Raquel Quadros Velloso

Estudo Numérico da Estimativa de Parâmetros
Hidráulicos em Solos Parcialmente Saturados

Dissertação apresentada ao Departamento de
Engenharia Civil da PUC - Rio como parte dos
requisitos para a obtenção do título de Mestre em
Engenharia Civil - Área Geotecnia.

Orientador: Eurípedes do Amaral Vargas Jr.

Co-Orientador: Luiz Eloy Vaz

Departamento de Engenharia Civil

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

Rio de Janeiro, Abril de 2000

Resumo

A análise de fluxo em solos parcialmente saturados exige o conhecimento das propriedades hidráulicas do solo: a curva característica, $\theta(\psi)$, e a curva de permeabilidade, $k(\psi)$. Entre os problemas geotécnicos que envolvem fluxo em meios parcialmente saturados pode-se citar a instabilização de encostas, muitas vezes associada a variações de sucção, e o transporte de contaminantes, pois, freqüentemente, a fonte contaminante está acima do nível d'água.

O principal objetivo deste trabalho é a implementação numérica de um programa, baseado num código de elementos finitos, para a realização da retroanálise de parâmetros de fluxo em solos parcialmente saturados a partir de ensaios de campo, e que forneça também informações sobre a qualidade da estimativa obtida. O método de retroanálise utilizado permite a determinação simultânea da curva característica e da curva de permeabilidade a partir de dados de fluxo transiente.

O programa desenvolvido foi utilizado para determinar os parâmetros de fluxo de um ensaio realizado no campo experimental II da PUC - Rio. Com base na análise dos resultados obtidos neste ensaio e na análise de sensibilidade foi proposto um ensaio de configuração mais simples que pode fornecer resultados satisfatórios na determinação das propriedades hidráulicas de solos parcialmente saturados.

Abstract

Flow analysis in partially saturated soils requires the determination of soil hydraulic properties: its characteristic curve, $\theta(\psi)$, and its permeability curve $k(\psi)$. The instabilization of slopes, often associated with suction variations, and the transport of contaminants, where the source of contaminants is often above water level, are some of the geotechnical problems involving flows in partially saturated media.

The main objective of this work is the numerical implementation of a program, based on finite element coding, for the back analysis of flow parameters in partially saturated soils, based on field experiments, capable of providing information on the quality of the estimates obtained. The back analysis method used here allows the simultaneous determination of the characteristic and permeability curves from transient flow data.

The program was used to determine flow parameters of a field experiment conducted in Experimental Field II (PUC-Rio). A simpler configuration test is proposed based on the analysis of the results obtained in this field experiment and on a sensitivity analysis. This test may provide satisfactory results in the determination of hydraulic properties of partially saturated soils.

Sumário

Lista de figuras	IV
Lista de tabelas	VI
Lista de símbolos	VII
Capítulo 1 – Introdução	1
Capítulo 2 – Solução Numérica para Problemas de Fluxo em Solos Parcialmente Saturados	3
2.1 Equação Geral do Fluxo	3
2.2 Propriedades Hidráulicas	5
2.3 Solução Numérica da Equação de Fluxo	12
Capítulo 3 – Estimativa de Parâmetros	17
3.1 Introdução	17
3.2 Métodos de Estimativa de Parâmetros	20
3.3 Algoritmos de Otimização	23
3.4 Análise de Sensibilidade	31
3.5 Análise de Resíduos e Interpretação das Estimativas	34
Capítulo 4 – Implementação Numérica e Resultados Obtidos	43
4.1 Estudos Anteriores	43
4.2 Implementação Numérica	47

4.3 Ensaio de Campo	50
4.4 Estimativa dos Parâmetros Hidráulicos	55
4.5 Uma Proposta de Ensaio	64
 Capítulo 5 – Conclusões e Sugestões para Trabalhos Futuros	 69
 Referências Bibliográficas	 71
Apêndice 1 - Dedução da Matriz de Covariância dos Parâmetros Estimados	76
Apêndice 2 - Malhas de Elementos Finitos	80

Lista de Figuras

Figura 2.1 Menisco	4
Figura 2.2 Curva característica típica	5
Figura 2.3 Curvas características típicas de solos arenosos e argilosos	5
Figura 2.4 Histerese	6
Figura 2.5 Permeabilidade não saturada	8
Figura 3.1 Problema Direto e Problema Inverso	15
Figura 3.2 Principais componentes de um problema de estimativa de parâmetros	18
Figura 3.3 Definição de resíduo, erro de medida e erro de modelagem	34
Figura 3.4 Modelos ilustrativos	
Figura 3.5 Gráficos de sensibilidade e de função objetivo	
Figura 4.1 Fluxograma	44
Figura 4.2 Localização do Campo Experimental II	45
Figura 4.3 Descrição morfológica do perfil	47
Figura 4.4 Configuração do ensaio	48
Figura 4.5 Esquema do tensiômetro utilizado no ensaio	49
Figura 4.6 Modelagem do ensaio	50
Figura 4.7 Curva característica e de permeabilidade utilizadas na análise de sensibilidade	52
Figura 4.8 Resposta calculada pelo modelo e sensibilidades	53
Figura 4.9 Ajuste das medidas e resíduos finais	55
Figura 4.10 Curva característica e de permeabilidade para os parâmetros estimados	56
Figura 4.11 Análise de sensibilidade	56
Figura 4.12 Dados utilizados nas retroanálises	57

Figura 4.13 Curvas características e de permeabilidade	58
Figura 4.14 Configuração do ensaio proposto	59
Figura 4.14 Modelagem do ensaio proposto	60
Figura 4.16 Análise de sensibilidade e variação de pressão no ponto A	61
Figura 4.17 Distribuição de carga de pressão	61
Figura 4.18 Análise de sensibilidade e variação da vazão no furo	63
Figura 4.19 Função Objetivo	63
Figura A2.1 Malha de elementos finitos para o ensaio realizado	
Figura A2.2 Malha de elementos finitos para o ensaio proposto	

Lista de Tabelas

Tabela 4.1 Resumo dos ensaios de caracterização	46
Tabela 4.2 Parâmetros utilizados da análise de sensibilidade	51
Tabela 4.3 Parâmetros estimados e função objetivo	53
Tabela 4.4 Coeficientes de correlação e desvios padrão	55
Tabela 4.5 Resultados das retroanálises para os casos de sucção inicial alta e baixa	58
Tabela 4.6 Coeficientes de correlação e desvios padrão	58
Tabela 4.7 Coeficientes de correlação e desvios padrão do ensaio proposto	62

Lista de Símbolos

$[A]$	matriz de coeficientes da equação global de fluxo $[LT^{-1}]$
A_e	área do elemento triangular e $[L^2]$
BHi	tensiômetro instalado ($i = 1, 2, 3, 4$)
$\{B\}$	vetor da equação global de fluxo $[L^2T^{-1}]$
C	capacidade de retenção específica $[L^{-1}]$
C_p	matriz de covariância dos parâmetros estimados
C_{p0}	matriz de covariância das estimativas iniciais dos parâmetros
C_y	matriz de covariância dos valores medidos
d^k	direção de busca
e_d	erro nos valores medidos
e_m	erro de modelagem
F	função objetivo
$[F]$	matriz de coeficientes da equação global de fluxo $[L]$
g	gradiente da função objetivo
h	carga hidráulica total $[L]$
H	matriz hessiana
J	matriz de sensibilidade
K	tensor de permeabilidade $[LT^{-1}]$
k	permeabilidade $[LT^{-1}]$
K^A	tensor de anisotropia da permeabilidade $[-]$
k_s	permeabilidade saturada $[LT^{-1}]$
L_n	comprimento do segmento do contorno

m	número de medidas
n	coeficiente da curva característica [-]
n_p	número de parâmetros a estimar
$\mathbf{p}$	vetor de parâmetros
$\mathbf{p}^*$	vetor dos parâmetros estimados
$\mathbf{p}_0$	vetor de estimativa inicial dos parâmetros
$\{Q\}$	vetor da equação global de fluxo [L^2T^{-1}]
r_i	resíduos
t	tempo [T]
u_w	sucção [FL^{-2}]
$\mathbf{v}$	vetor de velocidade de fluxo (ou vazão específica) [LT^{-1}]
V_T	volume total [L^3]
V_w	volume de água nos poros [L^3]
$\mathbf{W}$	matriz de pesos
$\mathbf{x}$	vetor de coordenadas espaciais (x_i ; $i = 1, 2$) [L]
$\mathbf{y}$	variáveis dependentes calculadas pelo modelo
$\mathbf{y}^*$	variáveis dependentes medidas no ensaio
$\tilde{\mathbf{y}}$	valor verdadeiro da variável independente
σ_0^2	variância prévia do erro
s_0^2	variância final do erro
ψ	carga de pressão [L]
θ	teor de umidade volumétrico [L^3L^{-3}]
α	coeficiente da curva característica [L^{-1}]

ϕ	função de interpolação [-]
Ω	região de fluxo
λ	parâmetro de Levenberg
ρ	coeficiente de correlação
ψ_{ar}	valor de entrada de ar [L]
Γ_D	segmento do contorno do domínio de fluxo onde a condição de contorno do tipo Dirichlet é especificada
Ω_e	domínio ocupado pelo elemento e
Γ_e	segmento de contorno do elemento e
∇h	gradiente hidráulico [LL^{-1}]
α^k	tamanho do passo
Γ_N	segmento do contorno do domínio de fluxo onde a condição de contorno do tipo Neumann é especificada
σ_n	fluxo prescrito no contorno Γ_N [LT^{-1}]
σ_p	desvio padrão dos parâmetros estimados
θ_r	teor de umidade residual [L^3L^{-3}]
θ_s	teor de umidade na saturação [L^3L^{-3}]
Δt	incremento de tempo [T]
γ_w	peso específico da água [FL^{-3}]
σ_y	desvio padrão da medida
σ_y^2	variância da medida

1. Introdução

A análise de fluxo em solos parcialmente saturados exige o conhecimento das propriedades hidráulicas do solo, que são a curva característica, $\theta(\psi)$, e a permeabilidade não saturada, $k(\psi)$. Entre os problemas geotécnicos que envolvem fluxo em meios parcialmente saturados pode-se citar a instabilização de encostas, muitas vezes associada a variações de sucção, e o transporte de contaminantes, pois, freqüentemente, a fonte contaminante está acima do nível d'água.

A curva característica é, geralmente, determinada em laboratório, onde um valor de sucção é imposto e o teor de umidade na condição de equilíbrio é medido. Para a determinação da permeabilidade vários métodos de laboratório e de campo estão disponíveis (Stephens, 1996). A maioria destes métodos é constituída por procedimentos de regime permanente baseados na inversão direta da lei de Darcy, e os métodos transientes, geralmente, envolvem algum tipo de aproximação ou simplificação da equação de Richards.

Estes métodos são conceitualmente simples, mas podem apresentar algumas limitações que restringem seu uso na prática. Muitos destes métodos são extremamente demorados, ou porque exigem condições de contorno e iniciais estritas, ou porque exigem a repetição de situações de regime permanente ou outras condições de equilíbrio (Simunek e van Genuchten, 1996). Enquanto que linearizações ou outras aproximações utilizadas para se obter soluções analíticas ou semi-analíticas da equação de fluxo podem introduzir erros adicionais.

Uma abordagem mais flexível para a determinação destas propriedades é a utilização de métodos de estimativa de parâmetros que permitem a determinação simultânea da curva característica e da permeabilidade não saturada a partir de dados de fluxo transiente (Kool et al., 1987). Inicialmente, o ensaio é modelado utilizando a equação governante do fluxo

submetida às condições de contorno e iniciais apropriadas. Os parâmetros desconhecidos são determinados pela minimização de uma função objetivo dada pela diferença entre os valores medidos no ensaio e os simulados pelo modelo adotado. Embora inicialmente aplicados a ensaios de laboratório, estes métodos podem ser igualmente aplicáveis a dados de campo.

Uma importante vantagem destes métodos de retroanálise de parâmetros é a avaliação que se pode obter sobre a qualidade da estimativa, e esta informação pode ser utilizada para se avaliar e otimizar o projeto de ensaios.

O principal objetivo deste trabalho é a implementação numérica de um programa, baseado num código de elementos finitos, para a realização da retroanálise de parâmetros de fluxo em solos parcialmente saturados e que forneça também informações sobre a qualidade da estimativa obtida.

O capítulo 2 apresenta a equação que governa o fluxo transiente em meios parcialmente saturados, as propriedades hidráulicas presentes nesta equação e a solução numérica da equação de fluxo utilizada na modelagem do ensaio.

O capítulo 3 apresenta os métodos de estimativa de parâmetros, os algoritmos de otimização, e os processos para a avaliação da qualidade da estimativa.

No capítulo 4 é feita uma breve revisão dos estudos anteriores sobre retroanálise das propriedades hidráulicas de solos parcialmente saturados e descreve-se a implementação numérica do método utilizado neste trabalho. Apresenta-se também a retroanálise de um ensaio de campo e a interpretação das estimativas obtidas. Ao final, um ensaio simples é proposto e analisado em relação à sua potencial capacidade de produzir resultados satisfatórios.

O capítulo 5 resume as principais conclusões deste trabalho e apresenta sugestões para futuros trabalhos.

2. Solução Numérica de Problemas de Fluxo em Solos Parcialmente Saturados

2.1 Equação de Fluxo

A equação de movimento para o fluxo em meios porosos é dada pela lei de Darcy (1856), que estabelece a relação entre a velocidade do fluxo e o campo de carga que o gera. Embora originalmente concebida somente para fluxo saturado, a lei de Darcy foi estendida por Richards (1931) para fluxo não saturado, incluindo a influência da carga de pressão na permeabilidade (Hillel, 1971):

$$\mathbf{v} = -\mathbf{K}(\psi) \tilde{\nabla} h \quad (2.1)$$

onde $\mathbf{v}$ é o vetor de velocidade de fluxo (ou vazão específica) $[LT^{-1}]$, $\tilde{\nabla} h$ é o gradiente hidráulico $[LL^{-1}]$ (sendo h a carga hidráulica total $[L]$), ψ é a carga de pressão $[L]$, e $\mathbf{K}$ é o tensor de permeabilidade $[LT^{-1}]$ dado por:

$$\mathbf{K} = k(\psi) \mathbf{K}^A \quad (2.1a)$$

onde $k(\psi) [LT^{-1}]$ é a permeabilidade, e $\mathbf{K}^A [-]$ é o tensor de anisotropia.

