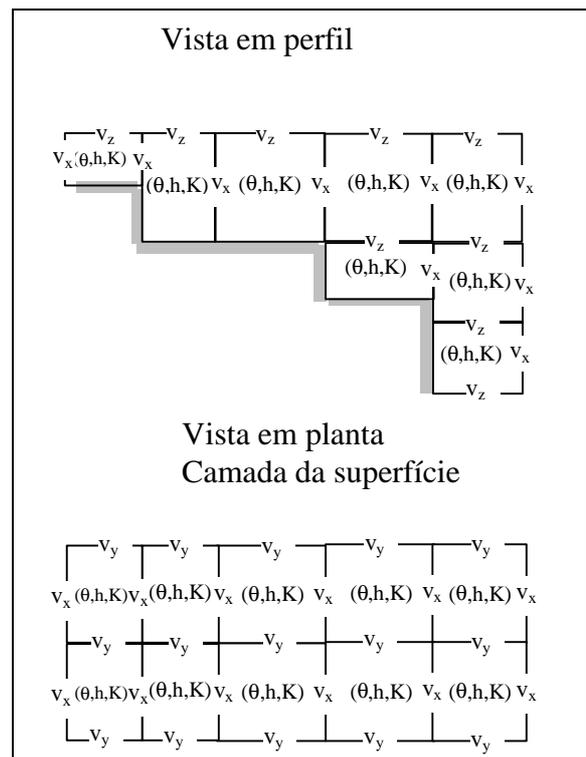


Figura 2. Vista em perfil e em planta da malha apresentada na Fig. 1(A) e localização dos pontos de cálculo de cada grandeza

O cálculo dos novos valores ($t+Dt$) do teor de água pela equação de Richards exige o conhecimento também em ($t+Dt$) dos valores da pressão e da condutividade hidráulica. A não linearidade dos modelos das propriedades hidráulicas do solo não permite a eliminação das incógnitas,

exigindo um processo iterativo. A velocidade de convergência desse processo é maior se se conseguir estimar os valores das incógnitas por extrapolação. É este o método usado no HYDRUS, seguindo a metodologia proposta por Celia *et al.* (1990).

É o seguinte o procedimento de cálculo. Conhecidos os valores de q no instante t , são calculados os valores de h e de k usando um modelo de propriedades hidráulicas do solo (e.g. van Genuchten). Admitindo estes valores como uma primeira aproximação dos valores em $(t+Dt)$, um valor de q em $(it=1)$ e dos valores correspondentes de h e de k podem ser estimados. Num processo iterativo simples, novos valores de q , h e k seriam estimados $(it=2, 3, 4\dots)$. Quando a diferença entre valores consecutivos for inferior a um desvio máximo tomado como admissível (da ordem de $0,001\theta$), o valor da última estimativa é tomado como o valor em $t+Dt$. Este processo iterativo é expedito, mas lento. A taxa de convergência pode ser aumentada se se conseguir extrapolar o novo valor de h na iteração $(it+1)$ como função de q em $(it+1)$ e dos valores das iterações anteriores. Admitindo uma extrapolação linear, h pode ser substituído por:

$$h^{it+1} = h^t + \frac{h^{it} - h^t}{\theta^{it} - \theta^t} (\theta^{it+1} - \theta^t)$$

Equação 4. Equação para explicitação de h na Eq. de Richards, admitindo uma evolução linear no passo de tempo

A equação anterior transforma-se numa identidade aquando da convergência do processo iterativo. Substituindo esta equação na de Richards obtém-se um sistema de equações tridiagonal onde as incógnitas são os teores de água em cada ponto da malha.

