RBRH - Revista Brasileira de Recursos Hídricos Volume 3 n.2 Abr/Jun 1998, 15-22

MÉTODO PERTURBATIVO DIFERENCIAL PARA ANÁLISE DE SENSIBILIDADE DE UM MODELO DE TRANSFERÊNCIA DE SOLUTO EM SOLOS

Carlos Alberto Brayner Oliveira Lira, Antonio Celso Dantas Antonino, Fernando Roberto Andrade Lima e Clemente José Gusmão Carneiro

Departamento de Energia Nuclear – UFPE
Av. Prof. Luiz Freire, 1000 - Cid. Universitária – CEP 54740-540 Recife, PE

RESUMO

As variações da quantidade total de soluto no perfil de um solo em um certo instante de tempo foram determinadas pelos métodos: numérico convencional e perturbativo, considerando a dispersividade do solo como parâmetro. Os cálculos foram efetuados para dois valores de velocidade aparente, com o objetivo de comparar os resultados dos dois métodos. Os resultados obtidos na faixa de velocidades analisadas ($v \leq 13{,}9.10^{-7}$ m/s), apresentaram boa concordância entre as metodologias perturbativa e via modelo, demonstrando a viabilidade do uso de métodos perturbativos para análise de sensibilidade em modelos computacionais da dinâmica de água e de solutos em solos.

INTRODUÇÃO

A descrição quantitativa do transporte de água, de sais e de poluentes na zona não-saturada do solo é essencial para o manejo da água, de nutrientes e de substâncias químicas perigosas e que potencialmente possam contaminar os alimentos ou a água que drena para os aqüíferos subterrâneos. Por causa das dificuldades envolvidas e também dos altos custos da execução de experimentos in-situ, os modelos de simulação computacionais estão tendo progressivamente um importante papel no estudo desse manejo.

A água é o principal veículo de transporte de poluentes. Os rios podem ser contaminados diretamente através das águas residuais das indústrias e indiretamente através de contaminação do solo que transporta a água para o aqüífero freático e posteriormente para os rios. A necessidade do aumento de produtividade dos solos, conseqüência do aumento populacional, tem levado a uma melhoria considerável das técnicas agrícolas, e também ao uso intensivo de fertilizantes e defensivos agrícolas. Um risco desse uso intensivo é o transporte de elementos poluentes para o aqüífero freático.

Predizer a dinâmica de solutos em solos em função das suas propriedades físico-químicas e físico-hídricas é importante nos estudos de balanço de nutrientes, manejo de solos e recuperação de solos salinos e sódicos. Em particular, o conhecimento do movimento de pesticidas e outros agentes tóxicos, tais como metais pesados e materiais radioativos resultantes de processos industriais, é essencial para avaliação do impacto desses poluentes sobre o meio ambiente.

A utilização de modelos matemáticos na simulação dos processos de transferência de água e de solutos que ocorrem nos solos depende ainda do conhecimento de parâmetros que são geralmente a maior fonte de imprecisão desses modelos. Para se estabelecer quais os parâmetros que mais influenciam a variável dependente do modelo, é necessário construir a sua superfície de resposta através de uma análise de sensibilidade. Desta forma, pode-se determinar aqueles parâmetros que devem ser conhecidos com maior precisão possível para assegurar o melhor desempenho do modelo.

Nas últimas décadas, métodos perturbativos têm sido empregados na análise de sensibilidade com grande vantagem computacional sobre os métodos de construção de superfície de resposta. Várias formulações da teoria de perturbação foram desenvolvidas, as quais podem ser classificadas em três categorias:

i. O formalismo variacional, que usa o método variacional adotado por Stacey Jr. (1974).
ii. O formalismo diferencial, baseado no uso de funções adjuntas, adotado por Oblow et al. (1979) e Cacuci et al. (1980).
iii. O formalismo da teoria da perturbação generalizada (GPT), baseado no princípio da conservação da função importância, adotado por Gandini (1967).

O formalismo diferencial tem sido, desde então, aplicado para cálculos de sensibilidade em problemas de reatores nucleares (Andrade Lima et al., 1993), de geradores de vapor (Lira et al., 1994) e de golpes de ariete em redes hidráulicas (Baliño et al., 1995).

