



CENTRO UNIVERSITÁRIO SENAI CIMATEC
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO STRICTO SENSU EM MODELAGEM
COMPUTACIONAL E TECNOLOGIA INDUSTRIAL
Doutorado em Modelagem Computacional e Tecnologia Industrial

Tese de Doutorado

**Análise de sistema complexo de infiltração utilizando um novo GSA-híbrido para
calibração automática aplicado à construção civil**

Apresentada por: Domingo Stalin Aguero Martinez
Orientador: Prof. Dr. Marcelo Albano Moret Simões Gonçalves
Coorientador: Prof. Dr. Thiago Barros Murari

Salvador, 2021

Domingo Stalin Aguero Martinez

**Análise de sistema complexo de infiltração utilizando um novo GSA-híbrido para
calibração automática aplicado à construção civil**

Tese de doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Modelagem Computacional e Tecnologia Industrial, Curso de Doutorado em Modelagem Computacional e Tecnologia Industrial do CENTRO UNIVERSITÁRIO SENAI CIMATEC, como requisito parcial para a obtenção do título de Doutor em Modelagem Computacional e Tecnologia Industrial.

Área de conhecimento: Interdisciplinar

Orientador: Prof. Dr. Marcelo Albano Moret Simões
Gonçalves

Coorientador: Prof. Dr. Thiago Barros Murari

Centro Universitário SENAI CIMATEC

Salvador

Centro Universitário SENAI CIMATEC

2021

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca do Centro Universitário SENAI CIMATEC

M385a Martinez, Domingo Stalin Agüero

Análise de sistema complexo de infiltração utilizando um novo GSA-híbrido para calibração automática aplicado à construção civil / Domingo Stalin Agüero Martinez. – Salvador, 2021.

85 f. : il. color.

Orientador: Prof. Dr. Marcelo Albano Moret Simões Gonçalves.

Coorientador: Prof. Dr. Thiago Barros Murari.

Tese (Doutorado em Modelagem Computacional e Tecnologia Industrial) – Programa de Pós-Graduação, Centro Universitário SENAI CIMATEC, Salvador, 2021. Inclui referências.

1. Infiltração. 2. Algoritmo GSA-híbrido. 3. Algoritmo genético. 4. Calibração. I. Centro Universitário SENAI CIMATEC. II. Gonçalves, Marcelo Albano Moret. III. Murari, Thiago Barros. IV. Título.

CDD 620.00113

Centro Universitário SENAI CIMATEC

Doutorado em Modelagem Computacional e Tecnologia Industrial

A Banca Examinadora, constituída pelos professores abaixo listados, leu e aprovou a Tese de doutorado, intitulada “Análise de sistema complexo de infiltração utilizando um novo gsa-híbrido para calibração automática aplicado à construção civil”, apresentada no dia 30 de novembro de 2021, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de Doutor em Modelagem Computacional e Tecnologia Industrial.

Orientador:

DocuSigned by:



ADA429E9E2B549F...

Prof. Dr. Marcelo Albano Moret Simões Gonçalves
SENAI CIMATEC

Coorientador:

DocuSigned by:



744BEED0A978446...

Prof. Dr. Thiago Barros Murari
FORD

Membro Interno:

DocuSigned by:



A548CA0EB0D84DA...

Prof. Dr. Alex Alisson Bandeira Santos
SENAI CIMATEC

Membro Interno:

DocuSigned by:

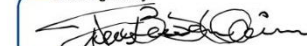


68B2562CA9FC4D1...

Prof. Dr. Ivan Costa da Cunha Lima
SENAI CIMATEC

Membro Externo:

DocuSigned by:




6C9719DD1D4F4AF...

Prof. Dr. Francisco Bruno Souza Oliveira
UESC

Membro Externo:

DocuSigned by:



1CD7112EFD69472...

Prof. Dr. Kleber Carlos Mundim
UNB

AGRADECIMENTOS

Meus agradecimentos ao SENAI-CIMATEC, excelente instituição, arrependo-me não haver conhecido muito antes. Agradeço ao professor Marcelo Moret por sua excelente orientação e amizade. Agradeço ao professor Thiago Murari pela excelente orientação e amizade. Agradeço ao professor Renelson Sampaio pela excelente ajuda nas disciplinas, publicação e amizade. Agradeço ao professor Aloísio pela ajuda no cumprimento de Tirocínio Docente e amizade. Agradeço a Julie pela ajuda e acompanhamento do começo (quando eu estava em outro estado e fui atendido pelo telefone e e-mails) até o final da obtenção da minha titulação. Agradeço ao professor Alex, sendo o primeiro em me atender ao telefone dando-me as boas vindas à instituição. Agradeço aos professores da instituição que contribuíram na minha formação acadêmica. Foram muitas dúvidas e incertezas na minha luta. Vinha de vivenciar várias frustrações acadêmicas. Mas, encontrei no SENAI-CIMATEC verdadeiros profissionais e amigos. Agradeço a minha esposa Rosita e meu filho David. Eles são a minha fonte de forças e inspiração. Agradeço a Deus por me dar a vida e inteligência suficiente para poder desenvolver este texto.

Domingo Stalin Aguero Martinez

Salvador, Brasil

23 de dezembro de 2021

RESUMO

Dentre os diversos sistemas complexos que vivenciamos a cada dia, encontra-se o fenômeno físico da infiltração. A infiltração é considerada como a dinâmica de fluxo de água no solo subsuperficial que neste trabalho é enquadrada para o contexto da construção civil. Este tema é abordado com o uso de modelos matemáticos e técnicas estocásticas, no entanto, encontram-se empecilhos para a coleta de amostras e dados em campo, a adoção de tipo de escala, mudanças entre as camadas de solo, características anisotrópicas do meio do solo, entre outros. Neste estudo, foram desenvolvidos e utilizados métodos que tratam os valores de dados de amostragem, como o modelo retrô, modelo constitutivo e algoritmos de otimização. Especialmente, dentre os Algoritmos de Otimização existentes encontram-se os Algoritmos Genéticos, o Algoritmo de Recozimento Simulado (*Simulated Annealing*) e sua generalização (*GSA - Generalized Simulated Annealing*). Neste trabalho, apresenta-se uma visão geral sobre esses métodos de otimização e uma proposta de algoritmo mais eficiente e de maior rapidez chamado GSA-híbrido que baseia-se na técnica de gradiente convergente. A estratégia utilizada dependerá do tipo de estudo de caso utilizado considerando suas propriedades físicas. Nesse sentido, encontra-se que enquanto os Algoritmos Genéticos conseguem replicar a superfície de otimização, o GSA é bem mais adequado na caracterização do sistema a um custo computacional extremamente baixo. No entanto, a técnica proposta de GSA-híbrido resultou ser mais rápida que as anteriores técnicas. Pesquisas futuras serão necessárias no algoritmo GSA-híbrido devido a sua grande adaptabilidade e maior rapidez computacional, assim como, seu estudo na aplicação a outros estudos de caso.

Palavras-Chave: Infiltração, Algoritmo GSA-híbrido, Algoritmo GSA, Algoritmo Genético, Calibração, Curva Característica.

ABSTRACT

Among the various complex systems that we experience each day, there is the physical phenomenon of infiltration. Infiltration is considered as the dynamics of water flow in the subsurface soil that in this work is framed for the context of civil construction. This issue is approached with the use of mathematical models and stochastic techniques, however, there are hardships in collecting the samples in the field, the adoption of a scale type, the influence in soil layers interfaces, the effects of soil anisotropic characteristics and so on. In this study, methodology is proposed to deal with the soil sampling input such as the retro model, constitutive model and optimization algorithms. Especially among the existing Optimization Algorithms there are Genetic Algorithms, the Simulated Annealing Algorithm and its generalization (GSA - *Generalized Simulated Annealing*). This work presents an overview of these optimization methods and a proposal for a more efficient and faster algorithm called GSA-hybrid based on convergence gradient technique. The applied strategy depends on the type of case study considering its physical properties. In this sense, it is found that while Genetic Algorithms are able to replicate the optimization surface, GSA is much more adequate in characterizing the system at an extremely low computational cost. Nevertheless, the proposed technique GSA-hybrid performed the fastest. Further research is necessary to implement the novel GSA-hybrid algorithm due to its flexibility and higher speed, also, studying its application at different case studies.

Keywords: Infiltration, GSA-hybrid Algorithm, GSA Algorithm, Genetic Algorithm, Calibration, Characteristic Curve.

LISTA DE FIGURAS

Figura 3.1 – Fluxograma dos Algoritmos Genéticos.....	24
Figura 3.2 – Diagrama de fluxo dos AG associado à técnica inversa aplicado ao modelo SWAP para um processo de calibração automática.....	26
Figura 4.1 – Diagrama esquemático do experimento.....	32
Figura 4.2 – Detalhes do experimento, com vazão constante igual a 14,8 cm/h.....	33
Figura 4.3 – Curva de retenção da água no solo.....	34
Figura 4.4 – Posição do nível freático em diferentes tempos. As linhas intermitentes indicam os níveis freáticos observados por Vauclin et al. (1979). As linhas sólidas representam os níveis freáticos modelados por Vauclin et al. (1979).....	35
Figura 4.5 – Limiares superior e inferior de busca AG e os dados observados do experimento de Vauclin et al. (1979).....	36
Figura 4.6 – Malha adotada para simulação numérica aplicada ao experimento de VAUCLIN et al. (1979), apresenta-se os pontos de controle.....	38
Figura 4.7 - Fluxograma do modelo de processo de calibração proposto via modelo matemático com auxílio dos Algoritmos de Otimização.....	41
Figura 5.1- Função ACKLEY com vários ótimos locais e um ótimo global.....	42
Figura 5.2 - Comparação de resultados do AG e GSA para a função matemática ACKLEY.....	43
Figura 5.3- Resultados do GSA híbrido para a função matemática ACKLEY. (a) mostra o resultado da Função Objetivo em relação ao tempo e (b) apresenta o resultado da Função Objetivo em relação ao espaço.....	44
Figura 5.4- Convergência de valores da Função Objetivo em relação ao tempo do modelo físico utilizando os Algoritmos Genéticos e o Algoritmo GSA.....	45
Figura 5.5- Convergência da Função Objetivo em relação ao tempo do modelo físico utilizando o Algoritmo GSA-híbrido.....	46
Figura 5.6 - Comparação da curva de retenção da equação de van Genuchten (1980), denominada “curva AG” representada por pontos contra a curva de retenção obtida por Vauclin et al. (1979), denominada de “curva VAUCLIN”, “curva GSA” e “curva GSA-híbrido”.....	49
Figura 5.7 - Localização dos pontos de controle e níveis de lençol freático em diferentes tempos representados em : linhas tracejadas, “modelo de Vauclin”, “Algoritmo	

GSA”, “Algoritmo GSA-híbrido” e em linha sólida “Algoritmo AG”. Escala em cm.....	50
Figura A.1 - Malha bi-linear com variação em uma dimensão espacial e uma dimensão temporal.....	59
Figura A.2 – Elemento triangular do MEF e as funções de forma lineares para elementos triangulares.....	61
Figura A.3 – Ponto quatro dentro do elemento triangular onde será interpolado o valor de potencial matricial global.....	62

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1 – Parâmetros do MVG de diferentes tipos de solo determinados por van Genuchten (1980).....	17
Tabela 4.1 – Valores dos parâmetros do MVG correspondentes ao limiar superior e inferior da figura 4.5.....	36
Tabela 4.2 – Faixa de valores maior e menor definitivos utilizados para o processo de busca.....	37
Tabela 5.1 - Comparação de tempo de cômputo dos algoritmos de otimização.....	46
Tabela 5.2 - Comparação dos valores simulados obtidos pelos Algoritmos de Otimização contra os valores obtidos experimentalmente por VAUCLIN et al. (1979).....	48
Tabela B1 - apresenta-se 48 pontos de pares ordenados umidade volumétrica contra potencial matricial.....	72

LISTA DE SIGLAS

- [Amn] - Matriz Fluxo (equação 4.6) matriz que isola o elemento de fluxo chamado também condutância
- A* - coeficiente da equação característica de condutividade hidráulica do modelo de Vauclin et al. (1979)
- AG - algoritmos genéticos
- Am241- fonte de raios gamma
- {Bn} - $\overline{VazãoGravita}$ (equação 4.6) é a matriz de fluxo devido ao potencial gravitacional
- B* - coeficiente da equação característica de condutividade hidráulica do modelo de Vauclin et al. (1979)
- C - capacidade de umidade específica (L^{-1})
- D(θ) - difusividade ($L T^{-1}$)
- [Fmn] - $\overline{Matriz Retenção}$ (equação 4.6) é a matriz de capacidade de retenção ou armazenamento dentro do domínio
- FO - função objetivo (adimensional)
- K - condutividade hidráulica ($L T^{-1}$)
- K(θ) - condutividade hidráulica em função da umidade volumétrica ($L T^{-1}$)
- Ksat - condutividade hidráulica saturada ($L T^{-1}$)
- Kz_i^j - a condutividade hidráulica na direção z, no tempo j, no ponto i (L/T)
- Kx_i^j - a condutividade hidráulica na direção x, no tempo j, no ponto i (L/T);
- Kz_{sat} - a condutividade hidráulica do solo saturado na direção z (L/T);
- Kx_{sat} - a condutividade hidráulica do solo saturado na direção x (L/T);
- L - distância percorrida pelo fluxo da água (L)
- L - operador diferencial
- MDF - método de diferenças finitas
- MEF - método dos elementos finitos
- MIN FO - Minimização da função objetivo
- MVG - modelo de van Genuchten (1980)
- m - coeficiente adimensional da equação de van Genuchten
- NN - número de nós do elemento
- n - coeficiente adimensional da equação de van Genuchten

n - número total de pontos de controle em função do tempo

$Pi_{Observado}$ - o valor de potencial matricial medido experimentalmente no ponto de controle i em relação ao tempo e ao espaço

$Pi_{Simulado}$ - o valor de potencial matricial simulado no ponto de controle i em relação ao tempo e ao espaço

$\{Q_n\}$ - $\overline{Vazões\ Nodais}$ (equação 4.6) é a matriz do fluxo através do contorno

q - fluxo da água no solo saturado (LT^{-1})

QG - quadratura de gauss

SWAP - *Soil Water Atmosphere and Plant model* - do Inglês

TDR - *Time Domain Reflectometry* – do Inglês

w - coeficiente de ponderação no tempo

α - coeficiente da equação de retenção de água no solo de Vauclin et al. (1979)

α - fator empírico da equação de van Genuchten (L^{-1})

β^* - coeficiente da equação de retenção de água no solo de Vauclin et al. (1979)

Δt - acréscimo do tempo (T)

Δz - acréscimo da profundidade (L)

θ - umidade volumétrica (L^3L^{-3})

θ_i^j - umidade volumétrica, no tempo j e no ponto i (L^3L^{-3})

θ_{sat} - umidade do solo saturado (L^3L^{-3})

θ_{res} - umidade residual (L^3L^{-3})

$\{\Psi_m\}$ - vetor com o valor de potenciais matriciais em todos os nós

Ψ - potencial matricial (L)

Ψ_i^j - representa o potencial matricial no tempo j e no ponto i (L)

SUMÁRIO

1 – INTRODUÇÃO	1
2 – OBJETIVOS	9
2.1 – OBJETIVO GERAL	9
2.2 – OBJETIVOS ESPECÍFICOS	9
3 – REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	9
3.1 – DEFINIÇÕES DE PARÂMETROS E VARIÁVEIS	9
3.2 – EQUAÇÃO DIFERENCIAL QUE GOVERNA O FLUXO DE ÁGUA EM SOLO NÃO SATURADO	10
3.3 – MODELOS CONSTITUTIVOS E EQUAÇÕES DE RETENÇÃO	13
3.3.1 – Modelo de van Genuchten (1980) – MVG	14
3.4 – CONCEITOS DE MODELO E CALIBRAÇÃO	16
3.4.1 – Identificação das variáveis, parametrização	16
3.4.2 – Modelo inverso	17
3.5 – ALGORITMOS COMPUTACIONAIS	20
3.5.1 – Os algoritmos genéticos	20
3.5.2 – Algoritmo de recozimento simulado generalizado (<i>Generalized Simulated Annealing</i>)	28
3.5.3 – Algoritmo híbrido inovador do <i>Generalized Simulated Annealing</i>, GSA-híbrido	31
4 – METODOLOGIA	32
4.1 – ESTUDO DE CASO INFILTRAÇÃO	32
4.1.1 – Estabelecimento da Função Objetivo	38
4.2 – PROCESSO MATEMÁTICO	39
4.2.1 – Esquema do processo de calibração do modelo	40
5 – RESULTADOS E DISCUSSÕES	41
5.1. TESTE DOS ALGORITMOS DE OTIMIZAÇÃO APLICADOS EM FUNÇÃO MATEMÁTICA	41

5.2. APLICAÇÃO DOS ALGORITMOS DE OTIMIZAÇÃO AO ESTUDO DE CASO DE INFILTRAÇÃO.....	44
6 – CONCLUSÕES.....	50
REFERÊNCIAS.....	53
APÊNDICES.....	57
A – MODELO MATEMÁTICO DO FLUXO DA ÁGUA EM SOLO NÃO SATURADO.....	58
A.1 – DISCRETIZAÇÃO TEMPORAL.....	58
A.2 – DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL.....	59
A.2.1 – Interpolação dentro de um elemento finito.....	60
A.3 – EQUAÇÕES BÁSICAS DO MODELO DE NEUMAN E INTEGRAÇÃO POR ELEMENTOS LINEARES.....	62
A.3.1 – Esquema da matriz [F].....	65
A.4 – INTEGRAÇÃO NO TEMPO.....	65
A.4.1 – O esquema de Picard.....	65
A.4.2 – O esquema de Newton-Raphson.....	67
A.4.3 – Integração numérica utilizando a quadratura de gauss.....	69
B - CÁLCULO POR MÍNIMOS QUADRADOS DO AJUSTE DA EQUAÇÃO DE VAUCLIN.....	70

1 – INTRODUÇÃO

Os sistemas complexos contornam nossa vida e atividades diárias, entre outros encontram-se, a temperatura, o tempo, o vento, a eletricidade, a luz, a chuva e a infiltração da água, todos esses fatores que mesmo em construções civis bem planejadas sempre foram motivo de sérias patologias e grandes despesas para o ramo da construção. Em particular, o entendimento de infiltração da água no solo auxilia no planejamento de redes de irrigação e drenagem urbana, no campo da ciência agrícola, entre outros, sustentando os possíveis julgamentos e/ou as tomadas de decisões de gestores (SIHAG et al., 2018; KUMAR et al., 2019; WANG et al., 2018, D'ANIELLO et al., 2019).

O fenômeno físico de infiltração fundamenta-se na dinâmica de fluxo de água no solo não saturado que origina avanço da frente de umidade nesse meio acabando na transitoriedade do lençol freático. O estudo desse fenômeno físico complica-se, pois, entre outras dificuldades, destaca-se que as coletas de amostras ou dados observados em campo em solos não saturados são de difícil obtenção sendo que encontram-se debaixo da superfície não sendo possível chegar até essas amostras sem alterar suas condições naturais (TEIXEIRA et al., 2006). Para contornar esse problema utilizam-se técnicas de reflectometria no tempo (*Time Domain Reflectometry – TDR*) que tem como vantagens a não destruição da amostra e não perturba o seguimento da frente de avanço de umidade no solo. Contudo, esses dados coletados são afetados gravemente pelo tipo de escala e as diversas camadas de solo.

Constata-se que os experimentos que adotam uma escala maior e diversas camadas de solo encontram entraves na simulação do fenômeno físico de infiltração, em especial, a frente de avanço de umidade sofre perturbações quando encontra camadas diferentes de solo, sendo afetada sensivelmente pelos valores baixos de condutividade hidráulica de solo não saturada. Entretanto, a sensibilidade que demonstram os parâmetros dos modelos constitutivos diante de experimentos em escala maior e com diferentes camadas de solo complicam a calibração automática e para tanto a obtenção de parâmetros simulados (GVIRTZMAN et al., 2007).

Adicionalmente, comprova-se que as características anisotrópicas do meio do solo influenciam no sistema de infiltração de águas pluviais, uma vez que, essas propriedades de heterogeneidade dependem da localização do lençol freático e a variabilidade da região da zona não saturada. Identifica-se que esses efeitos da heterogeneidade do solo e sua influência nos cálculos numéricos continuam sendo estudados até a atualidade, atingindo algumas conclusões

como que independentemente de se o solo é heterogêneo ou não, a uma determinada profundidade, o volume de água infiltrado segue uma lei de potência em crescimento enquanto que a taxa de infiltração segue uma lei de potência em decaimento (D'ANIELLO et al., 2019).

Para contornar essas dificuldades justifica-se, para fins de comparação de dados obtidos e dados simulados, a escolha de um estudo de caso em laboratório em escala menor. Desse modo, o solo é considerado homogêneo e bem classificado, com propriedades hidráulicas bem caracterizadas, considerando-se apenas uma camada de solo. Com isso, os ruídos ou incertezas foram minimizadas, o que facilitaria a constatação de resultados de simulação do fenômeno de infiltração (VAUCLIN et al., 1979).

No que tange à modelagem do fenômeno de infiltração estabeleceu-se uma equação diferencial parcial chamada “equação de Richards” que descreve o processo de infiltração, contudo, ressalta-se que se trata de uma função altamente não linear com o paradoxo de que os parâmetros estão em função das variáveis (RICHARDS, 1931, WANG et al., 2018; AGUERO-MARTINEZ et al., 2019). Dessa forma, a resolução dessa equação de Richards simula os valores dos parâmetros de teor de umidade volumétrica e potencial matricial que são valores de maior dificuldade de obtenção quando comparados aos dados coletados na zona superficial. No entanto, para auxiliar na resolução dessa equação de Richards foram adotados modelos matemáticos heurísticos, entre outros, os modelos constitutivos e o modelo inverso (DE CARLO et al., 2018; JAH E DATTA, 2018).

Os modelos constitutivos iniciaram-se associando tanto a umidade volumétrica como o potencial matricial do solo não saturado em um modelo experimental denominado de método de efluente de disco de pressão. Neste modelo, a pressão do ar foi acrescentada a uma amostra de solo saturado medindo os respectivos efluentes. Dessa maneira foi estabelecida a chamada curva de retenção de água no solo, ou também conhecida como curva característica. (Gardner, 1956). Esses estudos progrediram ao ponto de desenvolver várias correlações de curvas características com suas respectivas equações, sendo o modelo de van Genuchten um dos mais reconhecidos na literatura e que será utilizado no presente trabalho. (VAN GENUCHTEN, 1980, D'ANIELLO et al., 2019).

Como mencionado, outro modelo matemático que auxilia na resolução da equação de Richards é o modelo retrô ou modelo inverso, que consiste em atribuir os valores dos parâmetros do modelo arbitrariamente até atingir como resultado os valores observados em campo. Essa técnica, bem reconhecida na literatura, avalia as propriedades hidráulicas dos solos por tentativa e erro ajustando-se os resultados simulados aos dados obtidos em campo ou

experimentalmente como no caso do efluente multipasso (HOUWELING et al., 2017; PAPAFOTIOU et al., 2008; RAMOS et al., 2006).

Por um lado, essas equações de retenção da água no solo foram utilizadas unidimensionalmente, sendo o Modelo de Infiltração de Philips a primeira solução analítica da equação de Richards, ajudando a elucidar não apenas o fluxo de água em solo não saturado senão também o processo de sorção. (PHILIPS 1957a, 1957b). Entretanto, resulta difícil validar esses resultados do modelo de Philips para simulações 3D devido à complexidade dos problemas considerados, à escassez de bons laboratórios ou dados de campo e à falta de conhecimento relacionado às propriedades hidráulicas. Salienta-se que com o intuito de atingir o estudo real de um sistema complexo urge considerar o domínio em dimensões espaciais e não limitadamente como foi inicialmente considerado como fenômeno unidirecional gravitacional (WANG et al., 2018, D'ANIELLO et al., 2019).

Reconhece-se que o ajuste de correlação que existe entre o equacionamento altamente não linear, parâmetros, variáveis, dados coletados, todos esses confinados em um hipercubo em que atuará o modelo matemático imposto, precisa de uma complexa técnica de calibração. Ao longo dos anos, constatou-se que as técnicas de calibração nos modelos supramencionados deflagraram em intensa pesquisa na literatura, começando da calibração manual até o advento de computadores eletrônicos que deu origem à calibração automática. No seguimento desta linha de pesquisa de calibração automática, percebeu-se que diversos autores adotaram os algoritmos estocásticos no ajuste do modelo para um ótimo global, sendo, entre outros, os Algoritmos Genéticos um dos pioneiros (HOLLAND, 1962, 1975, 1992; GOLDBERG, 1989).

O conceito dos Algoritmos Genéticos (AG) começou no campo da biologia partindo da premissa de evolução e desenhando um plano adaptativo do ser vivo ao seu meio ambiente ao longo de gerações. Concebeu-se um sistema adaptativo artificial simples para simular um sistema adaptativo natural complexo ou não linear mediante uma estrutura formal e operadores acurados. Como um caso específico, dentre outros, estabeleceu-se que os sistemas complexos genéticos (fenótipos), com uma estrutura em cromossomos e operadores de mutação, recombinam-se funcionando como alelos, e assim por diante.

Ideou-se um controle e otimização de uma função, considerando um sistema nervoso central artificial e agentes adaptativos (economia, sistemas políticos, ecologia, sistema imune, entre outros). Debruçou-se em conceitos de esquemata e a localização de um ótimo mediante aprendizado (tentativa e erro) e a inteligência artificial (busca randômica). Estabeleceu-se que os algoritmos genéticos trabalham com populações e para tanto embutiu no seu plano

reprodutivo diferentes tipos de operadores genéticos, entre outros, o de cruzamento, o de inversão, o de mutação (HOLLAND, 1962, 1975, 1992).

No decorrer dos anos os AG passaram para aplicações em engenharia, quer seja inicialmente à indústria de gasodutos (GOLDBERG, 1989). Aperfeiçoou-se os AG no que tange ao melhor desempenho em um tempo limitado razoável, para isso, atentou-se ao desenvolvimento de outros tipos de operadores como foram: a técnica de roleta, entre outros. Utilizou-se como característica principal o aspecto randômico de maneira direcionada, isto é, explorando eficientemente a informação histórica de resultados com sucesso para especular em novos pontos com expectativa de uma boa performance. Os algoritmos genéticos distinguiram-se pela característica de ser robustos na procura do ótimo global através das procuras randômicas (GOLDBERG, 1989).

Os Algoritmos Genéticos (AG) foram aplicados à drenagem de água urbana para compreender o comportamento de modelos hidrodinâmicos adotados para a quantificação de risco em sistemas de drenagem urbana atendendo à sazonalidade de um evento de chuva crítico (KUMAR et al., 2019). Nesses estudos de caso, os AG foram aprimorados especialmente no uso dos operadores randômicos para computar e recombinar os cromossomos para gerar novas entidades melhoradas no decorrer do ajuste do modelo. Claro está que foi relevante também a escolha do tipo de modelo matemático utilizado que seja capaz de representar as dificuldades do sistema complexo físico real. Quando comparados a outros algoritmos de otimização os AG apresentaram um melhor desempenho na obtenção de um melhor ajuste dos valores de parâmetros, o uso de um menor número de iterações requeridas e um custo computacional menor. O conceito meta-heurístico se encontra embutido inerentemente, no entanto, na medida que, seja que aumente a complexidade do modelo, seja que aumentem os tipos de algoritmos de otimização, seja que aumente o poder computacional, assim também será aprimorado a análise do sistema complexo natural considerado (KUMAR et al., 2019).

