

Modelling infiltration and redistribution of water in a Fluvisol.

Agriculture, integrated management of water, environmental planning or the study of terrestrial ecology are activities requiring information on soil water circulation and on fertilizers and pesticides transport and transformations. The soil is the physical entity where significant processes occur. Soil sciences supply the basic knowledge required by integrated studies involving biological and/or chemical processes.

Models describe the relations between the state variables through a set of interdependent evolution equations, being interdisciplinary in nature. The structure of the evolution equations is the same in any system where a fluid mediates transport and so is the structure of the numerical tools required to solve them. A mathematical model involves 4 aspects: (i) a set of evolution equations, (ii) numerical algorithms, (iii) informatics support and (IV) data to specify parameters, initial and boundary conditions. Equations differ through the production and destruction terms, but requirements to describe space and time distributions are common to any problem involving transport phenomena. Most of the complexity of numerical algorithms is due to transport, which can be shared between very different applications if algorithms and informatics are conveniently organised..

In this communication it is described the model MOHID and results of its application in the study of processes of infiltration in situations with and without macropores. This model was initially developed for the simulation of circulation of superficial water and biogeochemical processes in those systems. The simulation of circulation and transport in soil makes use of the algorithms and informatics developed for those applications (three-dimensional), which have been complemented with specific developments for process in the soil.

The results of the model are compared with field data collected by Cameira (1999) and with results of another model (HYDRUS), which constitutes an international reference in the modelling of circulation of soil water.

It was shown that infiltration can be simulated using a 1D formulation, as far as macropore effect is taken into account (in this case increasing hydraulic conductivity). It is also shown that three-dimensional effects are important during drying process if horizontal gradients are relevant.

Modelação da infiltração e redistribuição de água num Fluvisso.

Neves, R.¹, Chambel-Leitão, P.¹, Fernando, R.M.², Leitão, P.C.¹, Cameira, M.R.²

¹Instituto Superior Técnico - Dept. Engenharia Mecânica - Av. Rovisco Pais, 1, 1049-001 Lisboa

²Instituto Superior de Agronomia - Dept. Engenharia Rural - Tapada da Ajuda, 1349-017 Lisboa

Tel: 21 4239016; Fax: 21 4211272; email: pedro.chambel.maretec@taguspark.pt

RESUMO

A agricultura, a gestão integrada da água, o planeamento ambiental ou o estudo da ecologia terrestre são actividades que requerem informação sobre a circulação da água no solo e sobre o transporte e transformações sofridas pelos fertilizantes e pesticidas. O solo é a entidade física no seio da qual ocorrem os processos relevantes para aquelas actividades; as ciências do solo fornecem os conhecimentos de base requeridos por estudos integrados que envolvam os processos biológicos e/ou químicos.

Os modelos descrevem as relações entre as variáveis de estado através de um conjunto de equações evolutivas interdependentes, que são interdisciplinares por natureza. A estrutura das equações evolutivas é a mesma em qualquer sistema em que onde o transporte é mediado por um fluido e também o é a estrutura das ferramentas numéricas necessárias para os resolver. Um modelo matemático envolve 4 aspectos: (i) conjunto de equações evolutivas, (ii) algoritmos numéricos, (iii) suporte informático e (iv) dados para especificar parâmetros e condições iniciais e de fronteira. As equações diferem pelos termos de produção e de destruição, mas as necessidades para descrever as distribuições espaciais e temporais são comuns a qualquer problema que envolva um fenómeno de transporte. A maior parte da complexidade dos algoritmos numéricos é devido ao transporte, que pode ser partilhado entre aplicações muito diversas se os algoritmos e a informática estiverem convenientemente organizados. Nesta comunicação descreve-se o modelo MOHID e resultados da sua aplicação no estudo de processos de infiltração em situações com e sem macroporos. Este modelo foi inicialmente desenvolvido para a simulação da circulação de águas superficiais e dos processos biogeoquímicos naqueles sistemas. A simulação da circulação e transporte no solo faz uso dos algoritmos e do suporte informático desenvolvido para aquelas aplicações (tridimensional) que foi complementado com desenvolvimentos específicos para processos em solos.

Os resultados do modelo são comparados com dados de campo obtidos por Cameira (1999) e com resultados de outro modelo (HYDRUS), que constitui uma das referências internacionais na modelação da circulação da água no solo. Demonstrou-se que a infiltração pode ser simulada usando a formulação 1D, desde que se tenha em conta o efeito dos macroporos (neste caso pelo aumento da condutividade hidráulica). Também se demonstra que efeitos tridimensionais são importantes durante o processo de secagem se os gradientes horizontais forem relevantes.

Introdução

A agricultura, a gestão integrada da água, o planeamento ambiental ou o estudo da ecologia terrestre são actividades que requerem informação sobre a circulação da água no solo e sobre o transporte e transformações sofridas por fertilizantes e pesticidas. O solo é a entidade física no seio da qual ocorrem os processos relevantes para aquelas actividades; as ciências do solo fornecem os conhecimentos de base requeridos por estudos integrados e os resultados necessários às disciplinas que estudam os processos biológicos e químicos.

Neste trabalho descreve-se o modelo MOHID e resultados da sua aplicação no estudo de processos de infiltração em situações com e sem macroporos. Os resultados do modelo são comparados com dados de campo obtidos por Cameira (1999) e com resultados do modelo HYDRUS

Modelos analisados

O modelo MOHID é uma ferramenta de simulação inicialmente desenvolvida para modelar a circulação em zonas costeiras e oceânicas. Tirando partido da experiência obtida na simulação desses sistemas e da capacidade de expansão permitida pelas novas linguagens de programação, esse modelo foi reorganizado, associando módulos específicos a cada processo envolvido nas equações. Deste modo cada nova aplicação requer desenvolvimento unicamente para os processos específicos. A especificidade da circulação da água no solo advém de requerer módulos específicos para descrever propriedades hidráulicas do solo, sendo a Equação de Richards tratada como uma equação de difusão, cujos aspectos específicos advém principalmente do algoritmo de convergência requerido pela interdependência fortemente não linear entre as propriedades hidráulicas do solo e o teor de humidade. As propriedades hidráulicas do solo são descritas pelo modelo de van Genuchten (1980).