O presente trabalho propõe aplicar o formalismo diferencial para análise de sensibilidade de um modelo conhecido de transferência de solutos em solos e comparar os resultados com os cálculos efetuados diretamente com as equações do modelo.

MATERIAL E MÉTODOS

Modelo

A equação que descreve a transferência de solutos não interativos em solos, obtida através da combinação da equação de conservação da massa e da equação de transporte, se escreve (Bresler et al., 1982):

$$\frac{\partial(\theta c)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z}\left[\theta D(v,\theta)\frac{\partial c}{\partial z}\right] - \frac{\partial(qc)}{\partial z} \qquad (1)$$

com,

$$v = \frac{q}{\theta}$$

onde t = tempo (s); z = distância (m); θ = umidade volumétrica (m^3 de solução/m^3 de solo); c = concentração de soluto (kg/m^3); D = coeficiente de dispersão hidrodinâmica (m^2/s); q = densidade de fluxo da solução (m/s); v = velocidade aparente da solução (m/s).

O coeficiente de dispersão hidrodinâmica é dado por:

$$D(v,\theta) = D_p(v) + \frac{D_f(\theta)}{\theta} \qquad (2)$$

onde D_p e D_f são respectivamente os coeficientes de dispersão e difusão. O valor de D_p pode ser estimado por:

$$D_p(v) = \lambda|v| \qquad (3)$$

onde λ é a dispersividade, em m, variando entre $0{,}002 < \lambda < 0{,}080$. O valor de D_f pode ser estimado por:

$$D_f(\theta) = D_l\, a \exp(b\theta) \qquad (4)$$

onde D_l é o coeficiente de difusão molecular na água livre, a e b são constantes empíricas podendo ser aproximadas por b = 10 e 0,005 > a > 0,001 (Bresler et al., 1982).

A fim de simplificar a identificação dos mecanismos físico-químicos e a determinação dos coeficientes de dispersão hidrodinâmica, muitos dos estudos sobre os fenômenos de deslocamento da solução do solo (principalmente em laboratório) têm se limitado à densidade de fluxo e umidade constantes. Nestas condições a Equação (1) torna-se:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - v\frac{\partial c}{\partial z} \qquad (5)$$

As condições de contorno e inicial usadas no presente trabalho, foram:

$$c(0,t) = c_o \qquad 0 < t < t_f \qquad (6)$$

$$c(L,t) = c_N \qquad 0 < t < t_f \qquad (7)$$

$$c(z,0) = c_N \qquad 0 < z < L \tag{8}$$

onde L é a profundidade do perfil de solo, c_N é a concentração inicial do soluto em todo o perfil e c_o é a concentração imposta ao perfil na superfície, para t > 0, e mantendo-se fixo o valor de c_N na fronteira inferior.

Análise de sensibilidade

Os métodos perturbativos referidos na introdução são todos equivalentes sob o ponto de vista da análise de sensibilidade (Cacuci et al., 1980; Andrade Lima, 1990). O método diferencial será utilizado no presente trabalho devido à simplicidade do modelo usado para descrever a transferência de solutos em solos.

Um sistema de equações pode ser escrito genericamente como:

$$m[f(\vec{r}, t, p_i)] = 0 \tag{9}$$

onde m representa todos os operadores e contém todas as equações que compõem o sistema. As variáveis dependentes do modelo denominam-se de f e são funções das coordenadas espaciais $\vec{r}$, do tempo t e dos parâmetros p_i que descrevem o modelo. Deseja-se normalmente determinar uma grandeza R (=funcional-resposta do sistema) através de f. É sempre possível encontrar R através de uma relação:

$$R = \langle\langle f S^+ \rangle\rangle \tag{10}$$

onde S^+ é uma função conhecida, denominada termo de fonte da equação adjunta e << >> significa integração no espaço de fase e no tempo. A variação do funcional-resposta (doravante denominado simplesmente de resposta) em relação a um parâmetro p_i do sistema é obtida derivando-se a Equação (10) em relação a p_i:

$$\frac{\delta R}{\delta p_i} = \langle\langle f \frac{\partial S^+}{\partial p_i} \rangle\rangle + \langle\langle \frac{\partial f}{\partial p_i} S^+ \rangle\rangle \tag{11}$$