Para se obter a equação geral do fluxo não saturado deve-se introduzir a equação de continuidade obtida a partir do balanço de massa que, para fluido incompressível em um meio poroso rígido (Freeze e Cherry, 1979), é dada por:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = - \tilde{\mathbf{N}} \cdot \mathbf{v} \quad (2.2)$$

onde $\theta = \frac{V_w}{V_T}$ é o teor de umidade volumétrico [$L^3 L^{-3}$], relação entre o volume de água nos poros, V_w [L^3], e o volume total do solo, V_T [L^3].

Substituindo a lei de Darcy para solos parcialmente saturados (eq. 2.1) na equação de continuidade (eq. 2.2) obtém-se, para duas dimensões:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\mathbf{K}(\psi) \frac{\partial h}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mathbf{K}(\psi) \frac{\partial h}{\partial z} \right] \quad (2.3)$$

É usual colocar a eq. (2.3) de forma que a variável independente seja a carga de pressão ψ , logo, lembrando que $h = \psi + z$, onde z é a carga de elevação [L], e sabendo que $\theta = \theta(\psi)$ obtém-se (Freeze e Cherry, 1979):

$$C(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\mathbf{K}(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mathbf{K}(\psi) \left(\frac{\partial \psi}{\partial z} + 1 \right) \right] \quad (2.4)$$

onde $C(\psi) = \frac{\partial \theta}{\partial \psi}$ é a capacidade de retenção específica [L^{-1}].

A equação (2.4) é a equação de fluxo transiente em um meio poroso parcialmente saturado, freqüentemente denominada equação de Richards. A solução desta equação (eq. 2.4) exige o conhecimento da distribuição inicial de carga de pressão no domínio de fluxo Ω :

$$\psi(x, z, t) = \psi_0(x, z, 0) \quad (2.5)$$

onde ψ_0 é uma função prescrita de x e z .

São necessárias também as especificações das condições de contorno que podem ser de carga de pressão prescrita (tipo Dirichlet):

$$\psi(x, z, t) = \bar{\psi}(x, z, t) \quad \text{para } (x, z) \in \Gamma_D \quad (2.6)$$

ou velocidade (vazão específica) imposta (tipo Neuman):

$$-\left[\mathbf{K}(\psi) \left(\frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{x}} + 1 \right) \right] \mathbf{n} = \sigma(x, z, t) \quad \text{para } (x, z) \in \Gamma_N \quad (2.7)$$

onde Γ_D e Γ_N indicam os segmentos do contorno do tipo Dirichlet e do tipo Neuman, respectivamente, $\bar{\psi}$ [L] e σ [LT⁻¹] são funções prescritas de x , z e t , e $\mathbf{n}$ é o vetor normal ao contorno Γ_N .

2.2 Propriedades Hidráulicas

A análise do fluxo em solos não saturados torna-se um tanto mais complicada, em relação à análise de solos saturados, pelo fato de que tanto o teor de umidade, θ , como a permeabilidade, k , são funções da carga de pressão, ψ . Para a solução da equação de fluxo (eq. 2.4) é necessário conhecer as relações da carga de pressão com a permeabilidade, $k(\psi)$, e com o teor de umidade, $\theta(\psi)$, denominada curva característica.

2.2.1 Curva Característica

A umidade no solo é mantida entre os grãos sob forças capilares que são refletidas no raio de curvatura de cada menisco (figura 2.1). Pode-se esperar que teores de umidade mais altos corresponderão a maiores raios de curvatura, menores forças capilares, e cargas de pressão menos negativas (Freeze e Cherry, 1979).

Figura 2.1 Menisco

A figura 2.2 apresenta uma curva característica típica. O valor de entrada de ar, ψ_{ar} , é a carga de pressão para a qual o ar começa a entrar nos poros mais largos do solo, e o teor de umidade residual, θ_r , é o teor de umidade para o qual é necessária uma grande variação de carga de pressão para remover mais água do solo (Fredlund e Xing, 1994).

Figura 2.2 Curva característica típica

Em solos argilosos, o valor de entrada de ar tende a ser maior do que em solos arenosos. Quanto maior o teor de argila, espera-se que maior seja a quantidade de água retida para um determinado valor de carga de pressão, e mais suave deve ser a inclinação da curva característica. Já em solos arenosos, os poros são relativamente grandes e a imposição de um pequeno valor de carga pressão negativa é, em geral, suficiente para reduzir bastante o teor de umidade (figura 2.3).

Figura 2.3 Curvas características típicas de solos arenosos e argilosos.

Não existe, atualmente, nenhuma teoria satisfatória para a determinação da relação entre teor de umidade e carga de pressão a partir das propriedades básicas do solo. A curva característica é influenciada por diversos fatores bastante complexos, tais como efeitos da geometria dos poros e da adsorção, para serem descritos por um modelo simples (Hillel, 1971).

A curva característica deve, então, ser determinada experimentalmente, e, em geral, isto é feito em laboratório onde uma amostra do solo é submetida a um valor de sucção¹ conhecido e o teor de umidade é medido na situação de equilíbrio.

Observou-se experimentalmente que a relação $\theta \times \psi$ apresenta histerese (Freeze e Cherry, 1979), ou seja, não há uma relação única entre o teor de umidade e a carga de pressão. A curva característica apresenta uma variação considerável no teor de umidade para a mesma carga de pressão dependendo da história de umidecimento ou secagem do solo (figura 2.4).

Figura 2.4 Histerese

¹ Lembrando que sucção (u_w) é dada por: $u_w = -\psi\gamma_w$

2.2.2 Permeabilidade Não Saturada

Uma importante diferença entre o fluxo não saturado e saturado é a permeabilidade. Quando o solo é saturado, todos os poros estão preenchidos e são condutores, então a permeabilidade é máxima. Quando o solo se torna não saturado, alguns poros se tornam preenchidos de ar e a porção condutora da área transversal do solo decresce correspondentemente (Hillel, 1971).

A transição de saturação para não saturação geralmente acarreta uma grande queda na permeabilidade, que pode decrescer várias ordem de grandeza. Na saturação, os solos mais permeáveis são aqueles em que poros grandes e contínuos constituem a maioria do volume dos poros, enquanto os menos permeáveis são os solos em que o volume de poros consiste de numerosos microporos. Então, como se sabe, solos arenosos conduzem água mais rapidamente que um solo argiloso. Entretanto, o oposto pode ser verdade quando os solos estão parcialmente saturados.

Em solos com poros grandes, esses poros esvaziam rapidamente e se tornam não condutores a medida que a carga de pressão se torna mais negativa, então a alta permeabilidade inicial decresce abruptamente. Por outro lado, em solos com poros pequenos, vários poros permanecem preenchidos e condutores mesmo a uma carga de pressão muito negativa, logo a permeabilidade decresce suavemente e pode ser maior que a de solo com poros grandes submetido mesma carga de pressão (Hillel, 1971).

A Figura 2.5 mostra a tendência geral da dependência da permeabilidade em relação à carga de pressão em solos de diferentes texturas. Observa-se que, embora a permeabilidade saturada do solo arenoso seja tipicamente maior do que a do solo argiloso, a permeabilidade não saturada do primeiro decresce mais abruptamente à medida que a carga de pressão se torna mais negativa, e eventualmente se torna menor.

Figura 2.5: Permeabilidade não saturada

Nenhuma equação de validade geral está disponível para a relação da permeabilidade com a sucção, e o conhecimento existente não permite uma previsão de confiança da permeabilidade com base nas propriedades básicas dos solos. Várias equações empíricas para o ajuste dos dados experimentais têm sido propostas (Hillel, 1971):

$$k = \frac{a}{\psi^m} \quad (2.8a)$$

$$k = \frac{a}{b + \psi^m} \quad (2.8b)$$

$$k = k_s e^{a\psi} \quad (2.8c)$$

Onde k é a permeabilidade para qualquer carga de pressão, k_s é a permeabilidade saturada, a , b e m são constantes empíricas (diferentes em cada equação) e ψ é a carga de pressão.

Para cada solo, a equação de melhor ajuste e os valores dos parâmetros devem ser determinados (Hillel, 1971).

Alguns autores sugerem modelos para as propriedades hidráulicas nos quais a curva de permeabilidade é estimada a partir do conhecimento da curva característica do material. Nestes modelos, geralmente, admite-se que a permeabilidade em solos não saturados é função, principalmente, da distribuição dos poros do solo. Entre estes modelos pode-se citar o modelo de Fredlund (Fredlund et al., 1994 e Fredlund e Xing, 1994), e o modelo de van Genuchten (1980), sendo este último expresso pelas equações abaixo:

$$\theta(\psi) = \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{\left(1 + |\alpha\psi|^n\right)^m} \quad (2.9a)$$

$$k(\psi) = k_s \theta_e^{0.5} \left[1 - \left(1 - \theta_e^{0.5}\right)^m \right]^2 \quad (2.9b)$$

onde θ_r [-] é o teor de umidade volumétrico residual, θ_s [-] é o teor de umidade volumétrico na saturação, k_s é a permeabilidade saturada, α [L^{-1}] e n [-] são parâmetros empíricos, e θ_e [-] e m [-] são dados por:

$$\theta_e = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \quad (2.9c)$$

$$m = 1 - \frac{1}{n} \quad (2.9d)$$

2.3 Solução Numérica da Equação de Fluxo

Poucas soluções analíticas da equação (2.4) são disponíveis pelo fato dela ser uma equação altamente não linear. Tanto a permeabilidade, $k(\psi)$, quanto a curva característica, $\theta(\psi)$, são dependentes da carga de pressão. Portanto, na maioria dos casos de interesse prático, soluções são obtidas numericamente com o auxílio de computadores.

Descreve-se a seguir a obtenção das equações de elementos finitos correspondentes à equação de Richards (eq. 2.4). Para isto será utilizado o método de Galerkin (Simunek et al, 1994).

Para este método, a região de fluxo é dividida em uma malha de elementos, cujos vértices são tomados como os pontos nodais. A carga de pressão $\psi(x, z, t)$ é aproximada pela função

$\hat{\psi}(x, z, t) :$

$$\hat{\psi}(x, z, t) = \phi_i(x, z)\psi_i(t) \quad (2.11)$$

onde ϕ_i são funções de interpolação e $\psi_i(t)$ é a carga de pressão no nó i , no tempo t . No presente trabalho será feito uso do elemento triangular de carga constante, logo, $i = 1, 2, 3$ representam os vértices do elemento.

Aplicando o método de Galerkin à equação (2.4), com ψ substituído por $\hat{\psi}$ (eq. 2.11):

$$\int_W \left\{ C(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[k(\psi) \left(K_{ij}^A \frac{\partial \hat{\psi}}{\partial x_j} + K_{iz}^A \right) \right] \right\} \phi_n dW = 0 \quad (2.12)$$

Integrando por partes e usando a equação (2.11):

$$\begin{aligned}
& \sum_e \int_{W_e} C(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial t} \phi_n dW + \sum_e \int_{W_e} k K_{ij}^A \frac{\partial \phi_n}{\partial x_i} \frac{\partial \phi_m}{\partial x_j} \psi_n dW = \\
& = \sum_e \int_{G_e} k \left(K_{ij}^A \frac{\partial \hat{\psi}}{\partial x_j} + K_{iz}^A \right) n_i \phi_n dG - \sum_e \int_{W_e} k K_{iz}^A \frac{\partial \phi_n}{\partial x_i} dW
\end{aligned} \tag{2.13}$$

onde Ω_e representa o domínio ocupado pelo elemento e , e Γ_e é o segmento de contorno do elemento e .

Após realizar a integração em relação aos elementos, chega-se a um sistema de de equações diferenciais ordinárias com coeficientes não-lineares. Na forma matricial, essas equações são dadas por:

$$[F] \left\{ \frac{d\psi}{dt} \right\} + [A] \{\psi\} = \{Q\} - \{B\} \tag{2.14}$$

Onde:

$$\begin{aligned}
A_{mn} &= \sum_e k_l K_{ij}^A \int_{W_e} \phi_l \frac{\partial \phi_n}{\partial x_i} \frac{\partial \phi_m}{\partial x_j} dW = \\
&= \sum_e \frac{1}{4A_e} \bar{k} [K_{xx}^A b_m b_n + K_{xz}^A (c_m b_n + b_m c_n) + K_{zz}^A c_n c_m]
\end{aligned} \tag{2.15}$$

$$\begin{aligned}
B_{mn} &= \sum_e k_l K_{iz}^A \int_{W_e} \phi_l \frac{\partial \phi_n}{\partial x_i} dW = \\
&= \sum_e \frac{1}{2} \bar{k} [K_{xz}^A b_n + K_{zz}^A c_n]
\end{aligned} \tag{2.16}$$

$$F_{mn} = \delta_{nm} \sum_e \int_{W_e} C(\psi) \phi_n dW = \delta_{nm} \sum_e \frac{1}{3} C(\psi) A_e \quad (2.17)$$

$$Q_n = -\sum_e \sigma_{l_1} \int_{G_e} \phi_l \phi_n dG = -\sum_e \sigma_n \frac{L_n}{2} \quad (2.18)$$

sendo que os subscritos i e j são os índices das direções no espaço (x,z) ; $l, m, n = 1, 2, \dots, N$ (onde N é o número total de nós), e L_n é o comprimento do segmento do contorno conectado ao nó n . As equações (2.15) a (2.17) são válidas para fluxo em um domínio bidimensional (x,z) .

O símbolo σ_n na equação (2.18) representa o fluxo $[LT^{-1}]$ através da fronteira na vizinhança do nó do contorno n . O fluxo no contorno é considerado uniforme em cada segmento deste contorno.