Os Algoritmos Genéticos foram utilizados no campo hidrológico e da agricultura. Nessa experiência, os AG foram associados ao modelo de infiltração de Philip estudando o fenômeno de infiltração na direção vertical. Utilizaram-se o critério de séries de perturbação ao redor do processo de sorção plasmado na equação de modelo de dois termos de infiltração de Philip definindo assim a parametrização do modelo a serem calibrados. No entanto, o modelo de Philip apesar de ser apreciavelmente reconhecido na literatura, encontra-se confinado ao estado unidirecional, e assim, não concebe a realidade do sistema complexo do fenômeno de infiltração (WANG et al., 2018).

Utilizaram-se os Algoritmos Genéticos para calibração do fenômeno de sedimentação, utilizando volumes finitos, ajustando uma função objetivo de mínimos quadrados entre os dados observados e os simulados. Aplicou-se a equação de transporte de fluxo de água, caracterizando-se pela sua alta não linearidade. Dentre os dados observados foram determinados a concentração de sólidos ao longo do tempo e como principal parâmetro o fluxo de água considerada temporalmente. Propuseram-se uma variante da técnica tradicional dos algoritmos genéticos denominada de Algoritmo Genético Contínuo que se enquadra em uma grande aplicação para os dados sintéticos (BERRES et al., 2018).

Utilizaram-se os AG para calibração em Sistemas de Abastecimento de Água com o intuito de otimizar custos energéticos. O modelo foi um caso em escala maior localizado na cidade de Ourém (Portugal). Os AG desempenharam uma diminuição do tempo computacional em relação aos outros modelos (COSTA et al., 2010). À continuação, neste trabalho, propõem-se o uso da estratégia estocástica para o ajuste de parâmetros baseado no *Generalized Simulated Annealing* - GSA.

O conceito de GSA começou ao descobrir-se que existe uma íntima conexão da mecânica estatística, ou seja, o comportamento de sistemas com muitos graus de liberdade que atingem o equilíbrio térmico em uma temperatura de congelamento, e a otimização combinatorial ou multivariada (KIRKPATRICK, et al., 1983). Um exemplo da mecânica estatística encontra-se no recozimento (*annealing*) em metais que para determinar a menor temperatura de estado de um material deve ter um recozimento cuidadoso, pelo que guarda similitude com o problema de otimização (KIRKPATRICK, et al., 1983). A disponibilização de uma temperatura apropriada ao sistema conduz a um processo de recozimento simulado vantajoso em obter soluções heurísticas ao problema de otimização. A técnica de iteração melhora conforme o processo de rearranjo microscópico seja modelado pela mecânica estatística tendo como função de custo a minimização da energia.

Para evitar o resfriamento rápido foi utilizada a técnica de METROPOLIS et al. (1953) que provê uma simulação eficiente para o conjunto de átomos em equilíbrio para uma determinada temperatura, conseguindo a simulação de recozimento. Segundo esse procedimento, em cada passo de algoritmo equivale a um deslocamento arbitrário do átomo com resultantes mudanças da função objetivo ou energia do sistema. Se o valor de desempenho da função custo for menor que o valor anterior então é aceito como novo valor, mas quando esse valor calculado for maior que o anterior esse é aceito com a probabilidade determinada pela estatística de quase-equilíbrio de Boltzmann-Gibbs e utilizando a distribuição gaussiana

denominando-se a todo este processo de recozimento simulado clássico (*Classical Simulated Annealing* - CSA) ou máquina de Boltzmann (KIRKPATRICK, et al., 1983).

Dentre as primeiras aplicações do CSA encontram-se o desenho físico dos computadores e o problema clássico do “caixeiro viajante”. Em ambos os casos foram abordados os problemas com dois conceitos filosóficos: “divide e vencerás” e iteração progressiva. No primeiro conceito trata-se da partilhação em subsistemas do inteiro domínio para executar em cada subsistema o algoritmo e se houver sucesso ir progredindo para outros subsistemas até atingir o ótimo global. No segundo, existe um rearranjo melhorado do sistema para reiniciar a iteração com base ao melhor vetor resposta obtido de algum ótimo local e, dessa forma, continuar a iteração progressivamente conseguindo assim o mínimo absoluto da função objetivo (KIRKPATRICK et al., 1983).

Na sequência, o algoritmo CSA desenvolveu uma melhora quando foi utilizada uma distribuição visitante Cauchy-Lorentz em vez da distribuição visitante gaussiana, procedimento conhecido como o recozimento simulado rápido (*Fast Simulated Annealing* - FSA) (SZU e HARTLEY, 1987). Essa técnica realiza uma pesquisa semi-local consistindo em saltos longos ocasionais. Outra característica dessa técnica é que o processo de resfriamento do algoritmo FSA é inversamente linear no tempo, o que é rápido em comparação com o recozimento simulado clássico (CSA), que é estritamente uma busca local e requer que a programação de resfriamento seja inversamente proporcional à função logarítmica do tempo. Esta técnica foi denominada de Máquina de Cauchy (SZU e HARTLEY, 1987).

Em uma aplicação em multifractais, foi proposto uma entropia generalizada que depende de uma probabilidade de configuração microscópica (TSALLIS, 1988). À continuação, efetuou-se a otimização dessa entropia empregando uma forma canônica dependendo de parâmetros de Lagrange e espectro de energia. Para isso, o procedimento de recozimento simulado foi generalizado para as duas distribuições já mencionadas, isto é, a distribuição de visita gaussiana de Boltzmann-Gibbs (máquina de Boltzmann) e a distribuição de visita de Cauchy-Lorentz (máquina de Cauchy). Adotou-se um valor do parâmetro chamado índice de visita qV que se assume o valor de 1 acaba na estatística de Boltzmann-Gibbs e se esse índice qV é atribuído o valor de 2 acaba na estatística de Cauchy. Desse modo, ambos os recozimentos foram enquadrados na mecânica estatística generalizada de Tsallis denominada de máquina de Tsallis. Com isso, a técnica proposta foi denominada de recozimento simulado generalizado (*Generalized Simulated Annealing* - GSA) (TSALLIS, 1988, TSALLIS e STARIOLO, 1996).

Foi proposta uma forma analítica para a obtenção dos parâmetros do algoritmo GSA utilizando-se a integração numérica. Isso incrementou a velocidade do algoritmo de otimização comparado aos métodos convencionais da máquina de Boltzmann e a Máquina de Cauchy (MORET et al., 1998).

Nestes últimos anos outros avanços foram desenvolvidos no GSA, assim, o parâmetro chamado índice de temperatura qT foi estabelecido independente dos outros parâmetros de probabilidade de aceitação qA e índice de visita qV sendo ao todo três parâmetros. Adicionalmente, o passo de avanço de iteração da visitação foi calculado diretamente da função distribuição de visitação em vez de integrá-la numericamente. Adicionalmente, foram propostas a utilização de uma função de distribuição modificada. Assim mesmo, foi estabelecida uma convergência híbrida que quando o GSA chega perto de um ótimo devido a seu poder de “pulo” longo, seja local ou global, imediatamente aplica-se a técnica de gradiente convergente atingindo ao valor do ótimo seja local ou global (DA SILVA, 2005; DE ANDRADE et al., 2008).

Devido a essas desejáveis características de rapidez computacional é que esta técnica GSA foi utilizada para o estudo do fenômeno de infiltração como proposto neste trabalho. Também, propõe-se adaptar uma técnica de gradiente conjugado convergente ao algoritmo GSA analisando seus efeitos e comparando seus resultados contra outro algoritmo de otimização. Até o momento não se reporta na literatura a utilização do GSA em problemas de infiltração abrangendo a construção civil. No entanto, quando foi aplicado a outros cenários da ciência, o GSA provou-se ser extremamente rápido.

O GSA foi utilizado na otimização estrutural de moléculas e macromoléculas onde foram determinados os valores mínimos de energia de superfície, utilizando um campo de força molecular clássico. Com base nos resultados obtidos desses valores mínimos, concluiu-se que a técnica de GSA utilizando a integração numérica é mais rápida demorando poucos minutos para obter os valores simulados, enquanto que usando o GSA tradicional demoraram vários dias (MORET et al., 1998).

O GSA foi utilizado no campo da biologia no quesito da dinâmica molecular sendo comparado a outras técnicas de otimização como foram a metadinâmica e a troca de réplicas. O GSA resultou ser o mais conveniente tanto na caracterização do sistema como no investimento em tempo computacional (BERNARDI et al., 2015).

No campo da química, o GSA foi utilizado no estudo sobre a estabilidade do complexo Kr-CH₃OH (Krypton-Metanol) considerando diversas teorias em relação às interações

eletrostáticas e intermoleculares. Nesse processo, destacou-se a importância do procedimento de rotação e vibração onde um parâmetro, chamado parâmetro de forma, foi otimizado. Para isso, o GSA recebeu implementações das técnicas de gradiente simplex e o método de Levenberg-Marquardt. Na sequência, concluiu-se, entre outras colocações, que aquele complexo Krypton-Metanol resulta ser estável (AQUINO et al., 2018).

Novamente, no campo da biologia, o GSA foi utilizado para a predição da estrutura tridimensional da proteína. Este processo baseou-se na minimização da energia e na técnica inversa da função de visita do GSA. Com isso, deu-se um grande avanço para utilizar os métodos computacionais em vez dos métodos experimentais. O método experimental é devagar e caro, enquanto que os métodos computacionais dependem apenas de estruturas previamente conhecidas tornando-se mais rápida e barata (MELO et al., 2012).

Ainda no campo da química, com base no procedimento híbrido do GSA, o gradiente Simplex e o método de Levenberg-Marquardt, o coeficiente de função de Rydberg foi otimizado. Com esse coeficiente ajustado calculou-se as propriedades dinâmicas, as constantes espectroscópicas e os níveis de energia rotação-vibração do sistema. Esse sistema baseia-se em cálculos da *Density Functional Theory* (DFT) e a equação nuclear de Schrödinger utilizando um método de representação de variável discreta para modelar a interação amônia com *metallo-phthalocyanines* visando o desenho de sensores químicos. Dentre as conclusões está que o *Phthalocyanine metal complexes* - MPC obtêm melhor performance para os sensores de amônia (BAGGIO et al., 2017).

No campo da física, o GSA foi modificado e utilizado para a determinação de uma nova base de dados atômicos dupla seta para cálculos eletrônicos atômicos de Li e Be. Para isso foi otimizada uma funcional de energia atômica eletrônica. Testaram-se essas novas bases realizando cálculos da energia do estado fundamental do átomo Be, entre outros testes, com razoáveis resultados de valores simulados comparados aos valores experimentais (SOBRINHO et al., 2014).

Sendo que a literatura enquadra adequadamente os algoritmos de otimização abordados, este trabalho enfoca como objetivo principal resolver o problema de otimização de sistemas complexos de infiltração de água em zona vadosa. Dentre os objetivos específicos a tratar colocam-se: entender o funcionamento dos Algoritmos de Otimização e compreender melhor as propriedades físicas do estudo de caso à luz da simulação do fenômeno físico de infiltração de água em zona vadosa.

Este trabalho está organizado como segue: a seção dois objetivos, a seção três revisão bibliográfica, a seção quatro metodologia que descreve a maneira de abordar as equações que governam o fluxo de infiltração em meio não saturado, os algoritmos utilizados e suas características atinentes. Adicionalmente, nessa seção quatro será explicitada a técnica do GSA-híbrido. Assim, mesmo, apresenta-se o problema físico abordado, como caso de estudo, detalhando-se suas restrições. Após, apresenta-se os dados coletados do fenômeno físico em laboratório. Na seguinte seção, realizou-se uma discussão da equação que governa o fluxo de água em solo não saturado e detalha-se o método numérico empregado para resolução da equação diferencial parcial. Na seção cinco realizou-se uma discussão dos resultados e na seção seis estão as conclusões e referência bibliográfica. No final, após as referências bibliográficas encontra-se o Apêndice A.

2 – OBJETIVOS

2.1 – OBJETIVO GERAL

O objetivo deste trabalho é desenvolver um modelo que resolva o problema de otimização de sistemas complexos de infiltração de água em zona vadosa.

2.2 – OBJETIVOS ESPECÍFICOS

Como os objetivos específicos a tratar estão:

- validar o funcionamento do modelo a partir dos Algoritmos de Otimização;
- avaliar quantitativamente as propriedades físicas do solo a partir da simulação do fenômeno físico de infiltração de água em zona vadosa.

3 – REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Apresenta-se uma revisão de pesquisas nestes últimos anos em relação à calibração de modelos de fluxo de água em solo não saturado.

3.1 – DEFINIÇÕES DE PARÂMETROS E VARIÁVEIS

Na literatura define-se como umidade do solo, θ , a razão de volume de água contido no solo e o volume total do mesmo ($L^3 L^{-3}$). A segunda variável definida é a pressão exercida pela água no solo, que pode ser positiva, negativa ou nula. Quando essa pressão é negativa ou de sucção costuma-se chamar de potencial matricial (ψ) com unidade de grandeza L.

Dentro do processo de fluxo de água no solo define-se de condutividade hidráulica (K) como a capacidade de transmissão de água de um determinado solo. Em solo não saturado existe a peculiaridade que a condutividade hidráulica depende ou está em função da umidade volumétrica (θ), equacionadas na seguinte fórmula:

$$K=K(\theta) \quad (3.1)$$

Passa-se a mostrar como foi equacionado o processo de fluxo de água em solo não saturado.

3.2– EQUAÇÃO DIFERENCIAL QUE GOVERNA O FLUXO DE ÁGUA EM SOLO NÃO SATURADO

Foi Darcy em 1856 que modelou o fenômeno hidrodinâmico de fluxo da água em solo saturado, segundo a seguinte equação:

$$q = -K_{sat} \frac{\Delta H}{L} \quad (3.2)$$

em que:

- q = fluxo da água no solo saturado (L/T);
- K_{sat} = condutividade hidráulica em solo saturado (L/T);
- H = carga total hidráulica = $(p/\gamma_w) + z$ (L);
 - sendo: p pressão da água (ML^{-2}); γ_w densidade da água (ML^{-3}); (p/γ_w) a carga de pressão (L); z a carga altimétrica (L);
- ΔH = variação da carga hidráulica (L);
- L = distância percorrida pelo fluxo (L);

o sinal negativo indica o fluxo contrário ao gradiente.

A equação de continuidade deriva da lei da conservação da massa aplicada a um fluido que atravessa um volume de controle. Segundo a equação 3.3, a variação do fluxo através do

volume de controle é igual à taxa de variação do armazenamento de massa do fluido dentro do elemento. Considerando um elemento infinitesimal de controle obtém-se:

$$-\frac{\partial(\gamma q_x)}{\partial x} - \frac{\partial(\gamma q_y)}{\partial y} - \frac{\partial(\gamma q_z)}{\partial z} = \frac{\partial(\gamma \eta S_e)}{\partial t} \quad (3.3)$$

sendo:

- q_x, q_y, q_z o fluxo da água no solo nas direções x, y e z (L/T);
- η a porosidade do solo (adimensional);
- S_e o grau de saturação (%);
- γ o peso específico do fluido ($ML^{-2}T^{-2}$).

A equação 3.2 foi modificada para o fluxo de água em meio não saturado por Buckingham em 1907 como mostrado na equação 3.4 onde ressalta-se que o valor do parâmetro de condutividade hidráulica depende do valor da variável θ :

$$q = -K(\theta) \frac{\Delta \phi_t}{\Delta L} \quad (3.4)$$

sendo:

- θ a umidade volumétrica (adimensional);
- $K(\theta)$ a condutividade hidráulica como função de θ (L/T);
- ϕ_t o potencial total: ($\psi + z$) (L);
 - sendo: ψ o potencial matricial (L); z a carga altimétrica (L);
- L a distância percorrida pelo fluxo de água (L).

Considerando o peso volumétrico constante, o segundo membro da equação 3.3 pode ser convertido como a taxa de variação da umidade volumétrica em relação ao tempo como apresentado na equação 3.5:

$$-\frac{\partial(q_x)}{\partial x} - \frac{\partial(q_y)}{\partial y} - \frac{\partial(q_z)}{\partial z} = \frac{\partial \theta}{\partial t} \quad (3.5)$$

Substituindo-se a equação 3.4 na equação 3.5 para os três eixos cartesianos x, y, z , obtém-se a equação 3.6:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x(\theta) \frac{\partial \phi_t}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y(\theta) \frac{\partial \phi_t}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z(\theta) \frac{\partial \phi_t}{\partial z} \right) = \frac{\partial \theta}{\partial t} \quad (3.6)$$

sendo já definidos as expressões das equações 3.5 e 3.6.

Outra característica em solos não saturados é que a umidade volumétrica θ é função de ψ e vice-versa (Gardner, 1956), pelo que a equação 3.6 transforma-se na equação 3.7 conhecida como a equação de Richards (1931). Nessa equação observa-se que aparecem só duas variáveis em função do tempo: o potencial matricial (ψ) e a umidade volumétrica (θ). A condutividade hidráulica age como parâmetro e está em função da variável de potencial matricial ($K(\psi)$). O valor de l que aparece na terceira derivada do primeiro membro da equação 3.7 advém do efeito gravitacional derivando o potencial total: $\phi_t = (\psi + z)$ (L).

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z(\psi) \left(\frac{\partial \psi}{\partial z} + 1 \right) \right) = \frac{\partial \theta}{\partial t} \quad (3.7)$$

Aplicando-se a derivação por partes no segundo membro da equação 3.7 e definindo como capacidade de umidade específica (C) a taxa de variação de umidade volumétrica (θ) em relação ao potencial matricial (ψ) obtém-se a equação 3.8:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = C(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (3.8)$$

em que: $C(\psi) = \partial \theta / \partial \psi$ (L⁻¹).

Dessa forma, a equação 3.8 faz possível colocar a equação 3.7 em função de uma só variável como apresentado na equação 3.9 facilitando assim a modelagem matemática:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z(\psi) \left(\frac{\partial \psi}{\partial z} + 1 \right) \right) = C(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (3.9)$$

em que os termos da equação já foram definidos.

Em modelos matemáticos aplicados ao fenômeno físico dinâmico de fluxo de água em solo não saturado definem-se três tipos de condições de contorno: de Dirichlet, onde a carga de pressão é conhecida; de Neumann, onde o fluxo é conhecido; e de Cauchy com o fluxo de água em função da variável dependente. A adoção das condições de Dirichlet resultam comuns ao estabelecer mudanças na posição do nível freático. Assim, o valor de ψ considera-se nulo na superfície freática. Adota-se as condições de Neumann em regiões de fluxo nulo, como no limite de uma camada impermeável, em linhas de simetria e onde se tenha infiltração ou evaporação conhecidas. Como se mencionou, as equações diferenciais parciais anteriormente colocadas podem ser aproximadas numericamente pelo que com o crescente progresso na capacidade dos computadores os esforços concentram-se na solução numérica da equação diferencial de Richards (1931) (AGUERO-MARTINEZ, 2013).

Nos métodos numéricos deve-se dar especial atenção aos problemas de convergência e estabilidade. Um esquema de solução, por aproximação numérica, considera-se estável se, com o decorrer do tempo, o erro não for ampliado de tal forma que invalide a solução. Tradicionalmente a convergência define-se em relação à qual a solução do esquema aproximado tende à solução exata da equação diferencial na medida em que se diminuem os acréscimos espacial e temporal. No caso de métodos iterativos, também se define convergência como a obtenção de soluções cada vez mais próximas, entre si, ao passo em que se procedem às iterações. Mesmo com essas ferramentas iterativas matemáticas, a equação 3.9 é de difícil solução, pois os parâmetros estão em função das variáveis. A equação de fluxo torna-se altamente não linear complicando grandemente o processo de calibração ou ajuste.

Mesmo que o fluxo que atravessa o solo matricial possa ser representado pela equação de Richards (1931) na equação 3.9, a descrição teórica e a medição da umidade volumétrica e as funções de condutividade hidráulica ainda é motivo de intensa pesquisa na literatura (AGUERO-MARTINEZ, 2019; FUENTES et al., 2020). Estabelecer todos os parâmetros por medidas de campo resulta impossível pelo alto custo e tempo consumido. Como foi mencionado, dentre as causas dessas dificuldades, encontram-se: as condições iniciais, de contorno; a variabilidade espacial do solo; a escala de experimento.

Na sequência, mostra-se brevemente algumas experiências em laboratório onde foram abordadas diversas dificuldades no experimento com a finalidade da obtenção de valores das variáveis de umidade volumétrica e de potencial matricial de um solo não saturado, resultando em esforços de equacioná-las e acabando em modelos empíricos, chamados modelos constitutivos.

3.3 – MODELOS CONSTITUTIVOS E EQUAÇÕES DE RETENÇÃO

Gardner (1956) realizou ensaios em laboratório com o propósito de relacionar as variáveis de umidade volumétrica (θ) e potencial matricial (ψ) em solo não saturado desenvolvendo o método do efluente do disco de pressão. Nesse método, submete-se um solo inicialmente saturado a uma série de acréscimos de pressão de ar em intervalos fixos com as respectivas medições de efluente ou drenagem. Fazendo algumas hipóteses, consegue-se que a solução analítica considere a difusividade do solo como uma função da umidade volumétrica.

Percebeu-se que o acréscimo de pressão de ar em um intervalo fixo denominado “de um passo” melhorou o método do efluente visto que se otimizou o tempo na aferição das

medições sem perda na exatidão. Esses experimentos mostraram que existe uma relação entre a umidade volumétrica (θ) e o potencial matricial (ψ). A quantidade de água remanescente no solo resulta de uma função da forma das partículas e, portanto, de uma função do potencial matricial.

Desse modo, desenvolveu-se a chamada curva de retenção de água no solo, denominada também de curva característica, que descreve a “capacidade” do solo em armazenar e liberar água. Essas curvas foram definidas como a relação entre a umidade volumétrica (θ) e o potencial matricial (ψ) sendo obtidas em laboratório por dois meios:

- secagem, em que se toma uma amostra inicialmente saturada aplicando-se uma sucção crescente, secando a amostra;
- umedecimento, em que se toma uma amostra inicialmente seca e gradualmente se diminui a sucção aplicada, molhando a mesma.

Essas duas curvas de equação de retenção de água no solo parcialmente saturado obtidas tanto pelo procedimento de secagem quanto pelo procedimento de umedecimento não são idênticas para a maioria dos solos, denominando-se esse fenômeno de “histerese”. Para tanto, conclui-se que o fluxo em meio não saturado apresenta as seguintes dificuldades:

- os parâmetros são funções da variável ψ ou da variável θ , isto é, a capacidade de umidade específica (C) e a condutividade hidráulica (K), pertencentes às equações 3.8 e 3.9 respectivamente, resultam parâmetros dependentes da variável que se procura;
- as relações de $K(\psi)$ e $\theta(\psi)$ são não-lineares, na zona de solo não-saturada, incluindo o efeito da histerese.

Estabeleceram-se equações que relacionam o potencial matricial (ψ), a umidade volumétrica (θ), a condutividade hidráulica (K) e também as condições iniciais de θ ou de ψ dando início aos modelos constitutivos. Os parâmetros desses modelos foram obtidos ao se correlacionar os valores das variáveis do solo não saturado obtidos a partir de medições em campo ou de análise de amostras em laboratório. Dentre os diversos modelos constitutivos desenvolvidos merecem atenção especial aquelas que simulam a curva de umidade volumétrica em função de potencial matricial e aquelas que simulam a curva de condutividade hidráulica em função do potencial matricial, sendo o modelo de van Genuchten (1980) o mais amplamente utilizado na literatura que se passa a detalhar.

3.3.1 - Modelo de van Genuchten

Van Genuchten (1980) continuou a linha de pesquisa de modelar a curva característica da retenção da água no solo parcialmente saturado desenvolvendo equações e compondo um modelo matemático ao qual foi chamado Modelo de van Genuchten (MVG). A equação 3.10, do MVG, determina uma curva simulada de retenção da água no solo, isto é, a variável da umidade volumétrica em função da variável de potencial matricial.

$$\frac{\theta_i^j - \theta_{res}}{\theta_{sat} - \theta_{res}} = \left[\frac{1}{1 + (\alpha |\psi_i^j|)^n} \right]^m \quad (3.10)$$

em que:

- i são os pontos de controle no espaço;
- j é o índice de tempo;
- θ_i^j é a umidade volumétrica, no tempo j e no ponto i (L^3L^{-3});
- θ_{sat} é a umidade do solo saturado (L^3L^{-3});
- θ_{res} é a umidade residual (L^3L^{-3});
- ψ_i^j representa o potencial matricial no tempo j e no ponto i (L);
- α é um fator empírico (L^{-1});
- n é um outro coeficiente adimensional;
- $m = (n-1)/(n)$.

As equações 3.11 a, b, pertencentes ao MVG, representam as condutividades hidráulicas para as direções z e x , respectivamente, em função da variável da umidade volumétrica.

$$Kz_i^j = Kz_{sat} \left(\frac{\theta_i^j - \theta_{res}}{\theta_{sat} - \theta_{res}} \right)^{1/2} \left\{ 1 - \left[1 - \left(\frac{\theta_i^j - \theta_{res}}{\theta_{sat} - \theta_{res}} \right)^{1/m} \right]^m \right\}^2 \quad (3.11a)$$

$$Kx_i^j = Kx_{sat} \left(\frac{\theta_i^j - \theta_{res}}{\theta_{sat} - \theta_{res}} \right)^{1/2} \left\{ 1 - \left[1 - \left(\frac{\theta_i^j - \theta_{res}}{\theta_{sat} - \theta_{res}} \right)^{1/m} \right]^m \right\}^2 \quad (3.11b)$$

sendo:

- Kz_i^j a condutividade hidráulica na direção z , no tempo j , no ponto i (L/T);
- Kx_i^j a condutividade hidráulica na direção x , no tempo j , no ponto i (L/T);
- Kz_{sat} a condutividade hidráulica do solo saturado na direção z (L/T);

- $K_{x_{sat}}$ a condutividade hidráulica do solo saturado na direção x (L/T);
- os demais parâmetros já foram definidos.

3.4 – CONCEITOS DE MODELO E CALIBRAÇÃO AUTOMÁTICA

Define-se modelo, em geral, como a representação de algum evento ou fenômeno físico. Todo modelo tem limitações impostas pelas hipóteses ao sistema complexo de infiltração.

Como foi mencionado, a calibração automática de um modelo se baseia na abordagem de técnicas iterativas que maximizam (minimizam) uma Função Objetivo (FO). A formulação matemática da FO e os valores de resultados (chamados índice de desempenho) constituem-se como índices que qualificam o modelo estabelecido.

À continuação efetua-se a identificação de variáveis, apresenta-se os conceitos de parametrização e de modelo inverso que representam conceitos fundamentais para a calibração automática de modelo.

3.4.1 – Identificação das variáveis, parametrização

Hill e Tiedeman (2007) alegam que os dados de entrada de modelo a serem calibrados são frequentemente distribuídos espacial e temporalmente. Desse modo, o número de parâmetros poderia ser infinito. Assim, utilizara-se o conceito de parametrização com o objetivo de limitar a quantidade de parâmetros que servem para definir os dados de entrada do modelo matemático.

