

2

Teoria de fluxo em solos não saturados

2.1.1.

Relações em solos não-saturados; Curva Característica e condutividade hidráulica

2.1.1.1.

Curva Característica (CC)

A curva característica (ou de retenção de umidade) é definida como a relação entre a sucção ($u_a - u_w$) do solo e o conteúdo de água (umidade gravimétrica w , umidade volumétrica θ , ou grau de saturação S). A curva apresenta algumas nuances que representam fenômenos físicos, como Ψ_r , valor de entrada de ar, θ_r , umidade residual e o efeito de histerese.

Essas características da curva de retenção são causas do efeito da tensão superficial de tração entre água e ar nos vazios do sólidos e que gera tensões compressivas nos mesmos. A relação deste fenômeno com o diâmetro dos poros é chamado de capilaridade.

Para dar um exemplo do efeito, pode-se supor uma trajetória de secagem e o solo saturado, ao desaturar a amostra (solo) a tensão superficial ar-água gera uma resistência que deve ser vencida pelo ar (Figura 1). Durante essa trajetória, no momento em que o ar começa a ocupar a amostra a sucção ($u_a - u_w$) correspondente ao ponto denominado de Ψ_{VEA} (valor de entrada de ar), que será determinado pela resistência do poro de maior diâmetro; ao continuá-la, a extração da água chegará a um “limite” e a umidade restante na amostra é chamada de θ_r (umidade residual) (Figura 2).

Segundo Aubertin *et al.* (1998), o valor de entrada de ar varia de 2 a 75 cm para solos arenosos (2-10, 10-35, 35-70, para areias grossas, médias e finas respectivamente), de 70 a 250 cm para solos siltsos e é maior que 250 cm para solos argilosos. O valor de entrada de ar para este autor é a pressão equivalente a umidade de 90% de θ_s .

Diversos fatores podem influenciar o comportamento desta curva, tais como umidade de compactação, energia de compactação, estado de tensões, estrutura do solo, mineralogia, estrutura, conteúdo de matéria orgânica e histerese. (Vanapalli et al, 1999, Ng & Pang, 2000).

Dentre estes fatores, Campos (1984) comenta sobre a influência determinante da estrutura para baixos valores de sucção ($<98\text{KPa}$). Quanto à granulometria Fredlund e Xing (1994) apresentam o formato da curva tipo para um solo arenoso, siltoso e argiloso. Esse comportamento mostra uma menor sensibilidade para perder umidade a uma variação de sucção no solo argiloso e uma variação de umidade mais acentuada para solos arenosos (Figura 1).

Diversos modelos constitutivos foram desenvolvidos para representar o comportamento da curva característica, aos quais podemos citar: Gardner (1958); Brooks e Corey (1964), van Genuchten (1980); Saxton (1986); Mc Kee e Bumb (1987); Fredlund e Xing (1994); Aubertin *et al.*, (1998).

Para 11 solos brasileiros, Gerscovich e Sayão (2002) concluíram pela adequabilidade dos modelos de Gardner (1958) eq. (2.2), Van Genuchten (1980) eq. (2.3) e Fredlund e Xing (1994) eq. (2.4) e eq. (2.5). Uma das constatações feitas por Leong e Rahardjo (1998) em estudos de retro-análise da curva característica mostrou a possibilidade de obtenção de parâmetros diferentes caso dados sobre as altas sucções não fossem considerados (*Apud* Gerscovich e Sayão, 2002).

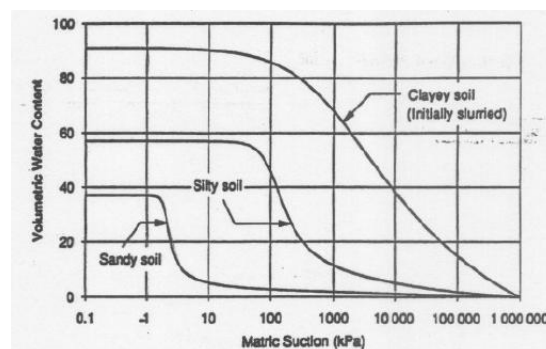


Figura 1 - Curvas características tipo para solos arenosos, siltosos e argilosos. (Fredlund e Xing 1994)

