

3 Estimativa de Parâmetros

3.1 Introdução

Alguns problemas utilizam dados de medições para deduzir valores de parâmetros, o estudo de tais problemas tem sido chamado que de problemas inversos; (Beck e Woodbury, 1998).

Campos Velho (2001) cita a seguinte afirmação acerca do problema inverso: “a solução de um problema inverso consiste em determinar causas baseado na observação dos seus efeitos”. Já nos problemas diretos a solução envolve encontrar efeitos na base de uma descrição de suas causas.

O método do problema inverso supõe à priori que o modelo aplicado e os relacionamentos hidráulicos selecionados são a descrição exata do comportamento físico do solo, e supõe conseqüentemente que o erro do modelo é insignificante. Isto implica que os erros entre o simulado e o observado são causados somente por inexatidão distribuída nas medidas.

Campos Velho (2001) define que problemas inversos pertencem à classe de problemas mal-postos. Define-se um problema bem-posto como sendo aquele que cumpre as três condições abaixo apresentadas:

- (i) Existe solução;
- (ii) A solução é única;
- (iii) A solução tem uma dependência contínua com os dados de entrada.

Assim, o problema é dito mal-posto se alguma das condições acima não é satisfeita. Em geral, nenhuma das condições descritas é satisfeita num problema inverso (Campos Velho, 2001).

A figura 3.1 apresenta um esquema simples descrevendo o problema direto e o problema inverso.

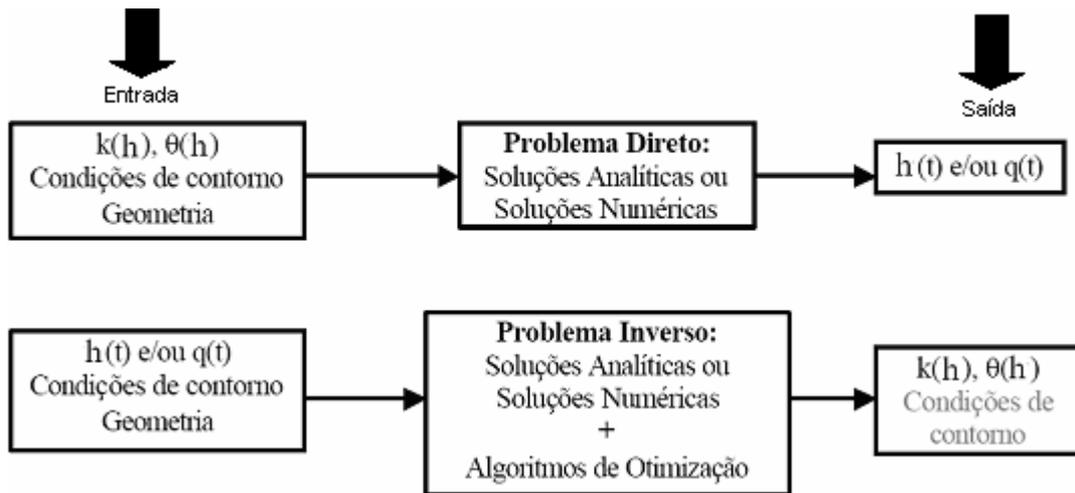


Figura 3.1- Diagrama do problema direto e problema inverso (Velloso, 2000).

Quando utiliza-se a solução do problema inverso para a determinação de parâmetros; este permite a utilização de experiências transientes, dando flexibilidade as condições de contorno experimentais. Como uma vantagem adicional, modelar o problema inverso permite a estimativa simultânea da curva característica e de condutividade num único experimento.