O conceito de parametrização, mesmo não sendo usual, aplica-se também aos modelos de fluxo de água na zona não saturada. Desse modo, como foi abordado anteriormente o modelo constitutivo tradicional de van Genuchten (MVG) (1980) utilizam apenas cinco parâmetros que serão a base de entrada do modelo matemático de fluxo de água em solos não saturados, sendo esses parâmetros: n , α , K_{sat} , θ_{sat} , θ_{res} . A determinação dos valores desses parâmetros constitui a calibragem do modelo. Van Genuchten (1980) determinou com seu modelo MVG os valores de parâmetros de diferentes tipos de solos, como apresentados na Tabela 3.1.

Nessa tabela 3.1 destaca-se a ampla faixa de abrangência das propriedades hidráulicas dos solos, como por exemplo a condutividade hidráulica saturada (K_{sat}) que tem como mínimo valor de quase zero para o Marga Guelph (seca) e o máximo valor de 303 (cm/dia) para a Marga siltosa Touchet G.E.3. Já a umidade residual (θ_{res}) oscila entre 0,00 para 0,218. Para umidade saturada (θ_{sat}) varia de 0,250 para 0,520. O valor do parâmetro α (apresentado no modelo de van Genuchten, 1980) muda na faixa de 0,00152 para 0,0200. Por último, o parâmetro n (também estabelecido no modelo de van Genuchten, 1980) oscila na faixa de 1,17 para 10,4.

Tabela 3.1 – Parâmetros do MVG de diferentes tipos de solo determinados por van Genuchten (1980)

Solo	$\theta_{sat}(*)$	$\theta_{res}(*)$	$K_{sat}(*)$ (cm/dia)	$\alpha(*)$ (cm^{-1})	$n(*)$
Arenito <i>Hygiene</i>	0,250	0,153	108,00	0,0079	10,4
Marga siltosa <i>Touchet G.E.3</i>	0,469	0,190	303,00	0,0050	7,09
Marga siltosa <i>G.E.3</i>	0,396	0,131	4,96	0,00423	2,06
Marga <i>Guelph</i> (molhada)	0,520	0,218	31,6	0,0115	2,03
Marga <i>Guelph</i> (seca)	0,434	0,218	-	0,0200	2,76
Argila <i>Beit Netofa</i>	0,446	0,0	0,082	0,00152	1,17

(*) Parâmetros já definidos na equação 3.10

Até aqui foram considerados o modelo de fluxo de água em zona subsuperficial, as variáveis e parâmetros desse modelo e de como esses parâmetros e variáveis se relacionam em modelos constitutivos. Mas ainda persiste o problema de calibragem automática associado ao modelo matemático e ao modelo constitutivo. Para isso, à continuação aborda-se esse problema utilizando a técnica denominada de modelo inverso.

3.4.2 – Modelo inverso

A resolução do problema inverso para estimação dos parâmetros de modelos numéricos distribuídos começou na hidrologia subterrânea na década dos 70. Uma revisão sobre esse caso foi feita por Yeh (1986), nesse procedimento, as propriedades hidráulicas foram determinadas analiticamente com valores de parâmetros desconhecidos. Assim, um experimento estabeleceu-se sob condições controladas com condições iniciais restringidas e condições de contorno definidas. Essa técnica de modelo inverso foi aplicada na estimação da

condutividade hidráulica saturada de um solo drenado comparando as drenagens simuladas e observadas.

Durante o experimento uma ou mais variáveis de fluxo são controladas e medidas. Subsequentemente, Yeh (1986) resolveu a Equação de Richards (1931) numericamente usando as funções hidráulicas com estimações iniciais para seus parâmetros. Esses parâmetros são otimizados pela minimização de uma Função Objetivo (FO) contendo a soma dos desvios quadrados dentre as variáveis de fluxo preditos e os observados, usando simulações numéricas repetidas do processo de fluxo.

A aplicação dessa técnica, para a zona de solo não saturada, começou mais tarde, e foi limitada à estimação dos parâmetros das propriedades hidráulicas do solo. Constaes e Kacur (2000) determinaram os parâmetros do solo das equações de retenção de van Genuchten considerando como mecanismo de fluxo da água em meio poroso a equação de Richards. Para isso, valeram-se de ferramentas matemáticas e analíticas, tais como os métodos de Newton-Raphson e de Levenberg-Marquardt, para resolver um problema inverso. No entanto, não se mostraram uma experiência seja em campo ou laboratório que confira seus resultados.

Kodesová (2003) desenvolveu um método para determinar as propriedades hidráulicas em solos não saturados com a técnica inversa. Esses autores desenharam um penetrômetro de cone modificado para injetar água no solo através de telas medindo-se o progresso da frente úmida com dois anéis de tensiômetro localizados acima da tela. Foram analisadas coletas de dados tanto de fluxo acumulado como dos valores de potenciais matriciais. Foram obtidos valores estimados de condutividade hidráulica em função de potencial matricial, $K(\psi)$, e de umidade volumétrica em função de potencial matricial, $\theta(\psi)$. Os resultados otimizados para os ensaios foram utilizados para demonstrar a possibilidade de avaliar os efluentes úmidos das propriedades hidráulicas do solo. Esses valores otimizados dos parâmetros hidráulicos foram comparados aos valores observados em laboratório e em campo com razoável convergência.

Priesack et al. (2006) utilizaram o modelo inverso para determinar as propriedades hidráulicas da curva de efluente. Ramos et al. (2006) utilizaram três tipos de solo de textura mediana e grosseira, e compararam as curvas $\theta(\psi)$ e $K(\psi)$ (parâmetros já definidos anteriormente) obtidas por modelagem inversa a partir de dados coletados em campo pelo teste de infiltração e também utilizando dados coletados por métodos laboratoriais. Os testes de infiltração foram realizados com infiltrômetros de tensão, utilizando placas porosas de 20 cm de diâmetro, medindo-se as tensões de umidade em espaços de 0, 3, 6 e 15 cm, numa sequência descendente. Os valores dos parâmetros da umidade volumétrica inicial (θ_i) e a umidade

volumétrica final (θ_f) foram determinados por gravimetria. Os métodos laboratoriais utilizados foram as caixas de sucção, placas de pressão e evaporação, realizadas em amostras de solo não perturbadas. O modelo hidráulico escolhido para representar ambas as curvas $\theta(\psi)$ e $K(\psi)$ foi o de Mualem-van Genuchten (MUALEM, 1976, VAN GENUCHTEN, 1980). Essas curvas foram comparadas por regressão linear simples. As curvas $\theta(\psi)$ e $K(\psi)$ e os respectivos parâmetros do modelo Mualem-van Genuchten, que foram obtidos por modelagem inversa, foram concordantes com aqueles valores determinados pelos métodos laboratoriais.

Ainda que a aplicação do método da técnica inversa ao método do efluente pareça promissora, foram encontrados alguns problemas com a não unicidade dos parâmetros otimizados. A não unicidade implica em mais de um conjunto de parâmetros que minimizam a função objetivo em máximos (mínimos) locais ou máximos (mínimos) globais. Entretanto, existem problemas de natureza de mal posto ou mal condicionados (*ill-posed* do Inglês) da solução. Dentre as causas desses problemas, entre outros, destaca-se a não existência de um resultado único e a instabilidade da solução. A não existência de um resultado único ocorre quando os parâmetros em estudo são pouco sensíveis aos métodos utilizados. Isso se deve a que encontrou um ótimo local não procurando mais resultados. A instabilidade da solução deve-se à alta sensibilidade dos parâmetros (Yeh, 1986). A instabilidade emerge do fato de que erros pequenos nas variáveis medidas podem resultar em mudanças grandes nos parâmetros otimizados.

Papafotiou et al. (2008) utilizaram as técnicas descritas por Ahrenholz *et al.* (2008) para determinar as propriedades hidráulicas da areia pelo modelo inverso do experimento do efluente multipasso. Foram utilizadas as relações de Mualem-van Genuchten para estabelecimento das equações de retenção da água no solo e a condutividade hidráulica na equação unidimensional de Richards. Papafotiou et al. (2008) ajustaram as ditas funções hidráulicas tanto dos valores de potenciais matriciais como dos valores do efluente acumulado utilizando otimizadores globais (AHRENHOLZ et al., 2008). Adicionalmente, utilizaram as técnicas de aderência de ajuste obtendo as propriedades hidráulicas da areia fina e grossa do experimento.

Argyrokastritis et al. (2009) pesquisaram a influência da relação entre a umidade volumétrica contra a difusividade, denotada como $D(\theta)$, no avanço da frente úmida e a infiltração acumulada. Além disso, essa relação $D(\theta)$ foi relacionada com a curva de retenção, obtida independentemente, para determinar a condutividade hidráulica. Os dados experimentais foram obtidos utilizando o método de efluente de um passo. O experimento refere-se a um

processo de infiltração vertical unidimensional utilizando dois tipos de solos: mistura de areias e areia misturada com argila. Entre as conclusões dos autores salienta-se que a utilização dos três tipos de equações, para estabelecer a relação $D(\theta)$, não foram significativos ao avanço da frente úmida para o tipo de solo de mistura de areias. No entanto, essas equações foram significativas na areia misturada com argila, acredita-se, devido a sua característica efusiva.

Entretanto, apesar da literatura apresentada, resulta difícil validar resultados de simulações 3D. Isso devido à complexidade dos problemas considerados, à escassez de bons laboratórios ou dados de campo e à falta de conhecimento relacionado às propriedades hidráulicas. A isso, adiciona-se o fato de não poder determinar quão bom são os resultados dos valores simulados, mesmo utilizando outros métodos mais precisos para a determinação das propriedades hidráulicas (PAPAFOTIOU et al., 2008).

Contudo, neste trabalho, aborda-se na sequência os avanços em calibração automática mediante algoritmos de otimização.

3.5 – ALGORITMOS DE OTIMIZAÇÃO

Como foi supramencionado, entende-se por modelo como uma simulação e/ou reprodução do problema físico, aplicado a um domínio matemático a ser estudado, considerando as restrições físicas ou matemáticas. Também, revisou-se que o modelo inverso, como técnica empregada na calibração, resulta ser uma alternativa de procura da estimação dos parâmetros. Mas a calibragem, ainda, era um tanto manual e em consequente o tempo investido em utilizar essas técnicas era dispendioso. Com o decorrer dos anos, a ciência computacional recebeu grande avanço na tecnologia de computadores pessoais e supercomputadores, o que auxiliou na calibração automática de modelos.

Esse progresso gigantesco fez com que as técnicas acima mencionadas de obtenção de dados simulados comparados aos dados observados, através de Funções Objetivas (FO), sejam capazes de serem utilizadas em termos de custo computacional. Os computadores rodam o modelo matemático hidrológico, em forma de código, quantas vezes foram necessários, dependendo da capacidade desses computadores, até conseguir soluções simuladas de parâmetros que sejam apropriadas ao modelo que representa o fenômeno físico. Após esta breve introdução apresenta-se uma das primeiras técnicas a serem exploradas em parceria com os computadores, a saber, os algoritmos genéticos.

3.5.1 – Os algoritmos genéticos

A ideia de Algoritmos Genéticos (AG) começou com a emulação da evolução mediante princípios de seleção natural e reprodução, sendo que o primeiro determina qual membro da população sobrevive para reproduzir e o segundo recombina os genes dos herdeiros. Por outro lado, os AG requerem um conjunto natural de parâmetros do problema de otimização que deve ser codificado como uma sequência de comprimento finito utilizando algum tipo de alfabeto finito. Desse modo, os AG em seus primórdios tentaram representar características de entidades utilizando um sistema binário em cadeias (bits) onde o caractere um (string *1*) representa uma condição satisfeita e o caractere zero (string *0*) quando não.

A mudança desses dígitos se reflete na diferença de comportamento de um ente, isto é, falando em termos computacionais, apresenta os diferentes resultados do processo do código computacional. Em outras palavras, os AG focam a atenção nas partes mais promissoras de resposta de todo um domínio, sendo assim, os AG desempenham a habilidade computacional de combinar partes de cadeias (bits) com certa quantidade de dígitos partindo do sistema binário que contém soluções parciais (HOLLAND, 1975,1992).

Entretanto, recorreu-se à vantagem de que esses algoritmos genéticos (AG) exploram similaridades de codificação de uma maneira muito geral, tornando-a manobrável e amplamente irrestritos às limitações (como são: existência de continuidade, existência de derivada, unimodalidade, e assim por diante) impostas para outros métodos de otimização. Por outro lado, utilizou-se a vantagem dos AG de partir de uma população de cadeias de caracteres e dessa maneira escalar muitos tipos de “picos” ótimos em paralelo, reduzindo assim a probabilidade de encontrar um ótimo falso.

Mais outra particularidade dos Algoritmos Genéticos baseia-se na forma de configuração de caracteres e população partindo de uma “semente” aleatória, como por exemplo o jogo de uma moeda para determinar cara como código *1* e coroa como código *0*, uma vez estabelecida essa semente os AG geram as próximas gerações de forma automática.

Outra vantagem dos AG é que não necessitam de informação auxiliar (como no caso da técnica de gradiente onde precisa-se das derivadas). A única necessidade dos AG para obter melhores ajustes é de uma função custo associado às populações em cadeia de bits geradas

automaticamente ao longo do processo. O valor de desempenho daquela função objetivo age como métrica do procedimento de ajuste (GOLDBERG, 1989).

Propuseram-se assim quatro características que contribuem para a robustez da técnica dos algoritmos genéticos: primeiro, o uso de uma codificação em caracteres; segundo, a procura através de uma população inicial composta de caracteres randômicos; terceiro, não utilizando informações auxiliares, isto é, busca “cega”, e; quarto, o uso de operadores aleatórios ou probabilísticos. Nesse último quesito de operadores aleatórios foram definidos os seguintes operadores: reprodução, cruzamento (*crossover*) e mutação (*mutation*) (GOLDBERG, 1989).

O operador denominado de “reprodução” age como o copiar de cadeias de caracteres que obtiveram um valor próximo do ótimo global de uma função custo. Desse modo, os AG desenvolvem uma grande potencialidade de reproduzir “filhos” ou descendentes (*offsprings*), isto é, gerar uma cadeia de caracteres com mais chances de obter dito ótimo em nas próximas gerações. A maneira de reproduzir é exemplificada como o uso de uma roda de roleta tendenciosa, isto é, formada com fendas de tamanho diferente dimensionado em proporção a sua aptidão (*fitness*).

Um indivíduo candidato à reprodução é escolhido com um simples giro da roleta ponderada, dessa forma, constitui-se uma população provisória com possivelmente maior número de indivíduos reproduzidos pela fenda maior da roleta. Os indivíduos assim reproduzidos dessa população provisória são acasalados (*mating*) em pares selecionados arbitrariamente dentre todos os indivíduos da população provisional denominado assim de piscina (*pool*) de acasalamento (GOLDBERG, 1989).

Daí que age o próximo operador genético denominado de cruzamento (*crossover*) operando a partição arbitrária da cadeia de caracteres de bits de ambos os indivíduos acasalados e realizando as trocas dessas partições. Dessa maneira, esse processo de combinatórias dos bits utilizando a ideia de acasalamento e cruzamento geram descendentes que substituem os indivíduos de menor aptidão (*fitness*) outorgando aos algoritmos genéticos uma qualidade de técnica robusta (GOLDBERG, 1989).

Contudo, pode acontecer que as respostas tendem a não atingir um valor ótimo, nesse caso, introduziu-se o operador genético de mutação (*mutation*). A mutação efetua a substituição de uma pequena fração da quantidade total de cadeia de caracteres *0s* e *1s*. Efetua-se essa alteração de forma aleatória (com pequena probabilidade) do valor de uma posição da cadeia de bits. Na codificação binária, isso significa simplesmente mudar de *1* para *0* e vice-versa, mas

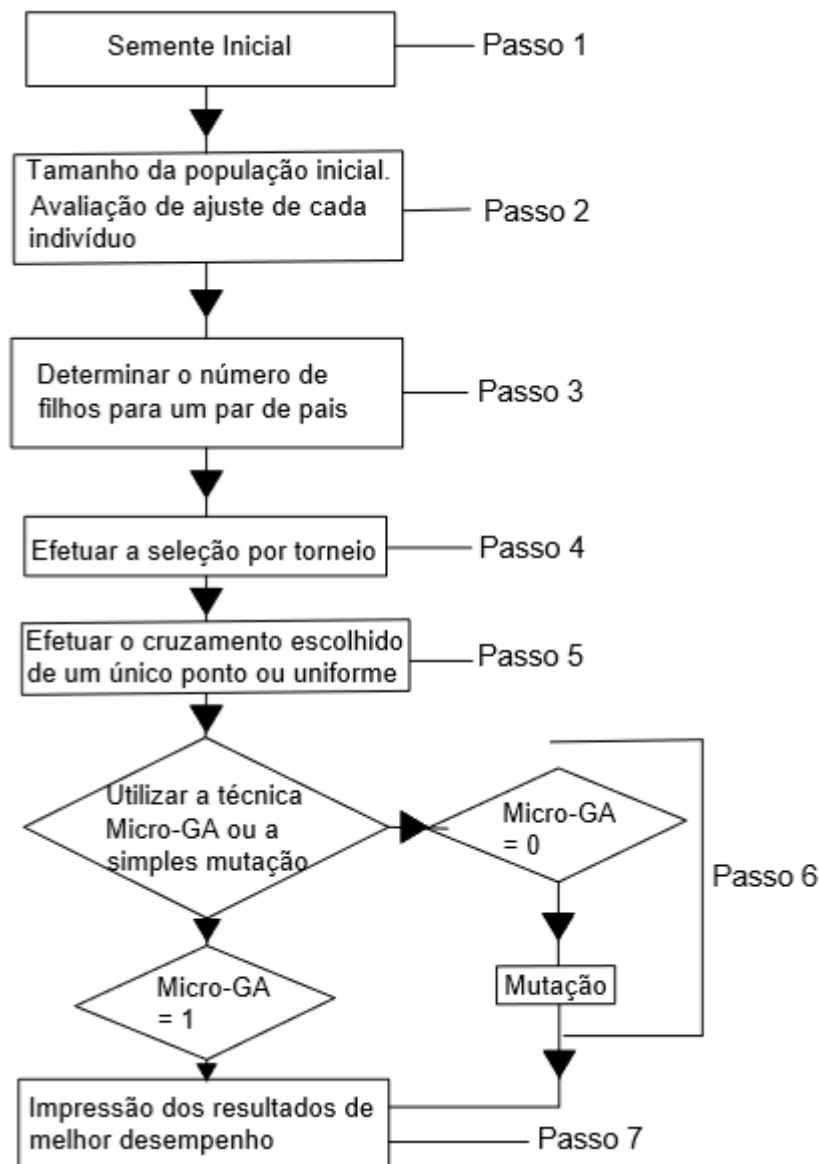
realizado ocasionalmente sendo considerado como um mecanismo secundário de “adaptação” (GOLDBERG, 1989).

Até aqui, dirimiu-se que a robustez da técnica dos Algoritmos Genéticos para a procura do ótimo global parte de um conjunto de parâmetros iniciais chamados sementes, utilizando uma função objetivo, codificando esse conjunto de parâmetros arbitrários e recorrendo aos operadores probabilísticos (GOLDBERG, 1989). No decorrer dos anos, os AG foram utilizados de forma interdisciplinar em diferentes campos da ciência, sofrendo diversas modificações.

No campo da medicina, os Algoritmos Genéticos foram utilizados para otimizar o funcionamento de um sistema laser, utilizando operadores avançados como são: seleção por torneio (*tournament*), mutação por pulo (*jump*), elitismo, ponto singular e cruzamento uniforme, mutação de rastejo (*creep*), nicho (*niching*), entre outros. Destaca-se que o elitismo forçou a permanecer o melhor indivíduo que obtivesse o melhor índice de desempenho até que um outro indivíduo supere o valor do mencionado índice. Sem esse critério de elitismo, a posição de melhor indivíduo se perde nas seguintes gerações, recriando novos indivíduos até obter um indivíduo que atinja um bom índice de desempenho totalmente novo produzindo bons resultados (CARROLL, 1996). Descobriu-se que uma população de cinco indivíduos evitava a convergência prematura demonstrando uma convergência mais rápida para a região quase ótima (KRISHNAKUMAR, 1989). Esses critérios expostos dos Algoritmos Genéticos serão utilizados neste trabalho, além do conceito de micro-GA de Krishnakumar(1989).

Apresenta-se na figura 3.1 um diagrama de fluxo onde se esquematiza o programa de Algoritmos Genéticos mostrando as características já mencionadas de seleção por torneio com uma técnica de arraste para escolher os pares aleatórios para acasalar, codificação binária para os indivíduos, mutação de salto, mutação de rastejo e a opção para um cruzamento de único-ponto ou um cruzamento uniforme.

Figura 3.1 – Fluxograma dos Algoritmos Genéticos.



Fonte: do próprio autor

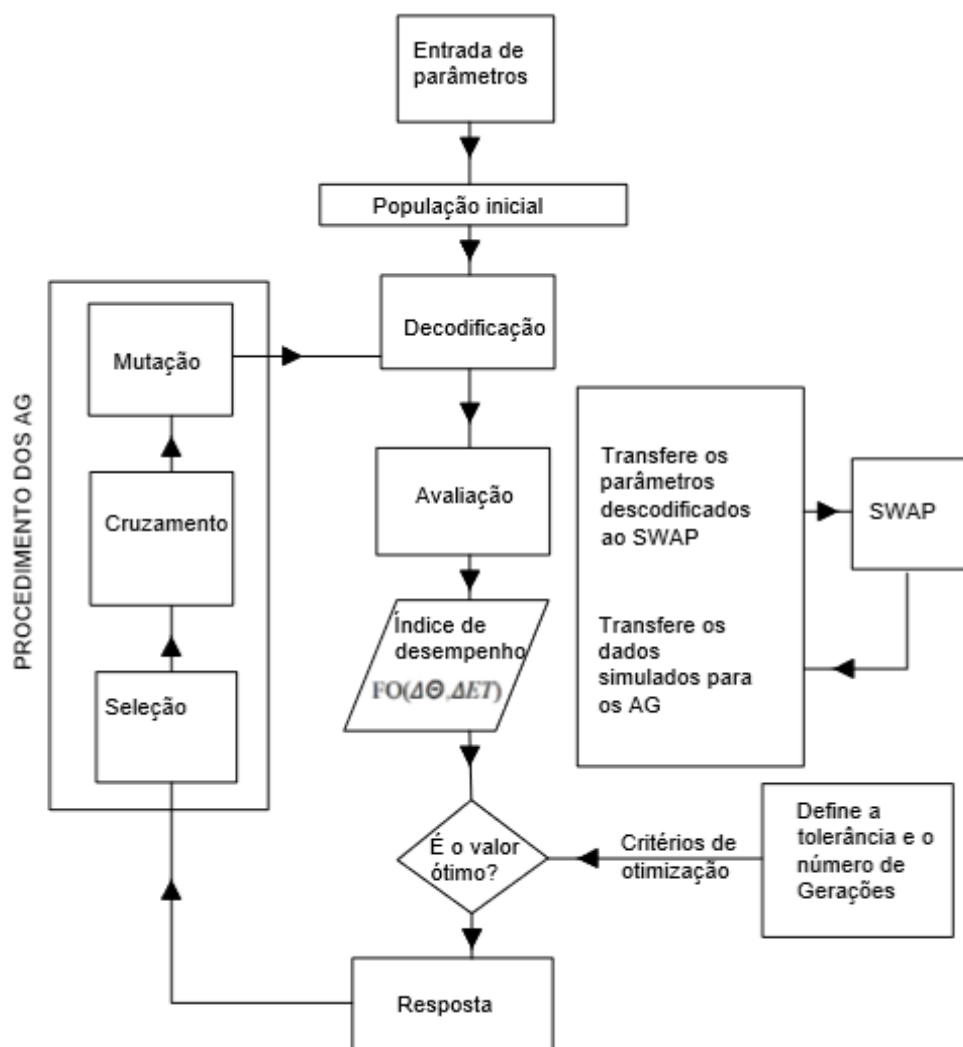
À continuação são apresentados alguns trabalhos, na literatura, sobre a aplicação dos AG na calibração de modelos de fluxo de água em solo não saturado. Foram utilizados os conceitos supramencionados de algoritmos de otimização e problema inverso na calibragem de modelos de fluxo de água na zona subsuperficial. Para isso, resultou fundamental a formulação da Função Objetivo (FO) cujo valor — que em diante será chamado índice de desempenho — reflete o ajuste do conjunto de parâmetros simulados com os parâmetros observados.

Ines e Droogers (2002) utilizaram os dados do experimento de evapotranspiração (contrário ao experimento do efluente tradicional). Utilizou-se o programa SWAP (*Soil Water Atmosphere and Plant Model* do Inglês) (VAN DAM et al., 1997). Este programa utiliza a

equação de Richards (1931) e a lei de Darcy para o sistema de solo saturado ou não saturado. Para resolver essa equação o SWAP utiliza a solução numérica de diferenças finitas de esquema implícito. As funções hidráulicas que auxiliam a solução do modelo de fluxo da água do programa foram as de Mualem-van Genuchten (MUALEM, 1976, VAN GENUCHTEN, 1980). Ines e Droogers (2002) utilizaram os Algoritmos Genéticos (AG) e a técnica inversa na determinação das propriedades hidráulicas na zona não saturada. Dentro da técnica dos AG, foi utilizada a técnica, já mencionada, do MICROGA (KRISHNAKUMAR, 1989; CAROLL, 1996).

A figura 3.2 apresenta o mecanismo de implementação que Ines e Droogers (2002) fizeram dos dois programas SWAP e AG para calibração automática utilizando uma Função Objetivo - FO. O resultado da FO depende da minimização das diferenças dos valores de umidade volumétrica tanto observada quanto simulada e da minimização das diferenças de valores de dados observados e calculados de evapotranspiração. Também, a FO utilizada por Ines e Droogers (2002) depende de um fator de peso atribuído tanto ao ajuste dos valores de umidade volumétricas quanto do ajuste de valores da evapotranspiração. Destaca-se que utilizar só a variável de umidade do solo conduz a melhores resultados. Além disso, fizeram-se uma análise de sensibilidade dos parâmetros concluindo que o parâmetro de umidade residual θ_{res} é de menor sensibilidade comparada aos outros parâmetros do MVG.

Figura 3.2 – Diagrama de fluxo dos AG associado à técnica inversa aplicado ao modelo SWAP para um processo de calibração automática.



Fonte: modificado de Ines e Droogers (2002)

Gurracino e Velis (2007) determinaram os parâmetros de van Genuchten (1980) aplicando um modelo inverso a um experimento de drenagem utilizando um algoritmo de otimização com base em métodos de quase-Newton e simulação de anéis. O experimento de drenagem foi simulado em base a equação de Richards considerando as condições de contorno. A solução da Equação de Richards foi realizada em base ao método de elementos finitos. Os mesmos autores analisaram extensões dos resultados e o comportamento do algoritmo de otimização. A função objetivo foi baseada em dados espaciais e temporais de potencial matricial e teor de umidade volumétrica.