O MOHID2000 é um modelo tridimensional. A resolução simultânea do escoamento nas três direcções do espaço obrigaria a utilizar sistemas de equações esparsas, cuja resolução numérica é pouco eficiente. Assim, optou-se por utilizar um método por etapas (*splitting-method*) no qual a solução das equações é obtida resolvendo três sistemas de equações tridiagonais, uma para cada direcção do espaço:

$$\begin{aligned} \frac{\theta^* - \theta^t}{\Delta t} &= \sum F_X^* \\ \frac{\theta^{**} - \theta^*}{\Delta t} &= \sum F_Y^{**} \\ \frac{\theta^{t+\Delta t} - \theta^{**}}{\Delta t} &= \sum F_Z^{t+\Delta t} \end{aligned}$$

Adicionando as três equações, é fácil verificar que todas as propriedades são calculadas entre os instantes t e $t+Dt$, sendo por isso o método mais preciso que os métodos puramente implícitos ou puramente explícitos. Nas equações acima F_X , F_Y , F_Z representam os fluxos de água segundo xx , yy e zz respectivamente. Em cada etapa é usado o esquema iterativo descrito acima para calcular as propriedades hidráulicas do solo. Este método é também usado noutros módulos do sistema MOHID. À semelhança de outros módulos do modelo MOHID, pretende-se no módulo solos garantir a conservação da massa. Essa foi uma das razões pela qual a variável dependente é o teor volúmico de água.

VERIFICAÇÃO, CALIBRAÇÃO E VALIDAÇÃO

A obtenção de resultados com um modelo exige verificação, calibração e validação. A verificação é um processo meramente qualitativo de teste da capacidade do modelo para simular casos muito simples e para reagir a alterações dos parâmetros. A calibração tem como objectivo a escolha dos parâmetros que melhor reproduzem um conjunto de dados. A validação tem como objectivo verificar a capacidade de previsão do modelo, simulando as condições de funcionamento com base em parâmetros calibrados com conjuntos de dados independentes dos usados na validação.

O conjunto de resultados que apresentamos neste capítulo tem como objectivo a abordagem destes três aspectos.

A validação de um modelo pode ser levada a cabo recorrendo a dados de campo ou por comparação com os resultados de outros modelos que tenham já sido objecto de verificação e validação. A comparação de resultados do modelo MOHID com resultados do modelo HYDRUS tem como objectivo a verificação e validação do primeiro, tirando partido do elevado número de testes a que o segundo já foi submetido.

Foram realizados dois ensaios com diferentes tipos de solo, com diferentes condições de fronteira e com diferentes tipos de dados.

O primeiro ensaio consiste na reprodução dos resultados de uma experiência clássica (descrita em Jury *et al.*, 1991) e apresentada na Fig. 3. Com um solo franco-limoso foram feitos dois ensaios de infiltração. Num deles foi colocada uma camada de argila de 1 cm de espessura na zona intermédia e noutro foi colocada uma camada de areia na mesma zona. Fotografias da experiência e resultados dos modelos MOHID e HYDRUS são apresentados na Figura 3 (argila à esquerda e areia à direita). Em ambos os casos é mantida uma película de água na depressão existente na zona central. No caso da argila os gradientes horizontais de teor de água são baixos e a penetração através da camada de argila é bastante uniforme. O efeito da variabilidade da condutividade hidráulica da areia com o teor de água é bem visível.

Na mesma figura, abaixo das fotografias são apresentados os resultados dos modelos MOHID e HYDRUS correspondentes a cada uma das experiências. A comparação dos resultados do modelo com os da experiência constitui a verificação do modelo, na medida em que tem que ser feita de forma qualitativa, por falta de informação quantitativa. A aplicação do modelo HYDRUS usando os mesmos parâmetros do MOHID torna esta aplicação um caso de validação, pois permite a comparação quantitativa dos resultados.

A Fig. 4 mostra a comparação dos resultados dos modelos HYDRUS e MOHID para um caso de drenagem livre. As figuras apresentam resultados muito semelhantes.