Desde que a solução não-perturbada f (ou solução de referência) pode ser encontrada a partir das Equações (5), (6), (7), e (8), resta apenas determinar $\partial f/\partial p_i$ para se poder avaliar $\delta R/\delta p_i$. Usando as propriedades das funções adjuntas é possível mostrar que se f^*, função adjunta de $\partial f/\partial p_i$, obedece a uma equação do tipo

$$m\left[f^*(\vec{r}, t)\right] = S^+ \tag{12}$$

então,

$$\begin{aligned} \langle\langle \frac{\partial f}{\partial p_i} S^+ \rangle\rangle &= \langle\langle f^* S_{p_i} \rangle\rangle + \\ &+ P_L\left(\frac{\partial f}{\partial p_i}, f^*\right) \end{aligned} \tag{13}$$

onde S_{p_i} é o termo de fonte da Equação (5) derivada em relação ao parâmetro p_i e $P_L\left(\partial f/\partial p_i, f^*\right)$ é o concomitante bilinear, que envolve as condições de contorno e iniciais do problema. Os termos do concomitante bilinear permitem estabelecer as condições de contorno e finais do problema adjunto (Equação 12), eliminando convenientemente os valores de $\partial f/\partial p_i$ desconhecidos. A vantagem do uso das funções adjuntas para a análise de sensibilidade consiste em que o sistema de Equações (12) é sempre do tipo linear, mesmo quando o sistema original é constituído de equações não-lineares.

Aplicação do método diferencial ao modelo

Derivando a Equação (5) em relação a um parâmetro genérico p_i, obtém-se:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial c}{\partial p_i}\right)=D\frac{\partial^2}{\partial z^2}\left(\frac{\partial c}{\partial p_i}\right)+\frac{\partial D}{\partial p_i}\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}- \\ -v\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial c}{\partial p_i}\right)-\frac{\partial v}{\partial p_i}\frac{\partial c}{\partial z} \quad (14)$$

chamando:

$$S_{p_i}=\frac{\partial D}{\partial p_i}\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}-\frac{\partial v}{\partial p_i}\frac{\partial c}{\partial z} \quad (15)$$

e abreviando $\partial c/\partial p_i$ para $c_{/p_i}$, temos:

$$\frac{\partial}{\partial t}(c_{/p_i})-D\frac{\partial^2(c_{/p_i})}{\partial z^2}+ \\ +v\frac{\partial(c_{/p_i})}{\partial z}=S_{p_i} \quad (16)$$

A equação adjunta da Equação (16) pode ser escrita como:

$$-\frac{\partial c^*}{\partial t}-D\frac{\partial^2 c^*}{\partial z^2}-v\frac{\partial c^*}{\partial z}=S^* \quad (17)$$

O termo S* é obtido multiplicando a Equação (16) por c* e a Equação (17) por c/p_i, e integrando ambas no espaço de fase e no tempo. Subtraindo, os resultados obtidos, tem-se:

$$\langle\langle S^* c_{/p_i}\rangle\rangle=\langle\langle c^* S_{p_i}\rangle\rangle+ \\ +P_L\left[c_{/p_i},c^*\right] \quad (18)$$

onde $P_L\left[c_{/p_i},c^*\right]$ é o concomitante bilinear dado por:

$$P_L\left[c_{/p_i},c^*\right]=\int_0^{t_f} D\left[\frac{\partial c}{\partial p_i}\frac{\partial c^*}{\partial z}\right]_0^L dt+ \\ +\int_0^L\left[c^*\frac{\partial c}{\partial p_i}\right]_{t=0} dz \quad (19)$$