A função de interpolação ϕ pode ser definida por:

$$\phi_i = \frac{1}{2A_e} (a_i + b_i x + c_i z) \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.19)$$

sendo:

$$A_e = \frac{c_3 b_2 - c_2 b_3}{2}$$

$a_1 = x_2 z_3 - x_3 z_2$	$a_2 = x_3 z_1 - x_1 z_3$	$a_3 = x_1 z_2 - x_2 z_1$	(2.20)
$b_1 = z_2 - z_3$	$b_2 = z_3 - z_1$	$b_3 = z_1 - z_2$	
$c_1 = x_3 - x_2$	$c_2 = x_1 - x_3$	$c_3 = x_2 - x_1$	

Os subscritos 1, 2 e 3, nas equações (2.19) e (2.20) representam os três vértices de um elemento triangular e . A_e é a área do elemento e , e $\bar{k}$ é a permeabilidade média do elemento e :

$$\bar{k} = \frac{k_1 + k_2 + k_3}{3} \quad (2.21)$$

Duas importantes hipóteses, além das relacionadas ao método de Galerkin, são adotadas na formulação da equação (2.14). A primeira se refere à derivada no tempo dos valores nodais da carga de pressão nesta equação. Estas derivadas são poderadas de acordo com:

$$\frac{d\psi_n}{dt} = \frac{\sum_e \int_{W_e} \frac{\partial \psi}{\partial t} \phi_n dW}{\sum_e \int_{W_e} \phi_n dW} \quad (2.22)$$

A esse tipo de formulação dá-se o nome de “lumping” ou diagonalização. Neuman (1973) e Simunek et al. (1994) mostram que este procedimento tende a melhorar a convergência do processo iterativo de solução.

A outra hipótese está relacionada ao tensor anisotrópico $\mathbf{K}^A$, que define a anisotropia de permeabilidade (eq. 2.1a), que é considerado constante em cada elemento, enquanto que a capacidade de retenção específica, $C(\psi)$, e a permeabilidade, $k(\psi)$, são considerados variando linearmente em cada elemento e . Por exemplo, a permeabilidade é expandida em cada elemento como:

$$k(x, z) = \sum_{i=1}^3 k(x_i, z_i) \phi_i(x, z) \quad \text{para} \quad (x, z) \in W_e \quad (2.23)$$

onde i representa os vértices do elemento e . A vantagem da interpolação linear está no fato de não ser necessária a integração no cálculo dos coeficientes da eq. (2.14).

A integração da eq. (2.14) no tempo é feita através da discretização do domínio do tempo em uma sequência de intervalos finitos e da substituição das derivadas no tempo por diferenças finitas. Um esquema de diferenças finitas implícito é utilizado:

$$[F] \frac{\{\psi\}_{j+1} - \{\psi\}_j}{\Delta t_j} + [A]_{j+1} \{\psi\}_{j+1} = \{Q\}_j - \{B\}_{j+1} \quad (2.24)$$

onde $j + 1$ representa o passo de tempo corrente onde a solução está sendo considerada, j se refere ao passo de tempo anterior, e $\Delta t_j = t_{j+1} - t_j$. A equação (2.24) representa o conjunto final de equações algébricas a serem resolvidas.

Como os coeficientes F , A e B são funções de ψ , este conjunto de equações é altamente não linear. Por causa desta não-linearidade, um processo iterativo deve ser empregado para se obter a solução da equação matricial global a cada novo passo de tempo. Esta não linearidade pode ser tratada com base no algoritmo de Piccard (Huyakorn e Pinder, 1983).

3. Estimativa de Parâmetros

3.1 Introdução

Estimativa de parâmetros se constitui hoje uma disciplina que vem a fornecer ferramentas para o uso eficiente de dados nas estimativas dos parâmetros existentes nos modelos matemáticos e para o auxílio na modelagem de um fenômeno (Beck e Arnold, 1977).

A estimativa de parâmetros pode também ser visualizada como um estudo de problemas inversos. No problema direto procura-se a solução no domínio, conhecendo-se as condições iniciais e de contorno e também os parâmetros do modelo (figura 3.1). No problema inverso nem todos estes parâmetros são conhecidos, mas medidas discretas das variáveis dependentes dentro do domínio podem ser usadas para estimar valores dos parâmetros.

Figura 3.1 Problema Direto e Problema Inverso

Existem duas abordagens alternativas para o problema de estimativa de parâmetros. Neuman (1973, apud Yeh, 1986) classificou as formulações como direta e indireta. A abordagem direta

trata os parâmetros do modelo como variáveis dependentes num problema de contorno inverso. Aplicações da formulação direta podem ser encontradas em Ramos (1997), Cividini e Gioda (1997) e Castro (1997). A formulação indireta é baseada na minimização da discrepância entre os dados medidos e as valores correspondentes calculados pelo modelo matemático.

A principal vantagem da formulação indireta está na simplicidade da implementação, pois o programa de análise direta é incluído como uma subrotina do programa principal de retroanálise (ver item 4.3), enquanto que na formulação direta é necessária a modificação do código da análise direta.

Na formulação indireta, recorre-se a um modelo matemático onde são calculadas as grandezas correspondentes às observadas (carga de pressão, deslocamento, etc.) em função dos parâmetros a estimar $\mathbf{p}$. Determina-se então, uma função F representativa do ajuste entre os valores observados, $\mathbf{y}^*$, e a resposta calculada pelo modelo, $\mathbf{y}(\mathbf{p})$:

$$F(\mathbf{p}) = f(\mathbf{y}(\mathbf{p}), \mathbf{y}^*) \quad (3.1)$$

O problema de estimativa de parâmetros pode, então, ser formulado como um problema de otimização, onde se deseja encontrar o vetor de parâmetros $\mathbf{p}$ que torne mínima a diferença entre os valores medidos no ensaio e os calculados pelo modelo matemático:

$$\begin{array}{ll} \text{Determinar} & \mathbf{p} \in \mathbb{R}^{np}, \text{ que} \\ \text{Minimiza} & F(\mathbf{p}) \end{array} \quad (3.2)$$

onde n_p é o número de parâmetros e $R(\mathbf{p})$ é denominada função objetivo. As diversas formas da função objetivo, dependentes do grau de informação prévia disponível sobre o problema, caracterizam os diferentes *métodos de estimativa de parâmetros*.

Posto o problema desta forma (eq. 3.2) sua solução é obtida através do uso de *algoritmos de otimização* que a partir de uma estimativa inicial do vetor de parâmetros $\mathbf{p}_0$ obtém, por processos iterativos, o vetor de parâmetros estimados $\mathbf{p}^*$ correspondente ao mínimo da função objetivo.

Após as estimativas terem sido calculadas deve-se questionar quais conclusões podem ser tiradas no que diz respeito à qualidade do modelo que está sendo ajustado e dos valores estimados (Bard, 1974). A *análise dos resíduos finais* fornece uma medida da adequação do modelo ao fenômeno estudado. Entretanto, encontrar um bom ajuste entre os valores calculados pelo modelo matemático e medidos no experimento é uma condição necessária, mas não suficiente, para uma estimativa significativa. Pode-se ter uma alta incerteza nos parâmetros estimados devido à má qualidade dos dados observados ou por características do próprio modelo. Uma das principais vantagens da abordagem formalizada da estimativa de parâmetros é a possibilidade de realizar uma *interpretação das estimativas* que é importante para avaliar sua qualidade (Finsterle, 1999).

A figura 3.2 resume os principais componentes de uma retroanálise, neste capítulo são abordados os componentes em destaque.

Figura 3.2 Principais componentes de um problema de estimativa de parâmetros

3.2 Métodos de Estimativas de Parâmetros

Na falta de qualquer informação adicional além das observações y^* , o método mais simples e recomendado (Beck e Arnold, 1977) é o **método dos mínimos quadrados**, onde a função F é definida por:

$$F(\mathbf{p}) = [\mathbf{y}^* - \mathbf{y}(\mathbf{p})]^T [\mathbf{y}^* - \mathbf{y}(\mathbf{p})] = \sum_{i=1}^m r_i^2(\mathbf{p}) \quad (3.3)$$

Onde r_i é o resíduo, ou seja, a diferença entre o valores medido e calculado.

O método dos mínimos quadrados (eq. 3.3) pode não apresentar resultados satisfatórios quando o vetor de observações $\mathbf{y}^*$ contém diferentes tipos de dados que são expressos em diferentes unidades. Por exemplo, o vetor de observações $\mathbf{y}^*$ pode ser composto por carga de pressão da ordem de 10^3 cm, vazão acumulada da ordem 10^4 cm³, e teor de umidade da ordem de 1. Não faria sentido somar números de ordens de grandeza tão diferentes, os resíduos relacionados à vazão acumulada e à carga de pressão seriam predominantes e qualquer informação relativa ao teor de umidade seria irrelevante na solução do problema.

Além disso, algumas medidas podem ser mais confiáveis do que outras e deseja-se que os parâmetros estimados sejam menos influenciados pelas medidas menos precisas. A solução para esses dois problemas seria a mesma: ponderar os resíduos de forma que a função objetivo seja dada por:

$$F(\mathbf{p}) = [\mathbf{y}^* - \mathbf{y}(\mathbf{p})]^T \mathbf{W} [\mathbf{y}^* - \mathbf{y}(\mathbf{p})] = \sum_{i=1}^m w_{ii} r_i^2(\mathbf{p}) \quad (3.4)$$

onde $\mathbf{W}$ é uma matriz de pesos diagonal com elementos não negativos. Quando a eq. (3.4) é utilizada o método é classificado como **mínimos quadrados ponderados**.

Os elementos de $\mathbf{W}$ são determinados com base no conhecimento do problema. Valores baixos são atribuídos aos elementos w_{ii} correspondentes às grandezas medidas em uma escala grande, ou aos que são menos confiáveis, e valores altos de w_{ii} caso contrário (Simunek e van Genuchten, 1996, sugerem equações para os pesos relacionados ao problema de fluxo em solos não saturados.)

Como procedimentos subjetivos para a escolha dos pesos podem produzir resultados tendenciosos, pode-se utilizar considerações estatísticas para a escolha desta matriz de pesos.

Bard (1974) sugere a adoção da inversa da matriz de covariância dos valores medidos, $\mathbf{C}_y$, como a matriz de peso:

$$F(\mathbf{p}) = [\mathbf{y} * -\mathbf{y}(\mathbf{p})]^T \mathbf{C}_y^{-1} [\mathbf{y} * -\mathbf{y}(\mathbf{p})] \quad (3.5)$$

Se as medidas forem não correlacionadas, a matriz de covariância das medidas, $\mathbf{C}_y$, é uma matriz diagonal, sendo seus elementos dados pelo quadrado do desvio padrão das medidas, σ_y^2 , ou seja, a variância. Logo, a função objetivo pode ser definida como:

$$F(\mathbf{p}) = \sum_{i=1}^m \frac{r_i^2(\mathbf{p})}{\sigma_{y_i}^2} \quad (3.6)$$

O desvio padrão, σ_{y_i} , pode ser estimado pela precisão do instrumento de medida, por exemplo, se uma medida de carga de pressão é obtida por um tensiômetro cuja precisão é de 1cmH₂O e outra por outro equipamento com precisão de 10cmH₂O, a primeira medida terá muito mais peso na função objetivo do que a segunda. O mesmo acontece para dados de diferentes grandezas.

Essa abordagem intuitiva pode ser formalizada se certas hipóteses sobre a distribuição dos erros das medidas forem feitas. Se os erros das medidas são aleatórios e obedecem a uma distribuição normal, pode-se mostrar que minimizar a soma dos resíduos de mínimos quadrados ponderados leva ao estimador de máxima probabilidade dos parâmetros desconhecidos (Bard, 1974, Beck e Arnold, 1977). Esta eq. (3.5) pode ser deduzida pelo **método da máxima probabilidade**.

Em alguns problemas de engenharia, a experiência acumulada ao longo do tempo fornece indicações que podem contribuir para o resultado da estimativa de parâmetros. Estas informações podem ser introduzidas na função objetivo. O **método bayesiano** é caracterizado pela inclusão de informações prévias sobre os parâmetros a serem estimados:

$$F(\mathbf{p}) = [\mathbf{y}^* - \mathbf{y}(\mathbf{p})]^T \mathbf{C}_y^{-1} [\mathbf{y}^* - \mathbf{y}(\mathbf{p})] + [\mathbf{p} - \mathbf{p}_0]^T \mathbf{C}_{p_0}^{-1} [\mathbf{p} - \mathbf{p}_0] \quad (3.7)$$

onde $\mathbf{C}_{p_0}$ é a matriz de covariância das estimativas iniciais dos parâmetros, $\mathbf{p}_0$.

O segundo termo da eq. (3.7) atua como uma função de penalidade que mantém os parâmetros numa região próxima à estimativa inicial $\mathbf{p}_0$. À medida que o vetor de parâmetros $\mathbf{p}$ se move para longe de $\mathbf{p}_0$, a contribuição do segundo termo cresce quadraticamente, logo a minimização de $F(\mathbf{p})$ só será concluída com êxito se $\mathbf{p}$ permanecer próximo a $\mathbf{p}_0$.

3.3 Algoritmos de Otimização

3.3.1 Introdução

O objetivo de um algoritmo de otimização sem restrição é resolver problemas do tipo do apresentado na eq. (3.2). Ele é utilizado para que, a partir de uma estimativa inicial dos parâmetros, $\mathbf{p}_0$, chegue-se ao mínimo da função objetivo, $F(\mathbf{p})$.

Os métodos numéricos de otimização são descritos pela seguinte equação iterativa:

$$\mathbf{p}^{k+1} = \mathbf{p}^k + \Delta \mathbf{p}^k \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.8)$$

onde k representa a iteração e $\Delta \mathbf{p}^k$ é a variação na variável corrente (o vetor de parâmetros $\mathbf{p}^k$). O processo iterativo descrito pela eq. (3.8) é repetido até que as condições de ótimo, ou algum outro critério de parada, sejam satisfeitos (Arora, 1989).