Camada de areia/argila

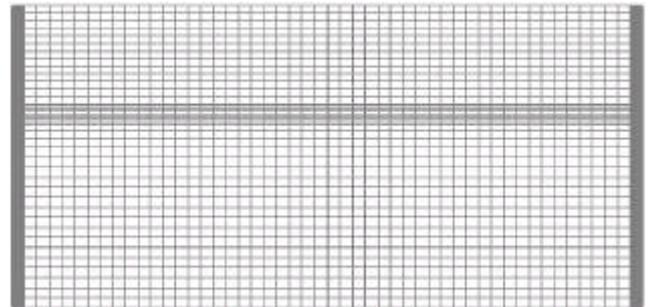
Quer nas simulações efectuadas com o HYDRUS, quer com o MOHID, foi usado o modelo de van Genuchten para cálculo das propriedades dos solos. Os parâmetros usados para esse modelo foram parâmetros típicos deste tipo de solo. Nas simulações considerou-se uma coluna de solo de 0,6 metros de largura por 0,3 de altura (corresponde à relação 2:1 entre a largura e a altura da coluna de solo considerado), com uma camada de areia ou argila de 0,01 m que estava a 0,1 m de profundidade. As condições de simulação foram definidas de acordo com as especificidades de cada modelo. Para cada um dos modelos são descritas as condições das simulações.

MOHID

Geometria

- Como se pretende uma simulação bidimensional usou-se uma malha com um único volume na espessura. Na direcção zz usou-se 40 células e na direcção xx (largura) usou-se 50. A condição de fluxo nulo lateral foi imposta colocando células impermeáveis (representadas a cinzento na figura) em redor das permeáveis.

Vista lateral:



Vista de cima:



- As camadas são definidas usando coordenadas cartesianas. Neste caso, as células dentro de cada camada têm todas a mesma espessura, a qual poderá ser diferente em cada camada. Foi imposta uma maior discretização na vertical na zona da camada de areia/argila. Isto porque é nesta zona que ocorrem os maiores gradientes.

Condição de fronteira

- Nas paredes laterais e no fundo foi imposta uma condição de fluxo nulo. Na superfície foi imposta uma condição de saturação em cinco colunas do meio.

Condição inicial

- Em ambas as simulações considerou-se uma humidade inicial de 0,2 no solo (franco-limoso) e 0,1 na camada (quer no caso da argila, quer no caso da areia).

Duração da simulação

- Os resultados apresentados correspondem a 7 horas de simulação.

HYDRUS2D

Geometria

- Este modelo usa o método dos elementos finitos, pelo que a geometria não pode ser definida exactamente da mesma forma. Neste caso, toda a informação é definida em pontos, os nós da malha. Foi gerada uma malha rectangular formada por elementos quadrangulares.

gulares com 50 colunas e 40 linhas. A coluna de solo tem igualmente 0,6 metros de lado e 0,3 de altura (com uma camada de areia ou argila de 0,01 m que estava a 0,1 m de profundidade). As colunas e as linhas estão uniformemente distribuídas nas duas direcções.