Os valores de $\partial c/\partial p_i$ são obtidos derivando diretamente as condições de contorno e iniciais do problema direto. A eliminação de valores de $\partial c/\partial p_i$ desconhecidos no concomitante bilinear acima, permite deduzir as condições de contorno e final do problema adjunto:

$$c^*(0,t)=0 \quad (20)$$

$$c^*(L,t)=0 \quad (21)$$

$$c^*(z,t_f)=0 \quad (22)$$

Fazendo $S^*=S^+$, a Equação (18) assume a mesma forma da Equação (13), e que substituída na Equação (11), fornece o coeficiente de sensibilidade:

$$\frac{\delta R}{\delta p_i}=\langle\langle c\frac{\partial S^+}{\partial p_i}\rangle\rangle+\langle\langle c^* S_{p_i}\rangle\rangle+ \\ +P_L\left[c_{/p_i},c^*\right] \quad (23)$$

Solução numérica da equação do modelo

A Equação (5) com as condições de contorno e inicial dadas pelas Equações (6), (7) e (8) foram resolvidas através do método das diferenças finitas, utilizando a aproximação de Cranck-Nicolson, resultando no seguinte esquema numérico padrão (Minkowicz et al., 1988):

$$\left[\frac{[I]}{\Delta t}+\frac{[Q]}{2}\right]\{c\}^{k+1}= =\left[\frac{[I]}{\Delta t}-\frac{[Q]}{2}\right]\{c\}^{k}+\{F\}^{k} \tag{24}$$

onde [I] é a matriz identidade de dimensão (N-1) x (N-1), sendo N = L/Δz e [Q] é a matriz tridiagonal (N-1) x (N-1):

$$[Q]=\begin{bmatrix} \beta & \delta & 0 & . & . & . & 0 \\ \alpha & \beta & \delta & 0 & . & . & . \\ 0 & \alpha & \beta & \delta & 0 & . & . \\ . & . & . & . & . & . & . \\ . & . & 0 & \alpha & \beta & \delta & 0 \\ . & . & . & 0 & \alpha & \beta & \delta \\ 0 & . & . & . & 0 & \alpha & \beta \end{bmatrix}$$

com,

$$\alpha=-\frac{v}{2\Delta z}-\frac{D}{(\Delta z)^2}\ ;\ \beta=\frac{2D}{(\Delta z)^2}\ ;$$
$$\delta=\frac{v}{2\Delta z}-\frac{D}{(\Delta z)^2}$$

e $\{c\}^{k+1}$ e $\{c\}^{k}$ são os vetores colunas com os valores da concentração de soluto c nos N-1 pontos da malha espacial, no instante t^{k+1} e t^k, respectivamente. $\{F\}^k$ é um vetor coluna (N-1) contendo os termos da condição de contorno:

$$\{F\}^{k}=\begin{bmatrix} -\frac{\alpha}{2}[c(0,t^{k})+c(0,t^{k+1})] \\ 0 \\ . \\ 0 \\ -\frac{\delta}{2}[c(L,t^{k})+c(L,t^{k+1})] \end{bmatrix}$$

e $\{c\}^0$ é dado por:

$$\{c\}^{0}=\begin{Bmatrix} c_N \\ c_N \\ . \\ . \\ c_N \\ c_N \end{Bmatrix}$$

Funcional resposta

Definindo a quantidade total de soluto no perfil por m^2 de área do mesmo, no instante $t_f = 10$ h como o funcional resposta de interesse, temos:

$$R=\int_0^L c(z,t_f)dz \tag{25}$$

e a integral é resolvida numericamente.

Coeficiente de sensibilidade

O coeficiente de sensibilidade pode ser calculado diretamente da equação do modelo através da expressão:

$$\frac{\delta R}{\delta p_i}=\frac{R-R_0}{p_i-(p_i)_0} \tag{26}$$

Solução numérica da equação adjunta

A mesma aproximação numérica para a equação do modelo foi utilizada para o problema adjunto, resultando:

$$\left[-\frac{[I]}{\Delta t}-\frac{[Q^*]}{2}\right]\{c^*\}^{k}= =\left[-\frac{[I]}{\Delta t}+\frac{[Q^*]}{2}\right]\{c^*\}^{k+1}-\{S^+\}^{k} \tag{27}$$