As propriedades hidráulicas do solo para isto são supostas serem descritas por um modelo com valores de parâmetros desconhecidos (ver equações 2.12-2.15). Estes parâmetros são definidos como o vetor \mathbf{p} que contem os parâmetros a ser validados, na seguinte forma:

$$\mathbf{p} = [\theta_s, \theta_r, \alpha_i, n_i, K_s]^T \quad (3.1)$$

As estimativas iniciais dos parâmetros do sistema \mathbf{p} são designadas usando um vetor de estimativa inicial denominado \mathbf{p}_0 , este vetor é avaliado e melhorado iterativamente durante o processo até que um grau desejado de precisão seja obtido. Os parâmetros são estimados automaticamente combinando os dados calculados pelo modelo $\mathbf{y}(\mathbf{p})$ e os valores observados \mathbf{y}^* . Alguma informação disponível de um experimento, tal como a medição de θ_r , θ_s , k_s etc. pode ser usada pelo método, estes serão denominados como informação prévia \mathbf{p}^* .

A resposta do sistema é representada por uma solução numérica da equação do fluxo, somada com as características hidráulicas parametrizadas, os parâmetros selecionados no modelo e as condições de contorno e iniciais do experimento.

Finalmente, o desempenho do método inverso depende da confiabilidade de toda a informação disponível em uma função objetivo, e apesar da existência de algumas regras gerais, há um espaço amplo para decisões subjetivas.

3.2 Métodos de Estimativa de Parâmetros

A aproximação geral para a estimativa de parâmetros do modelo deve selecionar uma função objetivo $\mathbf{F}(\mathbf{p})$ que seja uma medida das diferenças das variáveis medidas e o calculado pelo modelo. O método para determinar os parâmetros é obtido minimizando (ou maximizando, dependendo de como a função é definida) esta função objetivo. Usando o método de mínimos quadrados sugerido como o mais simples por Beck e Arnold (1977), a função objetivo é definida por:

$$F(p) = [y^* - y(p)]^T [y^* - y(p)] = \sum_{i=1}^m r_i^2 \quad (3.2)$$

onde r_i é o residual, ou seja, a diferença entre o valor observado e o calculado. Se nenhum erro de medida existisse, o valor da função objetivo seria zero. Entretanto, caso somente o modelo seja perfeito, a medição de erros experimentais criará geralmente um valor mínimo, diferente de zero para a função objetivo.

O método de mínimos quadrados funciona quando os erros de observação são distribuídos normalmente, ou seja, são não correlacionados e têm uma variação constante, sendo que as estimativas de mínimos quadrados possuem propriedades estatísticas ótimas (Bard, 1974).

3.3 Métodos de Solução do Problema Inverso

Para resolver o problema inverso Hopmans e Simunek (2002) citam três itens fundamentais:

- Um ensaio de laboratório ou campo controlado, de fluxo transiente, onde se estabeleçam as condições de contorno e iniciais e obtenham as variáveis medidas.

- Um modelo numérico de fluxo que simule o regime de fluxo transiente deste ensaio, e:
- Um algoritmo de otimização, que estime os parâmetros desconhecidos \mathbf{p} , tornando mínimas as diferenças entre os valores medidos nos ensaios e o calculado pelo modelo, definidas na função objetivo $\mathbf{F}(\mathbf{p})$ através de uma solução iterativa da equação do fluxo.

A finalidade do algoritmo de otimização é encontrar o mínimo da função objetivo de forma iterativa atualizando os parâmetros do modelo. Desde que a resposta calculada pelo modelo $\mathbf{y}(\mathbf{p})$ dependa dos parâmetros, o ajuste pode ser melhorado mudando os elementos do vetor \mathbf{p} . A busca para o mínimo ocorre no espaço n-dimensional do parâmetro. Muitas técnicas foram desenvolvidas para resolver o problema proposto (Bard, 1974; Beck e Arnold, 1977; Yeh, 1986; Kool, 1987). A maioria destes métodos é iterativa, isto é, começam com um vetor de parâmetro inicial \mathbf{p}_0 , e um novo vetor atualizado é calculado em cada iteração. A equação (3.8) descreve este procedimento:

$$\mathbf{p}^{k+1} = \mathbf{p}^k + \Delta\mathbf{p}^k \quad k=0,1,2,3\dots \quad (3.3)$$