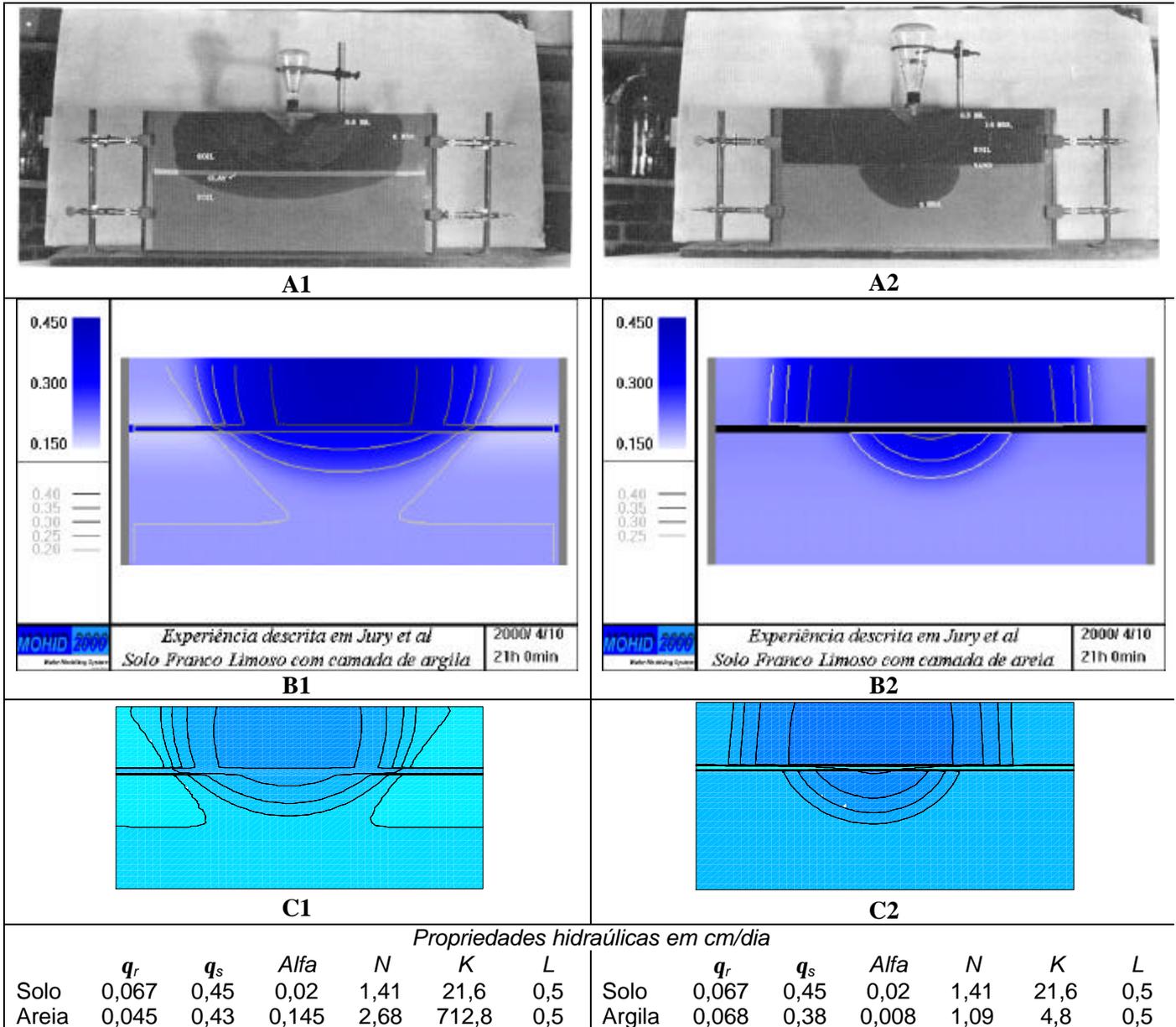
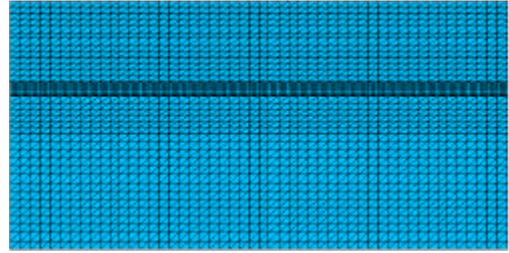


Figura 3. Experiência descrita em Jury *et al.* (1991) (A), simulações (com duração de 7 horas) com dois modelos nas mesmas condições do que a experiência: MOHID (B) e HYDRUS2D (C)

Coluna da esquerda (A1, B1, C1): solo Franco Limoso com camada de argila

Coluna da direita (A2, B2, C2): solo Franco Limoso com camada de areia

A cor e as isolinhas representam valores do teor volúmico de água.

- O uso de uma malha composta por elementos não quadrangulares (e.g. triangulares) e a definição de geometrias não rectangulares exige o recurso a um programa gerador de malhas que não dispúnhamos à data da realização deste trabalho. Por esta razão não foi possível representar a pequena depressão na parte superior do domínio. Como se verá adiante, isso é um pormenor que não invalida as conclusões do estudo. Para se poder comparar os resultados de ambos os modelos também se optou por não colocar a depressão no modelo MOHID.

Condição de fronteira

- Como no MOHID
- Foi imposta a saturação à superfície nos nós das 5 colunas centrais. Nos restantes nós da superfície impôs-se fluxo nulo, tal como no fundo e na parede lateral.