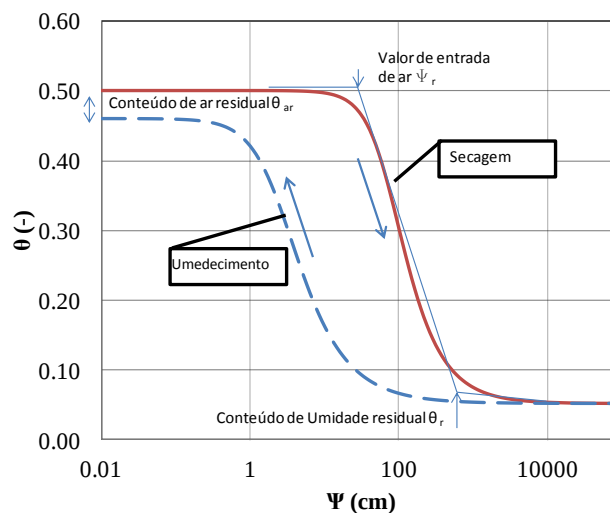


Figura 2 - Definição dos termos de uma curva característica (Fredlund e Xing 1994)

2.1.1.2. Condutividade Hidráulica .

A curva de condutividade hidráulica é função da sucção e do índice de vazios. Se o solo for considerado incompressível é possível desacoplar os parâmetros em duas funções independentes, uma que relaciona K_{sat} ao índice de vazios (e) e outra que relaciona a condutividade hidráulica ao grau de saturação (umidade) ou sucção.

Existem vários modelos para a curva de condutividade hidráulica, os quais podem ser separados em três categorias: empíricos, macroscópicos ou estatísticos, sendo o último o mais rigoroso¹. Os modelos empíricos são apenas o ajuste de curva a dados experimentais e claramente apresentam um formato semelhante a curva característica. Por sua vez, os modelos macroscópicos têm uma abordagem analítica que assume a representatividade do fluxo laminar (nível microscópico) ao fluxo em meios porosos (nível macroscópico), considerando todos seus aspectos; velocidade média, gradiente, permeabilidade e raio hidráulico. Por último, os modelos estatísticos refletem a interação da distribuição dos poros (mesma área em todas as direções) através da adoção da lei de Hagen-Poiseuille e da função da lei de capilaridade de Kelvin (para fins de integração sendo $\theta(\psi)$ transformado em $\theta(r)$ onde r é o raio dos poros interconectados da distribuição aleatória).

¹ Maulem (1976) (*Apud* Leong e Rahardjo, 1997).

2.1.2.

Equações constitutivas – modelos analíticos

Leong e Rahardjo (1997) fazem uma revisão² sobre os modelos e analisam o comportamento de seus parâmetros. O modelo de Van Genuchten eq. (2.3). foi analisado quanto ao formato de sua curva. Através desta linha de pensamento pode-se dizer que: o parâmetro α , Figura 3(1), representa a translação da curva ao longo do eixo Ψ (sucção); o parâmetro n , Figura 3(2), representa a rotação e muda a inclinação da curva em relação a um ponto pivotante, α , expresso pela equação (2.1); e por fim, o parâmetro m , Figura 3(3), representa a rotação e inclinação da parte reta da curva cujo pivot está fora da figura e acima da sua primeira inflexão.

$$\alpha = \frac{\Psi_{50}}{\left(2^{\frac{1}{m}} - 1\right)^{\frac{1}{m}}} \quad (2.1)$$

Onde; $(\theta_s - \theta_r)/2 = \Psi_{50}$

De acordo com Nielsen e Luckner o parâmetro α deve apresentar valores próximos ao inverso da altura capilar, enquanto o parâmetro n deve ser maior que 2. Não obstante, há pelos autores o reconhecimento de que alguns solos de textura mais fina podem apresentar valores entre 1 e 2, como observados por Rawls *et al.* (1992) e Carsel *et al.* (1988) (*Apud* Nielsen e Luckner, 1992).