Onde k é a iteração e $\Delta\mathbf{p}^k$ é a variação do vetor de parâmetros \mathbf{p}^k . Existem diversos métodos para o cálculo de $\Delta\mathbf{p}^k$, e geralmente ele é descomposto em duas partes:

$$\Delta\mathbf{p}^k = \alpha^k \mathbf{d}^k \quad (3.4)$$

onde α^k é o tamanho do passo, e \mathbf{d}^k é a direção de busca, também denominado vetor de sentido, o que é determinado de modo tal que a função diminua isto é:

$$F(\mathbf{p}^{k+1}) < F(\mathbf{p}^k) \quad (3.5)$$

Onde $F(\mathbf{p}^{k+1})$ e $F(\mathbf{p}^k)$ são funções objetivas no nível atual e precedente da iteração, respectivamente. O processo iterativo será repetido até que as condições

dadas na função objetivo seja reduzida ou algum outro critério de parada seja satisfeitos (Arora, 1989).

Velloso (2000) resume os passos característicos do algoritmo de otimização como segue:

1. Determinar a estimativa inicial, p_0 ($k = 0$).
2. Calcular a função objetivo para $p = p^k$.
3. Determinar a direção de busca, d^k .
4. Checar o critério de parada do algoritmo. Se satisfeito, parar o processo iterativo, caso contrário, continuar.
5. Calcular o tamanho do passo, α^k .
6. Calcular o vetor de novos parâmetros, p^{k+1} , utilizando a equação (3.8)
7. Fazer: $k = k + 1$, voltar ao passo 2.

A ferramenta numérica utilizada neste trabalho o HYDRUS 2D 3D utiliza o método proposto por Marquardt (1963) quem propôs um método muito eficaz, qual se tornou um padrão para a solução de problemas não-lineares com mínimos quadrados (Kool, 1987, Finsterle e Pruess, 1995, Simunek e van Genuchten, 1996). Chamado geralmente de *método de Marquardt-Levenberg*, esse método representa a união entre o método de Gauss-Newton e o Maximo declive.

Como a parte da solução inversa o HYDRUS produz uma matriz de correlação que especifique o grau de correlação entre os parâmetros a serem estimados. A matriz de correlação quantifica as mudanças nas predições do modelo causadas por mudanças pequenas na estimativa final de um parâmetro particular. Um valor de ± 1 sugere uma correlação linear perfeita visto que 0 não indicam nenhuma correlação em tudo. Beck e Arnold (1977) seguem que um valor maior do que 0,9 indica alta correlação. A matriz de correlação pode ser usada para selecionar os parâmetros, que vão ser mantidos constantes no processo da estimação de parâmetros por causa da correlação elevada.

3.4 Ensaio Modelados Utilizando a Estimativa de Parâmetros

3.4.1 Ensaio de Campo

O primeiro trabalho no qual o método de estimativa de parâmetros foi empregado para determinar as propriedades hidráulicas de solo parcialmente saturados foi o de Dane e Hruska (1983) que estudaram a drenagem por gravidade de um solo argiloso. Os parâmetros α e n do modelo de van Genuchten – Mualem (equações 2.9) foram determinados pela retroanálise, enquanto que os outros parâmetros (θ_r , θ_s , e k_s) foram considerados conhecidos. Os resultados obtidos em relação à curva característica foram bastante satisfatórios e concordantes com resultados já existentes. Entretanto, a curva de permeabilidade apresentou resultados superestimados em relação aos dados existentes (Dane e Hruska, 1983). Isto pode ter acontecido pelo fato da permeabilidade saturada, k_s , ter sido obtida em laboratório, e no campo os macroporos podem ter influenciado o fluxo (Kool et al. 1987). Seria recomendado que a permeabilidade saturada também fosse estimada em campo.