O modelo HYDRUS é um modelo para a zona não saturada (Simunek *et al.*, 1994). Este modelo 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.

As propriedades hidráulicas do solo foram descritas no MOHID e no HYDRUS pelo modelo de van Genuchten (van Genuchten, 1980).

Neste trabalho é ainda analisado o modelo de Brooks and Corey modificado (BC), sendo comparadas as curvas de condutividade e retenção descritas por este modelo e pelo modelo de van Genuchten (VG). O modelo de BC é utilizado no modelo de simulação RZWQM (DeCoursey *et al.*, 1992) e Cameira (1999) apresenta os parâmetros deste modelo para o solo estudado.

Descrição do 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 com tarefas de programação e a variedade de processos simulados obrigou à reorganização do código FORTRAN, tendo sido adoptada uma filosofia de programação orientada por objectos (Miranda *et al.*, 2000). O código específico da extensão desta nova versão – MOHID2000 – a escoamento em meios porosos representa menos de 10% do código total. Para além das vantagens iniciais da reutilização de código desenvolvido para outros fins, este tipo de filosofia de desenvolvimento tem ainda a vantagem de minimizar os custos de manutenção e de potenciar o desenvolvimento de modelos integrados de circulação da água no solo e à superfície.

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 actividade das raízes será também função do módulo de forçamento atmosférico.

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 controlo. 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 associados ao cálculo do termo advectivo do formalismo euleriano.

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

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint \theta dV = \iint (-k \vec{\nabla}(h+z) \cdot \vec{n}) dA + S \quad (1)$$

em que θ 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 Equação (2)

$$h(\theta) = - \frac{\left(\frac{1}{S_e^m} - 1 \right)^{\frac{1}{n}}}{\alpha} \quad (2)$$

em que h é a pressão, α e n são parâmetros, θ é o teor volúmico de água no solo, θ_s o valor de θ na saturação, θ_r o valor de θ residual e ainda

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

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

A equação (2) é fortemente não linear, exigindo um processo iterativo de resolução em regime variável (não-estacionário). A condutividade hidráulica, também segundo van Genuchten (1980) é dada pela Equação (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.

$$k(\theta) = k_s S_e^L \left(1 - \left(1 - S_e^m \right)^2 \right) \quad (3)$$

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 controlo 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 **Figura 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 **Figura 2** mostra os pontos de cálculo das grandezas na malha. As grandezas escalares (θ , 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.

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.

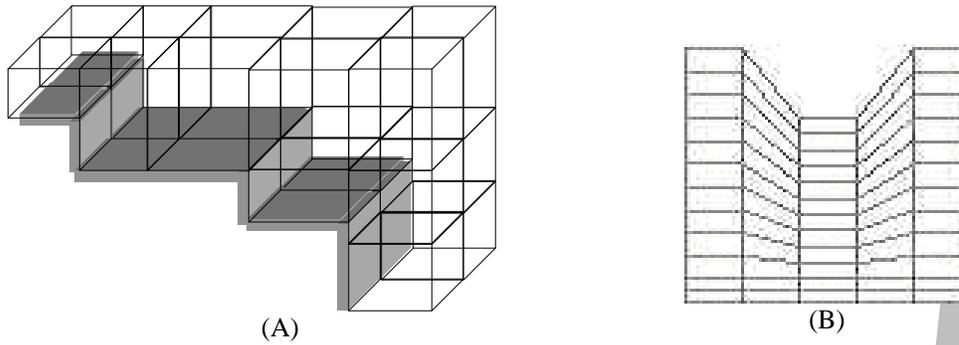


Figura 1 - Vista 3D de uma malha cartesiana que acompanha uma camada impermeável irregular (A) e vista em projecção de uma malha de um solo com topografia irregular (B)

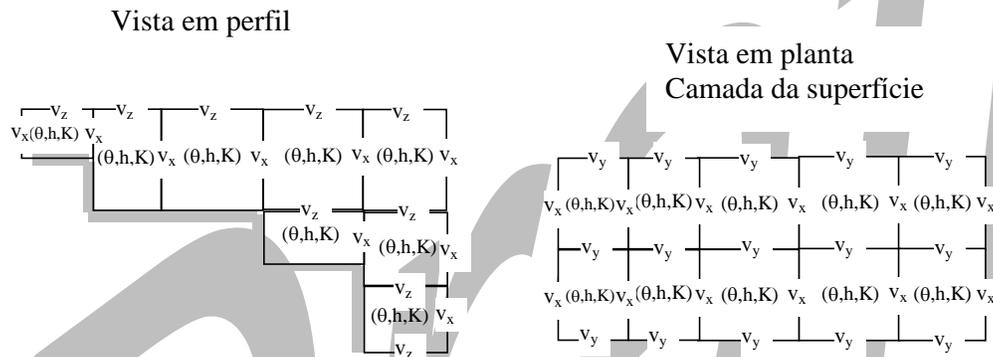


Figura 2 - Vista em perfil e em planta da malha apresentada na Fig. 1(A) e localização dos pontos de cálculo de cada grandeza

O cálculo dos novos valores em $(t+\Delta t)$ do teor de água pela equação de Richards exige o conhecimento também em $(t+\Delta t)$ 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 θ 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 $(t+\Delta t)$, estima-se um valor de θ em $(t+\Delta t)$ e os valores correspondentes de h e de k (iteração $it=1$). Num processo iterativo simples, novos valores de θ , h e k seriam estimados ($it=2, 3, 4...$). 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 $t+\Delta t$. Este processo iterativo é expedito, mas lento. A taxa de convergência pode ser aumentada estimando o novo valor de h na iteração $(it+1)$ por extrapolação, como função de θ em $(it+1)$ e dos valores das iterações anteriores. Admitindo uma evolução linear, h pode ser substituído por:

$$h^{it+1} = h^t + \frac{h^{it} - h^t}{\theta^{it} - \theta^t} (\theta^{it+1} - \theta^t) \quad (4)$$

A equação anterior transforma-se numa identidade quando 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:

$$\frac{\theta^* - \theta^t}{\Delta t} = \sum F_X^*$$

$$\frac{\theta^{**} - \theta^*}{\Delta t} = \sum F_Y^{**}$$

$$\frac{\theta^{t+\Delta t} - \theta^{**}}{\Delta t} = \sum F_Z^{t+\Delta t}$$

Adicionando as três equações, é fácil verificar que todas as propriedades são calculadas entre os instantes t e $t+\Delta t$, 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.