Gurracino e Velis (2007) consideraram que mesmo sendo utilizados procedimentos de precisão sofisticados em laboratório na análise de amostras de solo não saturados, os parâmetros

estimados não são representativos das condições reais do solo, pois as amostras são pequenas e em muitos casos de estrutura perturbada. Assim, utilizou-se um modelo estocástico associado ao método inverso para otimizar uma função objetivo, determinando, desse modo, os parâmetros de solo na zona não saturada. Os mesmos autores utilizaram um algoritmo híbrido de otimização baseado em recozimento simulado (*simulated annealing* do Inglês) e o método quase-newtoniano.

O método quase-newtoniano se fundamenta no gradiente com convergência quadrática. O experimento em escala menor em laboratório de drenagem foi modelado utilizando as equações de Richards (1931) e as equações do modelo de van Genuchten (1980). Gurracino e Velis (2007) utilizaram, a modo de comparação de resultados, o estudo de caso para três tipos de solo em três camadas diferentes de Carsel e Parrish (1988). Esses tipos de solo foram: marga siltosa na camada superficial, marga argilosa arenosa na camada intermédia e marga na camada mais profunda. Dentre os resultados, Gurracino e Velis (2007) obtiveram os valores simulados dos parâmetros de condutividade hidráulica saturada, α , n e a umidade saturada de MVG dos três tipos de solo com razoável aproximação comparada aos valores observados obtidos por Carsel e Parrish (1988). Também, assim como foi concluído por Ines e Droogers (2002), os valores simulados da umidade residual foram notoriamente diferentes.

Mahdi e Shahrokh (2010) estimaram os parâmetros hidráulicos utilizando a técnica inversa com dados obtidos em campo. Os mesmos autores utilizaram um experimento feito em campo de uma área de 2 x 2 m, umedecendo-a até atingir a saturação a uma profundidade de 1m. Pelo processo de secagem os dados de umidade de solo e potencial matricial foram obtidos diariamente pelo método do TDR (*Time Domain Reflectometry* – do Inglês) e os tensiômetros cerâmicos em diferentes profundidades durante 10 dias. Simulou-se o sistema físico utilizando um modelo matemático baseado em diferenças finitas, resolvendo a equação de Richards. A calibração dos parâmetros pelo ajuste de uma Função Objetivo foi realizada utilizando a técnica dos Algoritmos Genéticos. Os autores reportaram que existe notória diferença entre os valores da condutividade hidráulica saturada de campo com o obtido pela simulação.

3.5.2 - Algoritmo de recozimento simulado generalizado (*Generalized Simulated Annealing*)

Como foi mencionado, outro algoritmo a ser utilizado neste estudo do fenômeno de infiltração é o Algoritmo de Recozimento Simulado Generalizado (*Generalized Simulated*

Annealing - GSA). Além disso, foi supracitado o início da metodologia do GSA utilizando-se as técnicas do Classical Simulated Annealing - CSA, após a técnica do *Fast Simulated Annealing* - FSA e por último uma combinação de ambas as técnicas FSA e CSA, denominado de GSA ou da máquina de Tsallis, que segue o contexto estatístico de Tsallis (KIRKPATRICK et al., 1983, SZU e HARTLEY, 1987, TSALLIS, 1988, TSALLIS e STARIOLO, 1996).

Com isso, as ferramentas do GSA são: uma probabilidade de aceitação generalizada, o algoritmo de Metropolis (1958), uma temperatura de aceitação que decresce com o tempo e a distribuição estatística de Tsallis. Com esses argumentos, a metodologia foca-se na determinação dos passos iterativos $x_t \rightarrow x_{t+1}$ para a resolução da distribuição de visita $g_{q_v}(\Delta x_t)$ sendo $(\Delta x_t = x_{t+1} - x_t)$.

Considerando D como o número de dimensões para a otimização e mantendo as condições da máquina de Boltzmann ($qV=1$) obteve-se uma solução da distribuição de visita:

$$g_1(\Delta x_t) = \frac{e^{-(\Delta x_t)^2/T_1^V(t)}}{[\pi T_1^V(t)]^{\frac{D}{2}}}, \text{ sendo } T_1^V(t) \text{ a temperatura de visita para um tempo } t.$$

Já para as condições da máquina de Cauchy para $qV=2$ o resultado é:

$$g_2(\Delta x_t) = \frac{T_2^V(t)}{[[T_2^V(t)]^2 + (\Delta x_t)^2]^{\frac{D+1}{2}}}, \text{ com as condições de temperatura de visita } T_2^V(t) \text{ em}$$

um tempo t .

A expressão de Cauchy pode ser melhorada com a transformada de Fourier para D dimensões, gerando-se:

$$g_2(\Delta x_t) = \frac{\Gamma\left(\frac{D+1}{2}\right)}{\pi^{\frac{D+1}{2}}} \frac{T_2^V(t)}{\{[T_2^V(t)]^2 + (\Delta x_t)^2\}^{\frac{D+1}{2}}} \quad (3.12)$$

Com isso, aplica-se a máquina de Tsallis (TSALLIS, 1988, TSALLIS e STARIOLO, 1996) resultando a distribuição de visita generalizada:

$$g_{q_v}(\Delta x_t) = c \frac{[T_{q_v}^V(t)]^d}{\{[T_{q_v}^V(t)]^e + (q_v - 1)b(\Delta x_t)^2\}^{\left(\frac{a}{(q_v - 1)}\right)}} \quad (3.13)$$

sendo a, b, c, d e e dependentes dos valores de qV e D onde $d = e \left(\frac{2a-D(q_v-1)}{2(q_v-1)} \right)$ ($\forall q_v, \forall D$).

Depois de uma série de simplificações adequadas resulta o valor de: $d = \left(\frac{1}{(q_v-1)} \right)$ ($\forall q_v, \forall D$)

e acabando na expressão geral:

$$g_{q_v}(\Delta x t) = \left(\frac{q_v-1}{\pi} \right)^{\frac{D}{2}} \frac{\Gamma\left(\frac{a}{(q_v-1)}\right)}{\Gamma\left(\frac{a}{(q_v-1)} - \frac{D}{2}\right)} \frac{[T_{q_v}^v(t)]^{-\left(\frac{D}{2a-D(q_v-1)}\right)}}{\left\{ 1+(q_v-1) \frac{\Delta x_t^2}{[T_{q_v}^v(t)]^{\frac{2}{2a-D(q_v-1)}}} \right\}^{\left(\frac{a}{(q_v-1)}\right)}} \quad (3.14)$$

Considerando uma interpolação linear para qV obtém-se: $a = 1 + \left(\frac{D-1}{2}\right) (q_v - 1)$ ($\forall q_v, \forall D$) que utilizada na expressão da distribuição de visita de TSALLIS e STARIOLO (1996) acabou em:

$$g_{q_v}(\Delta x t) = \left(\frac{q_v-1}{\pi} \right)^{\frac{D}{2}} \left[\frac{\Gamma\left(\frac{1}{(q_v-1)} + \frac{D-1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{(q_v-1)} - \frac{1}{2}\right)} \right] \left[\frac{[T_{q_v}^v(t)]^{-\left(\frac{D}{3-q_v}\right)}}{\left\{ 1+(q_v-1) \frac{\Delta x_t^2}{[T_{q_v}^v(t)]^{\frac{2}{3-q_v}}} \right\}^{\left(\frac{1}{(q_v-1)} + \frac{D-1}{2}\right)}} \right] (\forall q_v, \forall D) \quad (3.15)$$

Adicionalmente adotou-se a proposta metodológica de gerar um vetor randômico $\Delta x = g^{-1}(\omega)$ e utilizando a integração numérica aplicada à distribuição visitante $g_{q_v}(x)$ para o valor de $D=1$ (MORET et al., 1998), obtendo:

$$g_{q_v}(x) = \left(\frac{q_v-1}{\pi} \right)^{1/2} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{(q_v-1)}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{(q_v-1)} - \frac{1}{2}\right)} \frac{[T_{q_v}^v(t)]^{-\left(\frac{1}{3-q_v}\right)}}{\left\{ 1+(q_v-1) \frac{x^2}{[T_{q_v}^v(t)]^{\frac{2}{3-q_v}}} \right\}^{\left(\frac{1}{(q_v-1)} - \frac{1}{2}\right)}} \quad (3.16)$$

sendo ω um vetor randômico $[0 \ 1]$ obtido da distribuição de equiprobabilidade e g^{-1} a inversa da integral de $g_{q_v}(x)$, assim, $g^{-1}(\omega) = \text{inversa}\left(\int_{-\infty}^x g_{q_v}(x) dx\right) = \text{inversa}(\omega)$ e:

$$g^{-1}(\omega) = \text{inverse}\left\{ \int_{-\infty}^x \left(\frac{q_v-1}{\pi} \right)^{1/2} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{(q_v-1)}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{(q_v-1)} - \frac{1}{2}\right)} \frac{[T_{q_v}^v(t)]^{-\left(\frac{1}{3-q_v}\right)}}{\left\{ 1+(q_v-1) \frac{x^2}{[T_{q_v}^v(t)]^{\frac{2}{3-q_v}}} \right\}^{\left(\frac{1}{(q_v-1)} - \frac{1}{2}\right)}} dx \right\} \quad (3.17)$$

Calcula-se, com essas implementações, a inversa da função utilizando uma integração em série, considerando-se a inversa da série polinomial truncada na ordem dezessete. Cumprindo-se $\Delta(x) = g^{-1}(w) = \text{inversa}\left(\int_{-\infty}^x g_{q_v}(x) dx\right) = \text{inversa}(w)$ e que a inversa da série seja truncada na solução de g^{-1} , equaciona-se ω como:

$$\omega = \omega(x) = \left(\frac{q_v-1}{\pi}\right)^{1/2} \frac{\Gamma\left(\frac{1-\frac{1}{2}(q_v-1)}{(q_v-1)}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{(q_v-1)-\frac{1}{2}}\right)} \int_{-\infty}^x \frac{a}{(1+bx^2)^c} dx \quad (3.18)$$

$$\text{onde: } a = [T_{q_v}^v(t)]^{-\left(\frac{1}{(3-q_v)}\right)}; b = \frac{(q_v-1)}{[T_{q_v}^v(t)]^{\frac{2}{3-q_v}}}; c = \frac{1}{(q_v-1)} - \frac{1}{2}.$$

Infere-se que utilizando a série de potências obtém-se:

$$\omega = \frac{1}{2} + ax - \frac{1}{3}abcx^3 + \frac{1}{5}\left(\frac{1}{2}ac^2b^2 + \frac{1}{2}acb^2\right)x^5 + \dots;$$

isto é, $\omega(x) = \omega_0 + A_1x + A_2x^3 + A_5x^5 + \dots$;

$$\text{ou, } \omega(x) = \omega_0 + \sum_{n=1}^{\infty} A_n(x - x_0)^n \quad (3.19)$$

Debruçando-se na função inversa $g^{-1}=x=x(\omega)$ para $x(\omega)-x=0$ e a equação (3.19) deduz-se que a função inversa pode ser expressada em termos de série potencial:

$x(\omega) = x_0 + \sum_{n=1}^{\infty} B_n(\omega - \omega_0)^n$. Com isso, os valores de B_n assumem a seguinte forma:

$$B_n = \frac{1}{nA_1^n} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\dots} (-1)^{\alpha+\beta+\gamma+\dots} \frac{(n)(n+1)\dots(n-1+\alpha+\beta+\gamma+\dots)}{\alpha!\beta!\gamma!\dots} \left(\frac{A_2}{A_1}\right)^\alpha \left(\frac{A_3}{A_1}\right)^\beta \quad (3.20)$$

Os primeiros coeficientes de B_n podem ser expressos como: $B_1 = \frac{1}{A_1}$; $B_2 = -\frac{A_2}{A_1^3}$;

$$B_3 = \frac{1}{3A_1^3} \left[\frac{(3)(4)}{2!} \left(\frac{A_2}{A_1}\right)^2 - \frac{(3)}{1!} \left(\frac{A_3}{A_1}\right) \right]; B_4 = \frac{1}{4A_1^4} \left[-\frac{(4)(5)(6)}{3!} \left(\frac{A_2}{A_1}\right)^3 + \frac{(4)(5)}{2!1!} \left(\frac{A_2}{A_1}\right) \left(\frac{A_3}{A_1}\right) - \frac{(4)}{1!} \left(\frac{A_4}{A_1}\right) \right]$$

Dessa maneira, essa proposta metodológica torna desnecessária a utilização da distribuição do voo de Lévy como distribuição visitante como proposto originalmente no GSA clássico (KIRKPATRICK et al., 1983, MORET et al., 1998). A partir deste ponto, definiu-se a aplicação do algoritmo de otimização GSA para minimização de uma função custo $E(x)$ em quatro etapas:

- 1) Fixa-se o valor de qV começando em um tempo $t=l$ com valor arbitrário xl e um valor suficientemente alto de temperatura $T_{qV}^V(1)$ determinando-se o valor para $E(xl)$ e iniciando o processo de esfriamento segundo a equação (3.21);

$$T_{q_v}^v(t) = T_{q_v}^v(1) \frac{2^{q_v-1}-1}{(1+t)^{q_v-1}-1} \quad (3.21)$$

- 2) Gerar randomicamente $x_{(t+1)}$ de x_t utilizando a distribuição de visita $g_{q_v}(\Delta \mathbf{X}_t)$ segundo a equação (3.22) determinando-se a forma do pulo $\Delta \mathbf{X}_t$ e isotropicamente define sua direção; garantindo um vai e vem de busca do algoritmo ao longo de todo o hipercubo. Como,

$$\Delta \mathbf{x}_t = g^{-1}(w), \text{ então } x(t+1) = x(t) + g^{-1}(w) \quad (3.22)$$

3) Determina-se $E(x(t+1))$:

Se $E(x(t+1)) < E(xt)$, substituir x_t por $x_{(t+1)}$.

Se $E(x(t+1)) \geq E(xt)$, empregar um número randômico r no intervalo de $[0, 1]$: Se r é maior que a probabilidade de aceitação generalizada P_{qA} como formulada na equação (3.23) com $T_{qA}^A(t) = T_{qv}^v(t)$, reter o valor de x_t ; de outra forma, substituir x_t por $x_{(t+1)}$;

$$P_{qA}(xt \rightarrow x(t+1)) = \left\{ \begin{array}{l} 1 \text{ se } E(x(t+1)) \leq E(xt) \\ \frac{1}{\{1 + [1 + (q_A - 1)(E(x(t+1)) - E(xt))] / T_1^A(t)\}^{(1/(q_A - 1))}} \text{ se } E(x(t+1)) > E(xt) \end{array} \right\} \quad (3.23)$$

onde o índice A e qA correspondem originalmente ao valor da máquina de Boltzman, isto é, o valor de um. De igual maneira, para o índice V e qV que correspondem ao valor da máquina de Cauchy com valor de dois.

4) Calcula-se a nova temperatura, $T_{qv}^v(t)$, utilizando a equação 3.24, logo, voltando para o passo 2 até obter o mínimo de $E(xt)$ dentro da precisão desejada.

3.5.3 - Algoritmo híbrido inovador do *Generalized Simulated Annealing*: GSA-híbrido

Um algoritmo inovador do *Generalized Simulated Annealing* foi proposto denominado de GSA-híbrido com o propósito de evitar que o GSA “pule” quando atinge um valor próximo ao mínimo global. Esta nova técnica foi inspirada na técnica do gradiente convergente da literatura (DE ANDRADE et al., 2008). Como hipótese foi estabelecido que o incremento de variável probabilística no domínio da equação 3.19 (vetor randômico $\Delta x = g^{-1}(w)$) transforma-se em uma variável determinística no momento que um valor da função objetivo encontra-se na região do mínimo global ou local.

Para esse propósito, uma função *boolean* foi estabelecida para continuar o passo 2 com a equação 3.23, mas com o vetor determinístico Δx até atingir o mínimo global. O valor atribuído ao vetor incremento Δx é convenientemente igual ao valor da tolerância imposta para o cálculo dos parâmetros do modelo. Por outro lado, o vetor Δx adota um valor de acréscimo ou de decréscimo dependendo da posição que o valor obtido do GSA consegue, isto é, se antes ou depois do mínimo global ou local, respectivamente. Desse modo, a estratégia imposta no passo 2 da equação 3.23 não é alterado continuando o ajuste do GSA exceto da condição de se

trabalhar com um Δx determinístico. Quando o mínimo local ou global é atingido a função *boolean* finaliza voltando às características originais probabilísticas de Δx .

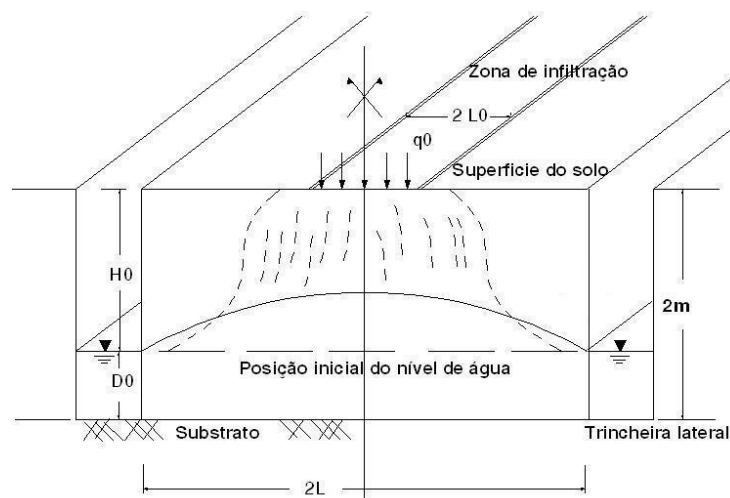
Na sequência se dá continuação à metodologia proposta definindo para análise um sistema complexo em particular como é o estudo de caso de infiltração de água em solo não saturado.

4 – METODOLOGIA

4.1 – ESTUDO DE CASO INFILTRAÇÃO

O estudo de caso utilizado para este trabalho foi o experimento em laboratório realizado por VAUCLIN et al. (1979) simulando o fenômeno de infiltração apresentado na figura 4.1 (AGUERO-MARTINEZ, 2013). Inere-se dessa figura que o fluxo de água constante simula uma precipitação pluvial com a conseqüente infiltração de água através do meio do solo não saturado elevando o nível do lençol freático em forma dinâmica. Como na seção de simetria não há fluxo horizontal, apenas uma das seções do esquema foi montada no experimento. Essa figura 4.1 apresenta o reservatório utilizado para o experimento com 3 m de largura, 2 m de altura e 5 cm de espessura. Esse reservatório foi preenchido com areia fina de distribuição granulométrica uniforme e o nível freático mantido constante a 135 cm do topo pela rede de drenagem.

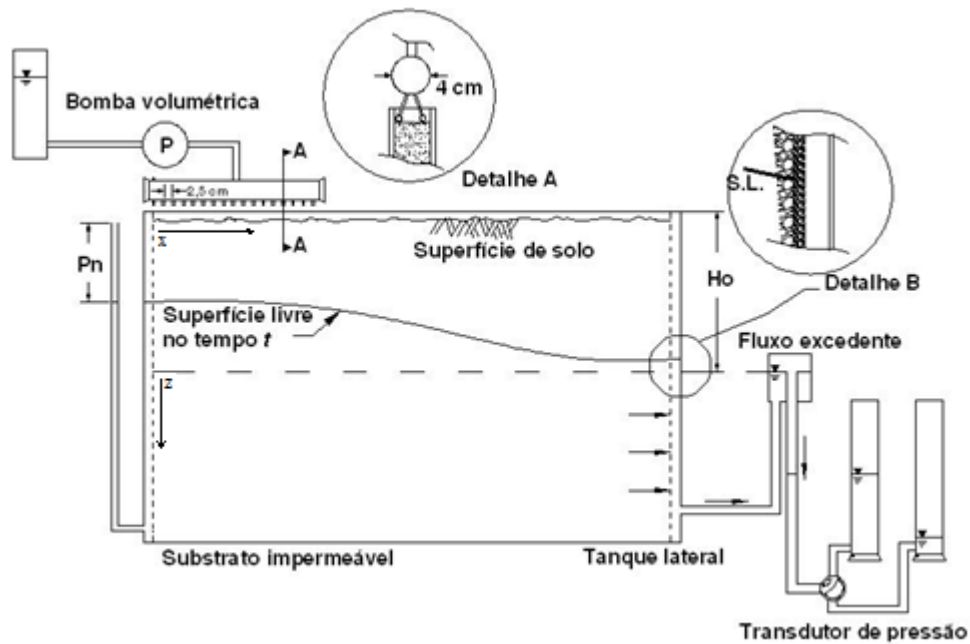
Figura 4.1 – Diagrama esquemático do experimento.



Fonte: modificado de VAUCLIN et al. (1979)

A figura 4.2 apresenta a parte inferior do reservatório considerando-o como uma superfície impermeável. Na parte superior esquerda foi instalada uma bomba volumétrica, como mostrado no detalhe A da figura 4.2. O comprimento da bomba é de $x=0$ a $x=50$ cm. O restante da superfície superior do tanque foi coberto para evitar a evaporação. Na lateral direita, segundo detalhe B na figura 4.2, mantém-se o nível freático em $z=-135$ cm. Após estabilização do nível freático, aplica-se uma taxa de recarga constante de 14,8 cm/h através de bomba.

Figura 4.2 – Detalhes do experimento, com vazão constante igual a 14,8 cm/h.



Fonte: modificado de VAUCLIN et al. (1979)

Foram obtidas medidas de umidade volumétrica com atenuação de raios gamma, emitidos por uma fonte Am241. A carga de pressão foi medida por 20 tensiômetros, cada um ligado ao seu próprio transdutor. Vauclin et al. (1979) utilizaram o método dos mínimos quadrados para determinar a equação 4.3 que representa a equação de retenção da água no solo:

$$\theta = \theta_{sat} \frac{\alpha}{\alpha + |\psi|^{\beta^*}} \quad \psi \leq 0 \quad (4.3)$$

em que: a umidade saturada do solo (θ_{sat}) equivale a 0,30; o coeficiente de retenção (α) equivale a 40000 cm^{2,9}; e, o coeficiente β^* é igual a 2,9. A demonstração do cálculo por mínimos quadrados encontra-se no Apêndice B.

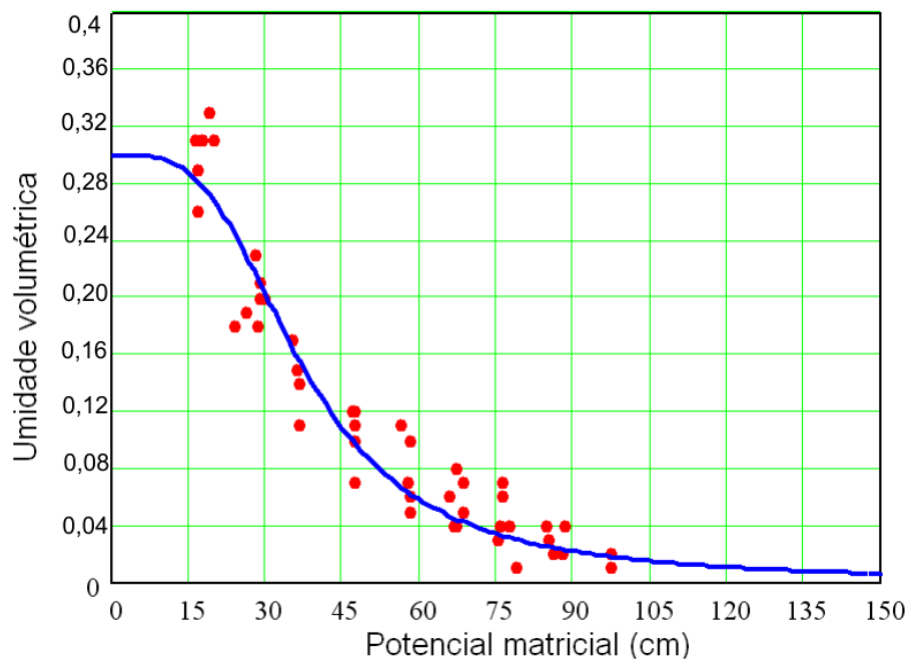
Vauclin et al. (1979) também determinaram a equação 4.4 de condutividade hidráulica do solo:

$$K = K_{sat} \frac{A^*}{A^* + |\psi|^{\beta^*}} \quad \psi \leq 0 \quad (4.4)$$

em que: a condutividade hidráulica saturada (K_{sat}) equivale a 35 cm/h; o coeficiente A^* é igual a $2,99 \cdot 10^6 \text{ cm}^5$; e, o coeficiente B^* equivale a 5,0.

A figura 4.3 apresenta a curva de retenção da água no solo do experimento de Vauclin et al. (1979) com base na equação 4.3. Também, nessa figura aparecem os pares ordenados tanto de umidade volumétrica como de potencial matricial medidos por Vauclin et al. (1979) em amostras do solo.

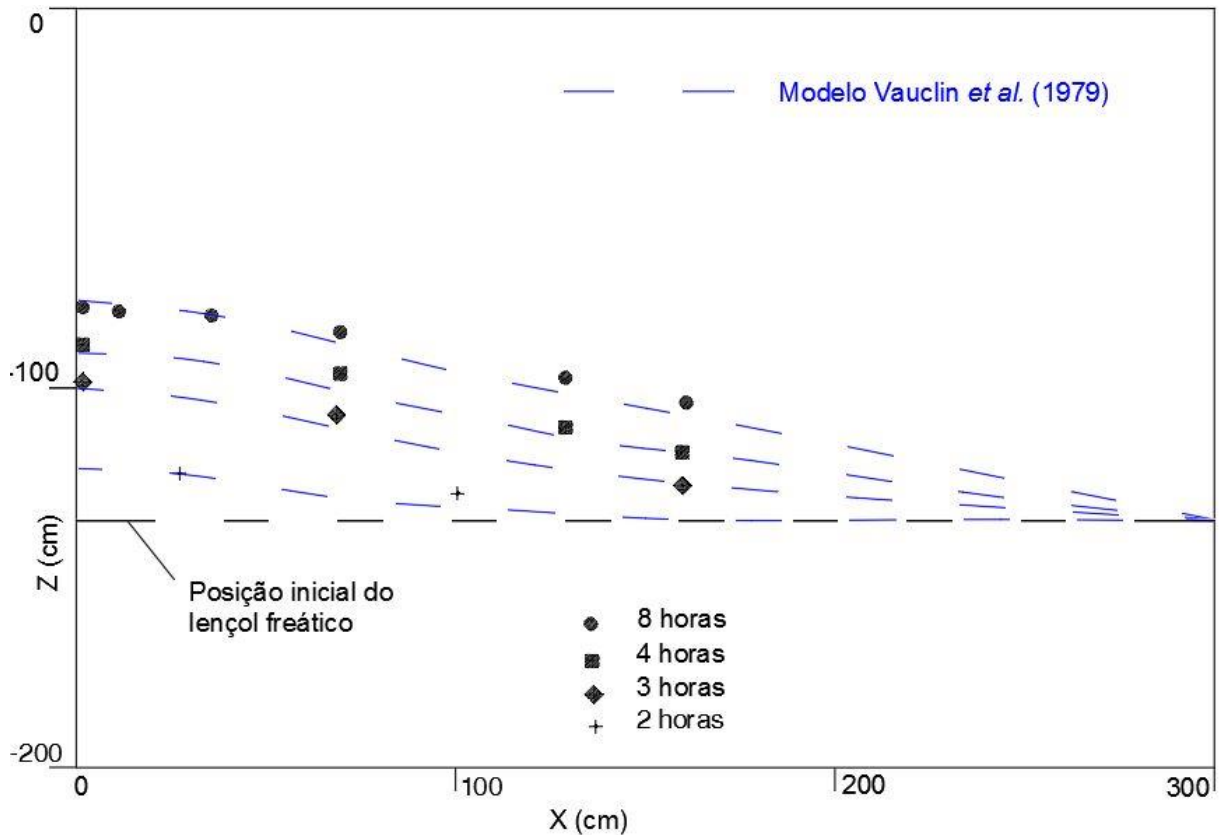
Figura 4.3 – Curva de retenção da água no solo.