pois, $\{F\}^k \equiv \{0\}$ pelas condições de contorno, e a matriz [Q*] é dada por:

$$[Q^*] = \begin{bmatrix} \beta & \alpha & 0 & . & . & . & 0 \\ \delta & \beta & \alpha & 0 & . & . & . \\ 0 & \delta & \beta & \alpha & 0 & . & . \\ . & . & . & . & . & . & . \\ . & . & 0 & \delta & \beta & \alpha & 0 \\ . & . & . & 0 & \delta & \beta & \alpha \\ 0 & . & . & . & 0 & \delta & \beta \end{bmatrix}$$

Note-se que a solução temporal do problema adjunto desenvolve-se no sentido inverso do problema direto, visto que a condição inicial deste se transforma de fato em uma condição final do sistema adjunto, com valor final nulo decorrente da Equação (22):

$$\{c^*\}^{K+1} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ . \\ . \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix}$$

Funcional resposta

Para a resposta definida como a quantidade total de soluto por m^2 de área da camada de solo de profundidade L no instante de tempo t_f, temos:

$$R = \int_0^{t_f}\int_0^{L} c(z,t)\delta(t - t_f)dzdt \qquad (28)$$

onde foi feito uso da função δ de Dirac. Comparando com a Equação (10), conclui-se que:

$$S^+ = \delta(t - t_f) \qquad (29)$$

Desta forma o vetor coluna $\{S^+\}^k$ é nulo para todo k, exceto no ponto correspondente a t_f (k = K), sendo então dado por:

$$\{S^+\}^K = \begin{Bmatrix} 1/\Delta t \\ 1/\Delta t \\ . \\ . \\ 1/\Delta t \\ 1/\Delta t \end{Bmatrix}$$

Coeficiente de sensibilidade

Entre os diversos parâmetros do modelo que afetam a resposta R, foi selecionada a dispersividade λ para aplicação do método ao modelo. Desta forma o coeficiente de sensibilidade resulta:

$$\frac{\delta R}{\delta p_i} = \langle\langle c^* |v| \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \rangle\rangle \qquad (30)$$

visto que:

$$S_{p_i} = |v| \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \quad , \quad \frac{\partial S}{\partial \lambda} = 0 \quad e \quad P_L\left[c_{/\lambda}, c^*\right] = 0$$

As equações numéricas do modelo e do método adjunto foram resolvidas para L = 0,1 m, usando Δz = 0,01 m, e um transitório total de 36.000 s, com Δt = 3.600 s. Velocidades aparentes de $6{,}95.10^{-7}$ m/s e $13{,}9.10^{-7}$ m/s foram usadas para se verificar a influência deste parâmetro sobre o coeficiente de sensibilidade da resposta R em relação à dispersividade λ, para valores de λ variando de -50%, -25%, +50% e +100% em relação ao valor de referência λ = 0,0028 m. Os demais parâmetros tiveram os seguintes valores de referência: a = 0,002, $D_l = 1{,}11.10^{-9}$ m^2/s e θ = 0,20.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os coeficientes de sensibilidade $\delta R / \delta\lambda$ calculados pelo método adjunto para as velocidades aparentes de $6{,}95.10^{-7}$ m/s e $13{,}9.10^{-7}$ m/s foram respectivamente de 10,13 kg/m e 9,16 kg/m. Isto mostra que a dependência da quantidade de soluto no solo R com a dispersividade λ se reduz com o crescimento da velocidade aparente v, isto é, o coeficiente de sensibilidade $\delta R/\delta\lambda$ decresce à medida que a velocidade v aumenta.

O resultado obtido é coerente pois apesar de R crescer com v, esta última influencia os termos de difusão e convecção de forma a reduzir a dependência de R com λ.

Por outro lado, a Tabela 1 mostra que as variações da quantidade de soluto no solo obtidas diretamente a partir da equação do modelo e a partir do formalismo diferencial apresentam discrepâncias menores que 12%.

Tabela 1. Variação da resposta, ΔR, com a dispersividade λ, para dois valores da velocidade aparente v (m/s) pelos métodos direto (D) e perturbado (P).