Outra técnica é a utilização do piezocone para determinar as propriedades hidráulicas de solo parcialmente saturados que vem sendo estudada por Gribb *et al.*, (1996, 1998) e Kodešová *et al.* (1998). O piezocone utilizados para obter as propriedades hidráulicas é instrumentado com um pedra porosa perto da ponta e de dois anéis do tensiômetros a 5 e 9 cm acima do filtro. O dispositivo é introduzido em um solo à profundidade desejada, e aplicada uma carga constante de 5 cm. O volume da água embebido pelo solo é monitorado, os tensiômetros registram o avanço da parte dianteira da fre

nte de umedecimento por um período de tempo curto (300-500 s). Gribb *et al.*, (1996) fez uma análise numérica detalhada desta experiência, sendo retroanalizados quatro parâmetros α , θ_s , n e k_s , e θ_r foi mantido constante. A solução mostrou que n e θ_s eram menos sensíveis, e que k_s e α eram mais sensíveis. Além de uma excelente resposta dos valores otimizados com relação aos medidos, como se observa na figura 3.2.

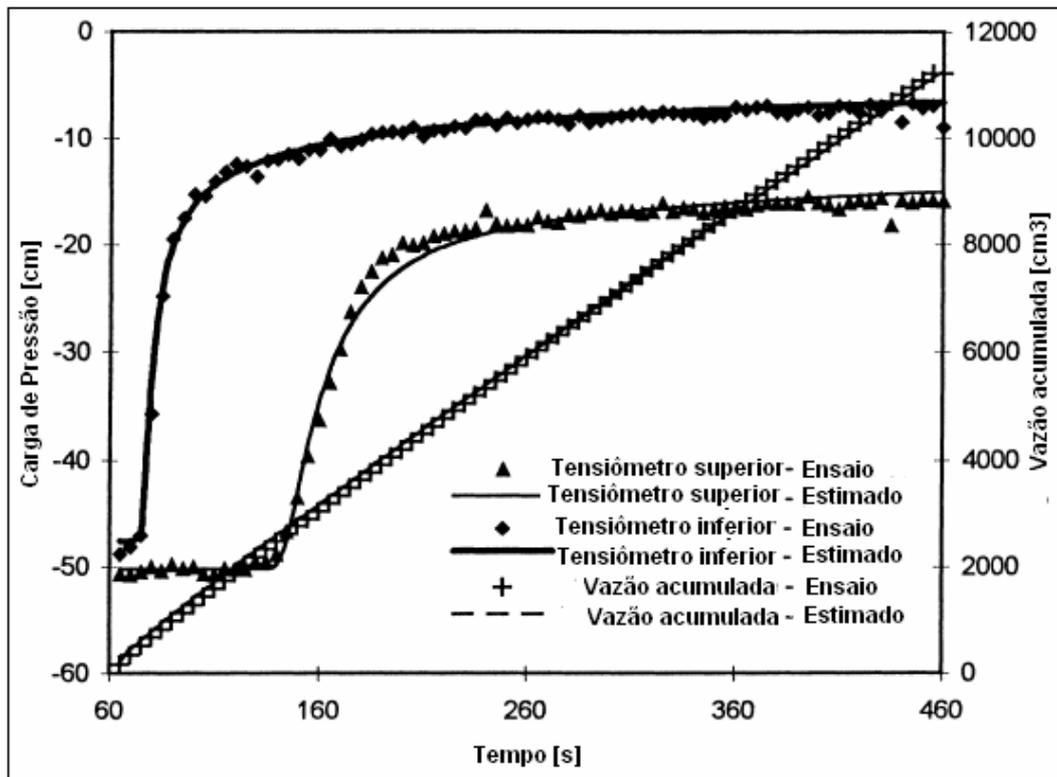


Figura 3.2 - Comparação entre os valores observados nos ensaios e os estimados no ensaio de piezocone (adaptado de Gribb *et al.*, 2006).