Fonte: modificado de VAUCLIN et al. (1979)

Vauclin et al. (1979) utilizaram quinze pontos de controle para determinar as diferentes posições do lençol freático nos intervalos de tempo de duas horas, três horas, quatro horas e oito horas. A figura 4.4 apresenta esses pontos de controle e a curva que indica a mudança de posição do nível freático em função do tempo, as linhas intermitentes representam os níveis freáticos modelados por Vauclin et al. (1979).

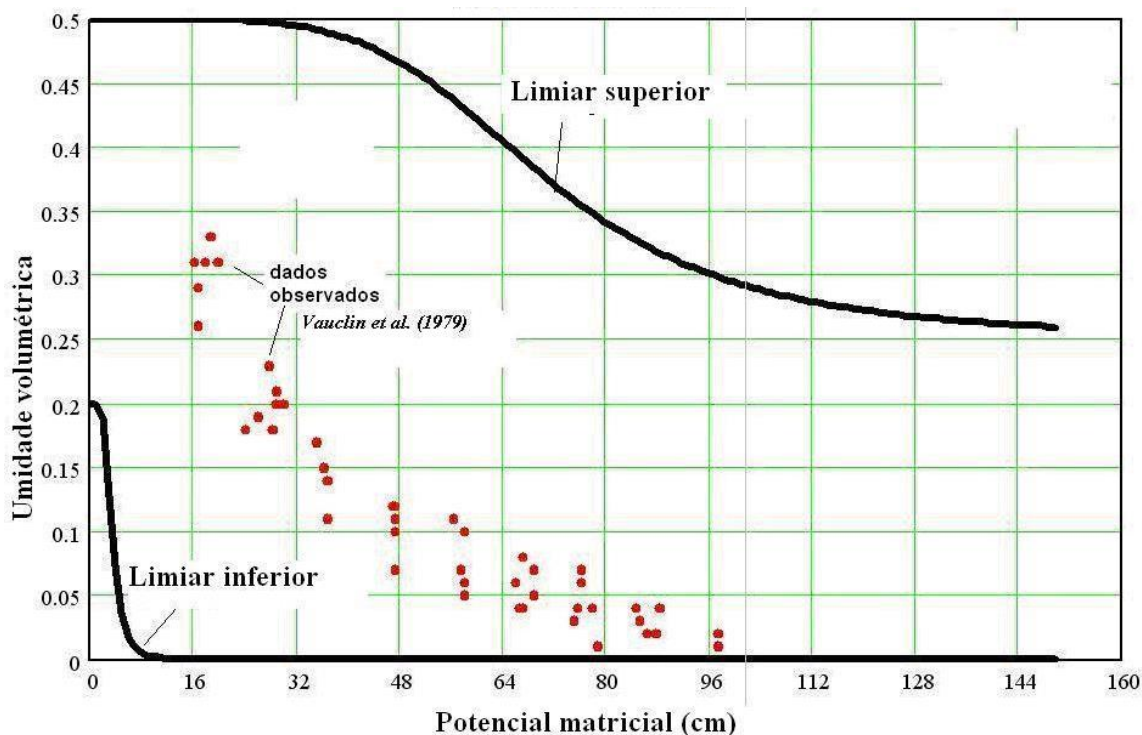
Figura 4.4 – Posição do nível freático em diferentes tempos. As linhas intermitentes representam os níveis freáticos modelados por Vauclin et al. (1979).



Fonte: modificado de VAUCLIN et al. (1979)

A figura 4.5 apresenta graficamente duas curvas de retenção da água no solo, que serão chamados limiar superior e limiar inferior, respectivamente. Essas curvas abrangem muito bem os valores de pares ordenados tanto de umidade volumétrica como de potencial matricial do experimento de Vauclin et al. (1979).

Figura 4.5 – Limiares superior e inferior de busca AG e os dados observados do experimento de Vauclin et al. (1979).



Fonte: modificado de VAUCLIN et al. (1979)

A tabela 4.1 apresenta os valores dos parâmetros do Modelo de van Genuchten - MVG (ver equação 3.10) correspondentes ao limiar superior e inferior da figura 4.5. Essa tabela 4.1 mostra que o parâmetro n tende a ser sempre um valor maior, e o parâmetro α tem um valor maior para a curva de limiar inferior, o contrário também é certo. A condutividade hidráulica não afeta a curva característica formada pela equação 3.10, desse modo sua consideração na tabela 4.1 é simples conferência. A umidade saturada considera uma faixa que inclui o valor experimental de umidade saturada de 0,30. A umidade residual também varia em uma faixa que inclui o valor da umidade residual experimental de zero.

Tabela 4.1 – Valores dos parâmetros do MVG correspondentes ao limiar superior e inferior da figura 4.5.

Parâmetros	n	α cm ⁻¹	K_{sat} cm/h	θ_{sat} cm ³ /cm ³	θ_{res} cm ³ /cm ³
Limiar superior	5,00	0,015	35,00	0,50	0,10
Limiar inferior	5,00	0,300	0,00	0,20	0,00

A tabela 4.2 apresenta o campo de busca definitivo dos algoritmos de otimização para determinação dos parâmetros do modelo de van Genuchten. Essa tabela 4.2 resulta da combinação de critérios colocadas na tabela 3.1 e 4.1. A tabela 4.2 resgata da tabela 3.1 a ampla

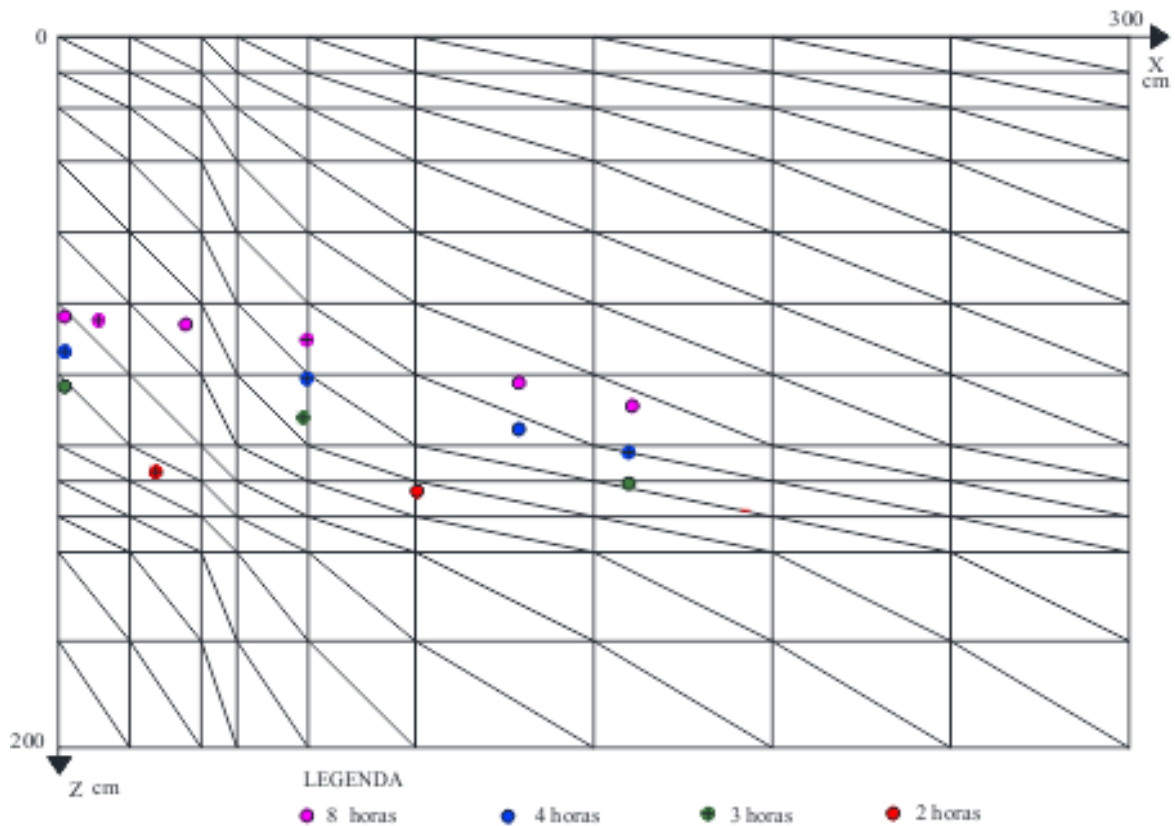
faixa de valores de condutividade hidráulica de diversos tipos de solos que oscila de 0 até 300 cm/h. Essa tabela 4.2 considera como valor máximo do parâmetro adimensional empírico de n o mesmo da tabela 4.1, mas para garantir uma busca ampla considerou-se o mínimo valor tolerável da equação 3.10 que deve ser maior que 1. A faixa de valor do parâmetro empírico α estabelecido na tabela 4.2 respeita a faixa de valores de α da tabela 4.1. O intervalo de valores para busca do parâmetro de umidade saturada na tabela 4.2 concorda com o colocado na tabela 4.1. O intervalo de valores para busca do parâmetro de umidade residual considera a faixa lógica máxima de 0,2, pois não pode perpassar valores de umidade saturada e inclui apropriadamente o valor da umidade residual experimental. Já o valor mínimo de umidade residual só pode ser zero para manter a lógica de critério físico do experimento.

Tabela 4.2 – Faixa de valores maior e menor definitivos utilizados para o processo de busca

Parâmetros	n	α cm ⁻¹	K_{sat} cm/h	θ_{sat} cm ³ /cm ³	θ_{res} cm ³ /cm ³
Valor maior	5,00	0,5000	300,00	0,50	0,20
Valor menor	1,01	0,0001	0,00	0,20	0,00

A figura 4.6 apresenta a discretização do fenômeno físico que consta de uma malha do Método de Elementos Finitos (MEF) de forma triangular (Zienkiewicz, 1977). Essa figura 4.6 também apresenta os quinze pontos de controle, os quais foram monitorados em laboratório, que indicam a mudança de posição do nível freático em diferentes períodos de tempo de duas, três, quatro e oito horas respectivamente. Os valores das variáveis em relação ao tempo e ao espaço nos pontos de controle constituem-se nos dados observados. No caso específico do estudo de caso experimental deste trabalho optou-se por trabalhar apenas com a variável de potencial matricial.

Figura 4.6 – Malha adotada para simulação numérica aplicada ao experimento de VAUCLIN et al. (1979), apresenta-se os pontos de controle.



Fonte: modificado de VAUCLIN et al. (1979)

A calibração automática do modelo inverso requer o estabelecimento de uma Função Objetivo (FO). A seguir, amplia-se o conceito da FO utilizada.

4.1.1 – Estabelecimento da Função Objetivo

Como já mencionado, as técnicas de otimização precisam de uma função objetivo (FO) onde os valores dos parâmetros buscados devem ser ajustados. Neste trabalho, será minimizado uma FO com base na diferença de valores de dados simulados e os de valores de dados observados nos pontos de controle, como mostrado na equação 4.5:

$$MIN FO = \sum_{i=1}^n (|P_{i_{Observado}} - P_{i_{Simulado}}|)^2 \quad (4.5)$$

sendo: $P_{i_{Observado}}$ o valor de potencial matricial medido experimentalmente no ponto de controle i em relação ao tempo e ao espaço; $P_{i_{Simulado}}$ o valor de potencial matricial simulado no ponto de controle i em relação ao tempo e ao espaço; n o número total de pontos de controle, quinze

para o experimento de Vauclin et al. (1979); $\sum_{i=1}^n (|P_{i_{Observado}} - P_{i_{Simulado}}|)^2$ o resultante do somatório quadrático dos valores absolutos das diferenças entre o $P_{i_{Observado}}$ e o $P_{i_{Simulado}}$ em todos os pontos de controle do experimento.

4.2 PROCESSO MATEMÁTICO

A abordagem matemática utilizada neste trabalho baseou-se em aproximação numérica tanto no espaço pelo método de elementos finitos (MEF) como no tempo pelo método de diferenças finitas (MDF). O Método dos Elementos Finitos estabelece soluções aproximadas do potencial matricial (ψ) em cada elemento finito da malha imposta. Essas funções de aproximação, denominadas na literatura como “funções de interpolação”, obedecem às condições de contorno do fenômeno físico.

Os potenciais matriciais simulados no inteiro domínio originam valores residuais, denominados de soluções aproximadas. Redistribui-se esses valores residuais em todo o hipercubo mediante o método de resíduos ponderados que se vale de funções ponderadas. Quando utilizado o método de Galerkin, essas funções ponderadas constituem-se nas mesmas das funções de interpolação. Resolvem-se os resíduos ponderados através da integração por partes. Estabelecida dessa forma, soluciona-se a equação que governa o fluxo de água em meio não saturado mediante a montagem de matrizes em cada elemento finito como mostrado na equação 4.6:

$$\overline{Matriz Fluxo} |\psi| + \overline{Matriz Retenção} \left| \frac{d\psi}{dt} \right| = \overline{Vazões Nodais} - \overline{Vazão Gravita} \quad (4.6)$$

em que: $\overline{Matriz Fluxo}$ é a matriz que isola o elemento de fluxo; $\overline{Matriz Retenção}$ é a matriz de capacidade de retenção; $\overline{Vazão Gravita}$ é a matriz de fluxo que inclui os efeitos gravitacionais; $\overline{Vazões Nodais}$ é a matriz do fluxo através do contorno; $|\Psi|$ = vetor com o valor de Ψ (potencial matricial ou poropressão) em todos os nós; $\left| \frac{d\Psi}{dt} \right|$ = vetor com a taxa de variação de Ψ no tempo em cada nó. O apêndice A oferece maiores detalhes do processo matemático.

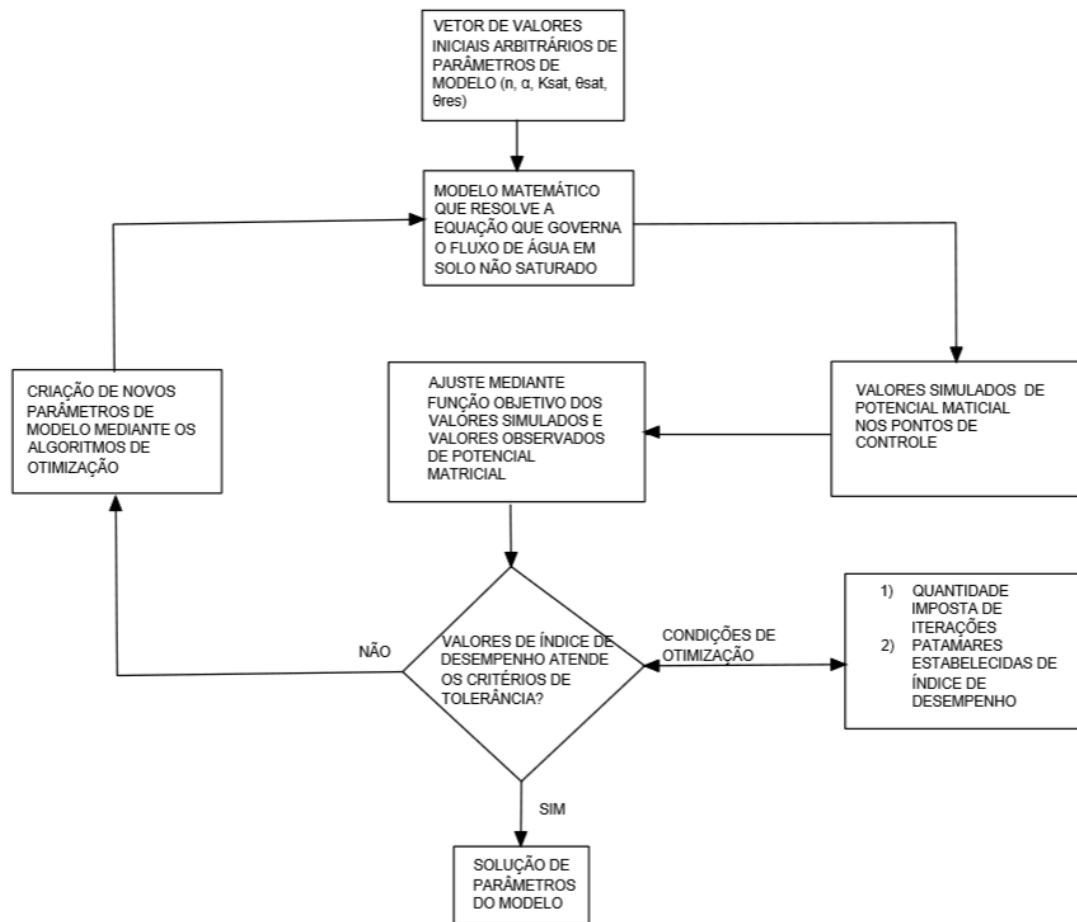
À continuação, descreve-se o processo de calibração automática para atingir os valores de parâmetros simulados do fenômeno físico.

4.2.1 - Esquema do processo de calibração do modelo

O modelo proposto neste trabalho de calibração automática de fluxo de água em meio de solo não saturado encontra-se esquematizado na figura 4.7. Conforme essa figura, estabeleceu-se como primeiro passo um vetor inicial de parâmetros que, nesta proposta, constituem-se em cinco parâmetros (n , α , K_{sat} , θ_{sat} , θ_{res}) do Modelo de van Genuchten (MVG). Dando seguimento ao processo, encaminha-se esse vetor inicial arbitrário ao modelo matemático que soluciona a equação que governa o fluxo de água em meio não saturado.

Após isso, ajusta-se os valores das variáveis simuladas obtidas com os valores observados do experimento mediante a função objetivo (FO) que foi estabelecida na equação 4.5. Submeteu-se o valor resultante da FO (índice de desempenho) às tolerâncias impostas, que se não satisfeitas origina o reinício do processo com a criação de um novo conjunto de parâmetros determinados pelos operadores do Algoritmo de Otimização. Uma vez atingidas as tolerâncias impostas detêm-se a iteração apurando-se os resultados.

Figura 4.7 - Fluxograma do modelo de processo de calibração proposto via modelo matemático com auxílio dos Algoritmos de Otimização.



Fonte: do autor

5 - RESULTADOS E DISCUSSÕES

Discutiu-se a comparação de resultados da aplicação dos algoritmos de otimização primeiro a uma função matemática teste, e depois, ao estudo de caso de infiltração.

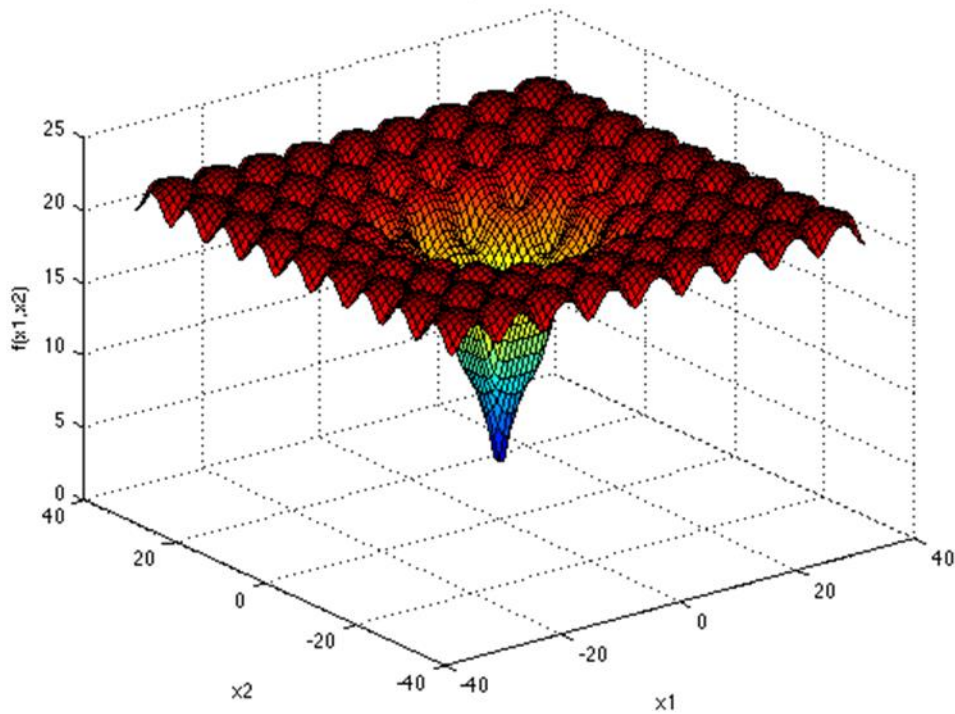
5.1. Teste dos algoritmos de otimização aplicados em função matemática

A função matemática teste foi a função de Ackley apresentada na figura 5.1, onde observou-se que essa função possui ótimos locais e um ótimo global. A expressão matemática

é dada pela equação 5.1, com valores recomendados para essa função: $a = 20$, $b = 0,2$, $c = 2\pi$, $d=2$ (SURJANOVIC E BINGHAM, 2013).

$$f(\mathbf{x}) = -a \exp\left(-b \sqrt{\frac{1}{d} \sum_{i=1}^d x_i^2}\right) - \exp\left(\frac{1}{d} \sum_{i=1}^d \cos(cx_i)\right) + a + \exp(1) \quad (5.1)$$

Figura 5.1- Função ACKLEY com vários ótimos locais e um ótimo global.

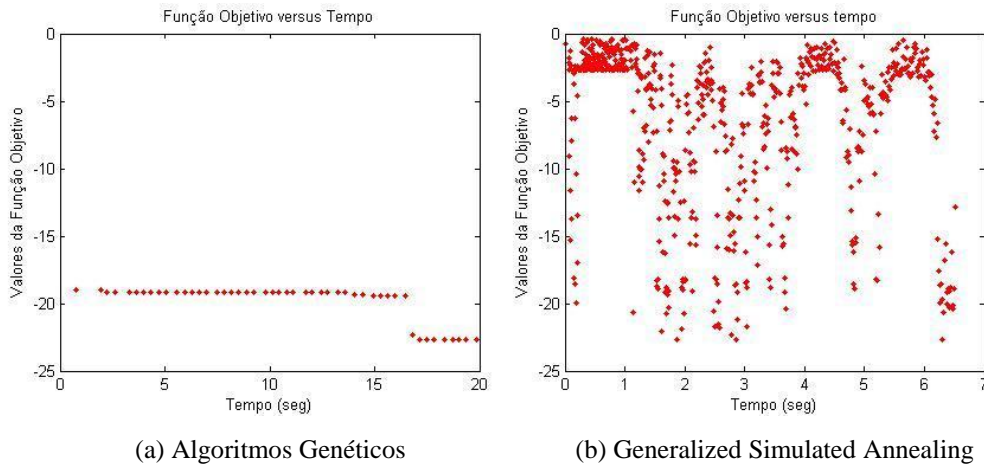


Fonte: Surjanovic e Bingham (2013)

Para o processamento do modelo matemático proposto utilizou-se um computador Pentium Intel core i7. Constata-se na figura 5.2a que o tempo de cômputo utilizado pelos Algoritmos Genéticos - AG para obtenção do ótimo global foi de 16 segundos. A figura 5.2b apresenta o resultado do *Generalized Simulated Annealing* - GSA que atinge um valor próximo do ótimo quase que instantaneamente, mas alcança o mínimo global aproximadamente em dois segundos. Destaca-se que os AG realizam uma busca contínua e de rasteira enquanto que o GSA tem o potencial de reiniciar sua busca de um começo pelo critério do algoritmo de Metropolis outorgando ao algoritmo maior poder de busca.

Em relação ao GSA ter atingido próximo ao ótimo global quase que instantaneamente e depois ter dado um “pulo” discute-se mais na frente os resultados obtidos utilizando o GSA híbrido que aproveita desse resultado próximo para atingir o ótimo global efetivamente.

Figura 5.2 - Comparação de resultados do AG e GSA para a função matemática ACKLEY.

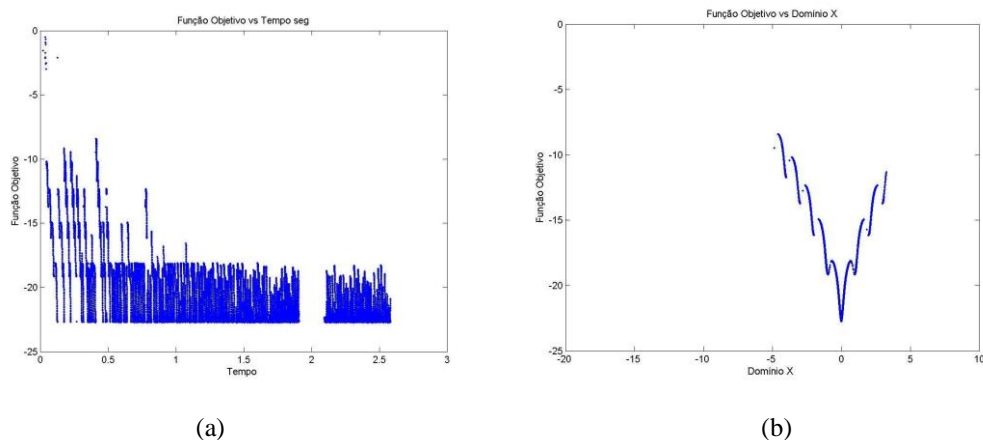


Fonte: do próprio autor

A figura 5.3 apresenta o resultado do GSA híbrido utilizando o critério de convergência. A figura 5.3a mostra o gráfico de Função Objetivo contra o tempo enquanto que a figura 5.3b reflete o gráfico de Função Objetivo contra o espaço. Como supramencionado, diferentemente do resultado do GSA apresentado na figura 5.2, o critério de convergência do GSA-híbrido não permite o GSA sair da bacia atratora para outra quando atinge um primeiro resultado aproximado. Essa técnica híbrida leva ao GSA atingir o mínimo global efetivamente.

Apenas quando consegue-se atingir o mínimo global é que o GSA é permitido continuar seu “pulo” no domínio. O gráfico de Função Objetivo contra o tempo (figura 5.3a) mostra como o primeiro resultado aproximado continua descendo até convergir ao mínimo global. Os espaços vazios da figura 5.3a representam os “pulos” do GSA no vasto domínio, no entanto, quando atinge um valor perto do mínimo ela novamente é forçada a atingir o mínimo global. Nessa figura 5.3a atingiu-se o primeiro mínimo global em 0,12 segundos, mas repete-se o mínimo global frequentemente. A figura 5.3b apresenta um exemplo de como converge o GSA-híbrido ao mínimo global em relação ao espaço. Observa-se como o critério do GSA-híbrido consegue representar os sobe e desce da função matemática antes de atingir o mínimo global.

Figura 5.3 - Resultados do GSA híbrido para a função matemática ACKLEY. (a) mostra o resultado da Função Objetivo em relação ao tempo e (b) apresenta o resultado da Função Objetivo em relação ao espaço.



Fonte: do próprio autor.