Materiais e métodos

Uma das conclusões apresentadas por Cameira (1999) é que para obter uma boa estimativa da humidade do solo é necessário garantir uma boa quantificação da acção dos macroporos do solo, a qual é importante durante o processo de infiltração, quando estão cheios.

Os macroporos no MOHID

A maioria dos modelos de águas subterrâneas considera que o escoamento ocorre através da matriz do solo, a qual é admitida como um domínio uniforme. Outros modelos consideram que este escoamento ocorre em dois domínios: a matriz e os macroporos. Esta última abordagem permite ter em conta o escoamento preferencial da água através dos macroporos. Para além disso permite tratar separadamente a água que circula pelos macroporos e a água que circula pela matriz. Esta aproximação representa melhor o processo de infiltração de forma mais realista e tem vantagens na simulação do transporte de compostos dissolvidos. De facto a água que circula pelos macroporos não vai interagir com o solo. Em oposição a água que passa pela matriz pode deixar ou retirar solutos do solo.

No entanto quando se pretende simular apenas o escoamento o papel dos macroporos pode ser simulado aumentando artificialmente a condutividade.

Neste trabalho foi admitido um aumento linear da condutividade entre a superfície do solo e a profundidade máxima dos macroporos (admitida com a profundidade de lavoura). Este tipo de aproximação foi também usado por Cameira(1999) que sugere que o factor multiplicativo deve ser um valor entre 50 e 57. Admitiu-se ainda que os macroporos só influenciam o escoamento durante a fase de infiltração.

Dados de campo

Para verificar o modelo simularam-se os perfis de humidade observados num ensaio de infiltração e redistribuição num monólito de solo do vale do Sorraia, sem vegetação, Cameira (1999). À volta desse monólito existia uma margem de 2 metros de solo nu descoberto (**Figura 3**). O solo estudado é um solo aluvionar de textura franco-limosa com um horizonte A e um horizonte C. Tem uma toalha freática que durante o ensaio se situou a uma profundidade de 80 cm. Este solo tem cerca de 55% de areia, 28% de limo e 17% de argila. A mesma autora mediu as propriedades hidráulicas no horizonte A (até 25 cm) e em duas camadas do horizonte C (25-50 cm e 50-80 cm).

Os teores de água a diferentes profundidades foram medidos no centro do monólito. Foi feita uma medição inicial do perfil de teores de água, sendo depois aplicados 73 mm de água por alagamento, que demoraram 45 minutos a infiltrar-se. No final da infiltração foi feita nova medição do perfil de teores de água. O monólito foi depois coberto com plástico e palha para evitar a evaporação. Os perfis de humidade foram medidos de novo ao fim de 6 dias e ao fim de 30 dias.

Modelação: Geometria e condições de fronteira

A simulação foi feita considerando a geometria tridimensional representada em corte na **Figura 3** e em planta na **Figura 4**. No centro desta geometria está localizado o monólito. A área total de simulação era de $5 \times 5 \text{ m}^2$, dos quais 1×1 correspondiam ao monólito. Sobre o monólito admitiu-se que a evaporação era nula, por estar coberta com palha e na zona envolvente impôs-se uma evaporação potencial de diária de 2.5 mm/dia , a qual se anula quando a $pF \geq 5$. Como veremos na análise dos resultados, esta evaporação lateral é fundamental para justificar os valores de teor de água medidos ao fim de 30 dias de redistribuição. No fundo do monólito foi imposta a toalha freática (a 80 cm de profundidade).

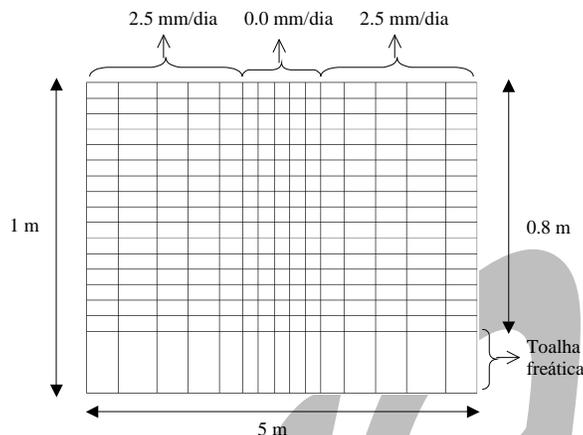


Figura 3 – Geometria vertical do perfil de solo e condições de fronteira

A malha utilizada é tridimensional. Na **Figura 4** apresenta-se a malha horizontal do monólito mais o solo à volta do monólito.

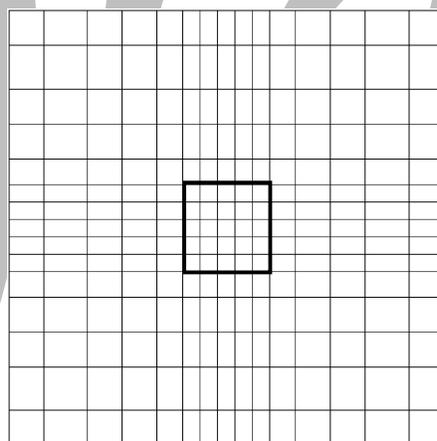


Figura 4 – Geometria horizontal do perfil de solo

Parametrização do modelo

A curva $\theta(h)$ foi determinada a partir de dados de laboratório e de campo. As curvas $K(\theta)$ foram determinadas a partir apenas de dados de laboratório.