Tabela 1 - Modelos constitutivos para a curva característica

Modelo	Eq.	
Gardner, 1958	$\Theta = \frac{1}{1 + \left(\frac{\Psi}{\alpha}\right)^\eta}$	(2.2)
Van Genuchten, 1980	$\Theta = \left[\frac{1}{1 + (\alpha\Psi)^\eta} \right]^m$	(2.3)
Fredlund e Xing, 1994	$\theta = C(\Psi) \frac{\theta_s}{\left[\ln \left[e + \left(\frac{\Psi}{\alpha}\right)^\eta \right] \right]^m}$	(2.4)

² Brooks e Corey (1964); Campbell (1974); Clapp e Hornberger (1978) e Russo (1988).

	$C(\psi) = \left[1 - \frac{\ln\left(1 + \frac{\psi}{\psi_r}\right)}{\ln\left(1 + \frac{\psi_e}{\psi_r}\right)} \right] \quad (2.5)$	
--	--	--

Onde α, η e m são parâmetros de ajuste dos modelos

O o modelo de Van Genuchten pode ser reescrito como;

$$\theta_w = \theta_r + \left((\theta_s - \theta_r) \left[\frac{1}{1 + \left(\frac{\psi}{\alpha} \right)^\eta} \right]^m \right) \quad (2.6)$$

Onde,

$$m = 1 - \frac{1}{n} \quad n > 1 \quad (2.7)$$

E a função de condutividade expressa por:

$$K(h) = K_s S_e^l \left[1 - \left(1 - S_e^{\frac{1}{m}} \right)^m \right]^2 \quad (2.8)$$

Onde l é um parâmetro de conectividade dos poros e estimado por Maulem (1976) como sendo 0,5 para a maioria dos solos e a constante m conforme a eq. (2.7). S_e é equivalente a Θ e é o grau de saturação relativo, que é igual a $(\theta_w - \theta_r) / (\theta_s - \theta_r)$.