5.2. APLICAÇÃO DOS ALGORITMOS DE OTIMIZAÇÃO AO ESTUDO DE CASO DE INFILTRAÇÃO

Como fonte computacional para o processo de simulação do fenômeno de infiltração foi utilizado um Cluster e um computador pessoal com processador Intel® Core™ i7. A figura 5.4a apresenta os resultados dos valores de índice de desempenho da função objetivo em relação ao tempo utilizando tanto os Algoritmos Genéticos como o *Generalized Simulated Annealing*.

Essa figura 5.4a mostra o ajuste do AG utilizando o computador pessoal com código de cômputo desenvolvido em MATLAB. Determina-se que o patamar mínimo de índice de desempenho do AG foi de 2658 em um tempo de duas horas e meia. Entretanto, quando o processo de calibração dos AG foi submetido ao cluster em linguagem de código FORTRAN atingiu-se o valor mínimo de 400, demandando um tempo computacional de sete dias, isto é, o cluster obteve um melhor ajuste (400), utilizando um tempo computacional maior (AGUERO-MARTINEZ, 2013). Acredita-se que o resultado do cluster foi o melhor ajuste atingido para o fenômeno de infiltração utilizando os algoritmos genéticos. Logo, esse resultado do cluster foi utilizado para comparação com os resultados obtidos utilizando o GSA e GSA-híbrido que se passa a mostrar à continuação.

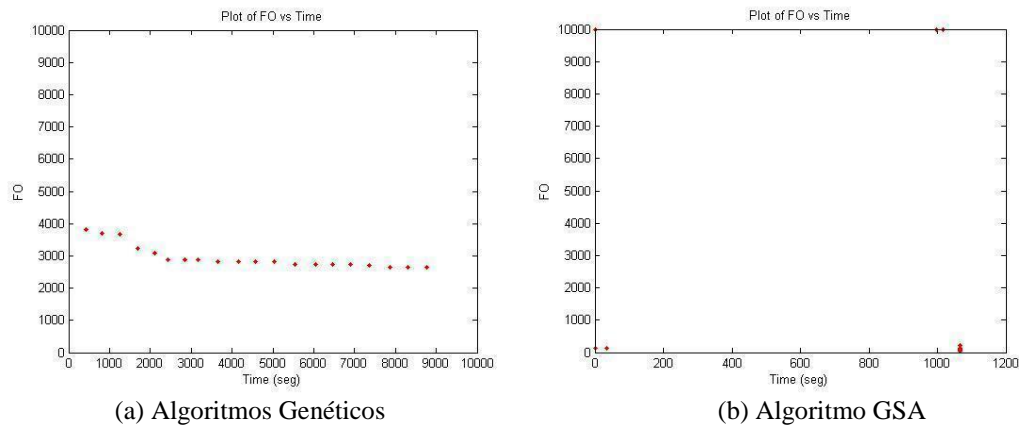
Voltando-se para a figura 5.4b apresenta-se o resultado do ajuste do GSA em relação ao tempo. Destaca-se que o GSA atinge valores penalizados de índice de desempenho da ordem de 10000. O GSA atinge o valor mínimo de índice de desempenho de aproximadamente 40,

demorando 20 minutos. Infere-se que esse valor de índice de desempenho já é um excelente resultado lembrando que o valor zero é utópico e ideal e que sempre existem imperfeições do sistema complexo estudado (ver Apêndice B).

Esse melhor resultado do GSA deve-se ao maior poder de busca mediante a apuração metodológica da distribuição visitante e a probabilidade de aceitação generalizada. Desse modo, o GSA evidencia sua maior eficiência e rapidez quando comparado contra os procedimentos dos Algoritmos Genéticos e seus operadores de mutação, rastejo, cruzamento, entre outros.

Adicionalmente, o GSA tem a potencialidade de melhorar seu próprio ajuste de modelo em um tempo computacional menor quando se manobra com a quantidade de número de ciclos de iteração, com o valor da temperatura inicial, entre outros quesitos. Destaca-se que o algoritmo GSA quase atinge o valor mínimo global em 50 segundos aproximadamente “pulando” para outra resposta, para evitar isso, será aplicada a técnica do GSA-híbrido inspirada no gradiente convergente conjugada.

Figura 5.4 - Convergência de valores da Função Objetivo em relação ao tempo do modelo físico utilizando os Algoritmos Genéticos e o Algoritmo GSA.

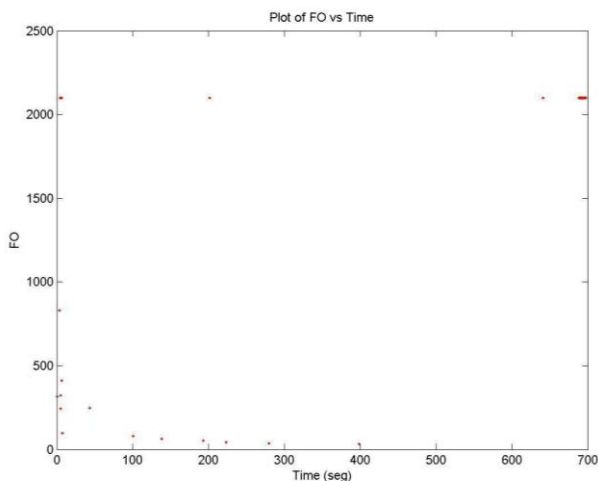


Fonte: do próprio autor.

Na figura 5.5 aprecia-se o resultado do GSA-híbrido onde a Função Objetivo atinge um valor menor (33,5) que o atingido pelo GSA (40) da figura 5.4. O valor de zero ideal não foi obtido, recorrendo-se ao argumento da existência de ruídos que são inerentes em todo o sistema complexo. Contudo, destaca-se a efetividade do GSA-híbrido considerando-se o menor valor da Função Objetivo em um menor tempo (aproximadamente 7 minutos). Nessa figura 5.5 infere-se do modo que age o GSA-híbrido não deixando “fugir” a resposta próxima ao mínimo global. Essa figura 5.5 apresenta quando o valor do mínimo global é atingido o GSA segue seu

procedimento estocástico de saída para outras bacias atratoras refletido pelo faixa vazia de 400 segundos para frente apenas voltando aparecer para aproximadamente 700 segundos.

Figura 5.5 - Convergência da Função Objetivo em relação ao tempo do modelo físico utilizando o Algoritmo GSA-híbrido.



Fonte: do próprio autor

Apresenta-se a tabela 5.1 onde compara-se o tempo de cômputo utilizado por cada algoritmo de otimização. Essa tabela 5.1 utiliza o tempo computacional abrangido pelo CLUSTER (168 horas) que foi o melhor resultado utilizando a técnica dos Algoritmos Genéticos (AGUERO-MARTINEZ, 2013). Observa-se que quando a simulação do estudo de caso foi realizada no PC pessoal, os algoritmos genéticos utilizam uma quantidade de 1000 gerações com uma população de cinco indivíduos segundo o linguajar dessa técnica, enquanto que a quantidade de iterações no GSA foi de 200 ciclos.

Contudo, como foi mencionado, o GSA deixa “fugir” respostas próximas ao mínimo local ou global. Nesse sentido o GSA-híbrido força a técnica a atingir o mínimo local ou global antes do GSA “pular”. Essa tabela 5.1 apresenta o resultado do GSA-híbrido para a função matemática e o estudo de caso. Observa-se que o GSA-híbrido é extremamente rápido.

Tabela 5.1 - Comparação de tempo de cômputo dos algoritmos de otimização

Aplicação	Algoritmos de otimização		
	AG	GSA	GSA-híbrido
Função matemática	16 segundos	2 segundos	0,12 segundos
Estudo de caso sistema complexo de infiltração	168 horas (CLUSTER)	20 minutos	7 minutos

A tabela 5.2 compara os resultados simulados obtidos por ambos os algoritmos de otimização dos valores dos cinco parâmetros das equações de van Genuchten (1980) (n , α , K_{sat} , θ_{sat} , θ_{res}). Do mesmo modo, essa tabela 5.2 apresenta os valores dos parâmetros experimentais de solo obtidos por Vauclin et al. (1979) (K_{sat} , θ_{sat} , θ_{res}) que serão comparados aos valores simulados pelos algoritmos de otimização.

A condutividade hidráulica K_{sat} (cm/h) do experimento difere do resultado simulado do Algoritmo Genético na ordem de 3 cm/h e do GSA na ordem de 5 cm/h. Os valores experimentais do teor volumétrico da unidade saturada θ_{sat} (cm³/cm³) e de umidade residual θ_{res} (cm³/cm³) também são muito próximos das simulações do AG e GSA. Infere-se assim da sensibilidade desses valores de parâmetros, uma vez que, qualquer pequena mudança desses valores origina resultados de índice de desempenho apreciavelmente diferentes e conseqüentemente ocasionando maior custo computacional (ver Apêndice A).

Destaca-se da tabela 5.2 que os valores de n e α , parâmetros empíricos do modelo, apresentam valores próximos para os três algoritmos de otimização: algoritmos genéticos, *Generalized Simulated Annealing* - GSA e o GSA-híbrido. Assim, n tende a um valor alto de quase quatro. Um valor alto de n era aguardado conforme discutido da figura 4.5 onde os valores de n das curvas de retenção utilizados como limiar superior e inferior tendiam a um valor próximo de cinco (ver tabela 4.1). Ressalta-se que o valor de α também guarda uma certa semelhança dos valores obtidos pelos algoritmos de otimização tendendo a um valor de 0,025. Como foi discutido da tabela 4.2 os valores da faixa de procura do parâmetro α resultou apropriada para busca dos algoritmos de otimização.

Neste estudo de caso de infiltração em relação à procura de simular os valores de parâmetros físicos obtidos em laboratório destaca-se que não adianta procurar atingir uma tolerância de erro perto de zero, uma vez que, esses valores experimentais são inerentemente aproximados por ser um sistema complexo (ver Apêndice A). Do mesmo modo, não seria apropriado deixar como constante alguns dos parâmetros do modelo de van Genuchten, quer seja, o parâmetro n ou α , afim de determinar os outros parâmetros, pois esses são parâmetros sensíveis que causa grande mudança na constatação de resultados mediante a curva característica como considerado mais na frente (D'ANIELLO et al., 2019).

Contudo, a aplicação do GSA-híbrido resultou extremamente rápido e eficiente apesar dos problemas mencionados sobre a simulação do fenômeno físico. A tabela 5.2 apresenta os

valores simulados obtidos pelo GSA-híbrido em relação aos valores experimentais de Vaucelin et al. (1979). Observa-se que o valor da umidade saturada θ_{sat} é menor que o obtido pelo GSA e AG, mas como se reitera existe perturbação na determinação desse parâmetro experimentalmente (ver Apêndice A). Contudo, o valor da umidade residual θ_{res} obtido pelo GSA-híbrido é bem mais próximo do valor experimental em relação aos outros algoritmos de otimização. O valor da condutividade hidráulica K_{sat} obtido pelo GSA-híbrido é maior que o obtido pelo GSA, no entanto, menor que o obtido pelos algoritmos genéticos e do que o valor experimental. Já os valores de n e α mantêm quase o mesmo comportamento que o obtido pelo GSA como foi discutido anteriormente.

Tabela 5.2 - Comparação dos valores simulados obtidos pelos Algoritmos de Otimização contra os valores obtidos experimentalmente por VAUCLIN et al. (1979)

	n <i>adimensional</i>	α <i>cm⁻¹</i>	K_{sat} <i>(cm/h)</i>	θ_{sat} <i>(cm³/cm³)</i>	θ_{res} <i>(cm³/cm³)</i>
Valores do experimento de VAUCLIN et al. (1979)	----	----	35,0000	0,30	0,00
Algoritmos Genéticos (AG)	3,57	0,030	32,2200	0,310	0,020
GSA	4,13	0,024	30,0819	0,298	0,010
GSA-híbrido	4,56	0,027	31,5123	0,254	0,006

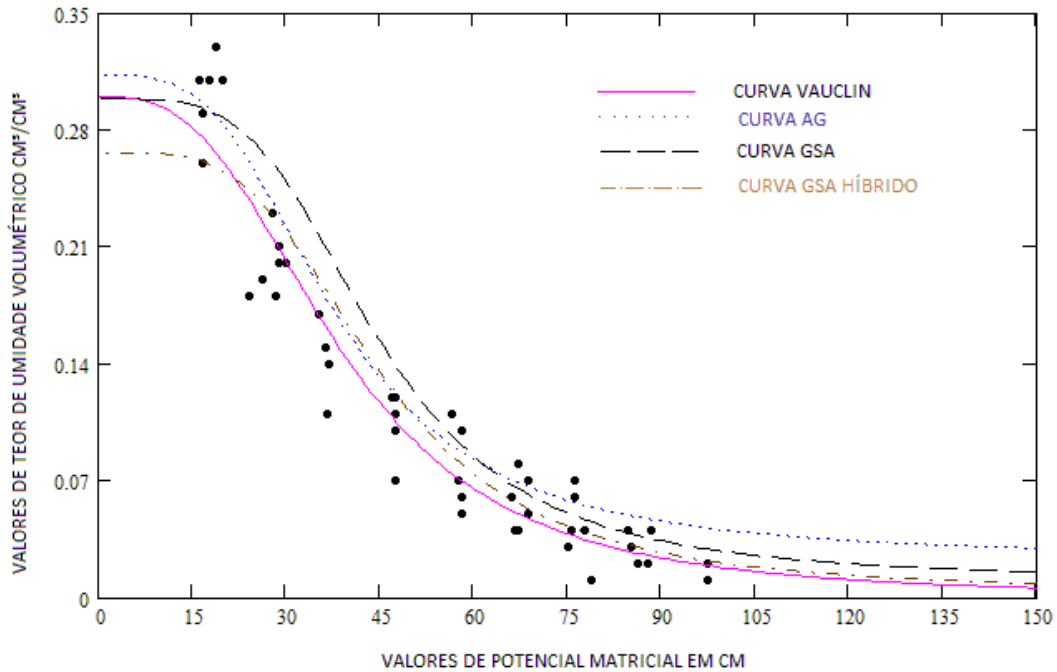
O ganho deste trabalho pode ser conferido nas figuras 5.6 e 5.7. Nessa figura 5.6 observa-se a curva do modelo aplicado por VAUCLIN et al. (1979), denominada de “curva VAUCLIN” representada em linha sólida. A linha em pontos representa o ajuste obtido pelos Algoritmos Genéticos chamada de “curva AG”, a linha intermitente com tracejadas maiores é o simulado pela técnica do Algoritmo de Recozimento Simulado Generalizado, chamada de “curva GSA” e a linha intermitente com tracejados menores representa a simulação do GSA-híbrido.

Essas curvas “características” foram construídas utilizando esses valores dos parâmetros obtidos pela simulação numérica da tabela 5.2 e a equação 3.10 do modelo de van Genuchten. Estas curvas não são obtidas por eventos diferentes como realizado pelo autor do experimento (VAUCLIN et al., 1979), senão, para este trabalho proposto, essas curvas servem de mera constatação de resultado da simulação de infiltração (ver apêndice B).

Aponta-se que os três algoritmos de otimização (algoritmos genéticos, GSA e GSA-híbrido) conseguem o formato de “S” espelhado próxima da curva característica obtida pelo autor do experimento (VAUCLIN et al., 1979). No entanto, ressalta-se que a curva AG mostra deficiência tanto no patamar (umidade saturada) como na cauda (umidade residual) da curva

característica, enquanto que, o GSA mostra melhor resultado de ajuste em ambos, patamar e cauda. Entretanto, o ajuste do GSA-híbrido apresenta o patamar com menor valor de umidade saturada em relação aos outros algoritmos, mas a cauda é bem mais próxima ao valor experimental (VAUCLIN et al., 1979).

Figura 5.6 - Comparação da curva de retenção da equação de van Genuchten (1980), denominada “curva AG” representada por pontos contra a curva de retenção obtida por Vauclin et al. (1979), denominada de “curva VAUCLIN”, “curva GSA” e “curva GSA-híbrido”.



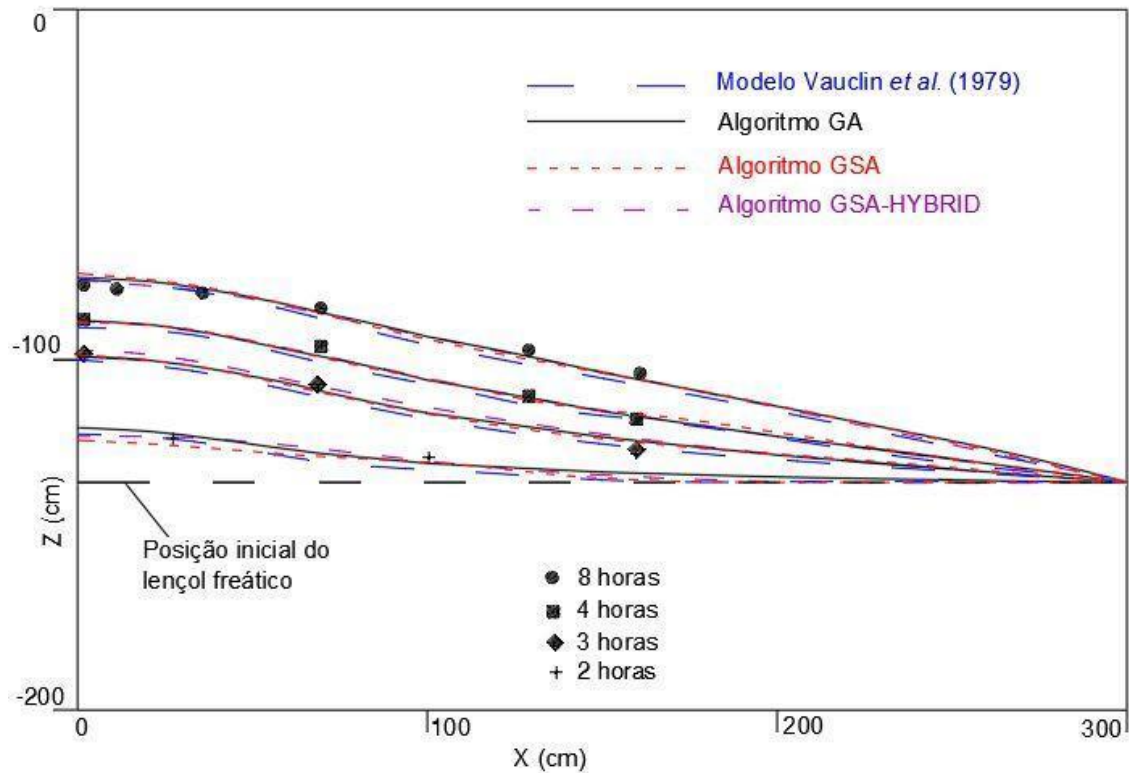
Fonte: do próprio autor.

Como foi mencionado, a figura 5.7 também representa outro ganho do modelo matemático proposto. Tão igual como a figura 5.6, a figura 5.7 serve como outra constatação da eficiência da simulação de infiltração. Nessa figura 5.7 mostra-se a localização dos quinze pontos de controle unidos em linhas tracejadas longas chamadas de “Modelo Vauclin” a mudança de posição do nível freático em função do tempo e do espaço segundo o experimento em laboratório (VAUCLIN et al., 1979). Nessa figura 5.7 aparece em linhas sólidas o ajuste da técnica dos algoritmos genéticos chamada de “Algoritmo AG”. Em linhas tracejadas menor está o resultado de infiltração obtida pelo GSA denominada de “Algoritmo GSA”.

Em linhas intermitentes com tracejado menor está o resultado de infiltração do GSA-híbrido denominada “GSA-híbrido”. Atentou-se ao fato que os resultados de otimização dos três algoritmos são razoáveis cumprindo com simular o fenômeno físico de infiltração e recarga do aquífero. Reitera-se que os resultados da figura 5.6 e figura 5.7 conseguem ser unidos em

um só evento graças ao modelo proposto (AGUERO-MARTINEZ, 2013) em contrapartida de eventos separados como proposto pelo autor do experimento (VAUCLIN et al., 1979).

Figura 5.7 - Localização dos pontos de controle e níveis de lençol freático em diferentes tempos representados em: linhas tracejadas, “modelo de Vauclin”, “Algoritmo GSA”, “Algoritmo GSA-híbrido” e em linha sólida “Algoritmo AG”. Escala em cm.



Fonte: do próprio autor.

6 - CONCLUSÕES

Realça-se a importância deste trabalho em simular o sistema complexo de infiltração aplicado à construção civil restringindo esse fenômeno a um experimento em laboratório, sendo que até na atualidade não se tem registro de aplicação do GSA para a engenharia civil e, mais ainda, propondo uma técnica híbrida para o GSA que auxiliará em muito as tomadas de decisão em outros campos da tecnologia da construção civil, hidrologia, interdisciplinares, entre outros.

Cumpriu-se com os objetivos traçados no trabalho, validando o modelo matemático proposto pelos resultados razoáveis e com rapidez computacional sobre quesitos: de discretização do fenômeno físico no tempo e no espaço, da equação que governa o fluxo de

água em solo não saturado, da modelação da curva de retenção, do modelo inverso, da formulação da função objetivo e da implementação dos algoritmos de otimização.

O estabelecimento de hipóteses de contorno na modelagem do fenômeno físico foi acertada uma vez que agiram apropriadamente na simulação do experimento obtendo-se resultados acertados dos lençóis freáticos em função do tempo.

Remarcou-se claramente a alta sensibilidade dos parâmetros do modelo a cuja procura foram submetidos os algoritmos de otimização, contudo esses algoritmos contornaram bem essa dificuldade obtendo bom sucesso no ajuste desses parâmetros.

A grande hipótese aplicada ao algoritmo *Generalized Simulated Annealing* Híbrido de mudar sua natureza probabilística de avanço no espaço para um avanço determinístico foi bem-sucedida.

A escolha do estudo de caso foi apropriado uma vez que sendo experimental em laboratório reduziu-se ao máximo os ruídos inerentes ao sistema complexo. Contudo, esses ruídos não podem ser totalmente eliminados, pois sempre existiram perturbações inerentes de um sistema complexo.

A discretização do domínio do hipercubo pelo método dos elementos finitos e a discretização no tempo pelo método das diferenças finitas funcionou apropriadamente. O tempo de cômputo consumido pelas discretizações mencionadas foi razoável para o estudo de caso escolhido.

A formulação da função objetivo de minimização de somatória dos quadrados das diferenças das tensões matriciais simuladas e observadas desempenhou-se acertadamente. Se bem é verdade que não se atingiu o valor ideal da minimização, deve-se ter em consideração as imperfeições inerentes do sistema físico modelado.

As condições de tolerância e de interrupção do programa impostas ao modelo matemático foram apropriadas devido ao bom desempenho de penalização de resultados uma vez atingida a tolerância máxima sem sucesso permitindo o fluxo do programa e em relação à outra condição de interrupção do programa que conseguiu finalizar o programa apropriadamente sem nenhum imprevisto quando atingido o número de “gerações” impostas para os Algoritmos Genéticos ou de número de ciclos estabelecidas para o *Generalized Simulated Annealing* e seu híbrido .

As referências da literatura foram apropriadas ao trabalho uma vez que abrangeu os autores originais das técnicas apresentadas. Essas referências também apresentaram o estado de arte do uso dessas técnicas, permitindo fazer uma contribuição com este trabalho ao cenário atual.

O benchmark utilizado, isto é, os Algoritmos Genéticos, foi acertado uma vez que estabeleceu resultados ao qual o GSA e o GSA-híbrido superaram.

As técnicas do GSA utilizando seus próprios operadores como a função de probabilidade de Tsallis, entre outros, consagraram-se, tendo como característica principal a busca no domínio em “pulos” reduzindo o tempo de busca do ótimo global. Daí a proposta de modelo de otimização GSA-Híbrido que se baseia na técnica de gradiente convergente conseguindo convergir esses resultados próximos ao mínimo global e, desse modo, reduzindo impressionantemente o tempo de busca precisando apenas de um computador pessoal, pelo que recomenda-se fortemente o uso desta nova técnica para estudos de caso em pesquisas futuras.

Outro grande motivo de recomendar-se intensamente o uso do GSA-Híbrido como uso inicial na modelação de outros estudos de caso futuros deve-se à robustez apresentada pelo novo algoritmo GSA-híbrido suportando mudanças mínimas sem interrupção abrupta do programa e cumprindo o número de ciclos atribuídos.

A facilidade de utilizar o GSA-híbrido acoplado ao modelo matemático que simula o fenômeno físico o faz apropriado para obter valores iniciais de parâmetros físicos reduzindo custos de laboratório ou de obtenção de dados em campo representando um verdadeiro potencial de uso no campo da engenharia.

REFERÊNCIAS

ARGYROKASTRITIS, I.; KARGAS, G.; KERKIDES P. Simulation of Soil Moisture Profiles Using $K(h)$ from Coupling Experimental Retention Curves and One-Step Outflow Data. **Water Resource Manage**, v.23, p.3255-3266, 2009.

AGUERO-MARTINEZ, D. S. Avaliação de Algoritmos Genéticos na Calibração de Modelo de Fluxo da Água em Solo não Saturado utilizando um Estudo Experimental. *In: XX Simpósio Brasileiro de Recursos Hídricos*, 2013, Bento Gonçalves. **Anais [Simpósio Brasileiro de Recursos Hídricos]**, Bento Gonçalves, RS, 2013 / ISSN 2318-035.

AGUERO-MARTINEZ, D. S.; MURARI, T. B.; SOUZA, F. B. O.; MORET, M. A. Calibração de Modelo de Fluxo Subsuperficial em Escala Menor Adotando os Algoritmos NSGA II, PADD5 E MOPSO. **Revista Cereus**, v.11, n.3, p.190-211, 2019.

AHRENHOLZA, B.; TÖLKEA, J.; LEHMANN, P.; PETERS, A.; KAESTNER, A.; KRAFCZYKA, M.; DURNERC, W. Prediction of capillary hysteresis in a porous material using lattice-Boltzmann methods and comparison to experimental data and a morphological pore network model. **Advances in Water Resources**, v.31, n.9, p.1151-1173, 2008.

AQUINO, A. B. M.; LEAL, L. A.; CARVALHO-SILVA, V. H.; GARGANO, R.; RIBEIRO, L. A. J.; CUNHA, W. F. Krypton-methanol spectroscopic study: Assessment of the complexation dynamics and the role of the van der Waals interaction. **Spectrochimica Acta Part A-Molecular and Biomolecular Spectroscopy**, v.205, p.179-185, 2018.

BAGGIO, A. R.; MACHADO, D. F. S.; CARVALHO-SILVA, V. H. Rovibrational spectroscopic constants of the interaction between ammonia and metallo-phthalocyanines: a theoretical protocol for ammonia sensor design. **Physical Chemistry Chemical Physics**, v.19, n.17, p.10843-10853, 2017.

BUCKINGHAM, E. Studies on the movement of soil moisture. Washington, USDA 61p. (Soils Bulletin, 38), 1907.

BERNARDI, R. C.; MELO, M. C. R.; SCHULTEN, K. Enhanced sampling techniques in molecular dynamics simulations of biological systems. **Biochimica et Biophysica Acta**, v.1850, n.5, p.872-877, 2015.

BERRES, S., CORONEL, A., LAGOS, R. Solución numérica de un problema inverso aplicando un algoritmo genético continuo. **Revista de integración, temas de matemáticas**, v.36, n.2, 2018. DOI: <https://doi.org/10.18273/revint.v36n2-2018001>.