QUADRO 1 – Parâmetros do modelo de BC modificado obtidos com base nas medidas de laboratório pelo RZWQM (Cameira, 1999)

Profun	ths	thr	A1	B	Lamb	hb1
0-10	0.406	0.05	0.00026	2.1989	0.3656	258.0
25-50	0.412	0.06	0.00026	2.198	0.3656	290
>50	0.387	0.05	0.0002	1.472	0.3	215
Profun	ks	N1	Hb2	c2	N2	
0-25	9.12	0	1	9.13	1.326	

25-50	21.40	0	1	21.40	1.390
>50	106.39	1.91	14.9	18.99	1.270

Cameira (1999) apresenta os parâmetros das características hidrodinâmicas dos solos relativos ao modelo de Brooks e Corey (**QUADRO 1**).

As propriedades hidráulicas do solo foram calculadas usando o modelo de van Genuchten. Os parâmetros deste modelo (**QUADRO 2**) foram estimados utilizando o programa RETC (van Genuchten *et al.*, 1991) e os dados de campo e de laboratório de Cameira (1999). Foram considerados 3 horizontes (0-25 cm; 25-50 cm e abaixo dos 50 cm), seguindo a organização dos dados experimentais.

Como se verá no capítulo de apresentação dos resultados, verificou-se que os parâmetros do modelo de van Genuchten estimados a partir do programa RETC e deste conjunto de dados permitem simular as tendências da evolução do teor de humidade, mas não o detalhe dos dados de campo.

Cameira (1999) utilizou o modelo RZWQM (DeCoursey *et al.*, 1992), o qual estima as propriedades hidráulicas do solo a partir do modelo de Brooks & Corey modificado (Ahuja, 1992). Nesta aplicação, foi verificado que os horizontes do solo inicialmente considerados para a determinação das propriedades hidráulicas não correspondiam aos reais, tendo sido considerados os 3 horizontes indicados no **QUADRO 3**. Num dos cenários descritos neste trabalho os parâmetros do modelo de van Genuchten foram corrigidos usando os estudos de Cameira como referência. Os parâmetros do modelo são indicados no **QUADRO 3**.

QUADRO 2 - Valores obtidos pelo RETC para os três horizontes de solo considerado

Profun.	θ_r	θ_s	alfa	n	ks
0-25	0.001	0.4386	0.0747	1.1424	12.132
25-50	0.001	0.3927	0.0129	1.2180	22.360
>50	0.001	0.3862	0.0171	1.1920	154.70

Resultados e discussão

São apresentados dois conjuntos de resultados: (i) considerando os parâmetros do modelo de van Genuchten tal como estimados pelo programa RETC e os horizontes do perfil considerados para a obtenção das propriedades hidráulicas do solo e (ii) considerando os horizontes propostos por Cameira (1999) e ajustando os parâmetros do modelo de Van Genuchten de forma a otimizar o ajuste.

Simulação no cenário “i”

Para o cenário “i” definido acima são apresentados dois ensaios, um de redistribuição e outro de infiltração. No primeiro iniciou-se com um solo saturado e em seguida coberto de modo a minimizar a evaporação e foi estudado o processo de redistribuição da água. No segundo o solo estava seco e foi acompanhado o processo de humedecimento.

A **Figura 5[a]** mostra o perfil de humidade medido no início da simulação de redistribuição e o perfil medido e simulado ao fim de 6 dias, usando as propriedades hidráulicas do solo calculadas pelo modelo de van Genuchten parametrizado usando os resultados do RETC indicados no **QUADRO 2** e os perfis indicados no mesmo quadro. A figura mostra uma concordância razoável entre os valores medidos e os calculados na generalidade do perfil, que piora à medida que nos aproximamos da superfície. A **Figura 5[b]** mostra a redistribuição ao fim de 30 dias, mostrando maiores desvios em profundidade.

A condição inicial de humidade no solo antes de ocorrer a infiltração é representada na **Figura 6**. O solo foi humedecido fazendo infiltrar 73 mm de água em 45 minutos. As simulações foram efectuadas considerando cenários sem e com macroporos. No cenário sem macroporos não foi possível simular de forma realista a infiltração do 73 mm de água. Nos primeiros 45 minutos simulados apenas se infiltraram 44 mm de água. Os 73 mm de água requeriam mais de 15 horas para se infiltrarem.

Este cenário não era realista. Com efeito o solo estudado é um solo frequentemente lavrado, sendo a velocidade de infiltração na camada superficial determinada pelo escoamento nos macroporos. A caracterização hidrodinâmica convencional efectuada em laboratório não considerou a lavoura. Deste modo foi feita uma parametrização dos macroporos como descrito no parágrafo 0. Considerou-se um factor multiplicativo de 50 à superfície e que os macroporos têm 35 cm de profundidade.

Os resultados da simulação da infiltração considerando a existência de macroporos e as características hidráulicas da matriz do solo apresentadas no **QUADRO 2**, estão representados na **Figura 6**. A totalidade dos 73 mm de água infiltraram-se em 1 hora e 40 minutos, melhorando os resultados obtidos anteriormente, mas ainda com um tempo de infiltração demasiado longo quando comparado com os 45 minutos observados experimentalmente.

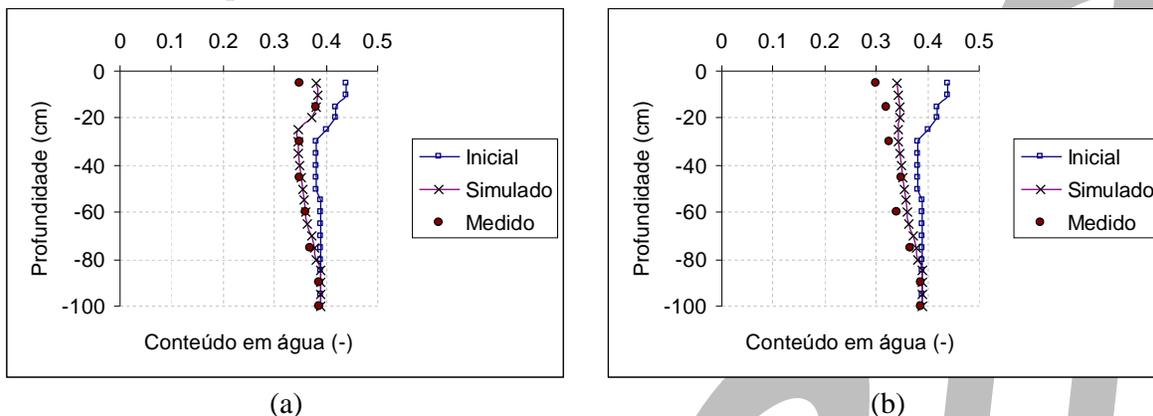


Figura 5 – Perfis de humidade medidos e simulados (a) ao fim de 6 dias e (b) ao fim 30 dias (redistribuição). Parâmetros não calibrados. Modelo utilizado – **MOHID**