3.4.1.1 Ensaio de Infiltração Monitorado (E.I.M.)

Velloso (2000) demonstrou que o ensaio de infiltração monitorado desenvolvido para a identificação dos parâmetros hidráulicos considera todos os fundamentos teóricos descritos no capítulo 3 além da sua simplicidade de execução e confiabilidade.

Este ensaio consiste em determinar a variação da carga de pressão com o tempo quando é aplicada uma carga hidráulica constante.

A configuração do ensaio consiste em escavar um furo de profundidade rasa para colocação do permeâmetro de Guelph juntamente com o tensiômetro. Em seguida, aplica-se uma carga constante de 5 cm, utilizando o tubo de Mariotte de Guelph, com o tensiômetro obtém-se a variação da sucção com o tempo à medida que a água infiltra no solo. A figura 3.3 apresenta o esquema do ensaio.

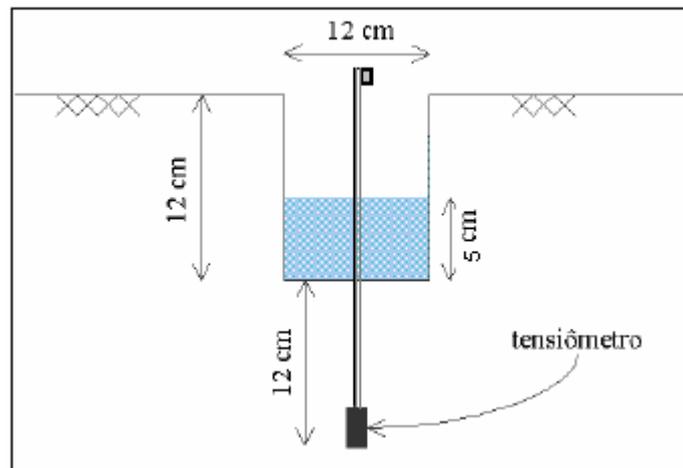


Figura 3.3 – Esquema do Ensaio de Infiltração Monitorado (Velloso, 2006).

A garrafa de Mariotte do permeômetro de Guelph controla a carga constante de água dentro do furo, um tubo de acrílico com uma régua graduada onde a água é introduzida e um tripé que permite adaptar o aparelho a terrenos irregulares.

A figura 3.4 apresenta um esquema do permeômetro de Guelph utilizado no ensaio de infiltração monitorada.

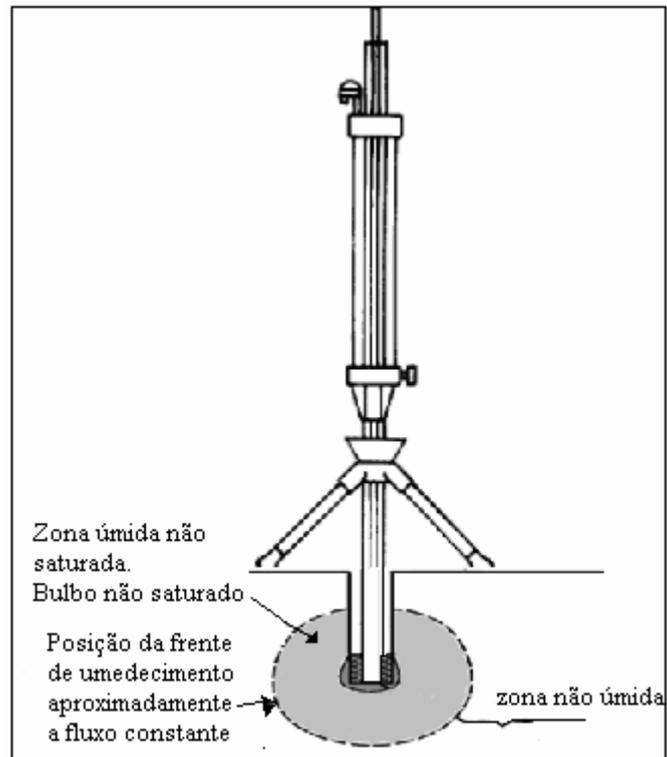


Figura 3.4 - Permeômetro de Guelph.