Existem diversos métodos para o cálculo de $\Delta \mathbf{p}^k$ e, geralmente, ele é decomposto em duas partes:

$$\Delta \mathbf{p}^k = \alpha^k \mathbf{d}^k \quad (3.9)$$

sendo $\mathbf{d}^k$ é a direção de busca e α^k é o tamanho do passo.

Os métodos de otimização podem ser classificados de acordo com a ordem da derivada da função objetivo utilizada na determinação da direção de busca, $\mathbf{d}$. Os métodos de ordem zero utilizam somente informações da função objetivo, enquanto que os de 1ª ordem utilizam seu gradiente e o método de Newton-Raphson utiliza a derivada de 2ª ordem. Quanto mais alta a ordem da derivada, mais alta é a taxa de convergência.

A exigência básica para a direção de busca, $\mathbf{d}$, é que a função objetivo seja reduzida quando se move uma pequena distância nesta direção (Arora, 1989).

Os algoritmos de otimização são, geralmente, constituídos dos seguintes passos:

1. Determinar a estimativa inicial, $\mathbf{p}_0$ ($k = 0$).
2. Calcular a função objetivo para $\mathbf{p} = \mathbf{p}^k$.
3. Determinar a direção de busca, $\mathbf{d}^k$.
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 , utilizando busca linear (Arora, 1989), por exemplo.
6. Calcular o vetor de novos parâmetros, $\mathbf{p}^{k+1}$, pela eq. (3.8)

7. $k = k + 1$, voltar ao passo 2.

Alguns aspectos básicos dos problemas de estimativa de parâmetros devem ser considerados na escolha do método de otimização:

1. Um número relativamente pequeno de variáveis (os parâmetros), raramente mais do que dez parâmetros.
2. Uma função objetivo altamente não linear (embora contínua e diferenciável), cujo cálculo é freqüentemente muito demorado.
3. Um número pequeno de restrições, muitas vezes nenhuma. As restrições são geralmente de limites superior e inferior.

3.3.2 Métodos de Otimização

A seguir estão apresentados alguns métodos de otimização.

a) Método Univariante

O método univariante se resume em mudar uma variável de cada vez. A direção de busca é dada por vetores unitários que são colocados em ordem cíclica, e o tamanho do passo é positivo ou negativo, escolhido de tal forma que haja um decréscimo na função objetivo.

Este é um método de ordem zero, visto que não há a necessidade do cálculo do gradiente da função objetivo. O método univariante é muito lento, se comparado com outros métodos.

b) Método do Máximo Declive

O método do máximo declive é um método de 1ª ordem já que somente o gradiente da função objetivo é calculado e utilizado para a determinação da direção de busca. A filosofia do método é encontrar a direção $\mathbf{d}$ na iteração corrente para a qual a função objetivo $F(\mathbf{p})$ decresça mais rapidamente, ao menos localmente.

A direção do máximo decréscimo da função objetivo é o negativo do seu gradiente (Arora, 1989). Qualquer pequeno movimento na direção contrária ao gradiente vai resultar na taxa local máxima de decréscimo da função objetivo. Então, o vetor que aponta na direção contrária à direção do gradiente representa a direção de máximo declive para a função objetivo. Logo, para o método do máximo declive:

$$\mathbf{d}^k = -\mathbf{g}^k \quad (3.10)$$

onde $\mathbf{g}$ é o gradiente da função objetivo.

O método do máximo declive é bastante simples e robusto, entretanto, mesmo que a convergência do método seja garantida, um grande número de iterações pode ser necessário, tornando a convergência muito lenta próxima ao mínimo. Experiência prática com o método demonstra que para as primeiras iterações é grande o decréscimo da função objetivo, enquanto que nas últimas iterações o decréscimo é bastante lento (Arora, 1989).

c) Método de Newton-Raphson

A idéia básica do método de Newton-Raphson é utilizar a expansão em série de Taylor até segunda ordem da função objetivo em torno do ponto corrente. Isto fornece uma expressão quadrática para $\Delta \mathbf{p}$. Com as condições necessárias para a minimização desta função obtém-se explicitamente a direção de busca, $\mathbf{d}$.

Expandindo a função $F(\mathbf{p})$ em série de Taylor, até termos de segunda ordem, obtém-se:

$$F(\mathbf{p} + \Delta \mathbf{p}) = F(\mathbf{p}) + \mathbf{g}^T \Delta \mathbf{p} + \frac{1}{2} \Delta \mathbf{p}^T \mathbf{H} \Delta \mathbf{p} \quad (3.11)$$

Sendo $\mathbf{g}$ o gradiente (∇F) e $\mathbf{H}$ a matriz hessiana ($\nabla^2 F$) da função objetivo, demonstra-se que para $\mathbf{p}^*$ ser um ponto de mínimo local de $F(\mathbf{p})$ é necessário que, para $\mathbf{p} = \mathbf{p}^*$, (Arora, 1989):

(i) gradiente seja nulo.

(ii) hessiana seja positiva definida.

Escrevendo a condição de estacionaridade ($\partial F / \partial(\Delta \mathbf{p}) = 0$) para a função da equação (3.11):

$$\mathbf{g} + \mathbf{H}\Delta \mathbf{p} = \mathbf{0} \quad (3.12)$$

Admitindo que $\mathbf{H}$ é não singular, a expressão para $\Delta \mathbf{p}$ é dada por:

$$\Delta \mathbf{p} = -\mathbf{H}^{-1} \mathbf{g} \quad (3.13)$$

O método de Newton-Raphson trabalha com $\alpha = 1$, sem busca linear.

Como a equação (3.11) é somente uma aproximação de F no ponto $\mathbf{p}^k$, o ponto $\mathbf{p}^{k+1} = \mathbf{p}^k + \Delta \mathbf{p}^k$ provavelmente não vai ser o mínimo preciso de $F(\mathbf{p})$. Portanto, o processo deve ser repetido para se obter melhores estimativas até que o mínimo seja encontrado (Arora, 1989).

O gradiente, $\mathbf{g}$, e a hessiana, $\mathbf{H}$, são obtidos derivando a função objetivo, F , em relação a $\mathbf{p}$.

Para o método dos mínimos quadrados (eq. 3.6), por exemplo, o gradiente é dado por:

$$g_j = \frac{\partial F}{\partial p_j} = -2 \sum_{i=1}^m r_i \frac{\partial y_i(\mathbf{p})}{\partial p_j} \quad j = 1, \dots, n_p \quad (3.14)$$

e a hessiana por:

$$H_{jk} = \frac{\partial^2 F}{\partial p_j \partial p_k} = -2 \sum_{i=1}^m r_i \frac{\partial^2 y_i(\mathbf{p})}{\partial p_j \partial p_k} + 2 \sum_{i=1}^m \frac{\partial y_i(\mathbf{p})}{\partial p_j} \frac{\partial y_i(\mathbf{p})}{\partial p_k} \quad j, k = 1, \dots, n_p \quad (3.15)$$

Definindo a matriz jacobiana, ou matriz de sensibilidade, como:

$$\mathbf{J} = \frac{\partial \mathbf{y}(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial y_1(\mathbf{p})}{\partial p_1} & \dots & \frac{\partial y_1(\mathbf{p})}{\partial p_{n_p}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial y_n(\mathbf{p})}{\partial p_1} & \dots & \frac{\partial y_n(\mathbf{p})}{\partial p_{n_p}} \end{bmatrix} \quad (3.16)$$

O gradiente pode ser escrito como:

$$\mathbf{g} = -2\mathbf{J}^T \mathbf{r} \quad (3.17)$$

e a hessiana como:

$$\mathbf{H} = -2 \sum_{i=1}^n r_i \frac{\partial^2 y_i(\mathbf{p})}{\partial p_j \partial p_k} + 2\mathbf{J}^T \mathbf{J} \quad (3.18)$$

No método de Newton-Raphson, a hessiana (eq. 3.15) é calculada diretamente. Este método apresenta ótimas propriedades de convergência. Uma grande desvantagem do método de Newton-Raphson é o custo do cálculo das derivadas de segunda ordem (o primeiro termo da eq. 3.15). Estas derivadas, geralmente, não podem ser obtidas analiticamente. A aproximação por diferenças finitas, por exemplo, exige um número significativo de cálculos da função

objetivo, isso aumenta muito o custo computacional. O método de Newton-Raphson é por esta razão pouco utilizado na solução de problemas de estimativa de parâmetros. A matriz hessiana não é somente cara para se calcular como também pode vir a ser negativa-definida se o modelo é altamente não-linear (Finsterle e Pruess, 1995), fazendo com que a convergência não seja garantida.

As modificações do método de Newton-Raphson não calculam a hessiana diretamente (eq. 3.15), mas utilizam alguma aproximação. Os métodos chamados quase-Newton aproximam a hessiana a partir de informações disponíveis da 1ª derivada e ainda utilizam informações obtidas das iterações anteriores. Uma matriz positiva definida é construída e atualizada a cada iteração do algoritmo de otimização de forma que produza uma aproximação de $\mathbf{H}$ ou de $\mathbf{H}^{-1}$ com muito menos esforço do que o cálculo da hessiana exige.

Já no método de Gauss-Newton admite-se que o segundo termo da eq. (3.15) é uma aproximação suficiente para a hessiana:

$$\mathbf{H} \approx 2\mathbf{J}^T \mathbf{J} \quad (3.19)$$

Isto é razoável quando o resíduo $\mathbf{r}$ é pequeno. Por outro lado, quando a solução está longe do mínimo, ou quando os resíduos permanecem grandes no mínimo, o método de Gauss-Newton pode não convergir.

O método de Levenberg-Marquart é uma modificação do método de Gauss-Newton e tem sido considerado bastante robusto na solução de problemas de estimativa de parâmetros (Kool et al., 1987, Finsterle e Pruess, 1995, Simunek e van Genuchten, 1996). No método de Levenberg-Marquardt a hessiana é aproximada por

$$\mathbf{H} \approx 2(\mathbf{J}^T \mathbf{J} + \lambda \mathbf{D}) \quad (3.20)$$

onde $\mathbf{D}$ é uma matriz diagonal de ordem n_p com os elementos iguais aos elementos da diagonal da matriz $(\mathbf{J}^T \mathbf{J})$. O escalar $\lambda \geq 0$ é denominado parâmetro de Levenberg. O método de Levenberg-Marquardt apresenta diversas vantagens em relação ao método de Gauss-Newton. Para valores não nulos de λ , a aproximação da hessiana é sempre positiva-definida o que garante a propriedade de descida do algoritmo, mesmo se a estimativa inicial dos parâmetros forem ruins. O método de Levenberg-Marquardt pode ser visto como uma interpolação entre o método do máximo declive e o método de Gauss-Newton. Quando λ é grande, o resultado vai ser um pequeno passo na direção do máximo declive, enquanto que, quando λ se aproxima de zero, o método se aproxima de Gauss-Newton. A estratégia usual é iniciar com um valor alto de λ e então diminuí-lo, se há um decréscimo da função objetivo, e aumentá-lo, caso contrário.

3.4 Análise de Sensibilidade

3.4.1 Introdução

A matriz de sensibilidade (eq. 3.16) calculada no mínimo da função objetivo ($\mathbf{p} = \mathbf{p}^*$) contém informações importantes que podem ser usadas para estudar a adequação do projeto de experimento proposto e também para analisar as incertezas associadas aos parâmetros estimados.

Os coeficientes de sensibilidade são definidos por:

$$J_{ij} = \frac{\partial y_i(\mathbf{p})}{\partial p_j} \quad (3.21)$$

Estes coeficientes mostram o impacto de uma pequena variação no parâmetro p na resposta calculada pelo modelo no ponto de calibração i , $y_i(\mathbf{p})$ (Finsterle, 1999).

Como os coeficientes de sensibilidade podem ser determinados sem os dados coletados, o projeto de experimentos pode ser melhorado pela inspeção dos tipos de dados (carga de pressão, vazão...) e pontos no espaço e no tempo que produzem maiores coeficientes de sensibilidade. Entretanto, esta análise reflete a sensibilidade somente em um ponto do espaço de parâmetros. Para problemas não lineares de estimativas de parâmetros, os coeficientes de sensibilidade variam se calculados para outras combinações de parâmetros. Logo essas análises devem ser repetidas para diversas hipóteses sobre os parâmetros e ao final do processo de otimização (Finsterle e Pruess, 1995).

3.4.2 Identificabilidade

Existem alguns modelos para os quais não é possível estimar de forma única todos os parâmetros a partir das medidas, mas apenas pode-se estimar alguns destes parâmetros, ou funções deles. Isso é parte do problema de *identificabilidade* (Beck e Arnold, 1977).

Em alguns casos é bastante óbvia a impossibilidade de se estimar todos os parâmetros com os dados disponíveis, como, por exemplo, no modelo abaixo:

$$y_i = (p_1 + p_2)f(t_i) \quad (3.22)$$

Onde p_1 e p_2 são os parâmetros a serem estimados e $f(t)$ é uma função qualquer conhecida de t . Neste modelo, somente $(p_1 + p_2)$ pode ser estimado dadas as medidas de y_i versus t_i . Entretanto, em muitos casos isso pode não ser tão evidente, particularmente quando existem muitos parâmetros e o modelo é uma equação diferencial. Por isso deve-se procurar algum critério que possa ser aplicado tanto em modelos algébricos como também em modelos que envolvem equações diferenciais.

Os coeficientes de sensibilidade (eq. 3.21) podem fornecer informações relativas aos casos em que os parâmetros podem ou não ser estimados. Beck e Arnold (1977) sugerem o seguinte critério de identificabilidade: *Parâmetros podem ser estimados se os coeficientes de sensibilidade no intervalo das medidas não são linearmente dependentes*. A dedução deste critério pode ser encontrado em Beck e Arnold (1977).

Se os coeficientes de sensibilidade de dois parâmetros são linearmente dependentes no intervalo de medidas, a variação de um parâmetro pode ser compensada pela variação do outro e a resposta do sistema continuará sendo a mesma. No modelo da eq. (3.22), a mesma

resposta do sistema, y_i , será obtida se os parâmetros forem modificados mas a soma permanecer a mesma.