Os perfis experimentais de humidade após a infiltração mostram que o teor de água observados à saturação (θ_s) são superiores aos obtidos na caracterização hidrodinâmica do solo (**QUADRO 2**) e apresentam uma distribuição mais heterogénea ao longo do perfil. Isto significa que os parâmetros obtidos a partir do ajustamento aos dados de laboratório efectuado pelo RETC é insuficiente para descrever as condições particulares deste perfil de solo e constitui motivo para revisão dos parâmetros do modelo de van Genuchten, como descrito no parágrafo seguinte.

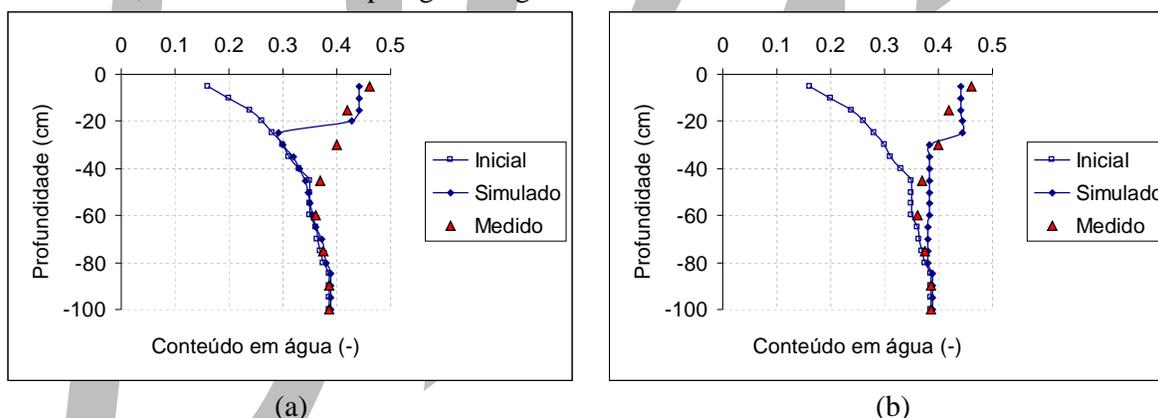


Figura 6 - Perfil de humidade medidos e simulados (a) ao fim de 45 minutos e (b) ao fim de 1h39m (infiltração). Parâmetros não calibrados. Modelo utilizado - **MOHID**

Revisão dos parâmetros do modelo de van Genuchten.

Os parâmetros do modelo de van Genuchten foram ajustados tendo como objectivo a reprodução dos valores das propriedades hidráulicas obtidas por Cameira (1999) usando o modelo de Brooks & Corey. Tal como aquela autora redefinimos o horizonte superficial de forma a incluir a camada lavrada (35 cm). Este primeiro horizonte foi subdividido em três sub-horizontes com as espessuras indicadas no **QUADRO 3**. O segundo horizonte passou a estar compreendido entre os 35 e os 65 cm e o terceiro a partir daquela profundidade. Os parâmetros hidráulicos *alfa*, *n* e *Ks* obtidos apresentam-se no **QUADRO 3**.

QUADRO 3 – Parâmetros hidráulicos do solo obtidos após calibração com o modelo MOHID.

Profun.	θ_r	θ_s	alfa	n	ks
0-10	0.001	0.46	0.02	1.4	12.1
10-20.	0.001	0.42	0.02	1.2	12.1

20-35	0.001	0.4	0.02	1.2	12.1
35-65	0.001	0.393	0.013	1.218	22.4
>65	0.001	0.386	0.017	1.192	22.4

Os resultados da simulação na redistribuição com os novos parâmetros são apresentados na **Figura 7**. A figura mostra resultados obtidos com uma geometria tridimensional **Figura 7 [b]** e com uma geometria unidimensional **Figura 7 [a]**. A comparação dos dois resultados mostra a importância do transporte lateral e da evaporação na zona envolvente do monólito. A comparação da **Figura 7 [b]** e da **Figura 5 [b]** mostra a importância do refinamento da parametrização. A evaporação parece ser a grande responsável pela secagem mais acentuada da camada da superfície ao fim de 30 dias, enquanto que o refinamento da parametrização parece ser crítica para a reprodução da variabilidade vertical.

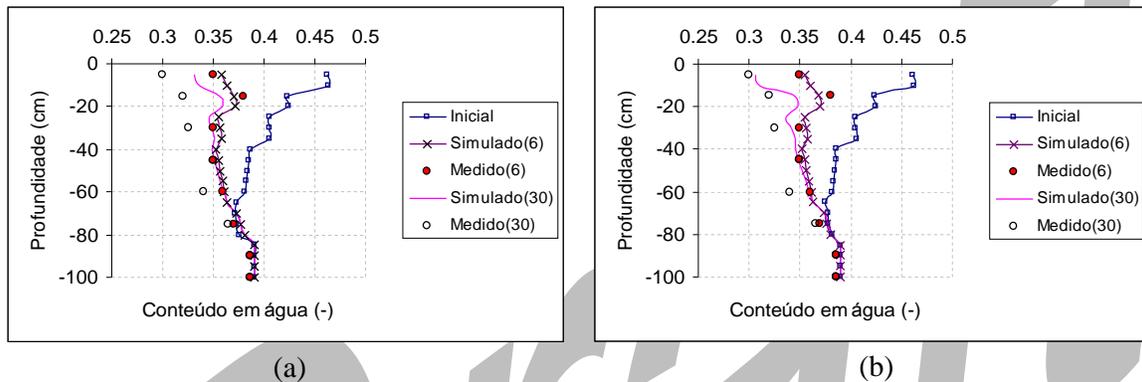


Figura 7– Perfis de redistribuição (ao fim de 6 e 30 dias) medidos e simulados depois da infiltração (a) com modelo unidimensional e (b) com modelo tridimensional. Parâmetros calibrados. Modelo utilizado – **MOHID**