CARROLL, D.L. Genetic Algorithms and Optimizing Chemical Oxygen-Iodine Lasers. **Developments in Theoretical and Applied Mechanics**, v.18, p.411-424, 1996. Ed. H. Wilson, R. Batra, C. Bert, A. Davis, R. Schapery, D. Stewart, and F. Swinson, School of Engineering, The University of Alabama.

CARSEL, R.F. e PARRISH, R.S. Developing joint probability distribution of soil water retention characteristic. **Water Resources Research**, v.24, p.755-769, 1988.

COSTA, L.H.M., CASTRO, M.A.H., RAMOS, H. Utilização de um algoritmo genético híbrido para operação ótima de sistemas de abastecimento de água. **Eng. Sanitária e Ambiental [online]**, v.15, n.2, p.187-196, 2010.

CONSTALES, D. E KACUR, J. On the solution of some inverse problems in porous media flow. **Acta Math. Univ. Comenianae**, LXX, 1(2001), 1-13, 2000.

- DARCY, H. Les Fontaines Publiques de la Ville de Dijon: Exposition et Application des Principes a Suivre et des Formules a Employer dans les Questions de Distribution d'Eau. **Dalmont, V., Ed.**, Paris, p.647, 1856.
- D'ANIELLO, A., CIMORELLI, LUIGI; COZZOLINO, L. The Influence of Soil Stochastic Heterogeneity and Facility Dimensions on Stormwater Infiltration Facilities Performance. **Water Resources Management**, v.33, n.7, p.1-17, 2019.
- DA SILVA, D.M. Estudo de Otimização Global com Base na Termoestatística Não-Extensiva. Dissertação apresentada ao Instituto de Física da Universidade Federal de Goiás, 2005.
- DE ANDRADE, M.D., MUNDIM, K.C., MALBOUISSON, L.A.C. Convergence of the Generalized Simulated Annealing Method with Independent Parameters for the Acceptance Probability, Visitation Distribution, and Temperature Functions. *International Journal of Quantum Chemistry, Special Issue: Proceedings of the XIV Brazilian Symposium of Theoretical Chemistry*, v.108, n.13, p.2392-2397, 2008.
- DE CARLO, L., BERARDI, M., VURRO, M., CAPUTO, M.C. Geophysical and hydrological data assimilation to monitor water content dynamics in the rocky unsaturated zone. **Environmental Monitoring and Assessment**, v.190, n.310, 2018.
- FERREIRA, V.G. e DE LIMA, G.B. Solução numérica de equações diferenciais parciais. V Bienal da SBM Sociedade Brasileira de Matemática UFPB - Universidade Federal da Paraíba 18 a 22 de outubro de 2010.
- FUENTES, S., TREJO-ALONSO, J., QUEVEDO, A., FUENTES, C., CHÁVEZ, C. Modeling Soil Water Redistribution under Gravity Irrigation with the Richards Equation. *Mathematics*, v.8, n.9, p.1581, 2020. DOI.ORG/10.3390/MATH8091581.
- GALERKIN, B.G. Series development for some cases of equilibrium of plates and beams, **Wjestrnik Ingenerow Petrograd**, Vol. 19, pp. 897, 1915, (in Russian).
- GARDNER, W.R. Calculation of capillary conductivity from pressure plate outflow data. **Soil Sci. Soc. Am. Proc.**, v.20, n.3, p.317 - 320, 1956.
- GVIRTZMAN, H., SHALEV, E., DAHAN, O., HATZOR, Y. Large-scale infiltration experiments into unsaturated stratified loess sediments: Monitoring and modeling. **Journal of Hydrology**, v.349, p.214– 229, 2008.
- GOLDBERG, D. Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning. Reading, Massachusetts: Addison-Wesley Professional, 1989. ISBN: 978-0201157673.
- GURRACINO, L. e VELIS, D. A Hybrid Simulated Annealing and Gradient-Based Algorithm for the Estimation of Unsaturated Soil Parameters. **Mecânica Computacional**, v.XXVI, p.2061-2071, 2007.
- HERBERT, F.W. e MARY, P.A. Introduction to groundwater modeling: finite difference and finite element methods. **Academic Press Limited**, London, Inglaterra, 237p, 1982.
- HOLLAND, J.H. Outline for a logical theory of adaptive systems. **Journal of the ACM**, v.9, p.297–314, 1962.
- HOLLAND, J.H. (1975). *Adaptation in Natural and Artificial Systems*. University of Michigan Press, Ann Arbor, Michigan; re-issued by MIT Press, 1992.

- HOLLAND, J.H. (1992). *Adaptation in Natural and Artificial Systems: An Introductory Analysis with Applications to Biology, Control, and Artificial Intelligence*. MIT Press. ISBN: 978-0262082136.
- HOUWELING, S.; BERGAMASCHI, P.; CHEVALLIER, F.; HEIMANN, M.; KAMINSKI, T.; KROL, M.; MICHALAK, A. M.; PATRA, P.: Global inverse modeling of CH sources and sinks: an overview of methods. **Atmos. Chem. Phys.**, v.17, p.235–256, 2017. <https://doi.org/10.5194/acp-17-235-2017>.
- HUYAKORN, P.S. E PINDER, G.F. **Computational Methods in Subsurface flow**. Academic Press, New York, USA, 1983.
- HUYAKORN, P.S., LESTER, B.H., FAUST, C.R. Finite element techniques for modeling groundwater flow in fractured aquifers. **Water Resources Research**, v.19, n.4, p.1019-1035, 1984.
- INES A.V.M. e DROOGERS. Inverse modelling in estimating soil hydraulic functions: a Genetic Algorithm approach. **Hydrology and Earth System Sciences**, v.6, n.1, p.49-65, 2002.
- JHA, M. E DATTA, B. Three-Dimensional Groundwater Contamination Source Identification Using Adaptive Simulated Annealing. **Journal of Hydrologic Engineering**, v.18, n.3, 2013.
- KIRKPATRICK S., GELATT C. D., VECCHI M. P. Optimization by Simulated Annealing. **Science, New Series**, v.220, n.4598, p.671-680, 1983.
- KODESOVÁ, R. Determination of Hydraulic Properties of Unsaturated Soil via Inverse Modeling. **Department of Soil Science and Geology**, Czech University of Agriculture, Prague, Czech Republic, 2003.
- KRISHNAKUMAR, K. Micro-Genetic Algorithms for Stationary and Non-Stationary Function Optimization. **SPIE: Intelligent Control and Adaptive Systems**, 1196, Philadelphia, PA, 1989.
- KUMAR, S.; KAUSHAL, D.R.; GOSAIN, A.K. Evaluation of evolutionary algorithms for the optimization of storm water drainage network for an urbanized area. **Acta Geophysica**, v.67, n.1, p.149–165, 2019
- MAHDI, M. e SHAHROKH, Z. Prediction of soil hydraulic parameters by inverse method using genetic algorithm optimization under field conditions. **Archives of Agronomy and Soil Science**, v.56, n.1, p.13-28, 2010.
- MELO, M.C.R., BERNARDI, R.C., FERNANDES, T.V.A., PASCUTTI, P.G. GSAFold: A new application of GSA to protein structure prediction. **Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics**, v.80, n.9, p.2305-2310, 2012. DOI: 10.1002/prot.24120.
- METROPOLIS, N., ROSENBLUTH, AL, ROSENBLUTH, M. TELLER, A., TELLER E. Equation of State Calculations by Fast Computing Machines. **Journal of Chemical Physics**, v.21, p.1087, 1953.
- MORET, M. A., PASCUTTI, P. G., BISCH, P. M., MUNDIM, K. C. Stochastic Molecular Optimization Using Generalized Simulated Annealing. **Journal of Computational Chemistry**, v.19, n.6, p.647-657, 1998.
- MUALEM, Y. A New Model for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Porous Media. **Water Resour. Res.**, v.12, p.513-522, 1976.

- NEUMAN, S.P. Saturated-Unsaturated Seepage by Finite Elements. **ASCE, Hydraulics Division**, v.99, n.12, p.2233-2250, 1973.
- NIEBER, J.L. Evaluation of coefficient matrices of linear triangular elements involving unsaturated soil moisture flow. **Preprints of papers. Volume 1. 3rd International Conference on finite elements in water resources**, Univ. of Mississippi, 1980.
- PAPAFOTIOU, A., HELMIG, R., SCHAAP, J., LEHMANN, P., KAESTNER, A., FLÜHLER, H., NEUWEILER, I., HASSANEIN, R., AHRENHOLZ, B., TÖLKE, J., PETERS, A., DURNER, W. From the pore scale to the lab scale: 3-D lab experiment and numerical simulation of drainage in heterogeneous porous media. **Advances in Water Resources**, v.31, p.1253–1268, 2008.
- PHILIP, J.R. The theory of infiltration-3: moisture profiles and relation to experiment. **Soil Science, Baltimore**, v.84, p.163-78, 1957a.
- PHILIP, J.R. The theory of infiltration: 4. Sorptivity and algebraic infiltration equations. **Soil Science**, Baltimore, v.84, p.257-265, 1957b.
- PRIESACK, E., DURNER, W. Closed-form expression for the multi-modal unsaturated conductivity function. **Vadose Zone J**, v.5, p.121-124, 2006.
- RAMOS, T.B., GONÇALVES, M.C., JACINTO, G., MARTINS, J.C. E PIRES, F.P. Avaliação das propriedades hidráulicas do solo por modelação inversa através dos dados obtidos pelo infiltrômetro de tensão e por métodos laboratoriais. **Revista de Ciências Agrárias**, p.384-396, 2006.
- RICHARDS, L.A. Capillary Conduction of Liquids in Porous Mediums. **Physics**, v.1, n.5, p.318-333, 1931.
- SIHAG, P., SINGH, B., VAND, A.S., MEHDIPOUR, V. Modeling the infiltration process with soft computing techniques. **ISH Journal of Hydraulic Engineering**, v.26, p.138-152, 2018.
- SOBRINHO, C.A.M., DIAS, M.A., NASCIMENTO, C.M.A. Multi-reference Hartree-Fock configuration interaction calculations of LiH and Be using a new double-zeta atomic base. **Journal of Molecular Modeling**, v.20, n.8, p.2382, 2014.
- SURJANOVIC, S.E., BINGHAM, D. (2013). Virtual Library of Simulation Experiments: Test Functions and Datasets. Retrieved June 14, 2021, from <http://www.sfu.ca/~ssurjano>.
- SZU, H. E HARTLEY, R. Fast simulated annealing. **Phys. Lett. A**, v.122, p.157-162, 1987.
- TSALLIS, C. Possible Generalization of Boltzmann-Gibbs Statistics. **Journal of Statistical Physics**, v.52, p.479–487, 1988.
- TSALLIS C. E STARIOLO D. A.Generalized Simulated Annealing. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v.233, n(1–2), p.395-406, 1996.
- TEIXEIRA, C.F.A., MORAES, S.O. E SIMONETE, M.A. Desempenho do Tensiômetro TDR e Sonda de Nêutrons na Determinação da Umidade e Condutividade Hidráulica do Solo. **Revista Brasileira de Ciências de Solo**, v.29, p.161-168, 2006.
- VAN DAM, J.C., HUYGEN, J., WESSELING, J.G., FEDDES, R.A., KABAT, P., VAN WALSUM, P.E.V., GROENENDIJK, P., VAN DIEPEN, C.A. Theory of SWAP version 2.0. **Report 71, Technical Document 45**, Wageningen, 167p, 1997.
- VAN GENUCHTEN, M.Th. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity on unsaturated soils. **Soil Science Society American Journal**, v.44, p.892-898, 1980.

VAUCLIN, M., KHANJI, D., VACHAUD, G. Experimental and numerical study of a transient, two-dimensional unsaturated-saturated water table recharge problem. **Water Resources Research**, v.15, n.5, p.1089-1101, 1979. DOI: 10.1029/WR015i005p01089.

YEH, W.W.G. Review of parameter identification procedures in ground water hydrology: the inverse problem. **Water Resources Research**, v.22, n.2, p.95-108, 1986.

WANG, K., YANG, X., LI, Y., LIU, C., GUO, X. An Application of Chaos Gray-Encoded Genetic Algorithm for Philip Infiltration Model. **Thermal Science**, v.22, n.4, p.1581-1588, 2018.

ZIENKIEWICZ, O.C. The Finite Element Method. Mc Graw-Hill (ed.), London, Inglaterra, 787p, 1977.

ZIENKIEWICZ, O.C. The Finite Element Method and the Solution of Some Geophysical Problems. Phil. Trans. R. Soc. Lond. A. v.283, p.139-151 (1976). Printed in Great Britain.

ZIENKIEWICZ, O.C., TAYLOR, R.L. E ZHU, J.Z. The Finite Element Method: Its Basis and Fundamentals. Sixth edition published by Butterworth-Heinemann, 2005.

APÊNDICES

A – MODELO MATEMÁTICO DO FLUXO DA ÁGUA EM SOLO NÃO SATURADO

A.1 – DISCRETIZAÇÃO TEMPORAL

Como supracitado, o domínio do fenômeno físico foi discretizada pelo Método de Elementos Finitos (MEF) e a discretização temporal foi realizada pelo Método de Diferenças Finita (MDF). A discretização realizada pelo MEF é representada por elementos triangulares apresentados na figura 4.6. Através de cada nó dessa malha da figura 4.6 existe fluxo de água governado pela equação de Richards expressado na equação 3.7. Por outro lado, as derivadas dessa equação 3.7 em função da séries de Taylor truncada na primeira ordem podem ser aproximadas pela taxa de variação em pequenos intervalos finitos de tempo (Δt) e espaço (Δz) como expressado na equação A.1. Dessa forma, habilita-se a equação diferencial para cálculos iterativos no tempo utilizando o MDF e no espaço considerando o MEF. Essa equação A.1 vale-se de índices que representam a iteração no tempo (j) e no espaço (i). Nessa equação A.1 utiliza-se o valor do coeficiente de ponderação no tempo w . Esse coeficiente determina os seguintes esquemas do Método das Diferenças Finitas: implícito ($w = 1$), explícito ($w = 0$) e centrada no tempo denominada de Crank–Nicholson ($w = 0,5$). Devido aos critérios de convergência, o esquema implícito é o mais desejável pelo que foi utilizado neste trabalho (FERREIRA e LIMA, 2010) como apresentado na equação A.1:

$$\frac{\theta_i^{j+1} - \theta_i^j}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta z} \left[K_{i+\frac{1}{2}}^{j+w} \left(\frac{\psi_{i+1}^{j+w} - \psi_i^{j+w}}{\Delta z} + 1 \right) - K_{i-\frac{1}{2}}^{j+w} \left(\frac{\psi_i^{j+w} - \psi_{i-1}^{j+w}}{\Delta z} + 1 \right) \right] \quad (\text{A.1})$$

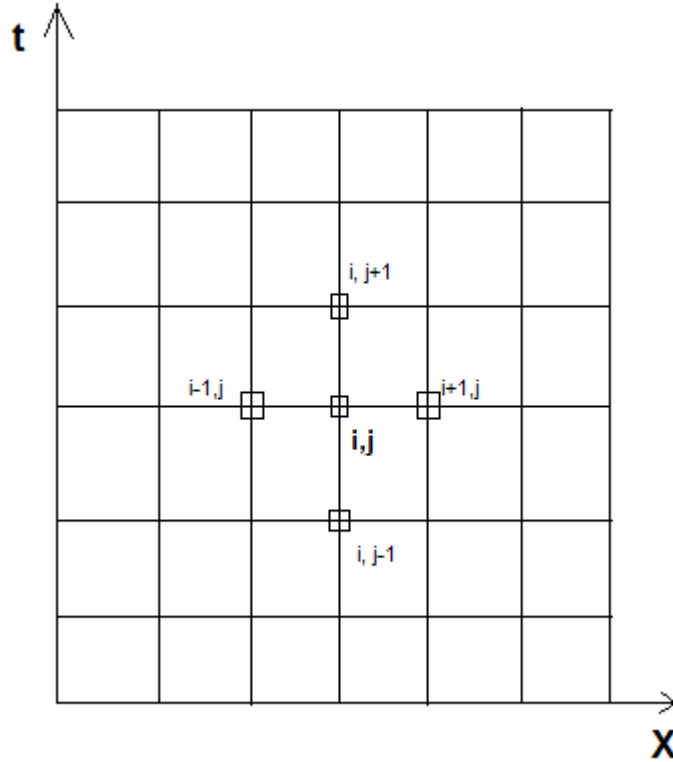
sendo:

- i o índice de espaço;
- j o índice de tempo;
- Δt o acréscimo do tempo (T);
- Δz o acréscimo da profundidade (L);
- $0 \leq w \leq 1$.

A figura A.1 ilustra a representação de uma malha bi-linear sendo concomitante dos eixos coordenados tempo (t) representado pelo índice j e espaço (X) representado pelo índice i . Dessa forma, durante a resolução do problema, mesmo que o domínio do espaço permaneça constante (i) existe o acréscimo de tempo que pode ser variável ($j-1, j, j+1$). Esse critério de

tempo e espaço foi utilizado neste trabalho facilitando a convergência de valores de tensão matricial nos nós da malha de elementos finitos no decorrer do tempo (HERBERT e MARY, 1982).

Figura A.1 – Malha bi-linear com variação em uma dimensão espacial e uma dimensão temporal.



Fonte: modificado de Herbert e Mary (1982)

A.2 – DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL

Como mencionado na seção anterior, foram utilizados elementos triangulares para o Método de Elementos Finitos - MEF (ver figura 4.6). A variável de potencial matricial do modelo (Ψ) foi aproximada por uma série de funções lineares como expressada na equação A.2 (ZIENKIEWICZ, 1976). Nessa equação A. função $\xi_m(x,z)$ expressa a distribuição da influência do valor de $\Psi_m(t)$ no cálculo de $\hat{\psi}(x, z, t)$ e é chamada de “funções de forma”.

$$\hat{\psi}(x, z, t) = \sum_{m=1}^{NN} \xi_m(x, z) \psi_m(t) \tag{A.2}$$

em que:

- $\hat{\psi}(x, z, t)$ é a solução aproximada de potencial matricial $\Psi(L)$;
- $\Psi_m(t)$ é o valor de potencial matricial (Ψ) no nó m da malha de elementos finitos no tempo t (L);
- $\xi_m(x, z)$ é a função nodal de base do nó m avaliada na posição (x, z) (adimensional);
- NN é o número de nós do elemento.

A figura A.2 apresenta um elemento triangular do Método de Elementos Finitos - MEF e suas respectivas equações de funções de forma utilizadas no modelo proposto. Os pontos nomeados o, p, q e suas correspondentes numéricas $1, 2, 3$ representam as coordenadas globais e locais, respectivamente (ZIENKIEWICZ, 1977; ZIENKIEWICZ et al., 2005; HERBERT e MARY, 1982). Dessa figura A.2 infere-se que:

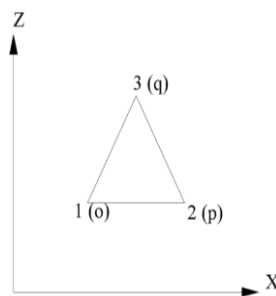
$$a_1 = x_2 z_3 - x_3 z_2; \quad b_1 = z_2 - z_3; \quad c_1 = x_3 - x_2;$$

$$a_2 = x_3 z_1 - x_1 z_3; \quad b_2 = z_3 - z_1; \quad c_2 = x_1 - x_3;$$

$$a_3 = x_1 z_2 - x_2 z_1; \quad b_3 = z_1 - z_2; \quad c_3 = x_2 - x_1.$$

Com esses coeficientes a_i, b_i, c_i para $i=1,2,3$, a área do elemento triangular fica definida como: $A = \frac{1}{2}(b_1 c_2 - c_1 b_2)$. Da mesma maneira, com esses coeficientes a_i, b_i, c_i determina-se que: $\xi_i^e = \frac{1}{2A}(a_i + b_i x + c_i z)$. Sendo assim, um par ordenado (x, z) origina a interpolação de potencial matricial $\hat{\psi}(x, z, t)$ nessa coordenada, segundo a equação A2: exemplo, se (x, z) for igual a (x_1, z_1) deve originar $\hat{\psi} = \psi_1$, isto é, o valor de potencial matricial interpolado nas coordenadas do ponto 1 será o mesmo valor de potencial matricial nesse ponto 1. Com isso, essas funções de forma auxiliam em determinar qualquer valor de potencial matricial interpolado nas coordenadas (x, z) dentro do domínio triangular como apresentado mais na frente.

Figura A.2 – Elemento triangular do MEF e as funções de forma lineares para elementos triangulares.

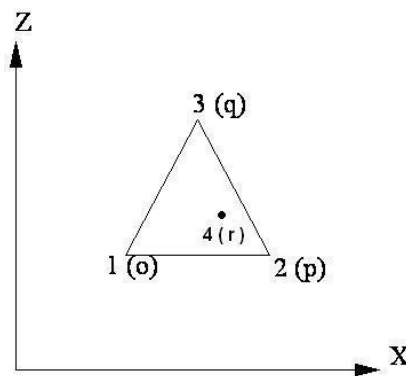


Fonte: Modificado de Herbert e Mary (1982)

A.2.1 – Interpolação dentro de um elemento finito

A simulação do modelo começa utilizando um conjunto de valores iniciais arbitrários dos parâmetros das equações de retenção de van Genuchten (1980). Assim, obtém-se os valores de potencial matricial, em cada um dos nós dos elementos finitos triangulares. A figura A.3 mostra um ponto numerado como quatro no interior do elemento finito triangular. O valor de potencial matricial do ponto quatro será resultado da interpolação linear dos valores de potencial matricial nas coordenadas globais dos nós o , p e q como apresentado anteriormente utilizando a equação A.2. No estudo de caso deste trabalho foram utilizados quinze pontos de controle como indicados na figura 4.6. Como pode ser observado nessa figura 4.6 esses 15 pontos de controle encontram-se dentro de elementos triangulares semelhantes ao representado na figura A.3.

Figura A.3 – Ponto quatro dentro do elemento triangular onde será interpolado o valor de potencial matricial global.



Fonte: Modificado de Herbert e Mary (1982)

Para tanto, utiliza-se funções de interpolação como apresentadas na equação A.3 e discutido na equação A.2 para determinar o valor de potencial matricial em um ponto interior do elemento (HERBERT e MARY, 1982).

$$\Psi_4 = \sum_{i=1..3} \xi_i^e(x_4, z_4) \cdot \Psi_i \quad (\text{A.3})$$

em que:

- i representa os nós locais do elemento triangular;
- e indica o elemento triangular;
- Ψ_i é o valor de potencial matricial no nó i ;
- Ψ_4 é o valor de potencial matricial no ponto de interpolação quatro.

Daí, da equação A.3 e A.4 infere-se que:

- para $x=x_1$ e $z=z_1$ então $\zeta_1^e = 1, \zeta_2^e = 0, \zeta_3^e = 0$, e segundo a equação A.4: $\hat{\psi} = \psi_1(t)$;
- para $x=x_2$ e $z=z_2$ então $\zeta_1^e = 0, \zeta_2^e = 1, \zeta_3^e = 0$, $\hat{\psi} = \psi_2(t)$;
- para $x=x_3$ e $z=z_3$ então $\zeta_1^e = 0, \zeta_2^e = 0, \zeta_3^e = 1$, $\hat{\psi} = \psi_3(t)$.

A equação 3.9 pode ser representada do seguinte modo:

$$L(\Psi) = \frac{\partial}{\partial x} \left[K_x(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[K_z(\Psi) \left(\frac{\partial \Psi}{\partial z} + 1 \right) \right] - C \frac{\partial \Psi}{\partial t} = 0 \quad (\text{A.4})$$

sendo L chamado operador diferencial e C já foi definido.

Aplicando-se a esse operador L a função aproximada, $\hat{\psi}$, descrita na equação A.2, obtém-se: $L(\hat{\psi})$ o que origina um resíduo (R) diferente de zero. A função de aproximação deve satisfazer todas as condições de contorno do problema. O método dos resíduos ponderados redistribui o resíduo (R) usando uma álgebra denominada de “função de ponderação” (ω_n), de forma que seja ortogonal à $L(\hat{\psi})$ e sua integral em todo o domínio seja zero, como equacionado em A.5 denominado de “Método dos Resíduos ponderados” (ZIENKIEWICZ et al., 2005, HERBERT e MARY, 1982):

$$\int L(\hat{\psi}) \cdot \omega_n dR = 0 \quad (\text{A.5})$$

A.3 – APLICAÇÃO DO MÉTODO DOS RESÍDUOS PONDERADOS

O método de Galerkin (1915) sugere que as funções de ponderação sejam iguais às funções de forma, ambas funções já foram definidas anteriormente (ZIENKIEWICZ et al., 2005). Desse modo, a equação A.5 que se refere ao método dos Resíduos Ponderados adaptado

à condição de que as funções de ponderação (ω) sejam iguais às funções lineares (ξ) e também considerando a equação A.4 resulta na equação A.6:

$$\int_R \frac{\partial}{\partial x} \left[K_x(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right] \xi_n \, dR + \int_R \frac{\partial}{\partial z} \left[K_z(\Psi) \left(\frac{\partial \Psi}{\partial z} + 1 \right) \right] \xi_n \, dR - \int_R C \frac{\partial \Psi}{\partial t} \xi_n \, dR = 0 \quad (\text{A.6})$$

em que $n = 1, 2, \dots, NN$ e $R =$ domínio do problema físico.

Discretizando-se a equação A.6 em termos de elementos finitos resulta na equação A.7:

$$\sum_e \left\{ \int_{R^e} \frac{\partial}{\partial x} \left[K_x(\Psi) \Psi_m \frac{\partial \xi_m^e}{\partial x} \right] \xi_n^e \, dR^e + \int_{R^e} \frac{\partial}{\partial z} \left[K_z(\Psi) \left(\Psi_m \frac{\partial \xi_m^e}{\partial z} + 1 \right) \right] \xi_n^e \, dR^e - \int_{R^e} C \frac{\partial \Psi_m}{\partial t} \xi_m^e \xi_n^e \, dR^e \right\} = 0 \quad (\text{A.7})$$

onde $m, n = 1, 2, \dots, NN$ e R^e é o domínio do elemento finito.

Submete-se a equação A.7 ao teorema de Green para obtenção da equação A.8 (HERBERT E MARY, 1982):

$$\sum_e \left\{ - \int_{R^e} K_x(\Psi) \Psi_m \frac{\partial \xi_m^e}{\partial x} \frac{\partial \xi_n^e}{\partial x} \, dR^e - \int_{R^e} K_z(\Psi) \Psi_m \frac{\partial \xi_m^e}{\partial z} \frac{\partial \xi_n^e}{\partial z} \, dR^e + \int_{B^e} -\vec{q}_n \xi_n^e \, dB^e - \int_{R^e} K_x(\Psi) \frac{\partial \xi_n^e}{\partial z} \, dR^e - \int_{R^e} C \frac{\partial \Psi_m}{\partial t} \xi_m^e \xi_n^e \, dR^e \right\} = 0 \quad (\text{A.8})$$

onde:

- $B^e =$ comprimento do lado do elemento (L);
- $q_n =$ fluxo ortogonal ao elemento de contorno (L/T);
- $q_n = q_x + q_z$;
- $q_x = K_x(\Psi) \Psi_m \frac{\partial \xi_m^e}{\partial x}$;
- $q_z = K_z(\Psi) \left(\Psi_m \frac{\partial \xi_m^e}{\partial z} + 1 \right)$.