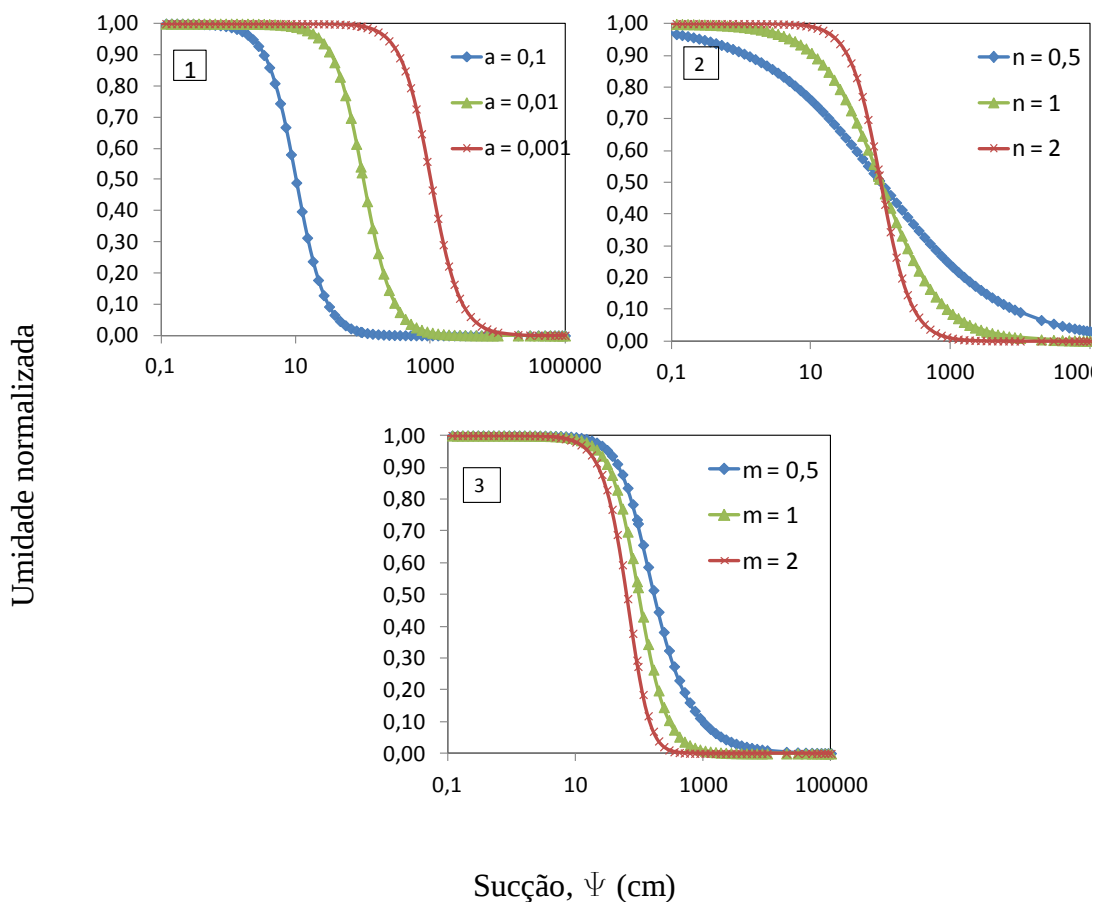


Figura 3 - Variação dos parâmetros do modelo de Van Genuchten (Adaptado de Leong e Rahardjo, 1997)

2.2.

Teoria de fluxo – equação governante não saturada

O fluxo de água através de um solo é nada mais do que a interação de um fluido passando através de uma matriz porosa. Bear e Jacob (1957) representam esta relação fluido/poros como sendo função da densidade do fluido (ρ_w), viscosidade (μ) e compressibilidade além da distribuição estatística da matriz porosa, com sua porosidade, sua superfície específica e sua compressibilidade.

O fluxo no meio poroso leva em conta a continuidade de massa do sistema³ e então para a formulação do problema pode-se dizer que em um elemento de controle unitário a diferença entre a taxa (vazão) de entrada de fluido e a taxa de saída é o fator de acumulação do elemento.

³ Exemplo em Freeze e Cherry (1979) ou Radcliffe e Simunek (2010)

Para o fluxo em regime transiente e meio não saturado temos então a equação governante eq. (2.9), denominada de equação de Richards (Freeze e Cherry, 1979), já que podemos assumir que as derivadas parciais de ρ_w (ML⁻³) e S (-) no tempo são negligenciáveis e que a equação de Darcy é válida como lei de movimento.

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[K(\Psi) \frac{\partial h}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[K(\Psi) \frac{\partial h}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[K(\Psi) \frac{\partial h}{\partial z} \right] = C(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (2.9)$$

Sendo;

$$h = \Psi + z;$$

$C(\Psi)$ = Curva característica;

$K(\Psi)$ = Curva de condutividade hidráulica;

A solução e adaptação à condição axissimétrica foi dada por Warick (1991/1992) e a conservação de massa para o problema numérico foi proposto por Celia *et al.* (1990) (Apud Simunek, 1998b).

A validade desta equação (2.9) ainda é controversa principalmente porque depende da escala de discretização (Sposito, 1998; Kabat *et al.*, 1997; Apud Coppola *et al.*, 2009) e que haja continuidade na fase gasosa. (Ippisch *et al.*, 2006).

2.3.

O problema inverso e o método de estimativa de parâmetros

“Uma das tarefas fundamentais da engenharia é a extração de informação a partir de dados.” (Beck & Arnold, 1977)

Uma consideração prévia ao item será a definição de problema direto e inverso. O problema direto visa através de condições de contornos impostas e de um modelo estabelecido, cujos parâmetros são conhecidos, se estabelecer o comportamento em um dado domínio (Tabela 2, esquerda). De outro lado, o problema inverso consiste em, sob condições impostas a um domínio, obter a um dado modelo utilizado (ou de parametrização livre) os parâmetros ou contornos antes desconhecidos que representam o fenômeno observado (Tabela 2, direita).