Com o objectivo de avaliar a importância do transporte horizontal, apresentam-se (**Figura 8**) os perfis do logaritmo da pressão efectiva imediatamente após a infiltração, ao fim de 6 dias e ao fim de 30 dias. A figura mostra que ao final dos 30 dias existia uma diferença de cerca de 10^5 cm de equivalente de pressão entre as células extremas da superfície e o centro de monólito. Esta diferença origina um gradiente elevado que pode ser a justificação para o abaixamento do teor de água à superfície, mesmo com evaporação nula sob a superfície do monólito. Na situação ao 6º dia após a infiltração a importância da evaporação era ainda reduzida, por o gradiente ser ainda baixo.

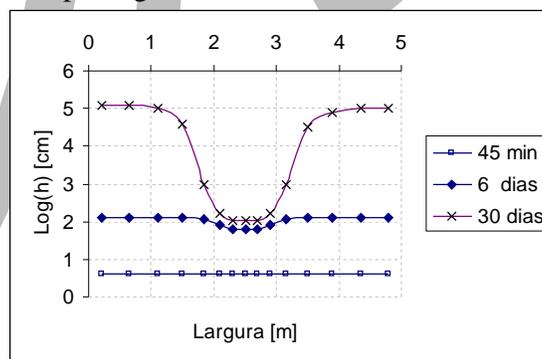


Figura 8 – Logaritmo da pressão efectiva ao longo da superfície do terreno (5cm de profundidade). Parâmetros calibrados. Modelo utilizado – **MOHID**.

A simulação da infiltração foi feita com os novos parâmetros obtidos na calibração (QUADRO 3) e considerando a presença de macroporos, como desfruto anteriormente. O perfil de condutividades obtido, tendo em conta os macroporos, para o exemplo estudado, está descrito na **Figura 9**.

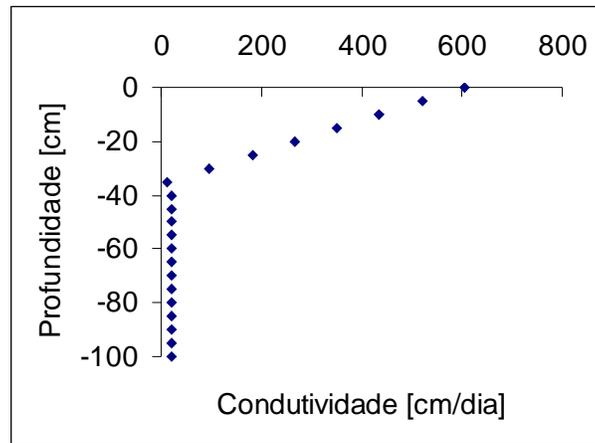


Figura 9 - Perfil de condutividades nas faces em saturado com amplificação de macroporos

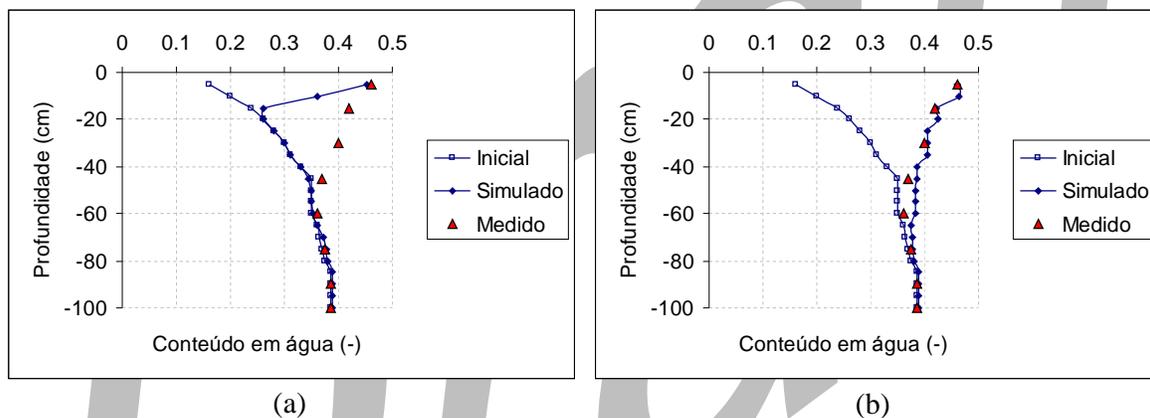


Figura 10 - Perfil de humidade medidos e simulados ao fim de 45 minutos (a) sem macroporos e (b) com macroporos (infiltração). Parâmetros calibrados. Modelo utilizado – *MOHID*

Com a nova parametrização e considerando os macroporos, o modelo foi capaz de simular a infiltração dos 73 mm de água aplicada em 45 minutos. Na **Figura 10** são apresentados os perfis de humidade medidos antes e depois da infiltração e o perfil obtido na simulação utilizando a formulação simplificada dos macroporos descrita previamente.

Comparação com o modelo Hydrus

Após o refinamento dos parâmetros e das simulações com o modelo *MOHID*, usou-se o modelo *HYDRUS* e fez-se uma simulação semelhante, mas apenas bidimensional, pois o *HYDRUS* não permite fazer malhas tridimensionais. Para tornar a comparação objectiva, as simulações do *MOHID* foram também repetidas considerando uma malha bidimensional.

Os resultados da simulação dos perfis de redistribuição ao fim de 6 dias e ao fim de 30 dias, foram iguais aos obtidos pelo *MOHID* nas mesmas condições.

O *HYDRUS* não considera a existência de macroporos, por isso na simulação da infiltração, foi necessário ampliar o K_s . (**QUADRO 4**). A ampliação foi da mesma ordem de grandeza da que foi utilizada na equação simplificada para os macroporos utilizada no *MOHID* (50 vezes). O perfil de teor de água foi igual ao obtido pelo *MOHID* e o tempo de infiltração foi de 45 minutos.