Uma prática recomendada é a plotagem e análise cuidadosa dos coeficientes de sensibilidade, o que permite perceber se há dependência linear entre colunas da matriz de sensibilidade

$\left(\frac{\partial \mathbf{y}(\mathbf{p})}{\partial p_j} \right)$. Entretanto, para que os coeficientes de sensibilidade sejam comparáveis é

necessário que sejam expressos na mesma unidade, sendo conveniente transformar os coeficientes de sensibilidade, fazendo, por exemplo:

$$\tilde{J}_{ij} = \frac{\partial y_i(\mathbf{p})}{\partial p_j} p_j \quad (3.23)$$

3.4.3 Métodos de cálculo da matriz de sensibilidade

Existem basicamente dois métodos para o cálculo da matriz de sensibilidade. Por diferenças finitas o cálculo do coeficiente de sensibilidade é dado por:

$$\frac{\partial y_i(\mathbf{p})}{\partial p_j} = \frac{y_i(p_1, \dots, p_j + \Delta p_j, \dots, p_{np}) - y_i(p_1, \dots, p_j, \dots, p_{np})}{\Delta p_j} \quad (3.24)$$

onde $10^{-5}p_j \leq \Delta p_j \leq 10^{-2}p_j$.

Um outro método para o cálculo dos coeficientes de sensibilidade pode ser obtido pela diferenciação da equação do problema (eq. 2.14) em relação aos parâmetros:

$$\mathbf{F} \frac{\partial \dot{\psi}}{\partial p_i} + \mathbf{A} \frac{\partial \psi}{\partial p_i} = \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial p_i} - \left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial p_i} \psi + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial p_i} \dot{\psi} \right) \quad (3.25)$$

Como esta equação resultante é semelhante à equação original (eq. 2.14), os coeficientes de sensibilidade podem ser calculados com as mesmas rotinas do cálculo direto. Este método é conhecido como método da diferenciação direta. Observa-se que para os dois métodos é necessário o cálculo direto $(1 + n_p)$ vezes, a fim de se obter a matriz de sensibilidade.

3.5 Análise de Resíduos e Interpretação da Estimativa

3.5.1 Introdução

Uma importante questão que surge depois que se obtém a estimativa dos parâmetros é se o modelo ajusta ou não os dados experimentais. A questão pode ser respondida afirmativamente se os resíduos, ϵ , do modelo ajustado podem ser explicados como erros de medida. Por outro lado, se os resíduos são muito grandes, ou se apresentam um comportamento não aleatório, ou seja, são erros sistemáticos, então o modelo não ajusta os dados e deve ser rejeitado (Bard, 1974), ou pelo menos corrigido para incluir os efeitos observados nos resíduos (Finsterle e Persoff, 1997).

Entretanto, mesmo que o modelo ajuste bem os dados, é necessário que se avalie os parâmetros estimados pois eles podem ser altamente imprecisos devido à correlação entre parâmetros. A matriz de covariância dos parâmetros estimados pode ser analisada para obter os coeficientes de correlação.

3.5.2 Análise de resíduos

O resíduo, isto é, a diferença entre os valores medido e calculado, é dado pela soma do erro no

modelo, $\mathbf{e}_m = \tilde{\mathbf{y}} - \mathbf{y}(\mathbf{p})$, e do erro nos dados, $\mathbf{e}_d = \mathbf{y}^* - \tilde{\mathbf{y}}$, onde $\tilde{\mathbf{y}}$ é o valor verdadeiro.

Figura 3.3 Definição de resíduo, erro de medida e erro de modelagem

Tanto o erro de modelagem quanto o erro nos dados têm um componente sistemático, b , e um erro aleatório, ε .

$$r_i = y_i^* - y_i(p) = e_{mi} + e_{di} = (b_m + \varepsilon_m)_i + (b_d + \varepsilon_d)_i \quad (3.26)$$

Na maioria dos casos, para equipamentos de medições corretamente calibrados, os erros sistemáticos das medidas são praticamente desprezíveis ($b_{di} \cong 0$), assim como devem ser pequenos também os erros aleatórios de modelagem ($\varepsilon_{mi} \cong 0$) devidos a arredondamentos ou oscilações numéricas.

Lembrando que a estimativa de parâmetros é baseada na hipótese de que o modelo matemático descreve o mais fielmente possível o sistema real, sendo este representado por dados pontuais modificados por ruídos de medida, pode-se considerar, ao menos inicialmente,

que os erros sistemáticos de modelagem (b_{mi}) são nulos e que, então, as características estatísticas dos resíduos devem ser ao menos similares às características dos erros aleatórios das medidas (ϵ_{di}).

Logo, na retroanálise, a distribuição final dos resíduos deve ser consistente com a distribuição dos erros aleatórios de medida, ϵ_d , e a consideração inicial acerca da ausência de erros sistemáticos deve ser avaliada, verificando se o sistema verdadeiro é corretamente identificado pelo modelo (Finsterle e Persoff, 1997).

Para que se possa comparar os resíduos finais com os erros aleatórios de medidas, uma hipótese sobre a distribuição dos erros de medida deve ser feita e pode ser obtida a partir dos níveis de ruídos e autocorrelação do processo de medida.

Uma hipótese razoável sobre os erros de medida é que eles são variáveis aleatórias não correlacionadas, normalmente distribuídas, com média nula. O que pode ser resumido em uma matriz de covariância $\mathbf{C}_y$. Observa-se que somente a magnitude relativa dos elementos da matriz de covariância é relevante, logo pode-se introduzir um fator adimensional σ_0^2 e escrever:

$$\mathbf{C}_y = \sigma_0^2 \mathbf{V}_y \quad (3.27)$$

onde $\mathbf{V}_y$ é uma matriz positiva definida. Se todas as observações são do mesmo tipo, de mesma qualidade e não correlacionadas, $\mathbf{V}_y$ pode ser escolhida como uma matriz identidade.

Na eq. (3.27), σ_0^2 é um escalar denominado *variância prévia do erro*. Após a retroanálise, pode-se calcular a *variância final do erro*, s_0^2 :

$$s_0^2 = \frac{\mathbf{r}^T \mathbf{V}_y \mathbf{r}}{m - n_p} \quad (3.28)$$

A eq. (3.28) (sua dedução pode ser encontrada em Bard (1974)) é, simplesmente, a equação da estatística que estabelece que a variância dos erros é estimada dividindo a soma dos quadrados dos resíduos pelo número de graus de liberdade, que é o número de observações, m , menos o número de parâmetros desconhecidos, n_p , (Bard, 1974).

Se os erros de medidas estão apropriadamente descritos por $\mathbf{C}_y$ e se não há erros sistemáticos prevalecendo, a razão s_0^2 / σ_0^2 não deve ser muito diferente de 1 (Finsterle e Persoff, 1997). Se o valor de s_0^2 for muito maior do que o valor de σ_0^2 é provável que o modelo matemático não esteja representando bem o experimento, ou então que a hipótese sobre os erros de medida não foram muito realistas (Finsterle, 1999). A comparação entre as variâncias prévia, σ_0^2 , e estimada (ou final), s_0^2 , fornece uma medida do ajuste do modelo.

A análise dos resíduos finais também pode avaliar se a hipótese de normalidade é justificada. A violação dessa hipótese pode indicar falha na modelagem matemática. Uma maneira de se avaliar a distribuição dos erros pode ser a plotagem dos resíduos finais.

3.5.3 Interpretação das estimativas

Além de se verificar a adequação do modelo utilizado através da análise dos resíduos, como visto no item 3.5.2, deve-se procurar determinar a incerteza nos parâmetros estimados, pois um bom ajuste não indica, necessariamente, que a estimativa seja satisfatória. Pode-se ter uma alta incerteza nas estimativas por causa da baixa sensibilidade ou da alta correlação entre parâmetros.

Devido ao caráter aleatório dos erros nas medidas, o valor de $\mathbf{p}$ que melhor ajusta uma série de medidas difere do valor que melhor ajusta outra série de medidas (Bard, 1974). O que se deseja é obter uma estimativa dos parâmetros que não somente ajuste bem os dados, mas que também não varie excessivamente de uma série de medidas para outra. Para que isso ocorra é necessário que os parâmetros estimados não sejam correlacionados e apresentem baixos desvios padrão.

A interpretação da matriz de covariância dos parâmetros estimados, $\mathbf{C}_p$, fornece um critério para a avaliação dos resultados do problema inverso (Bard, 1974, Beck e Arnold, 1977). Para o método dos mínimos quadrados a matriz de covariância dos parâmetros estimados é dada por (o apêndice A1 apresenta uma dedução desta matriz):

$$\mathbf{C}_p = \sigma_0^2 [\mathbf{J}^T \mathbf{J}]^{-1} \quad (3.29)$$

Onde σ_0 é o desvio padrão das medidas e $\mathbf{J}$ é a matriz de sensibilidade (eq. 3.16).

Geralmente a matriz de covariância calculada a partir de um conjunto de dados pode ser vista como não mais do que uma estimativa grosseira, correta em uma ordem de magnitude, aproximadamente. Entretanto, mesmo uma aproximação grosseira da matriz de covariância pode ajudar a avaliar a confiança das estimativas (Bard, 1974).

Os elementos da diagonal de $\mathbf{C}_p$ contém as variâncias dos parâmetros estimados:

$$\sigma_{p_i}^2 = C_{p_{ii}} \quad (3.30)$$

A variância, $\sigma_{p_i}^2$, que é o quadrado do desvio padrão, σ_{p_i} , é uma medida de quão incerto é o parâmetro. Da eq. (3.29) percebe-se que a incerteza da estimativa é inversamente proporcional ao valor absoluto do coeficiente de sensibilidade.

Os elementos fora da diagonal de $\mathbf{C}_p$ são as covariâncias. A medida da covariância pode ser dada por um coeficiente adimensional, chamado coeficiente de correlação, definido por:

$$\rho_{ij} = \frac{c_{p_{ij}}}{\sqrt{c_{p_{ii}} c_{p_{jj}}}} \quad -1 \leq \rho_{ij} \leq 1 \quad (3.31)$$

Coeficientes de correlação assumem valores entre -1 e 1 ; um coeficiente de correlação zero indica que não há correlação entre os parâmetros i e j , um valor maior do que $0,9$ indica alta correlação (Beck e Arnold, 1977), isto é, os dois parâmetros não podem ser determinados independentemente. Se dois parâmetros são correlacionados, uma resposta similar do modelo pode ser obtida pelo acréscimo de um parâmetro e decréscimo do outro. Numa retroanálise envolvendo três ou mais parâmetros, os coeficientes de correlação são, geralmente, difíceis de interpretar do ponto de vista físico por causa das dependências indiretas dos parâmetros.

Um alto coeficiente de correlação pode estar relacionado ao projeto inadequado do experimento (dados insuficientes) ou ser inerente ao modelo e então nenhum projeto de experimento poderá produzir parâmetros não correlacionados (Beck e Arnold, 1977).

3.5.4 Exemplos Ilustrativos

A fim de ilustrar a utilidade da plotagem dos coeficientes de sensibilidade (critério de identificabilidade) e da determinação dos coeficientes de correlação (eq. 3.31), dois modelos algébricos simples estão apresentados na figura 3.4.

Figura 3.4 Modelos ilustrativos

Os parâmetros utilizados na análise de sensibilidade e também no cálculo da função objetivo (na determinação dos valores medidos, y^*) foram $p_1 = 1,5$ e $p_2 = 1,0$.

Observa-se na figura 3.4 que para o modelo 1 não é possível determinar unicamente os dois parâmetros (p_1 , p_2), pois eles são altamente correlacionados, ou seja, várias combinações dos parâmetros p_1 e p_2 fornecem o mesmo valor para a variável $y(p)$. O modelo 1 apresenta um alto coeficiente de correlação ($\rho_{12} = 0,9485$) e os coeficientes de sensibilidade são linearmente dependentes.

Pode-se observar da figura 3.4 que a forma da função objetivo próxima ao mínimo também fornece informações sobre a correlação entre parâmetros. Entretanto, para modelos mais complexos, o cálculo da função objetivo pode ser muito trabalhoso, enquanto que o coeficiente de correlação e a matriz de sensibilidade já são calculados no processo de minimização, se métodos de 1ª ou 2ª ordem são utilizados. Modelos com parâmetros não correlacionados exibem um gráfico de função objetivo com o mínimo melhor definido, em comparação aos modelos com parâmetros correlacionados.

O modelo 2 apresenta um baixo coeficiente de correlação ($\rho_{12} = 0,6152$) indicando que a retroanálise pode fornecer bons resultados, entretanto, mesmo para modelos que aparentemente não tenham parâmetros correlacionados, a análise de sensibilidade e o cálculo do coeficiente de correlação devem ser feitos, pois dados insuficientes podem resultar em uma estimativa de má qualidade.

A figura 3.5 apresenta os gráficos de sensibilidade e de função objetivo para o mesmo modelo 2, mas para um intervalo de medidas diferente ($2 \leq t \leq 20$). O coeficiente de correlação para este caso é $\rho_{12} = 0,9811$. Pode-se observar que, para este conjunto de medidas, a retroanálise pode não fornecer bons resultados, pois os dados disponíveis são insuficientes.

Figura 3.5 Gráficos de sensibilidade e de função objetivo

4. Implementação Numérica e Resultados Obtidos

4.1 Estudos Anteriores

4.1.1 Ensaio de laboratório

Provavelmente, o primeiro trabalho publicado sobre a aplicação do problema inverso na estimativa de parâmetros hidráulicos de solos parcialmente saturados foi o de Zachmann et al. (1981, 1982). Eles simularam numericamente um ensaio de drenagem por gravidade numa coluna inicialmente saturada. A vazão acumulada medida foi utilizada para estimar, através do método dos mínimos quadrados, os parâmetros hidráulicos. Este trabalho mostra a importância da seleção do modelo correto para as curvas $\theta(\psi)$ e $k(\psi)$ no processo de estimativa.