O *Tensiômetro* desenvolvido em 1922, por Gardner, fornece de forma direta a carga de pressão da água no solo e de forma indireta a umidade. Ele é constituído por um tubo, de comprimento variável, preenchido com água deaerada, em cuja extremidade inferior há uma cápsula de porcelana porosa. É fechado hermeticamente na extremidade superior, onde se encontra um transdutor de pressão que permite a obtenção das pressões geradas no interior do tubo, correspondendo estas à carga de pressão da água intersticial. O princípio de funcionamento do tensiômetro baseia-se na formação do equilíbrio entre o solo e a água contida no interior do aparelho. O equilíbrio ocorre quando a cápsula porosa entra em contato com o solo e a água do tensiômetro entra em contato com a água do solo. Caso a água do solo esteja sob tensão, ela exerce uma sucção sobre o instrumento, retirando água deste, fazendo com que a pressão interna diminua. Como o instrumento é vedado, ocorre a formação do vácuo; a leitura dessa pressão negativa fornece o a carga de pressão à água no solo (Marinho, 1995).

Para os ensaios realizados utilizou-se o tensiômetro modelo 2725, fabricado pela Soilmoisture Equipment Corp., com faixa de operação entre 0 a 90 kPa. A figura 3.5 mostra o procedimento usado para a colocação do tensiômetro no ensaio de campo proposto.

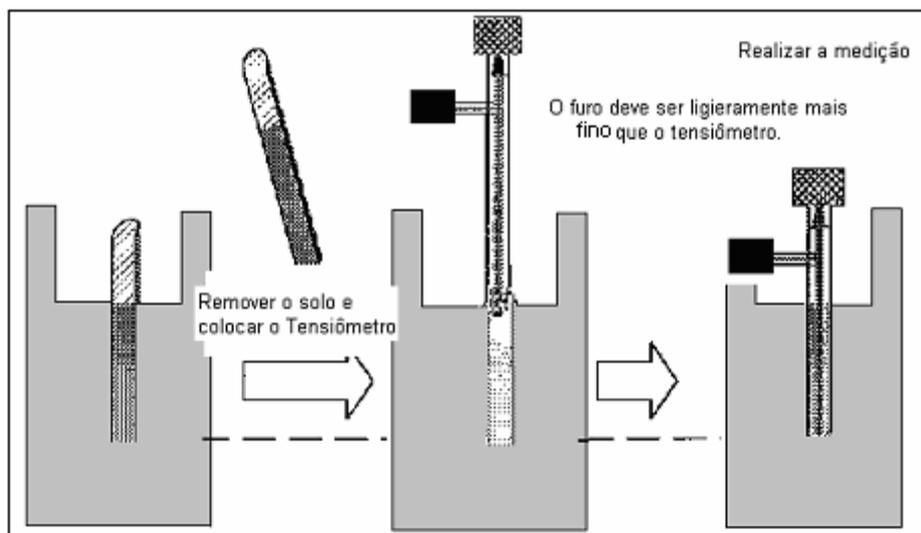


Figura 3.5 - Colocação do tensiômetro.

A figura 3.6 ilustra o ensaio de infiltração monitorada (E.I.M.).



Figura 3.6 - Vista do ensaio de infiltração monitorada (E.I.M.).