Condição inicial

- Como no MOHID

Duração da simulação

- Como no MOHID

Note-se que a escala de tonalidades das figuras de cada modelo não é a mesma, mas que têm em comum o facto de as mais escuras representarem maior conteúdo de água. No entanto, as isolinhas de ambos os modelos referem-se aos mesmos valores.

Deste modo, olhando para as isolinhas de cada modelo, constata-se que os resultados de ambos os modelos são semelhantes, embora com diferenças de pormenor.

Este exemplo académico permite-nos validar quantitativamente o modelo MOHID com base no modelo HYDRUS2D. De facto, partindo do pressuposto que este é um modelo que já foi muito validado com base em situações reais, esta pode ser considerada uma validação quantitativa do modelo MOHID.

Por outro lado, a experiência mostrada nas fotografias permite-nos constatar que, pelo menos em termos de forma, os resultados se aproximam dos reais.

Coluna de Solo com drenagem livre

Na Fig. 4 apresenta-se uma comparação entre simulações do HYDRUS2D e do MOHID numa situação com drenagem livre. A camada de solo representada na figura tem 0,5 metros de espessura e 7 metros de largura. À semelhança do exemplo anterior, a geometria do modelo MOHID foi definida com apenas uma célula na direcção *Y*, para que fosse 2D tal como a do HYD-

RUS. O solo é franco-arenoso, com 81% de areia, 11% de limo e 8% de argila.

O teor volúmico de água inicial era 0,25. Na fronteira superior foram impostos teores volúnicos de água constantes ao longo de toda a simulação: 0,35 na zona central e 0,25 nas laterais. Como condição de fronteira inferior impôs-se um gradiente nulo (drenagem livre) e nas fronteiras laterais fluxo nulo.

São apresentados resultados ao fim de 1, 5 e 10 dias. Para facilitar a leitura dos resultados, a escala vertical está ampliada 10 vezes nas figuras. As figuras foram preparadas usando programas de pós-processamento específicos de cada modelo e por isso as escalas de tonalidade não são exactamente as mesmas. Para permitir a comparação dos resultados são apresentadas as mesmas isolinhas para ambos os modelos.

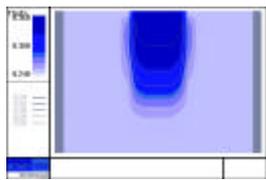
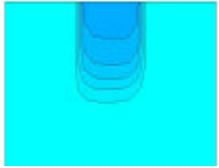
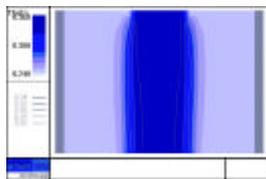
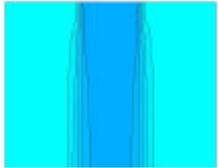
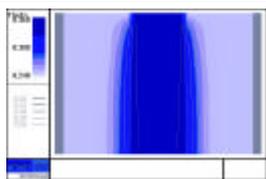
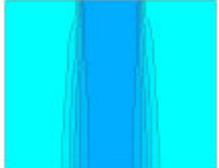
Dias	MOHID	HYDRUS			
1					
5					
10					
	q_r	q_s	$Alfa$	n	k_s
	0,001	0,366	0,0252	1,2298	14,5

Figura 4. Comparação entre HYDRUS e MOHID num terreno de 7 metros de largura, ao fim de 1, 5 e 10 dias de simulação, estando em ambas as figuras representadas as mesmas isolinhas de teor volúmico de água: 0,26; 0,30; 0,32; 0,34.

As figuras mostram que os modelos dão soluções muito semelhantes em qualquer dos instantes, mostrando que a velocidade de propagação da frente de humidade é também semelhante.

CONCLUSÕES

As preocupações quanto à poluição provocada pela agricultura nas reservas de água são crescentes. A agricultura, por seu lado, começa a deparar-se ela própria com problemas de poluição da água de rega. Para o desenvolvimento sustentado da agricultura surge a necessidade de ferramentas que permitam estudar o ciclo da água.