Tabela 2 - Descrição do problema direto e inverso

Problema direto	Problema inverso
<pre> graph LR A[Condições] --> B[Solução] B --> C[Fenômeno] </pre>	<pre> graph LR A[Fenômeno] --> B[Solução + Algoritmos de otimização] B --> C[Condições] </pre>
Fenômeno = y = variável dependente Condições = condições de contorno, geometria, parâmetros do modelo	

. O problema inverso, então, exige observações dentro do domínio, as quais são as variáveis dependentes medidas, y^* . No caso, em problemas de fluxo essas variáveis podem ser constituídas em diferentes grandezas como, carga de pressão, vazão, umidade volumétrica, cumulativas (ex: infiltração) etc. Através destas observações se procura um vetor de parâmetros (p) o qual satisfaça a solução direta ($y(p)$), do modelo dado, sob critério de haver pequena discrepância com os valores y^* (erro ou resíduo ver seção 2.3.1). A eq. (2.10) representa o intuito do problema inverso e é denominada de função objetivo, $F(p)$, sendo sua solução o vetor p que a minimiza, cuja busca nada mais é do que um problema de otimização.

Nas lições de Finsterle e Faybishenko (1999), a grande vantagem desta metodologia consiste na análise qualitativa dos resultados estimados. A etapa final de interpretação, então, se resume na análise dos resíduos e erros aleatórios que fornece a qualidade do ajuste além da análise de sensibilidade e identificabilidade que fornece a qualidade dos parâmetros ajustados, que representam a tipologia da FO ($F(p)$). No presente trabalho não serão abordadas as análises dos resíduos⁴ quanto aos erros produzidos pelo modelo ou pelo instrumento de medição (tensiômetro).

2.3.1. Função objetivo e o

⁴ Detalhes em Velloso (2000), Vrugt *et al.* (2003) ou Ippish *et al.* (2003)

método dos mínimos quadrados

Em relação à construção de uma função objetivo, Beck e Arnold (1977) explanam que, na falta de qualquer informação adicional além das observações y^* , o método mais simples e recomendado é o método dos mínimos quadrados.

A função F denominada de função objetivo pode ser expressa então por:

$$F(p) = [y^* - y(p)]^T [y^* - y(p)] = \sum_{i=1}^m r_i^2(p) \quad (2.10)$$

Sendo r_i o resíduo, y^* a grandeza medida, $y(p)$ a grandeza calculada e p o vetor de parâmetros. Visa-se, portanto obter o mínimo da eq. (2.10) como citado na seção 2.3.

Conforme os estudos promovidos por Velloso (2000), esse método é apropriado quando não há grandes variações de ordem de grandeza nos valores medidos e aplica-se ao EIM, pois utiliza-se da série temporal da carga de pressão (sucção) como variável dependente.

Em outros problemas onde ocorram escalas diferentes (devido ao uso de diferentes grandezas) pode-se usar uma matriz diagonal de peso w_{ii} , multiplicando baixos valores de w_{ii} para escalas grandes ou valores não confiáveis e altos valores no caso contrário.

Para adoção de peso há uma maneira estatística que foi proposta por Bard (1974) e constitui a multiplicação pela inversa da matriz de covariância, C_y , como na equação abaixo.

$$F(p) = [y^* - y(p)]^T C_y^{-1} [y^* - y(p)] \quad (2.11)$$

Ou,

$$F(p) = \sum_{i=1}^m \frac{r_i^2(p)}{\sigma_{yi}^2} \quad (2.12)$$

Sendo σ_{yi}^2 o valor do desvio padrão das medidas.

Beck e Arnold (1977) deduzem que se a distribuição dos resíduos for normal, a minimização da função dos quadrados ponderados dará a máxima probabilidade dos parâmetros desconhecidos, sendo conhecido como método da probabilidade máxima.

Outros métodos ainda podem ser utilizados, como o método bayesiano que apresenta uma parcela penalizante caso o vetor de parâmetros se afaste da estimativa inicial (Beck e Arnold, 1977).

2.3.2. Algoritmos de Otimização

A ferramenta para chegar-se ao mínimo da função objetivo é algum algoritmo de otimização.

O algoritmo de otimização (PNL) sem restrição visa a obtenção de um mínimo próximo à estimativa inicial do vetor de parâmetros p_0 .