Para a simulação do ensaio, o modelo das propriedades hidráulicas utilizado foi o de Brooks e Corey (Zachmann et al., 1981), e na retroanálise empregou-se funções exponenciais para a curva característica e para a permeabilidade. Apesar do ajuste das medidas (vazão acumulada) ter sido satisfatório, as curvas $\theta(\psi)$ e $k(\psi)$ estimadas não coincidiram com as curvas utilizadas na simulação numérica do ensaio.

Observa-se que o modelo das propriedades hidráulicas utilizado na retroanálise deve ser flexível para que os resultados do ensaio sejam bem reproduzidos pelo modelo numérico. Entretanto, mais relevante ainda é a escolha do projeto de experimento, pois este deve ser tal que produza estimativas confiáveis.

Em um estudo numérico, Kool et al. (1985) simularam um ensaio de drenagem em uma coluna inicialmente saturada, onde a vazão acumulada era medida e utilizada na retroanálise. Entretanto, diferentemente do ensaio de drenagem por gravidade de Zachmann et al. (1982), neste ensaio a drenagem é 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 (eqs. 2.9) 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.

Isto sugere que o ensaio de Kool et al. (1985) seria mais conveniente do que o de drenagem por gravidade, já que o teor de umidade final no ensaio de Kool et al. (1985) depende da variação de pressão no topo da coluna, que é controlada. Entretanto, Kool et al. (1985) sugerem que outras condições, além da acima 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), alguns estudos experimentais (Parker et al., 1985, van Dam et al., 1992, Wildenschild et al., 1997, e Hollenbeck et al., 1998) indicam que as retroanálises feitas a partir somente de dados de vazão não produzem estimativas confiáveis, sugerindo que os parâmetros estimados são correlacionados para este tipo de ensaio, o que pode ser confirmado pelos estudos numéricos realizados por Toorman et al. (1992) e Mous (1993), que mostram as formas da função objetivo e as análises de sensibilidade, respectivamente, para ensaio de laboratório com medidas de vazão. Entretanto, melhores resultados são obtidos quando nos ensaios a carga de pressão é medida e a função objetivo é dada em termos de carga de pressão (Hudson et al. (1996), Abu-Hejleh et al. (1993) e Simunek et al. (1999)).

4.1.2. Ensaio de campo

O ensaio de laboratório tem a vantagem de ser mais facilmente controlado e, geralmente, mais rápido do que o ensaio de campo, contudo sua grande desvantagem é que ele pode não ser representativo das condições de campo. A determinação das propriedades *in-situ* pode ser mais relevante que os dados obtidos nos ensaios de laboratório.

Dane e Hruska (1983) publicaram o primeiro trabalho em que o método de estimativa de parâmetros foi empregado para determinar as propriedades hidráulicas de solos parcialmente saturados em um ensaio de campo. Dane e Hruska (1983) estudaram a drenagem por gravidade de um solo argiloso. Os perfis de teor de umidade inicial e após 7 e 25 dias de drenagem foram medidos com uma sonda de neutrons.

Os parâmetros α e n do modelo de van Genuchten (eqs. 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.

Kool et al. (1987) realizaram um ensaio de drenagem em um lisímetro de 3m de diâmetro por 6m de profundidade. O lisímetro foi instrumentado com sondas de neutrons e tensiômetros em diversas profundidades. Após a saturação, acompanhou-se a drenagem por 100 dias e os perfis de teor de umidade e de carga de pressão foram monitorados. Neste trabalho o modelo de van Genuchten foi empregado e somente o teor de umidade na saturação, θ_s , foi considerado conhecido. Bons ajustes entre os dados observados e os calculados foram obtidos. A análise

da estimativa indicou que os parâmetros estimados são confiáveis, a menos da permeabilidade saturada, k_s , que apresentou um desvio padrão bastante maior do que os outros parâmetros. Kool et al. (1987) sugerem que informações prévias sobre a permeabilidade saturada sejam adicionadas à função objetivo (conforme visto no item 3.2).

É válido observar que neste ensaio tanto o teor de umidade como a carga de pressão são medidos, o que forneceria diretamente a curva característica.

Simunek e van Genuchten (1996, 1997) realizaram um estudo numérico para um ensaio de infiltração, no qual analisaram, através da plotagem da função objetivo, quais os dados de ensaio (vazão, teor de umidade ou carga de pressão) que poderiam produzir melhores resultados na retroanálise.

Os parâmetros retroanalizados são α , n e k_s . Os estudos indicaram que medidas de carga de pressão seriam suficientes para garantir a convergência para os parâmetros corretos. Entretanto, é válido lembrar que a análise de sensibilidade deve ser realizada para cada configuração de ensaio e cada conjunto de parâmetros.

Inoue et al. (1998) apresentam um ensaio que envolve a extração da água do solo através de aplicações sucessivas de vácuo. O volume de água extraído e medidas de cargas de pressão são utilizadas na retroanálise. O estudo foi realizado para dois tipos de solo: um arenoso e outro argiloso. Inoue et al. (1998) concluíram que o método é satisfatório para o solo argiloso, mas não para o solo arenoso, isto porque a resposta da carga de pressão do solo arenoso ao vácuo aplicado seria pequena. Eles observam também que o sucesso da retroanálise é dependente da estimativa inicial dos parâmetros.

É interessante observar que o gráfico de sensibilidades apresentado no trabalho mostra uma alta correlação entre todos os parâmetros para o solo argiloso, o que pode ser a causa do método falhar para estimativas iniciais ruins. Não é apresentada a análise de sensibilidade

para o solo arenoso nem a interpretação das estimativas (valores de correlação (eq. 3.31)) para nenhum dos dois casos.

Simunek et al. (1999) realizaram um ensaio em um aquífero de laboratório (4,7x4,7x2,6m) com um penetrômetro modificado (Gribb et al., 1998) que foi projetado para injetar água no solo, medir a taxa de infiltração com o tempo, e acompanhar o movimento da frente de saturação utilizando dois tensiômetros posicionados acima da saída de água. O ensaio é realizado da seguinte forma: após as leituras dos tensiômetros ficarem relativamente estáveis, o fornecimento de água é interrompido e as leituras de carga de pressão são tomadas enquanto há a redistribuição de umidade (Simunek et al., 1999). Este ensaio permite a obtenção de dados tanto da curva de umidecimento como da curva de secagem (figura 2.4).

Um modelo simples para a histerese é adotado, no qual os parâmetros θ_r , θ_s , n e k_s são iguais para as curvas de secagem e umidecimento e α^d e α^w são parâmetros para a curva de secagem e de umidecimento, respectivamente. Ajustes satisfatórios são obtidos entre dados medidos (taxa de infiltração e carga de pressão), entretanto não são apresentadas análises de sensibilidade, valores de correlação e desvios padrão para os parâmetros estimados.

É importante observar que poucos trabalhos apresentam a análise de sensibilidade (item 3.4), a análise de resíduo e a interpretação da estimativa (item 3.5).

4.2 Implementação Numérica

O algoritmo de otimização implementado neste trabalho é o de Levenberg-Marquardt. Sua escolha é devida à sua robustez longe do mínimo, onde a topologia da função objetivo pode ser complicada, devido à formulação do problema de estimativa de parâmetros. Mais ainda porque quando está próximo do mínimo e os efeitos da não-linearidade são reduzidos, o

método se aproxima do de Gauss-Newton, aumentando a taxa de convergência em relação ao método de máximo declive.

A função objetivo utilizada é dada em termos da carga de pressão e o método de estimativa escolhido foi o dos mínimos quadrados (eq. 3.3), já que não há informações adicionais, além dos dados do ensaio, e ainda porque todas as medidas são da mesma dimensão, obtidas com o mesmo tensiômetro, e não correlacionadas:

$$F(\mathbf{p}) = \sum_{i=1}^m [\psi_i^* - \psi_i(\mathbf{p})]^2 \quad (4.1)$$

onde ψ_i^* é a carga de pressão medida no ensaio no tempo $t = t_i$, e $\psi_i(\mathbf{p})$ é a carga de pressão calculada pelo modelo (eq. 2.14) para o vetor de parâmetros $\mathbf{p}$ no tempo $t = t_i$, e m é o número de medidas.

Para a modelagem do ensaio utilizou-se o programa SWMS_2D (Simunek et al, 1994) desenvolvido pelo U.S. Salinity Laboratory, Califórnia, em linguagem Fortran. Este programa resolve numericamente, pelo método dos elementos finitos, a equação de Richards para fluxo saturado-não saturado (eq. 2.14) e também a equação de dispersão-advecção para o transporte de solutos. A região de fluxo pode ser composta de solos heterogêneos e anisotrópicos, e o fluxo pode ocorrer no plano vertical, plano horizontal ou em regiões tri-dimensionais que tenham simetria radial em relação ao eixo vertical. Este programa utiliza elementos triangulares de carga constante.

Optou-se pelo uso do SWMS_2D por se tratar de um programa de domínio público, de código aberto, o que permite modificações se necessárias, e também por ser um programa bastante citado na bibliografia pela sua utilização na solução de problemas de fluxo e transporte em meios parcialmente saturados. Além disso, o SWMS_2D se mostrou eficiente em relação ao

tempo de cálculo, o que é muito importante para a solução do problema inverso, já que este exige um número significativo de cálculos da solução da equação de fluxo (eq. 2.14).

O modelo de propriedades hidráulicas implementado no programa SWMS_2D é o modelo de van Genuchten (eqs. 2.9). Kool et al. (1987) sugerem que as expressões de van Genuchten são flexíveis e razoavelmente acuradas para vários tipos de solos.

A figura 4.1 apresenta um fluxograma do programa implementado para a retroanálise.

Figura 4.1 Fluxograma

4.3 Ensaio de Campo

4.3.1 Local do ensaio

O ensaio foi realizado por Rodriguez (1998), como parte integrante de sua tese de mestrado, no campo experimental II da PUC-Rio, localizado no interior do campus da mesma, como mostra o croquis apresentado na figura 4.2.

Os principais motivos que levaram à escolha deste local foram os seguintes: a facilidade de acesso e segurança dos equipamentos, a homogeneidade do solo, e a existência de pesquisas já realizadas no local, incluindo estudos de caracterização geológica e geotécnica (Sertão, 1986; Daylac, 1994), além de estudos de infiltração em solos não saturados (Diniz, 1999).

Figura 4.2 Localização do Campo Experimental II.

4.3.2 Caracterização do subsolo

Sertã (1986) e Daylac(1994) definiram as principais características geológicas e geotécnicas do local até a profundidade de 12m. Um resumo dos ensaios de caracterização do solo está apresentado na tabela 4.1.

Tabela 4.1 Resumo dos ensaios de caracterização (Daylac, 1994)

Am.	n*	G _s	Granulometria [%]					
			Pedreg.	Areia			Silte	Argila
				grossa	media	finas		
3m	0,51	2,77	-	3	11	10	5	71
6m	0,46	2,76	-	4	17	10	6	63
12m	0,46	2,68	2	39	16	13	18	12

* valores médios

O solo é caracterizado como um solo coluvionar maduro que tem como características: tonalidade bruno amarelada; textura argilo-arenosa com poucos seixos de quartzo e lateritas; estrutura granular; aspecto homogêneo; e constitui-se basicamente por quartzo, argilo-minerais (essencialmente caulinita) e óxidos de ferro (Diniz, 1999).

Entre as profundidades de 3m e 8m, o solo é bastante homogêneo, demonstrando pouca presença de raízes, e sem evidências de estruturas da rocha matriz (figura 4.3). Portanto, esta região foi considerada adequada para a realização do ensaio (Rodriguez, 1998).

Figura 4.3 Descrição morfológica do perfil (Sertã, 1986)

4.3.4 Metodologia, Equipamento e Configuração do Ensaio

O ensaio consiste na aplicação de uma carga constante de 1,60m em um furo central e o acompanhamento da variação da sucção por tensiômetros instalados ao redor deste furo central (figura 4.4).

Na base do furo central ($\varnothing \cong 8,6\text{cm}$), que é revestido por um tubo de PVC, há uma pedra porosa de aproximadamente 40cm de comprimento e mesmo diâmetro do tubo, por onde se dá o fluxo de água. O espaço entre o furo e o revestimento é preenchido com uma mistura de cimento e bentonita. Para manter a carga constante no furo central foi utilizado o Permeâmetro de Guelph.

Figura 4.4 Configuração do ensaio

Os tensiômetros, desenvolvidos pelo grupo de Mecânica dos Solos do Imperial College (figura 4.5), têm a capacidade de medir baixas sucções (até $70\text{kPa} \cong 700\text{cmH}_2\text{O}$) e sua precisão é de $0,4\text{kPa} (\cong 4\text{cmH}_2\text{O})$. Eles funcionam permitindo o fluxo de água do reservatório para o solo, através de uma pedra porosa, até que a sucção no interior do tensiômetro seja igual à sucção do solo circundante. Esta sucção de equilíbrio é medida por um transdutor de pressão localizado na parte superior da pedra porosa. O tensiômetro é conectado a um sistema automático de coleta de dados que permite o registro contínuo das medidas.

Figura 4.5 Esquema do tensiômetro utilizado no ensaio

O processo para a instalação do tensiômetro é basicamente o seguinte: é executado um furo no solo por onde desce um tubo de PVC que tem colado em sua extremidade inferior a pedra porosa. Para garantir um bom contato entre a pedra porosa e o solo, uma pasta de solo e bentonita é colocada no fundo do furo. O tensiômetro, preso por hastes, desce pelo tubo de PVC e é atarraxado à pedra porosa. Isto permite que o tensiômetro possa ser recuperado e reutilizado em outros furos.

4.3.5 Resultados do ensaio

Este ensaio de carga constante teve duração de cinco dias. É válido observar que a época da realização deste ensaio (Agosto, 1998) foi bastante chuvosa o que resultou numa baixa sucção inicial (aproximadamente 15kPa) que não é desejável para o ensaio de infiltração. Além disto, o tensiômetro BH1 não registrou os dados da fase transiente do ensaio.

4.4 Estimativa dos Parâmetros Hidráulicos

4.4.1 Modelagem Numérica do Ensaio

As condições de contorno aplicadas, e o ponto que foi utilizado na retroanálise (BH3) estão apresentados na figura 4.6 (A malha de elementos finitos está apresentada no apêndice 2). Considerou-se que a pressão inicial é uniforme e igual à pressão medida pelo tensiômetro no instante $t = 0$.