A equação A.8 se reescreve na sua forma matricial obtendo-se a equação A.9:

$$\sum_e \left\{ MF_m^e \Psi_m + MR_{mn}^e \frac{\partial \Psi_m}{\partial t} + VG_m^e - VN_n^e \right\} = 0 \quad (\text{A.9})$$

A equação A.9 expressa a montagem global das matrizes que é a mesma equação A.10:

$$[MF_{mn}] \{ \Psi_m \} + [MR_{mn}] \left\{ \frac{\partial \Psi_m}{\partial t} \right\} + \{ VG_n \} - \{ VN_n \} = 0 \quad (\text{A.10})$$

em que:

- $[MF_{mn}] = \overline{Matriz Fluxo}$ (equação 4.6) matriz que isola o elemento de fluxo chamado também condutância ou rigidez ou montagem global, inerente no desenvolvimento do MEF (HERBERT E MARY, 1982, ZIENKIEWICZ et al., 2005);
- $[MR_{mn}] = \overline{Matriz Retenção}$ (equação 4.6) é a matriz de capacidade de retenção ou armazenamento dentro do domínio;
- $\{VG_n\} = \overline{Vazão Gravita}$ (equação 4.6) é a matriz de fluxo devido ao potencial gravitacional;
- $\{VN_n\} = \overline{Vazões Nodais}$ (equação 4.6) é a matriz do fluxo através do contorno;
- $\{\Psi_m\}$ = vetor com o valor de Ψ em todos os nós;
- $\left\{\frac{\partial \Psi_m}{\partial t}\right\}$ = vetor com a taxa de variação de Ψ no tempo em cada nó.

As equações A.8 até A.10 precisam resolver o parâmetro de condutividade hidráulica. Como já foi considerado, a condutividade hidráulica depende da variável de umidade volumétrica ou de potencial matricial (ver equação 3.1). Sendo $0 < K_i < K_i^{sat}$, sendo i a direção x ou z Neuman (1973) estabelece uma relação vantajosa colocando a condutividade hidráulica em termos da condutividade hidráulica saturada K_{sat} , desse modo, estabelece-se que:

$$K_x = K_r(S_e) K_x^{sat} \quad (A.11a)$$

$$K_z = K_r(S_e) K_z^{sat} \quad (A.11b)$$

onde:

- $K_r(S_e)$ = condutividade hidráulica relativa em função do grau de saturação (S_e) e adimensional;

- $S_e = \frac{\theta - \theta_{res}}{\theta_{sat} - \theta_{res}}$, adimensional;
- θ_{sat} = umidade do solo saturado, adimensional;
- θ_{res} = umidade residual, adimensional.

Substituindo as equações A.11 a e b em A.10 obtém-se:

$$[MF_{mn}] = \sum_e \left[K_x^{sat} \int_{R^e} K_r \frac{\partial \xi_m^e}{\partial x} \frac{\partial \xi_n^e}{\partial x} dR^e + K_z^{sat} \int_{R^e} K_r \frac{\partial \xi_m^e}{\partial z} \frac{\partial \xi_n^e}{\partial z} dR^e \right] \quad (A.12a)$$

$$[MR_{mn}] = \sum_e \left[\int_{R^e} C \xi_m^e \xi_n^e dR^e \right] \quad (A.12b)$$

$$\{VG_n\} = \sum_e \left[K_z^{sat} \int_{R^e} K_r \frac{\partial \xi_n^e}{\partial z} dR^e \right] \quad (A.12c)$$

$$\{VN_n\} = \sum_e \left[\int_{B^e} -\vec{q}_n \xi_n^e dB^e \right] \quad (\text{A.12d})$$

Assumindo o fluxo constante e uniformemente distribuído através do lado externo de cada elemento do contorno, se consegue a vazão em cada nó como sendo:

$$Q_n = - \sum_e \frac{(L_e V)_n}{2} \quad (\text{A.13})$$

sendo:

- V = vazão por unidade de área (LT^{-1});
- L_e = comprimento do lado do elemento (L);
- Q_n = vazão por metro linear (L^3T^{-1}).

A matriz $[MR_{mn}]$, da equação A.12b possui a característica de multiplicar a derivada de potencial matricial em relação ao tempo, isto é, $\frac{\partial \Psi}{\partial t}$ (ver equação A.10). Substitui-se o potencial matricial ψ pela sua aproximação por funções de interpolação da equação A.2. Desse modo, substituindo $\hat{\psi}$ em $\frac{\partial \Psi}{\partial t}$ obtém-se:

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\psi}(x, z, t) = \frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_{m=1}^{NN} \xi_m(x, z) \psi_m(t) \right) = \sum_{m=1}^{NN} \xi_m(x, z) \frac{\partial \psi_m}{\partial t} \quad (\text{A.14})$$

Dessa forma, substituindo a equação A.14 na equação A.10 obtém-se a equação A.15:

$$[F_{mn}] = \left\{ \sum_e \left[\int_{R^e} C \xi_m^e \xi_n^e dR^e \right] \text{ sendo } 0 \text{ para } m \neq n \right\} \quad (\text{A.15})$$

A.4 – INTEGRAÇÃO NO TEMPO

A.4.1 – O esquema de Picard

No modelo proposto deste trabalho foi utilizado o esquema iterativo direto de Picard. Nesse processo iterativo estima-se um valor inicial para Ψ_m^{k+1} , com esse valor calculam-se os parâmetros de capacidade de umidade específica (C) e condutividade hidráulica (K) resolvendo a equação A.8. Com o novo valor de Ψ_m^{k+1} repete-se o processo iterativo até que o resultado convirja para um valor estável.

Embora o método de Newton-Raphson apresente, de maneira geral, uma alta taxa de convergência, possui cálculo complexo, necessitando do cálculo da matriz jacobiana da equação, além de depender da precisão da estimativa inicial. Além disso, esse método gera um sistema não-simétrico de equações lineares. Outros autores observaram que este método possui eficiência computacional equivalente ao método de Picard, sendo mais indicado em situações de difícil convergência, como variações bruscas das condições de contorno e problemas altamente não-lineares. Discretizando-se a equação A.14 no tempo, tem-se:

$$\left[A_{mn}^{k+w} \right] \left\{ w \Psi_m^{k+1} + (1-w) \Psi_m^k \right\} + \left[F_{mn}^{k+w} \right] \left\{ \frac{\Psi_m^{k+1} - \Psi_m^k}{\Delta t_k} \right\} = \left\{ Q_n^{k+w} \right\} - \left\{ B_n^{k+w} \right\} \quad (\text{A.19})$$

onde:

- k = índice correspondente ao tempo;
- w = coeficiente de ponderação no tempo;
- $\Delta t_k = t^{k+1} - t^k$ (incremento de tempo).

O esquema de Crank-Nicholson funciona bem para casos em zona completamente saturada, mas apresenta problemas quando há mudanças bruscas na zona de saturação. Para superar esse problema, adotou-se o esquema completamente implícito ($w=1$). Para os coeficientes C e K , porém, recomenda-se o cálculo no tempo médio ($k+1/2$) a fim de se evitar oscilações numéricas. Conseqüentemente, as matrizes globais dependentes desses coeficientes passam a ser avaliadas em “ $k+1/2$ ” (Neuman, 1973). Aplicando o esquema proposto à equação A.19, tem-se:

$$\left[A_{mn}^{k+1/2} + \frac{F_{mn}^{k+1/2}}{\Delta t_k} \right] \left\{ \Psi_m^{k+1} \right\} = \left\{ Q_n^{k+1} \right\} - \left\{ B_n^{k+1/2} \right\} + \left[\frac{F_{mn}^{k+1/2}}{\Delta t_k} \right] \left\{ \Psi_m^k \right\} \quad (\text{A.20})$$

Huyarkorn e Pinder (1983) sugeriram resolver a equação A.20 em termos de $\Delta \Psi$, para evitar que uma grande variação na magnitude de Ψ resulte em grandes erros finais. Adotando-se esse esquema, subtrai-se a parcela “Resíduo” em ambos os lados da equação A.20.

$$\left[\frac{F_{mn}^{k+1/2}}{\Delta t_k} \right] \left\{ \Psi_m^{k+1} \right\} - \text{Resíduo} = \left\{ Q_n^{k+1} \right\} - \left\{ B_n^{k+1/2} \right\} + \left[\frac{F_{mn}^{k+1/2}}{\Delta t_k} \right] \left\{ \Psi_m^k \right\} - \text{Resíduo} \quad (\text{A.21})$$

onde: $\text{Resíduo} = \left[A_{mn}^{k+1/2} + \frac{F_{mn}^{k+1/2}}{\Delta t_k} \right] \left\{ \Psi_m^{k+1} \right\}^r$, sendo r = iteração anterior.

Assim, fica definida a equação A.22:

$$\left[A_{mn}^{k+1/2} + \frac{F_{mn}^{k+1/2}}{\Delta t_k} \right] \{\Psi_m^{k+1}\}^{r+1} = \{Q_n^{k+1}\} - \left\{ B_n^{k+1/2} \right\} + \left[\frac{F_{mn}^{k+1/2}}{\Delta t_k} \right] \{\Psi_m^k\} - \left[A_{mn}^{k+1/2} + \frac{F_{mn}^{k+1/2}}{\Delta t_k} \right] \{\Psi_m^{k+1}\}^r \quad (\text{A.22})$$

onde: $\Delta \Psi_m^{k+1,r+1} = \Psi_m^{k+1,r+1} - \Psi_m^{k+1,r}$.

A equação A.22 pode ser expressa em formas simples como mostrado na Equação A.23:

$$[AG]\{\Delta \Psi_m\} = [BG] \quad (\text{A.23})$$

onde:

- $[AG] = \left[A_{mn}^{k+1/2} + \frac{F_{mn}^{k+1/2}}{\Delta t_k} \right];$
- $[BG] = \{Q_n^{k+1}\} - \left\{ B_n^{k+1/2} \right\} + \left[\frac{F_{mn}^{k+1/2}}{\Delta t_k} \right] \{\Psi_m^k\} - \left[A_{mn}^{k+1/2} + \frac{F_{mn}^{k+1/2}}{\Delta t_k} \right] \{\Psi_m^{k+1}\}^r.$

A.4.2 – O esquema de Newton-Raphson

Uma derivação detalhada do algoritmo de Newton-Raphson foi apresentado por Huyarkorn *et al.* (1984), ainda que esses autores adotaram uma técnica de coeficiente de influência, as derivações ficaram de formas simples. Desse modo da equação A.14, tem-se:

$$G_n = [A_{mn}]\{\Psi_m\} + [F_{mn}] \left\{ \frac{\partial \Psi_m}{\partial t} \right\} + \{B_n\} - \{Q_n\} = 0$$

Considerando uma rodada posterior $r+1$, se tem:

$$G_n^{r+1} = G_n^r + \left[\frac{\partial G_n}{\partial \Psi_i} \right]^r \Delta \Psi_i^{r+1} = 0 \quad (\text{A.24})$$

e operando a equação A.24, se tem:

$$\left[\frac{\partial G_n}{\partial \Psi_i} \right]^r \Delta \Psi_i^{r+1} = -G_n^r \quad (\text{A.25})$$

$$\frac{\partial G_n}{\partial \Psi_i} = [A_{ni}] + \frac{\partial A_{nj}}{\partial \Psi_i} \Psi_j + [F_{nm}] \frac{\partial}{\partial \Psi_i} \left[\frac{\partial \Psi_m}{\partial t} \right] + \frac{\partial \Psi_m}{\partial t} \frac{\partial F_{nm}}{\partial \Psi_i} + \frac{\partial B_n}{\partial \Psi_i} \quad (\text{A.26})$$

sendo: $i, j, n, m = 1, 2, \dots, NN$, com $i \neq j$.

Utiliza-se a forma da diferença finita implícita para a derivação do tempo, assim:

$$\frac{\partial G_n}{\partial \Psi_i} = [A_{ni}] + \frac{\partial A_{nj}}{\partial \Psi_i} \Psi_j^r + \frac{[F_{nm}]}{\Delta t} + \frac{\partial F_{nm}}{\partial \Psi_i} \frac{\Psi_m^r - \Psi_m^k}{\Delta t} + \frac{\partial B_n}{\partial \Psi_i} \quad (\text{A.27})$$

Ψ_m^k é o valor de Ψ_m no passo de tempo anterior e Ψ_m^r é o valor do passo de tempo atual ($k+1$) e r rodadas.

Derivando a equação A.14, e assumindo as formas de função lineares da equação A.2.

$$\frac{\partial A_{nm}^e}{\partial \Psi_i} \Psi_m = K_x^{\text{sat}} \sum_j \Psi_j \int_{R^e} \frac{\partial K_r}{\partial \Psi_i} \frac{\partial \xi_j^e}{\partial x} \frac{\partial \xi_n^e}{\partial x} dR^e + K_z^{\text{sat}} \sum_j \Psi_j \int_{R^e} \frac{\partial K_r}{\partial \Psi_i} \frac{\partial \xi_j^e}{\partial z} \frac{\partial \xi_n^e}{\partial z} dR^e \quad (\text{A.28})$$

Utilizando as derivadas por partes: $\frac{\partial K_r}{\partial \Psi_i} = \frac{\partial K_r}{\partial \Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial \Psi_i} = \frac{\partial K_r}{\partial \Psi} \xi_i^e$ e substituindo na equação A.28, se tem:

$$\frac{\partial A_{nm}^e}{\partial \Psi_i} \Psi_m = K_x^{\text{sat}} \sum_j \Psi_j \int_{R^e} \frac{\partial K_r}{\partial \Psi} \xi_i^e \frac{\partial \xi_j^e}{\partial x} \frac{\partial \xi_n^e}{\partial x} dR^e + K_z^{\text{sat}} \sum_j \Psi_j \int_{R^e} \frac{\partial K_r}{\partial \Psi} \xi_i^e \frac{\partial \xi_j^e}{\partial z} \frac{\partial \xi_n^e}{\partial z} dR^e \quad (\text{A.29a})$$

Adotando o procedimento de aglutinamento sugerido por Neuman (1973) para o termo de armazenamento: $F_{nn}^e = \int_{R^e} \eta \xi_n^e dR^e$ ($F_{nn}^e = 0$ para $n \neq m$), se tem: $\frac{\partial F_{nm}^e}{\partial \Psi_i} = \int_{R^e} \frac{\partial \eta}{\partial \Psi_i} \xi_n^e dR^e$.

Utilizando a derivada por partes $\frac{\partial \eta}{\partial \Psi_i} = \frac{\partial \eta}{\partial \Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial \Psi_i} = \frac{\partial \eta}{\partial \Psi} \xi_i^e$, se tem:

$$\frac{\partial F_{nm}^e}{\partial \Psi_i} = \left\{ \int_{R^e} \frac{\partial \eta}{\partial \Psi_i} \xi_n^e dR^e \text{ para } n = m \text{ para } n \neq m \right\} \quad (\text{A.29b})$$

$$\frac{\partial B_n^e}{\partial \Psi_i} = K_z^{\text{sat}} \int_{R^e} \frac{\partial K_r}{\partial \Psi} \xi_i^e \frac{\partial \xi_n^e}{\partial z} dR^e \quad (\text{A.29c})$$

Para resolver as integrais das equações A.16a–d e A.29a–c é necessário escolher os tipos de elementos e o procedimento de integração. Este trabalho utiliza os elementos finitos triangulares para uma análise de modelo em duas dimensões.

A.4.3 – Integração numérica utilizando a quadratura de gauss

A fim de reduzir os erros em volume, considera-se a variação não-linear dos coeficientes nos elementos individuais (NIEBER, 1980). Com isso, conseguiu avaliar as

integrais dos elementos utilizando a quadratura de Gauss em todo o elemento triangular em um esquema de Picard em conexão ao modelo de Neuman (1973). Na sequência se apresenta a quadratura de Gauss tanto para o esquema de Picard quanto do esquema de Newton-Raphsom. Considerando as funções de forma linear descritas na figura A.2, a equação A.16a pode ser reescrita como:

$$A_{nm}^e = K_x^{\text{sat}} \frac{b_m b_n}{4A^2} \int_{R^e} K_r dR^e + K_z^{\text{sat}} \frac{c_m c_n}{4A^2} \int_{R^e} K_r dR^e \quad (\text{A.30})$$

Integrando numericamente pela quadratura de Gauss:

$$\int_{R^e} K_r dR^e = \Lambda \sum_{g=1}^p w_g K_{r_g}; K_{r_g} = f(\Psi_g); \Psi_g = \sum (\xi_i^e)_g \Psi_m; j = n, p, q \quad (\text{A.31})$$

onde Λ é a área do elemento, g é um ponto gaussiano e w_g é o coeficiente de ponderação. Se os p pontos gaussianos foram utilizados, a ordem de erro será $R = O(h^{p-1})$ (ZIENKIEWICZ, 1977, ZIENKIEWICZ et al., 2005).

Ainda que o potencial matricial foi assumido como uma função linear em todo o elemento finito, as funções características são integradas numericamente como função não linear, com base nos valores de Ψ nos pontos gaussianos.

As equações A.16a–d e A.29a–c são avaliadas por:

$$A_{nm}^e = (K_x^{\text{sat}} b_m b_n + K_z^{\text{sat}} c_m c_n) \frac{1}{4\Lambda} \sum_{g=1}^p w_g K_{r_g} \quad (\text{A.32a})$$

$$F_{nn}^e = \Lambda \sum_{g=1}^p w_g \eta_g (\xi_n^e)_g \quad (\text{A.32b})$$

$$B_n^e = \frac{K_z^{\text{sat}} c_n}{2} \sum_{g=1}^p w_g K_{r_g} \quad (\text{A.32c})$$

$$\frac{\partial A_{nm}^e}{\partial \Psi_i} \Psi_m = (K_x^{\text{sat}} \sum_j \Psi_j b_j b_n + K_z^{\text{sat}} \sum_j \Psi_j c_j c_n) \frac{1}{4\Lambda} \sum_{g=1}^p \left[\frac{\partial K_r}{\partial \Psi} \right]_g (\xi_i^e)_g w_g \quad (\text{A.33a})$$

$$\frac{\partial F_{nn}^e}{\partial \Psi_i} = \Lambda \sum_{g=1}^p \left[\frac{\partial \eta}{\partial \Psi} \right]_g (\xi_i^e)_g (\xi_n^e)_g w_g \quad (\text{A.33b})$$

$$\frac{\partial B_n^e}{\partial \Psi_i} = \frac{K_z^{\text{sat}} c_n}{2} \sum_{g=1}^p \left[\frac{\partial K_r}{\partial \Psi} \right]_g (\xi_i^e)_g w_g \quad (\text{A.33c})$$

Todas as funções características são avaliadas nos pontos gaussianos e as derivadas $\frac{\partial K_r}{\partial \Psi}$ e $\frac{\partial \theta}{\partial \Psi}$ são aproximados pela fórmula da corda secante, como sugerido por Huyakorn et al.

(1984), se a diferença absoluta de potencial ($|\Psi^{r+1} - \Psi^r|$) em duas rodadas sucessivas é maior que a tolerância:

$$\frac{\partial K_r}{\partial \Psi} \approx \frac{K_r^{r+1} - K_r^r}{\Psi^{r+1} - \Psi^r}; \quad \frac{\partial \theta}{\partial \Psi} \approx \frac{\theta^{r+1} - \theta^r}{\Psi^{r+1} - \Psi^r} \quad (\text{A.34})$$

B – CÁLCULO POR MÍNIMOS QUADRADOS DO AJUSTE DA EQUAÇÃO DE VAUCLIN

A formulação da equação 4.3 possui coeficientes que foram determinados pelos mínimos quadrados. Nesta seção de apêndice passa-se a fazer a demonstração.

A equação 4.3 deve ser transformada em uma equação linear, para esse propósito se faz necessário realizar uma série de operações matemáticas. Como primeiro passo a equação 4.3 pode se transformar em:

$$\alpha + \psi^\beta = \alpha \left(\frac{\theta_{\text{sat}}}{\theta} \right) \quad \text{B1}$$

Daí, passando α para o segundo membro obtém-se:

$$\psi^\beta = \alpha \left(\frac{\theta_{\text{sat}}}{\theta} \right) - \alpha = \alpha \left[\left(\frac{\theta_{\text{sat}}}{\theta} \right) - 1 \right] \quad \text{B2}$$

Operando o logaritmo neperiano da expressão B2 resulta:

$$\beta \ln(\psi) = \ln(\alpha) + \ln \left[\left(\frac{\theta_{\text{sat}}}{\theta} \right) - 1 \right] \quad \text{B3}$$

A equação B3 é equacionado convenientemente do seguinte modo:

$$-\ln \left[\left(\frac{\theta_{\text{sat}}}{\theta} \right) - 1 \right] = \ln(\alpha) + (-\beta) \ln(\psi) \quad \text{B4}$$

Desse modo obtém-se a forma linear $Y=A + B X$ onde:

$$Y = -\ln \left[\left(\frac{\theta_{\text{sat}}}{\theta} \right) - 1 \right]; \quad A = \ln(\alpha); \quad B = (-\beta); \quad X = \ln(\psi).$$

A tabela B1 apresenta os 48 pontos de pares ordenados de umidade volumétrica contra potencial matricial da figura 4.3.

Tabela B1 - apresenta-se 48 pontos de pares ordenados umidade volumétrica contra potencial matricial.

	θ	ψ	$Y = -\ln \left[\left(\frac{\theta_{\text{sat}}}{\theta} \right) - 1 \right]$	$X = \ln(\psi)$	X^2	XY
1	0,01	97,61	-3,727377744	4,580979194	20,98537038	-17,07503989
2	0,02	97,62	-2,474043938	4,58112492	20,98670553	-11,33390434

3	0,02	88,02	-2,887747038	4,477532581	20,04829801	-12,92998145
4	0,02	86,42	-2,439258871	4,459269736	19,88508658	-10,87731326
5	0,03	85,36	-2,319718025	4,446878764	19,77473074	-10,31550482
6	0,04	84,84	-1,938964775	4,440723039	19,72002111	-8,610405549
7	0,04	88,57	-1,790695396	4,483841301	20,10483281	-8,029193975
8	0,01	78,95	-3,266419694	4,368764071	19,08609951	-14,270217
9	0,03	75,23	-2,291951324	4,320509755	18,66680454	-9,902398052
10	0,04	75,77	-1,841754179	4,327730719	18,72925318	-7,970616136
11	0,04	77,91	-1,771171824	4,35552614	18,97060796	-7,71438518
12	0,06	76,32	-1,44397398	4,334930975	18,79162656	-6,259527536
13	0,07	76,33	-1,174162703	4,335086282	18,79297307	-5,090096629
14	0,04	77,91	-1,771171824	4,35552614	18,97060796	-7,71438518
15	0,04	66,70	-1,984662596	4,200218655	17,64183675	-8,336016859
16	0,06	66,19	-1,317176181	4,192549031	17,57746738	-5,522325722
17	0,04	67,24	-1,903288296	4,208217856	17,70909752	-8,009451792
18	0,05	68,84	-1,684663077	4,231838553	17,90845753	-7,129222157
19	0,08	67,28	-0,928033486	4,208817111	17,71414148	-3,905923216
20	0,07	68,87	-1,115621601	4,23218287	17,91137185	-4,721514629
21	0,05	58,18	-1,66652421	4,063494092	16,51198424	-6,771911282
22	0,06	58,19	-1,361104693	4,063697834	16,51364009	-5,531118194
23	0,07	57,67	-1,102060844	4,054695816	16,44055816	-4,468521494
24	0,10	58,22	-0,6651715815	4,064308793	16,51860597	-2,703462708
25	0,11	56,63	-0,5840148973	4,036528684	16,29356382	-2,357392885
26	0,07	47,53	-1,138433409	3,861405592	14,91045314	-4,395953131
27	0,10	47,56	-0,6145475711	3,862003951	14,91507452	-2,373385148
28	0,11	47,57	-0,4975094253	3,862153482	14,91622952	-1,921457759
29	0,12	47,57	-0,3837210157	3,86230299	14,91738439	-1,482046826
30	0,12	47,04	-0,3458681526	3,851079881	14,83081625	-1,331965884
31	0,11	36,90	-0,5257839932	3,60818042	13,01896594	-1,89712351
32	0,14	36,92	-0,1529128478	3,608822721	13,02360143	-0,5518353593
33	0,15	36,40	0,06471768263	3,594663845	12,92160816	0,2326383139
34	0,17	35,35	0,3213632092	3,565394859	12,7120405	1,145786734
35	0,18	24,16	0,4824412185	3,184827323	10,14312508	1,536491974
36	0,19	26,30	0,5576620784	3,269612588	10,69036648	1,823338951
37	0,18	28,42	0,4025136778	3,347267495	11,20419969	1,34732095
38	0,20	28,98	0,7559869225	3,366592655	11,3339461	2,54510002
39	0,20	30,04	0,6729877015	3,402580397	11,57755336	2,289894761
40	0,21	28,99	0,8836857945	3,366838039	11,33559838	2,975226947
41	0,23	27,94	1,21435206	3,329940386	11,08850298	4,043719968
42	0,23	27,94	1,266264524	3,330025241	11,0890681	4,216692827
43	0,26	16,77	2,101476943	2,819455475	7,949329174	5,925020672
44	0,29	16,79	3,965380926	2,820868277	7,957297839	11,18581726
45	0,31	17,87	Valor não possível	2,883384264	8,313904811	Valor não possível
46	0,33	18,96	Valor não possível	2,942470939	8,658135227	Valor não possível
47	0,31	20,01	Valor não possível	2,996129905	8,976794406	Valor não

						possível
48	0,31	16,27	Valor não possível	2,789465805	7,781119475	Valor não possível

O cálculo dos mínimos quadrados determina os coeficientes A e B da equação $Y=A + B X$ utilizando: $B = \frac{N\Sigma(xy)-\Sigma x\Sigma y}{N\Sigma(x^2)-(\Sigma x)^2}$, $A = \frac{\Sigma y-B\Sigma x}{N}$. Desse modo, obtém-se os seguintes valores:

$$N=44;$$

$$\Sigma(xy) = -172,2365482;$$

$$\Sigma x \Sigma y = (173,3389885) (-36,42067645) = -6313,123218;$$

$$\Sigma(x^2) = 692,7889038;$$

$$\Sigma x = 173,3389885;$$

$$B = -2,9;$$

$$A = 10,59682848$$

Após calculados B e A determina-se os valores dos coeficientes α e β da equação 4.3 voltando às formulações da equação B4:

$$\alpha = e^A = e^{10,59682848} = 40000 \text{ (valor obtido pelo autor do experimento Vauclin et al., 1990);}$$

$$\beta = -B = 2,9 \text{ (valor obtido pelo autor do experimento Vauclin et al., 1990);}$$

onde e é o número neperiano.

Observa-se da tabela B1 que não foram considerados os pares ordenados 45, 46, 47, 48 pela limitação imposta da umidade saturada de 0,30. Essa limitação torna-se severa, mas é o valor determinado em laboratório, mesmo que existam valores medidos de umidade volumétrica de 0,31 e 0,33 maiores que 0,30. Pode-se concluir que existe perturbação nas medições de pares ordenados de umidade volumétrica e tensão matricial. Desse modo, a solução da modelagem proposta neste trabalho corrobora a curva característica das figuras 4.3 e 5.6 como simples conferência e verificação sem se preocupar em exatidões que não existem, pois, as nuanças ou ruídos são inerentes em um sistema complexo de infiltração.