O algoritmo funciona de forma iterativa segundo a expressão abaixo (Velloso, 2000);

$$p^{k+1} = p^k + \Delta p^k \quad (2.13)$$

Onde Δp^k é o vetor de variação dos parâmetros e é adicionado ao conjunto de parâmetros anterior sendo processo repetido até um ponto de ótimo ou critério de parada que, no caso, é um valor próximo a zero da função objetivo ou seja que a minimiza.

A variação do vetor de parâmetros, Δp^k , pode ser calculado com diferentes métodos (ver final da seção) e geralmente se baseiam no conceito da eq. (2.14):

$$\Delta p^k = \alpha^k d^k \quad (2.14)$$

Onde d^k é a direção de busca (ou seja a função objetivo deve diminuir nesta direção) e α^k é o tamanho do passo (que está associado à estabilidade do problema).

Os métodos que usam esta técnica podem ser classificados quanto à ordem da derivada (zero, 1ª, 2ª ordem) da função objetivo para a determinação da direção

d^k , sendo que quanto maior a ordem da derivada maior será a taxa de convergência.

Os algoritmos supracitados são baseados em gradientes locais e dentre eles podemos citar as seguintes metodologias⁵: Método Univariante, Método do Máximo Declive, Método de Newton-Raphson, Método Levemberg-Marquardt. Um dos problemas destes algoritmos é a possibilidade do aprisionamento da solução a um mínimo local dependendo da estimativa inicial.

Mais recentemente surgiram algoritmos de busca global nos problemas de estimativa hidráulica como os métodos simplex annealing (Pan e Wu, 1998), algoritmos genéticos (Takeshita, 1999; Vrugt *et al.*, 2001), estratégias de amostragem de malha (Abbaspour *et al.*, 1997), métodos de colônias de formiga (Abbaspour *et al.*, 2001) e redes neurais (Schmitz *et al.*, 2005). (Apud Vrugt *et al.* 2001). Em geral estes algoritmos possuem altos custos computacionais ou tecnológicos; porém, podem trazer maior confiança sobre os parâmetros finais.

No Brasil, o uso dos algoritmos citados nesta seção podem ser vistos nos trabalhos de Campos (1993), Velloso (2000) e Ferreira (2010).

2.4.

Ferramentas para a análise inversa em problemas de otimização

“Segundo Yeh (1986) parâmetros altamente correlacionados significam que certo comportamento de fluxo dada uma condição de contorno pode ser definido por diferentes combinações de parâmetros. Os parâmetros, portanto não são identificáveis pelo método inverso.” (Apud Zurmühl e Durner, 1998).

2.4.1. Sensibilidade

A matriz de sensibilidade mostra a grandeza da variação do valor calculado (variável dependente) pelo modelo no ponto de calibração $y_i(p)$ (ponto arbitrário dentro do domínio) em relação ao parâmetro p_j . Finsterle e Faybishenko (1999) definem a matriz de sensibilidade (J_{ij}) como mostrado na Eq. (2.30):

$$J_{ij} = \frac{\partial y_i(p)}{\partial p_j} \quad (2.30)$$

⁵ maiores detalhes podem ser vistos em Velloso (2000).

É interessante observar a tipologia dessa matriz sob a ótica dos tipos de dados (medidas), pontos no espaço (escolha da geometria) e tempo onde apresentam maiores coeficientes (tempo de ensaio) (ex. Figura 4). Essas análises de sensibilidade devem ser conduzidas na mesma grandeza, ou seja a matriz de sensibilidade de forma normalizada, Eq.(2.31).

$$\tilde{J}_{ij} = \frac{\partial y_i(\mathbf{p})}{\partial p_j} p_j \quad (2.31)$$

Um exemplo pode ser observado na Figura 4, em que mostra a sensibilidade dos parâmetros à passagem da frente de infiltração (em termos de carga de pressão Ψ) em um ponto arbitrário (**b**). Quanto maior for a manutenção da sensibilidade ao longo do tempo maior será a informação obtida para a solução do problema inverso