Figura 4.6 Modelagem do ensaio (corte).

Foi desconsiderada a presença da camada de cimento em torno da pedra porosa por onde se dá o fluxo, pois esta se apresentou bastante fissurada (Rodriguez, 1999)

4.4.2 Análise de Sensibilidade

Os parâmetros utilizados na análise de sensibilidade (tabela 4.2) foram obtidos de estudos anteriores realizados no campo experimental II da PUC-Rio. Os parâmetros da curva

característica (figura 4.7) foram determinados a partir de dados de ensaios realizados por Daylac (1994), enquanto que a permeabilidade saturada, k_s , foi determinada com base nos valores obtidos por Diniz (1999).

Tabela 4.2 Parâmetros utilizados da análise de sensibilidade

θ_r [-]	θ_s [-]	α [cm ⁻¹]	n [-]	k_s [cm/s]
0,34	0,43	$8,5 \times 10^{-3}$	2,50	$5,0 \times 10^{-6}$

Figura 4.7 Curva característica e de permeabilidade utilizadas na análise de sensibilidade

A figura 4.8 mostra a variação da carga hidráulica com o tempo calculada pelo SWMS_2D no ponto correspondente ao tensiômetro BH3 utilizando os parâmetros da tabela 4.2, e também a sensibilidade da carga hidráulica em relação a cada um destes parâmetros (eq. 3.16).

Figura 4.8 Resposta calculada pelo modelo e sensibilidades

Na figura 4.8 observa-se que, para todos os parâmetros, a sensibilidade é maior quanto maior for a variação de carga de pressão.

Observa-se também que os parâmetros θ_r , θ_s e k_s têm as curvas de sensibilidade muito semelhantes indicando alta correlação entre estes parâmetros, o que pode ser confirmado pela análise das equações do modelo de van Genuchten (eqs. 2.9), onde os parâmetros θ_r e θ_s estão presentes somente como uma diferença entre eles, $(\theta_s - \theta_r)$, e k_s aparece multiplicando esta diferença (eq. 2.9b).

Visto que estes três parâmetros, θ_r , θ_s e k_s , não podem ser estimados ao mesmo tempo, sugere-se que tanto θ_r como θ_s sejam determinados de outra forma (em laboratório, por exemplo), pois é importante que a permeabilidade saturada seja determinada em campo, por causa do efeito de escala.

Para a retroanálise os parâmetros θ_r e θ_s foram fixos nos valores apresentados na tabela 4.2, já que θ_s é um valor próximo, um pouco menor, do que a porosidade, que varia de 0,46 a 0,51 (tabela 4.1) e θ_r parece bem determinado pela curva característica obtida em laboratório (figura 4.7).

4.4.3 Estimativa dos Parâmetros

Os parâmetros da tabela 4.2 foram utilizados como estimativas iniciais para a retroanálise, sendo que θ_r e θ_s foram mantidos fixos. A tabela 4.3 e a figura 4.9 apresentam os resultados da retroanálise. Foram realizadas 26 iterações nesta retroanálise, e o tempo total de cálculo foi de aproximadamente 8 horas.

Tabela 4.3 Parâmetros estimados e função objetivo

θ_r^1 [-]	θ_s^1 [-]	α [cm ⁻¹]	n [-]	k_s [cm/s]	F(p *)
0,34	0,43	$3,88 \times 10^{-3}$	3,66	$1,39 \times 10^{-6}$	1648,34

¹ parâmetros fixos

Observa-se na figura 4.9 que o ajuste das medidas parece satisfatório o que pode ser confirmado pela análise dos resíduos, conforme o item 3.5.2. Considerando que o desvio padrão inicial das medidas, σ_0 , pode ser estimado como a precisão do tensiômetro ($\sigma_0 = 4\text{cm}$), então a variância prévia do erro é $\sigma_0^2 = 16,0$. E a variância final do erro, dada pela eq. (3.28), é $s_0^2 = 16,99$, já que o número de medidas, m, é 100 e o número de parâmetros a estimar, n_p , é 3. Logo, pode-se concluir que o ajuste é realmente satisfatório.

Figura 4.9 Ajuste das medidas e resíduos finais

Porém, os coeficientes de correlação (eq. 3.31) são muito altos, assim como são altos também os desvios padrão (eq. 3.32) dos parâmetros estimados, como mostra a tabela 4.4.

Tabela 4.4 Coeficientes de correlação e desvios padrão

$\rho_{\alpha n}$	$\rho_{\alpha ks}$	ρ_{nks}	σ_{α}	σ_n	σ_{ks}
0,9981	0,9996	0,9974	40,1%	45,3%	86,7%

Estes valores da tabela 4.4 podem ser explicados pelo fato de que como o ensaio foi realizado a partir de uma baixa sucção ($\approx 15\text{kPa}$) somente um pequeno trecho da curva característica é necessário para o ajuste das medidas (figura 4.10), o que significa que diversas combinações de parâmetros poderão produzir este trecho de curva característica.

Figura 4.10 Curva característica e de permeabilidade para os parâmetros estimados

Visto que para a condição de baixa sucção do ensaio realizado não é possível a estimativa dos parâmetros, procurou-se avaliar a aplicabilidade do método numa condição de alta sucção inicial. Então, utilizando os parâmetros estimados (tabela 4.3), fez-se uma análise de sensibilidade para o caso do ensaio anterior, caso 1: $\psi_0 = -155\text{cmH}_2\text{O}$, e para uma sucção

inicial maior, caso 2: $\psi_0 = -600\text{cmH}_2\text{O}$. Observa-se na figura 4.11 que as sensibilidades de α e k_s para o segundo caso são, aproximadamente, 10 vezes maiores.

Figura 4.11 Análise de sensibilidade

A fim de comparar o resultado das retroanálises para os dois casos, somou-se aos valores calculados pelo modelo, erros de média zero e desvio padrão de 5% da carga de pressão inicial (figura 4.12) e fez-se a retroanálise. As estimativas iniciais foram as da tabela 4.2.

Figura 4.12 Dados utilizados nas retroanálises (em preto, solução numérica, em vermelho, solução com adição de um erro aleatório)

Os resultados obtidos estão apresentados na tabela 4.5 e na figura 4.13. Observa-se que mesmo com um erro nos dados maior, o erro na estimativa dos parâmetros para o caso de sucção inicial mais alta (caso 2) é menor. Nota-se ainda que existe uma boa concordância entre as curvas “reais” e as curvas do caso 1 para sucções menores do que a sucção inicial ($\psi_0 = 155\text{cmH}_2\text{O}$).

Tabela 4.5 Resultados das retroanálises para os casos de sucção inicial alta e baixa

	Parâmetros			Erro	
	“real”	$\psi_0 = -15\text{kPa}$	$\psi_0 = -60\text{kPa}$	$\psi_0 = 15\text{kPa}$	$\psi_0 = -60\text{kPa}$
$\alpha \text{ [x}10^{-3} \text{ cm}^{-1}\text{]}$	3,88	4,88	4,08	25,9%	16,5%
$n \text{ [-]}$	3,66	5,16	3,19	41,1%	38,1%
$k_s \text{ [x}10^{-6} \text{ cm/s]}$	1,39	2,54	1,41	82,7%	44,3%

Figura 4.13 Curvas características e de permeabilidade

A tabela 4.6 apresenta os coeficientes de correlação para os dois casos. Observa-se que há uma sensível diminuição nas correlações para o caso de sucção inicial alta.

Tabela 4.6 Coeficientes de correlação e desvios padrão

	$\rho_{\alpha n}$	$\rho_{\alpha k_s}$	$\rho_{n k_s}$	σ_{α}	σ_n	σ_{k_s}
caso 1	0,9971	0,9994	0,9960	23,9%	45,3%	70,5%
caso 2	0,8789	0,6138	0,2333	0,76%	3,2%	0,25%

4.5 Uma Proposta de Ensaio

O ensaio de carga constante analisado no item anterior apresenta um inconveniente no que diz respeito à instalação dos tensiômetros, pois há a necessidade da execução de um furo, da instalação do revestimento de PVC e ainda do preenchimento com mistura de cimento e bentonita. Além disso, o volume de água necessário para o ensaio é muito grande. Isto tudo pode tornar o ensaio pouco viável.

Procurou-se, então, apresentar uma proposta de um ensaio de simples instalação e analisar sua aplicabilidade na estimativa dos parâmetros hidráulicos através da retroanálise numérica.

O ensaio proposto é um ensaio de carga constante também, porém com uma carga menor do que a do ensaio anterior, de aproximadamente 12cm, o que reduziria o volume de água necessário para o ensaio. E propõe-se a utilização de um tensiômetro que seria cravado manualmente no solo, logo a profundidade do tensiômetro não deve exceder os 20cm (figura 4.14).

Figura 4.14 Configuração do ensaio proposto

A figura 4.15 apresenta as condições de contorno aplicadas e a localização do tensiômetro utilizadas na modelagem do ensaio proposto. A malha de elementos finitos está apresentada no apêndice 2.

Figura 4.15 Modelagem do ensaio proposto (corte)

Para a análise de sensibilidade foram utilizados os parâmetros da tabela 4.3. O gráfico de sensibilidades e da variação de pressão no ponto A (figura 4.15) estão apresentados na figura 4.16, e os coeficientes de correlação na tabela 4.7. Observa-se que os resultados da análise de sensibilidade são satisfatórios (coeficientes de correlação $< 0,9$) sugerindo que o ensaio pode fornecer estimativas dos parâmetros hidráulicos confiáveis.

A distribuição de carga de pressão para o tempo $t = 10h$ está apresentado na figura 4.17.

Figura 4.16 Análise de sensibilidade e variação de pressão no ponto A

Figura 4.17 Distribuição de carga de pressão

Tabela 4.7 Coeficientes de correlação e desvios padrão do ensaio proposto

$\rho_{\alpha n}$	$\rho_{\alpha ks}$	$\rho_{n ks}$	σ_{α}	σ_n	σ_{ks}
-0,0321	0,4942	-0,8401	0,50%	3,7%	0,60%

A fim de se tentar tornar o ensaio para determinação das propriedades hidráulicas ainda mais viável, procurou-se avaliar a possibilidade de se fazer a retroanálise utilizando somente os dados de vazão no furo ao longo do tempo, o que simplificaria muito a execução do ensaio, dispensando a utilização do tensiômetro.

Novamente, os parâmetros utilizados na análise de sensibilidade (figura 4.18) foram os da tabela 4.3. Observa-se que as sensibilidades em relação aos três parâmetros são muito semelhantes indicando uma alta correlação (tabela 4.8) e a impossibilidade de se estimar estes parâmetros medindo-se apenas a vazão.

Tabela 4.8 Coeficientes de correlação e desvios padrão do ensaio de vazão.

$\rho_{\alpha n}$	$\rho_{\alpha k_s}$	$\rho_{n k_s}$	σ_{α}	σ_n	σ_{k_s}
0,8310	0,9570	0,9634	10%	5,5%	5,8%

A figura 4.19 apresenta, para os dois casos: dados de vazão e dados de carga de pressão, o gráfico da função objetivo para os parâmetros α e k_s , mantendo o parâmetro n fixo no valor 3,66 (tabela 4.3). Observa-se que para os dados de vazão, os parâmetros α e k_s são muito correlacionados, ou seja, várias combinações de parâmetros produzem o mesmo valor da função objetivo. Já para os dados de pressão a função objetivo parece mais definida.

Figura 4.18 Análise de sensibilidade e variação da vazão no furo.

(a) Para dados de vazão

(b) Para dados de carga de pressão

Figura 4.19 Função Objetivo

5. Conclusões e sugestões para trabalhos futuros

O principal objetivo deste trabalho foi desenvolver uma ferramenta numérica para a determinação das propriedades hidráulicas em solos parcialmente saturados através da retroanálise de ensaios de campo.

Do ponto de vista da implementação numérica, os algoritmos utilizados se mostraram eficientes, apesar de não terem sido comparados a outros.

A análise de sensibilidade inicial mostrou que, para o modelo de van Genuchten, somente três parâmetros (α , n e k_s) podem ser estimados independentemente. Os outros dois (θ_r , θ_s) devem ser obtidos separadamente.

A retroanálise do ensaio do campo não apresentou bons resultados, entretanto as razões foram identificadas. A sucção inicial do ensaio realizado correspondia a uma condição de umidade alta, e sendo este um ensaio de infiltração (trajetória de umedecimento), um pequeno trecho da curva característica é suficiente para reproduzir os dados do ensaio, logo, os dados coletados foram insuficientes para a retroanálise. A interpretação das estimativas pode auxiliar na determinação da condição inicial necessária para uma estimativa de qualidade.

Através dos estudos numéricos realizados pôde-se observar que, se o ensaio de infiltração é iniciado a partir de uma sucção alta, a retroanálise pode fornecer resultados satisfatórios. E que, mesmo o ensaio sendo realizado a partir de uma condição de alta umidade, os parâmetros estimados parecem reproduzir, satisfatoriamente, a curva característica e a curva de permeabilidade para sucções menores que a sucção inicial do ensaio. Isto sugere que as propriedades obtidas da retroanálise de um ensaio de infiltração não devem ser extrapoladas para condições mais secas do que a condição inicial do ensaio.

Como o ensaio realizado (Rodriguez, 1998) pareceu pouco prático devido à instalação dos tensiômetros e ao volume de água necessário, foi proposto um ensaio de configuração simples

que pode fornecer resultados satisfatórios, conforme visto na análise de sensibilidade realizada.

Finalmente pode-se concluir que a metodologia utilizada parece ser extremamente útil na retroanálise de parâmetros geotécnicos e, em especial, de parâmetros de fluxo em meios parcialmente saturados. E que, através da análise de sensibilidade, a metodologia empregada pode, também, auxiliar no projeto do ensaio, indicando a configuração, as condições iniciais e de contorno, os tipos de dados (vazão, carga de pressão, etc.) e a localização dos equipamentos de medida que forneceriam a melhor estimativa dos parâmetros desejados.