3.4.2 Ensaios de Laboratório

Kool *et al.* (1985) simularam um ensaio de drenagem em uma coluna inicialmente saturada, onde a vazão acumulada era medida e utilizada na retroanálise, neste ensaio a drenagem foi iniciada por uma variação de pressão de ar no topo da coluna. Kool *et al.* (1985) estudaram a estimativa de três parâmetros (θ_r , α , e n) do modelo de van Genuchten - Mualem (eqs. 2.12 ao 2.15) e concluíram que não seria possível obter estimativas confiáveis se a diferença entre os teores de umidade inicial e final na coluna fosse menor do que 50% da diferença entre o teor de umidade saturado, θ_s , e o teor de umidade residual, θ_r , ou seja, o ensaio deveria cobrir pelo menos metade da curva característica, no mesmo trabalho eles sugerem que outras condições, além da descrita, devem ser satisfeitas para que a estimativa dos parâmetros, através deste ensaio de drenagem, seja confiável, tais como: o erro experimental na medida de vazão deve ser pequeno, e a estimativa inicial dos parâmetros deve ser razoavelmente próxima aos seu valores reais.

Mesmo satisfazendo as condições sugeridas por Kool *et al.* (1985), estudos numéricos realizados por Toorman *et al.* (1992) e Mous (1993), indicam que as retroanálises feitas a partir somente de dados de vazão não produzem estimativas confiáveis

3.4.2.1

Ensaio de Laboratório Proposto por Marinho (2006)

Marinho (2006) propôs uma técnica de laboratório para estimar a partir de interpretações analítico numéricas as propriedades hidráulicas desconhecidas de numa amostra de solo utilizando uma segunda amostra de solo cujas propriedades hidráulicas estejam conhecidas com anterioridade. O ensaio consiste em um solo 1 (com propriedade hidráulicas desconhecidas) em estado seco, será aderido a uma pasta de caulim em estado saturado (solo 2, com as propriedades hidráulicas conhecidas) e a variação de carga de pressão na pasta de caulim será monitorada por um tensiômetro, produzindo-se um fenômeno de umedecimento no solo 1. A continuação o procedimento descrito por Marinho:

- O solo 1 é moldado e colocado com uma determinada carga de pressão.
- A pasta de caulim (solo 2) é colocada no topo da pedra porosa do tensiômetro na condição saturada.
- O solo 1 é colocada sobre a pasta e o registro da variação da sucção com o tempo já é feito.
- O solo 1 passa a absorver a água da pasta e do tensiômetro (se desconsidera o volume de água que vem do tensiômetro pois é muito pouca água)
- Assim o solo 1 está submetida a uma trajetória de umedecimento.

A figura 3.7 descreve o procedimento sugerido por Marinho (2006) as etapas de preparação do ensaio (a) e o decurso do ensaio (b).

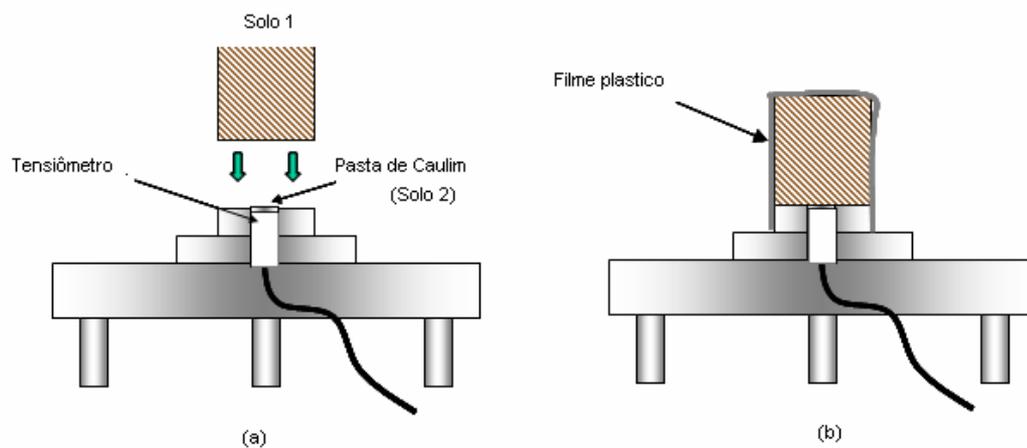


Figura 3.7 - Ensaio de laboratório proposto por Marinho (2006).