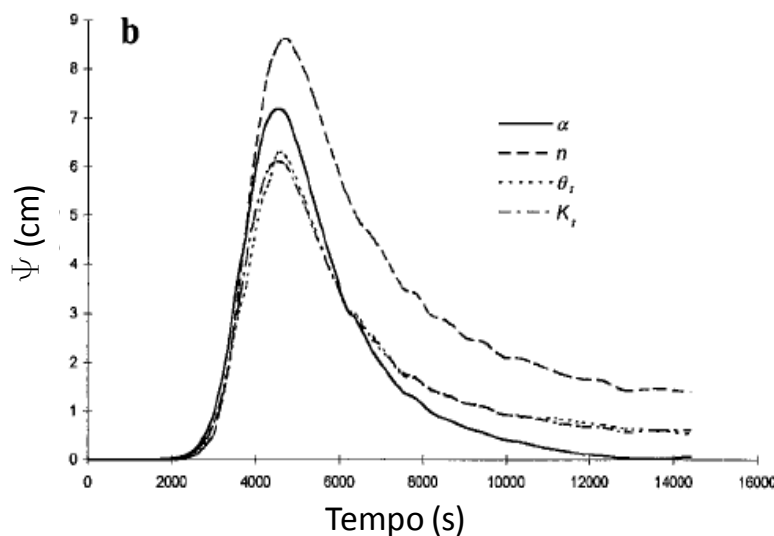


Figura 4 - Sensibilidade dos parâmetros a variação de carga em um tensiômetro no experimento de infiltração circular (Simunek, 1996)

2.4.2. Identificabilidade

Representa a capacidade de se determinar um parâmetro em estar correlacionado a outro. A identificação das incógnitas só pode resultar em bons parâmetros caso (i), todos os parâmetros a serem identificados sejam independentes, (ii) o parâmetro é sensível de certa forma à variável dependente

medida, (iii) o mínimo global da função objetivo pode ser encontrado. (Nielsen e Lucker, 1992)

Vrugt *et al.* (2003) sustentam que não é a quantidade de informação de medidas no problema inverso que impossibilita a caracterização das propriedades do solo e sim que os algoritmos geralmente apresentam incertezas em sua eficiência. Vrugt *et al.* (2003) também dizem que a unicidade da solução será demonstrada pela distribuição marginal de probabilidade⁶. Um exemplo deste problema é exposto no experimento de Simunek e van Genuchten (1996), cuja função objetivo no plano $k_{sat} \times n$ é representada na Figura 5. A figura mostra que para baixos valores de K_{sat} o vale mínimo da função se torna praticamente paralelo a n o que implica num problema pouco identificável (a solução pode não ser única o que indicaria altos coeficientes de correlação).

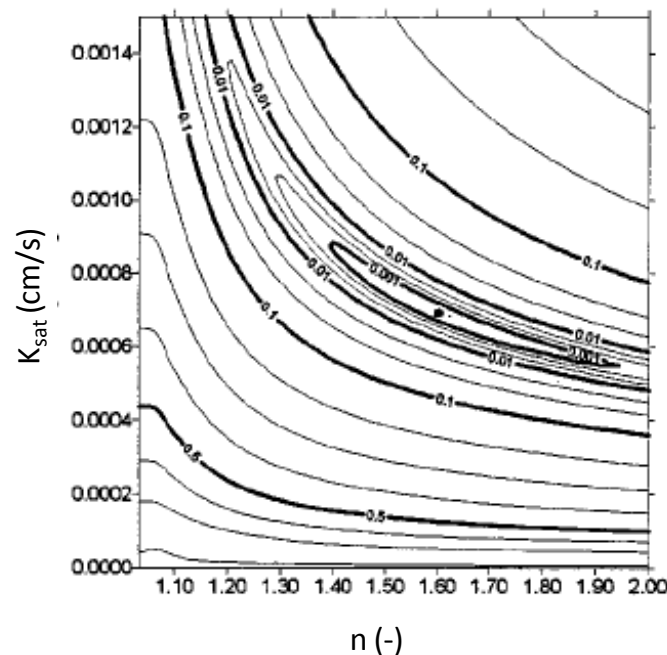


Figura 5 - Função objetivo com a variável dependente carga no plano $K_{sat} \times n$, Simunek, 1996

⁶ Detalhes em Hollenbeck & Jensen (1998).