	$v=6{,}95.10^{-7}$ m/s		$v=13{,}9.10^{-7}$ m/s	
$\Delta\lambda/\lambda$, %	D	P	D	P
-50	-1,57	-1,41	-1,26	-1,28
-25	-0,76	-0,71	-0,63	-0,64
+50	+1,40	+1,41	+1,20	+1,28
+100	+2,68	+2,83	+2,30	+2,57

CONCLUSÕES

A metodologia perturbativa possibilita, uma vez obtido o coeficiente de sensibilidade $\delta R/\delta\lambda$, determinar o valor de δR para qualquer $\delta\lambda$, ao passo que a solução, via modelo, exige uma execução do programa para cada valor de λ analisado.

Os resultados obtidos na faixa de velocidades analisadas ($v \leq 13{,}9.10^{-7}$ m/s), apresentaram boa concordância entre as metodologias perturbativa e via modelo. Outras faixas de velocidade e outros funcionais resposta estão sendo investigados para uma avaliação mais ampla da viabilidade do uso de métodos perturbativos para análise de sensibilidade em modelos da dinâmica da água de solutos em solos.

REFERÊNCIAS

ANDRADE LIMA, F. R. 1990, *Aplicações de métodos perturbativos ao modelo multi-canal COBRA-IV-I para cálculos de sensibilidade em núcleos de reatores nucleares*. Tese de Doutorado, COPPE/UFRJ.

ANDRADE LIMA, F. R., LIRA, C. A. B. O. & GANDINI, A. 1993, Sensitivity Analysis of Thermohydraulic Systems via Heuristic Generalized Perturbation Theory (HGPT) Methods, *Ann. Nucl. Energy*, vol 20, No 10, pp., 679-690.

BALIÑO, J. L., LARRETEGUY, A. E., LORENZO, A. & LIMA, F. R. A. 1995, Application of Perturbation Methods and Sensitivity Analysis to Waterhammer Problems in Hydraulic Networks, *Anais* do X ENFIR, pp. 184-189.

BRESLER E., MCNEAL B. L. & CARTER D. L. 1982, *Saline and Sodic soils: Principles-Dynamics-Modeling*. Spinger-Verlag, Berlin.

CACUCI, D. G., WEBER, C. F., OBLOW, E. M. & MARABLE, J. H. 1980, Sensitivity theory for general systems of nonlinear equations. *Nucl. Sci. Eng.*, 75:88-110.

GANDINI, A. 1967, A generalized perturbation method for bilinear functionals of the real and adjoint neutrons fluxes. *J Nucl. Energy*, 21:755-765.

LIRA, C. A. B. O., ANDRADE LIMA, F. R., FEITOZA, S. V. & GANDINI, A. 1994, Application of Perturbation Methods for Sensibility Analysis of Nuclear Power Plant Steam Generator, *Proceedings* of the International Conference on New Trends in Nuclear Systems Thermohydraulics, v. 1, pp. 501-506, Pisa, Itália, May 30 - June 2.

MINKOWYCZ, W. J., SPARROW, E. M., SCHNEIDER G. E. & PLETCHER R. H. 1988, *Handbook of Numerical Heat Transfer*. John Wiley & Sons, New York.

OBLOW, E. M., ALSMILLER, R. G. & WEISBIN, C. F. 1979, *Proc. Mtg. Institute for Gas Technology-Energy Modeling II*, Colorado Springs, Colorado.

STACEY Jr., W. M. 1974, *Variational methods in nuclear reactor physics*. Academic Press Inc., New York.

Differential Formalism of Perturbation Theory for Sensitivity Analysis of a Model for Solute Transfer in Soil

ABSTRACT

Total solute variations in the soil profile as a function of time and sensitivity analysis were calculated using both perturbation and transfer of soil solute models. Numerical solutions were performed, considering two values of apparent flow velocity of the soil solution and soil dispersivity as an input parameter. The results showed the viability of using perturbative methods for sensitivity analysis of solute dynamics in soils for values of velocities lower than 13,9 x 10^{-7} m/s.