QUADRO 4 - K_s utilizados para simular a infiltração em 45 minutos *HYDRUS*

Profun.	k_s
0-10	636.8
10-20	508.9
20-35	127.0

35-65	22.4
>65	22.4

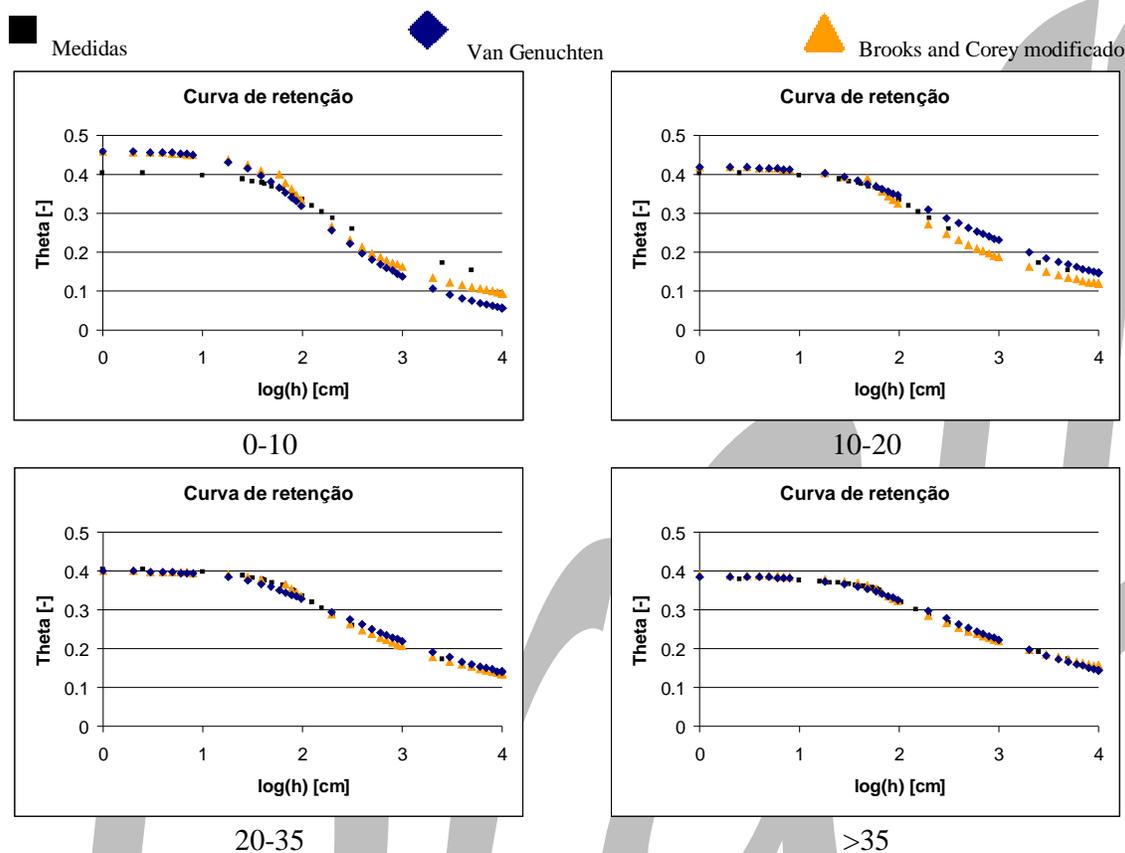


Figura 11 – Curvas de retenção descritas por: medidas de laboratório, modelo de VG e modelo modificado de BC (Parâmetros calibrados)

Comparação dos modelos de van Genuchten e de Brooks & Corey

Nas simulações usou-se a curva de retenção de van Genuchten, Equação (5). Cameira (1999) utilizou o modelo de Brooks & Corey, Equação (6),

$$\theta(h) = \begin{cases} \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{(1 + |\alpha h|^n)^m} & h < 0 \\ \theta_s & h \geq 0 \end{cases} \quad (5)$$

onde, θ é o teor de água volúmico no solo [L^3L^{-3}], h é a pressão efectiva no solo [L], θ_s é o teor de água à saturação [L^3L^{-3}], θ_r é o teor de água residual [L^3L^{-3}], n [-] e α são constantes [$1/L$] obtidas por ajustamento aos dados e ainda $m = 1 - 1/n$, $n > 1$.

$$\theta(h) = \begin{cases} \theta_s - A|h| & 0 \leq |h| \leq |h_{b1}| \\ \theta_r - B|h|^{-\lambda} & |h| \geq |h_{b1}| \end{cases} \quad (6)$$

A [L^{-1}], B [$L^{-\lambda}$], λ [-] e h_{b1} [L] são constantes obtidas por ajustamento aos dados.

A **Figura 11** compara as curvas de retenção produzidas pelos dois modelos (após refinamento do ajuste) e os valores experimentais. A figura mostra que as curvas de retenção produzidas pelos dois modelos são semelhantes e que comparam bastante bem com as medidas. Os maiores desvios encontrados próximo da superfície, poderão ter origem na grande perturbação produzida pela lavoura.

A curva de condutividade do modelo de van Genuchten (MOHID), é descrita pela Equação (3). Considerando $L=0.5$, dessa equação obtém-se a Equação (7):

$$K(h) = K_s \frac{\left(1 - (\alpha|h|)^{n-1} \left[1 + (\alpha|h|)^n\right]^{-m}\right)^2}{\left[1 + (\alpha|h|)^n\right]^{n/2}} \quad (7)$$

K_s é a Condutividade em saturado [LT^{-1}], h é a pressão efectiva no solo [L], n [-] e α [$1/L$] são constantes obtidas por ajustamento aos dados e ainda $m = 1 - 1/n$, $n > 1$.

A curva de condutividade do modelo de Brooks & Corey modificado é descrita pela Equação (8):

$$K(h) = K_s |h|^{-N_1} \quad 0 \leq |h| \leq |h_{b2}| \quad (8)$$

$$K(h) = c_2 |h|^{-N_2} \quad |h| \geq |h_{b2}|$$

c_2 [$L^{1+N_2}T^{-1}$], N_1 [-], N_2 [-] e h_{b2} [L] são constantes obtidas por ajustamento aos dados.