Como sugestões de futuros trabalhos, recomenda-se:

- a implementação de outros modelos de propriedades hidráulicas com o objetivo de se encontrar um modelo onde todos os parâmetros possam ser retroanalisados com somente um ensaio.
- a implementação de um modelo de propriedades hidráulicas que considere a histerese na curva característica e seu estudo em relação ao problema de identificabilidade.
- a análise de outras configurações de ensaio, incluindo ensaios de laboratório (em andamento).
- a utilização da metodologia estudada na determinação de parâmetros de transporte de contaminantes em solos parcialmente saturados.
- a comparação e busca de algoritmos de otimização mais eficientes que, eventualmente, possam ser necessários em análises tridimensionais.

6. Referências Bibliográficas

- Abu-Hejleh, A. N., Znidarcic, D. e Illangasekare, T. H., 1993. Permeability determination for unsaturated soils. *Unsaturated Soils*, ASCE GSP 39, 163-174.
- Arora, J.S., 1989, *Introduction to optimun design*. McGraw-Hill, Inc.
- Bard, Y., 1974. *Nonlinear Parameter Estimation*. Academic Presss, Inc., San Diego, Ca.
- Bear, J., 1972. *Dynamics of fluids in porous media*. Elsevier, New York.
- Beck, J. V. e Arnold, K. J., 1977. *Parameter Estimation in Engineering and Science*. John Wiley & Sons, Inc..
- Campos, J. L., 1993. Um estudo numérico e experimental da permeabilidade saturada e não saturada de solos de encostas do Rio de Janeiro. *Dissertação de Mestrado*. DEC/PUC-Rio.
- Castro, A. L., 1997. Métodos de retroanálise na interpretação do comportamento de barragens de betão. *Tese de Doutorado (Documento Provisório)*. Universidade Técnica de Lisboa/LNEC.
- Cividini, A. e Gioda, G., 1997. Deterministic andd probabilistic back analysis in rock mechanics. *Applications of Computational Mechanics in Geotechnical Engineering*. A.A. Balkema.
- Dane, J.H., e Hruska, S., 1983. In situ determination of soil hydraulic properties during drainage. *Soil Sci. Soc. Am., J.*, 47, 619-624.

- Daylac, R., 1994. Desenvolvimento e utilização de uma célula para medição de K_0 com controle de sucção. Dissertação de Mestrado. DEC/PUC-Rio.
- Diniz, B., 1998. Estudo experimental da permeabilidade saturada-não saturada de um solo de uma encosta do Rio de Janeiro. Dissertação de Mestrado. DEC/PUC-Rio.
- Finsterle, S. e Persoff, P., 1997. Determining permeability of tight rock samples using inverse modeling. *Water Resour. Res.*, 33(8), 1803-1811.
- Finsterle, S. e Pruess, K., 1995. Solving the estimation-identification problem in two-phase flow modeling. *Water Resour. Res.*, 31(4), 913-923.
- Finsterle, S., 1999. iTOUGH2 User's guide. Report LBNL-40041, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, California.
- Fredlund, D.G., e Xing, A., 1994. Equations for the soil-water characteristic curve. *Can. Geotech. J.*, 31, 521-532.
- Fredlund, D.G., Xing, A., e Huang, S., 1994. Predicting the permeability function for unsaturated soils using the soil-water characteristic curve. *Can. Geotech. J.*, 31, 533-546.
- Freeze, R. A., e Cherry, J. A., 1979. *Groundwater*. Prentice Hall, Inc., NJ, 604p.
- Gribb, M.M., Simunek, J., e Leonard, M.F., 1998. Development of cone penetrometer method to determine soil hydraulic properties. *J. of Geotech. and Geoenv. Eng.*, V. 124, N. 9, 820-829.
- Hillel, D., 1971. *Soil and Water*. Academic Press, Inc., New York.

- Hollenbeck, K. J. e Jensen, K. H., 1998. Experimental evidence of randomness and nonuniqueness in unsaturated outflow experiments designed for hydraulic parameter estimation. *Water Resour. Res.*, 34(4), 595-602.
- Hudson, D. B., Wierenga, P. J. e Hills, R. G., 1996. Unsaturated hydraulic properties from upward flow into soil cores. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 60, 388-396.
- Huyakorn, P.S., e Pinder, G.F., 1983. *Computational methods in subsurface flow*. Academic Press, Inc., Londres.
- Inoue, M., Simunek, J. Hopmans, J. W. e Clausnitzer, V., 1998. In situ estimation of soil hydraulic functions using a multistep soil-water extraction technique. *Water Resour. Res.*, 34(5), 1035-1050.
- Kool, J. B., Parker, J. C. e van Genuchten, M. T., 1985. Determining soil Hydraulic properties from one-step outflow experiments by parameter estimation: I. Theory and numerical studies. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 49, 1348-1354.
- Kool, J. B., Parker, J. C., van Genuchten, M. T., 1987. Parameter estimation for unsaturated flow and transport models – A Review. *J. of Hydrology*, 91, 255-293.
- Luckner, L., van Genuchten, M. T. e Nielsen, D. R., 1989. A consistent set of parametric models for the two-phase flow of immiscible fluids in subsurface. *Water Resour. Res.*, 25(10), 2187-2193.
- Mous, S. L. J., 1993. Identification of the movement of water in unsaturated soils: The problem of identifiability of the model. *J. of Hydrology*, 143, 153-167.
- Neuman, S.P., 1973. Saturated-unsaturated seepage by finite elements - *J. Hyd. Div. ASCE*,

V. 99, N. 12, 2233-2250.

Parker, J. C., Kool, J. B., e van Genuchten, M. T., 1985. Determining soil Hydraulic properties from one-step outflow experiments by parameter estimation: II. Experimental studies. Soil Sci. Soc. Am. J., 49, 1354-1359.

Ramos Jr., A. S., 1997. Modelos computacionais para avaliação de danos, tensões e ações em estruturas. Tese de Doutorado. DEC/PUC-Rio.

Rodriguez, J. J., 1998. Field measurements of flow in partly saturated residual soil. MSc Dissertation. Imperial College of Science, Technology & Medicine.

Sertã, H.B.C., 1986. Aspectos geológicos e geotécnicos do solo residual do Campo Experimental II da PUC/RJ. Dissertação de Mestrado. DEC/PUC-Rio.

Simunek, J. e van Genuchten, M. T., 1996. Estimating unsaturated soil hydraulic properties from tension disc infiltrometer data by numerical inversion. Water Resour. Res., 32(9), 2683-2696.

Simunek, J. e van Genuchten, M. T., 1997. Estimating unsaturated soil hydraulic properties from multiple tension disc infiltrometer data. Soil Science, 62(6), 383-398.

Simunek, J., Kodesova, R., Gribb, M., e van Genuchten, M. T., 1999. Estimating hysteresis in the soil water retention function from cone permeameter experiments. Water Resour. Res., 35(5), 1329-1345.

Simunek, J., Vogel, T., e van Genuchten, M. T., 1994. SWMS_2D: Simulating water flow and solute transport in two-dimensional variably saturated media, U. S. Salinity

Laboratory, Riverside, CA.

- Toorman, A. F. e Wierenga, P. J., 1992. Parameter estimation of hydraulic properties from one-step outflow data. *Water Resour. Res.*, 28(11), 3021-3028.
- van Dam, J. C., Stricker, J. N. e Droogers, P., 1992. Inverse method for determining soil hydraulic functions from one-step outflow experiments. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 56, 1042-1050.
- van Genuchten, M. T., 1980. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 44, 892-898.
- Wildenschild, D. Høgh Jensen, K., Hollenbeck, K. J., Illangasekare, T. H., Znidaric, D., Sonnenborg, T. e Butts, M. T., 1997. A two-stage procedure for determining unsaturated hydraulic characteristics using a syringe pump and outflow observations. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 61, 347-359.
- Yeh, W., 1986. Review of parameter identification procedures in groundwater hydrology: The inverse problem. *Water Resour. Res.*, 22(2), 95-108.
- Zachmann, D.W., Duchateau, P.C., e Klute, A., 1981. The calibration of the Richards flow equation for draining column by parameter identification. *Soil Sci. Soc. Am.*, J., 45, 1012-1015.
- Zachmann, D.W., Duchateau, P.C., e Klute, A., 1982. Simultaneous approximation of water capacity and soil hydraulic conductivity by parameter identification. *Soil Sci.*, 134, 157-163.

Apêndice 1

Matriz de Covariância das Estimativas

A dedução da matriz de covariância foi baseada na apresentada por Bard (1974). Supondo que a estimativa é o mínimo de uma função objetivo qualquer $F(\mathbf{p})$. Esta função objetivo também depende dos valores medidos $\mathbf{y}^*$. Logo $F = F(\mathbf{p}, \mathbf{y}^*)$. No mínimo tem-se:

$$\frac{\partial F(\mathbf{p}^*, \mathbf{y}^*)}{\partial \mathbf{p}} = \mathbf{0} \quad (\text{A1.1})$$

Supondo que os dados têm uma pequena variação, substituindo, então, $\mathbf{y}^*$ por $\mathbf{y}^* + \delta \mathbf{y}^*$, o mínimo vai se deslocar de $\mathbf{p}^*$ para $\mathbf{p}^* + \delta \mathbf{p}^*$, logo, deve-se obter:

$$\frac{\partial F(\mathbf{p}^* + \delta \mathbf{p}^*, \mathbf{y}^* + \delta \mathbf{y}^*)}{\partial \mathbf{p}} = \mathbf{0} \quad (\text{A1.2})$$

Expandindo a eq.(A1.2) em série de Taylor e retendo somente os termos de primeira ordem, após subtrair a eq.(A1.1) obtém-se:

$$\left(\frac{\partial^2 F}{\partial \mathbf{p}^2} \right) \delta \mathbf{p}^* + \left(\frac{\partial^2 F}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{y}^*} \right) \delta \mathbf{y}^* \approx \mathbf{0} \quad (\text{A1.3})$$

logo,

$$\delta \mathbf{p}^* \approx -\mathbf{H}^{*-1} \left(\frac{\partial^2 F}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{y}^*} \right) \delta \mathbf{y}^* \quad (\text{A1.4})$$

$$\text{onde, } \mathbf{H}^* = \left. \frac{\partial^2 F}{\partial \mathbf{p}^2} \right|_{\mathbf{p}=\mathbf{p}^*}.$$

A matriz de covariância desejada é definida por:

$$\mathbf{C}_p \equiv E \left[\delta \mathbf{p}^* \delta \mathbf{p}^{*T} \right] \quad (\text{A1.5})$$

Então, substituindo eq. (A1.4) na eq. (A1.5):

$$\mathbf{C}_p \approx E \left[\mathbf{H}^{*-1} \left(\frac{\partial^2 F}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{y}^*} \right) \delta \mathbf{y}^* \delta \mathbf{y}^{*T} \left(\frac{\partial^2 F}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{y}^*} \right)^T \mathbf{H}^{*-1} \right] \quad (\text{A1.6})$$

Sendo $\mathbf{H}^*$ e $\frac{\partial^2 F}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{y}^*}$ avaliados em $\mathbf{p} = \mathbf{p}^*$ e para os dados reais $\mathbf{y}^*$, estas quantidades são

constantes e podem ser colocados fora do símbolo de valor esperado $E[.]$ da eq. (A1.6):

$$\mathbf{C}_p \approx \mathbf{H}^{*-1} \left(\frac{\partial^2 F}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{y}^*} \right) \mathbf{C}_y \left(\frac{\partial^2 F}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{y}^*} \right)^T \mathbf{H}^{*-1} \quad (\text{A1.7})$$

sendo $\mathbf{C}_y \equiv E[\delta \mathbf{y}^* \delta \mathbf{y}^{*T}]$ a matriz de covariância das medidas.

Esta eq.(A1.7) se aplica a qualquer função objetivo, sendo ela baseada ou não em fundamentos estatísticos.

Particularizando para a função objetivo de mínimos quadrados, eq.(3.3), obtém-se:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{y}^*} = -2 \sum_{i=1}^n \frac{\partial y_i(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \quad (\text{A1.8})$$

Substituindo as eq.(3.19) (aproximação da hessiana) e eq.(A1.8) na eq.(A1.7) chega-se à:

$$\mathbf{C}_p \approx \left(2 \sum_{i=1}^n \mathbf{b}_i \mathbf{b}_i^T \right)^{-1} \left(-2 \sum_{i=1}^n \mathbf{b}_i \right) \mathbf{C}_y \left(-2 \sum_{i=1}^n \mathbf{b}_i \right)^T \left(2 \sum_{i=1}^n \mathbf{b}_i \mathbf{b}_i^T \right) \quad (\text{A1.9})$$

sendo $\mathbf{b}_i \equiv \frac{\partial y_i(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}}$.

Para o caso em que as medidas são não-correlacionadas e com mesmo desvio padrão ($\mathbf{C}_y = \sigma_0 \mathbf{I}$), a eq.(A1.9) se reduz à:

$$\mathbf{C}_{\mathbf{p}} \approx \sigma_0 \left(\sum_{i=1}^n \mathbf{b}_i \mathbf{b}_i^T \right)^{-1} = \sigma_0 \left(\sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial y_i(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \right) \left(\frac{\partial y_i(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \right)^T \right)^{-1} \quad (\text{A1.10})$$

Comparando esta eq.(A1.10) com a eq.(3.19) conclui-se que:

$$\mathbf{C}_{\mathbf{p}} \approx \sigma_0 \mathbf{H}^{-1} \quad (\text{A1.11})$$

Ou ainda:

$$\mathbf{C}_{\mathbf{p}} \approx \sigma_0 \left(\mathbf{J}^T \mathbf{J} \right)^{-1} \quad (\text{A1.12})$$

Apêndice 2

Neste apêndice estão apresentadas as malhas de elementos finitos utilizadas nas modelagens dos ensaios:

Figura A2.1 Malha de elementos finitos para o ensaio realizado

Figura A2.2 Malha de elementos finitos para o ensaio proposto