O Modelo MOHID apresenta-se como uma ferramenta que serve de laboratório numérico onde é feito o estudo integrado dos escoamentos de água superficiais, dos escoamentos nos solos e dos escoamentos em aquíferos até atingir os lagos e rios. Modelos semelhantes ao HYDRUS não permitem este tipo de integração por se aplicarem apenas aos meios porosos.

Como resposta a uma necessidade imediata modelos como o MOHID e o HYDRUS podem ser usados como ferramentas para o delineamento experimental. Para isso, estes modelos têm de ser calibrados para os solos em que forem aplicados, comparando-os com as medidas de campo.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Adcroft, A.J.; Hill, C.N. & Marshall J. 1997. Representation of Topography by Shaved Cells in a Height Coordinate Ocean Model. *Mon. Weather Rev.* 125: 2293-2315.
- Arakawa, A. & Lamb, V. 1977. Computational design of the basic dynamical processes of the UCLA general circulation model. *Methods in Computational Physics* 1
- Cameira, M. R. 1999. Water and nitrogen balance in irrigated corn in the Sorraia Valley. Discussion of the transfer processes and application of the model RZWQM98. Ph.D. thesis. Technical University of Lisbon, Agronomy Institute, Portugal.
- Celia, M.A.; Bouloutas, E.T. & Zarba R.L. 1990. A General Mass-Conservative Numerical Solution for the Unsaturated Flow Equation. *Water Resources Research* 26: 1483-1496.
- DeCoursey, D.; Ahuja, L.; Hanson, J.; Shaffer, M.; Nash, R.; Hebson, C. & Rojas, K. 1992. Root Zone Water Quality Model: version 1.0: technical documentation. USDA-ARS, GPSR Technical Report 2. Great Plains Systems Research Unit, Ft. Collins, Colorado.
- Jarvis, N.J. & Larsson, M. 1994. The MACRO model (Version 4.1). Technical description and sample simulations. Reports and Dissert. 19. Dept. Soil Sci., Swedish Univ. Agric. Sci., Uppsala, Sweden, 36 pp.
- Jury, W.A.; Gardner, W.R. & Gardner, H.R. 1991. *Soil Physics*. John Wiley. New York.
- Leitão, P.C. 1997. Modelo de Dispersão Lagrangeano Tridimensional. Tese de Mestrado em ecologia, gestão e modelação dos recursos marinhos. Instituto Superior Técnico, Lisboa.
- Martins, F. 2000. Modelação Matemática Tridimensional de escoamentos costeiros e estuários usando uma abordagem de coordenada vertical genérica. Universidade Técnica de Lisboa, Instituto Superior Técnico. Tese de Doutoramento.
- McDonald, M.G. & Harbaugh, A.W. 1988. A modular three-dimensional finite-difference ground-water flow model. U.S. Geological Survey Techniques of Water-Resources Investigations Book 6, Chapter A1, 586p.
- Miranda, R.; Braunschweig, F.; Leitão, P.; Neves, R.; Martins, F. & Santos, A. 2000. MOHID 2000 - A coastal integrated object oriented model. Hydrosoft.
- Mualem, Y. 1976. A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media. *Water Resour. Res.* 12: 513-522.
- Neves, R.J.J. 1985. Étude Experimentale et Modélisation des Circulations Transitoire et Résiduelle dans l'Estuaire du Sado. Ph. D. Thesis. Univ. Liège, 371 pp.
- Portela, L.I. 1996. Modelação matemática dos processos hidrodinâmicos e qualidade da água no estuário do Tejo. Tese de doutoramento. Instituto Superior Técnico, Univ. Técnica de Lisboa.
- Santos, Maria Júlia & Gonçalves, M.C. 1998. Uma nova expressão empírica para descrever a curva condutividade hidráulica dos solos. *Pedologia*, Oeiras 27: 34-39.
- Simunek, J.; Vogel, T. & van Genuchten, M.Th. 1994. The SWMS_2D code for simulating water flow and solute transport in two-dimensional variably saturated media, Version 1.21. Research Report 132, 197 p. U.S. Salinity Laboratory. USDA, ARS, Riverside, California.
- van Genuchten, M.Th. 1980. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 44: 892-898.