A comparação dos dois modelos e dos dados de campo é feita na **Figura 12**. Entre a saturação e pF 2,5 as curvas de condutividade dos modelos são semelhantes entre si e são semelhantes aos valores experimentais. As diferenças aumentam para valores de pF superiores a 2,5.

O modelo de Brooks & Corey usa parâmetros distintos para a curva de retenção e para a curva de condutividade, enquanto que o modelo de van Genuchten usa parâmetros comuns para ambas as curvas o que explica as diferenças de concordâncias nas duas curvas.

De qualquer modo, na gama de variação predominante do pF neste ensaio, as concordâncias entre os valores estimados por ambos os modelos e os dados experimentais é boa, o que mostra que as correcções dos horizontes do solo consideradas e o consequente ajuste dos parâmetros do modelo de van Genuchten são realistas. As diferenças entre as curvas previstas por ambos os modelos apresentados na **Figura 12** existem essencialmente para valores muito baixos de condutividade, cujo interesse prático é mínimo para a agricultura e para o próprio balanço hídrico, uma vez que tem associados caudais muito baixos.

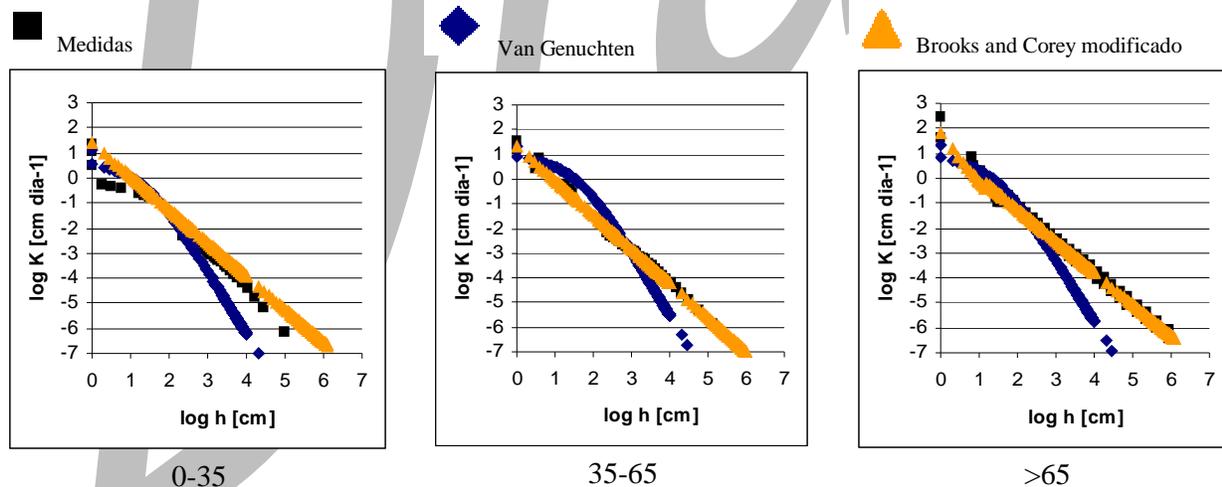


Figura 12 - Curvas de condutividade medidas em laboratório e descritas pelo modelo de VG e pelo modelo modificado de BC (parâmetros calibrados)

Conclusões

Este trabalho teve como grandes objectivos verificar a capacidade do modelo MOHID para simular o escoamento da água no solo, a importância da capacidade tridimensional de simulação do modelo e avaliar o detalhe dos dados de campo necessários à simulação.

A qualidade dos métodos numéricos usados no modelo foi avaliada por comparação com o modelo HYDRUS. Usando as mesmas discretizações e os mesmos parâmetros ambos os modelos produziram os mesmos resultados, provando a qualidade dos métodos.

A importância dos processos tridimensionais foi avaliada durante o processo de redistribuição, especialmente entre os dias 6 e 30 de simulação. Foi verificado que para a reprodução dos resultados do ensaio era essencial a consideração do transporte lateral associado à evaporação.

Os resultados obtidos usando uma definição grosseira dos parâmetros do modelo das propriedades hidráulicas do solo e uma definição mais detalhada mostram resultados diferentes, mas as mesmas tendências, sendo as diferenças durante o processo de redistribuição da mesma ordem de grandeza das obtidas considerando a solução unidimensional ou tridimensional, o que significa que o esforço dedicado ao refinamento dos parâmetros dos modelos das propriedades hidráulicas do solo deve ser equilibrado com o esforço dedicado à simulação do transporte horizontal.

Os macroporos mostraram ser essenciais para a simulação do processo de infiltração num solo lavrado. Este resultado era esperado e mostra que as zonas de escoamento preferencial, quando presentes não podem ser ignoradas.

Agradecimentos

Este trabalho contou com o apoio de uma bolsa da Universidade Técnica de Lisboa para estímulo da cooperação inter-escolas.

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.
- Ahuja, L.R. & Hebson 1992. *Water, chemical and heat transport in soil matrix and macropores*. In: *Root Zone Water Quality Model*. Tech. Docum. USDA/ARS, Great Plains Systems Research Unit, Tech. Report N°2. Fort Collins, Colorado.
- 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.
- 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 estuarinos usando uma abordagem de coordenada vertical genérica*. Universidade Técnica de Lisboa, Instituto Superior Técnico. Tese de Doutoramento.
- Miranda, R., Braunschweig, F., Leitão, P., Neves, R., Martins, F. & Santos, A. 2000. MOHID 2000 - *A coastal integrated object oriented model*. In Blain, W.R. & Brebbia, C.A. (eds). *Hydraulic Engineering Software VIII*, pp. 393-401. WIT Press, Southampton, UK.
- Neves, R.J.J. 1985. *Étude Experimentale et Modélisation des Circulations Trasitoire 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*, **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., F. J. Leij, and S. R. Yates. 1991 The RETC Code for Quantifying the Hydraulic Functions of Unsaturated Soils, Version 1.0. EPA Report 600/2-91/065, 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.

Draft