



Modalidade do trabalho: Relatório técnico-científico
Evento: 2011 JP - XVI Jornada de Pesquisa

UTILIZAÇÃO DO PROBLEMA INVERSO NA DETERMINAÇÃO DE PARÂMETROS DE UM MODELO SEMI-EMPÍRICO DE TRANSFERÊNCIA SIMULTÂNEA DE CALOR E ÁGUA NO SOLO¹

Peterson Cleyton Avi²; Pedro Augusto Pereira Borges³

¹ Parte da dissertação de Mestrado em Modelagem Matemática

² Mestre em Modelagem Matemática – Professor do DCEEng – UNIJUI

³ Orientador – Doutor em Engenharia Mecânica – Professor da UFFS

Resumo

No solo, os gradientes de temperatura e teor de água são importantes para a germinação de sementes, desenvolvimento de plantas e transporte de nutrientes e solutos. AVI (2011) propõem um modelo semi-empírico com acoplamento dos problemas hidráulico e térmico no solo simulado através de dados sintéticos. O modelo é composto por um sistema de duas Equações Diferenciais Parciais: a Equação de Richards e a Equação da Energia. Neste trabalho, o Problema Inverso foi utilizado para verificar se o modelo semi-empírico proposto é viável do ponto de vista de tempo computacional para ser utilizado como Problema Direto de um Problema Inverso e para determinação de parâmetros com base em dados sintéticos. Devido ao grande número de parâmetros a serem determinados foi utilizado o Método de Levenberg-Marquardt, que se mostrou uma eficiente técnica quanto à precisão e tempo computacional principalmente, para um número elevado de parâmetros a serem determinados. A eficiência deste método está diretamente ligada ao parâmetro de regularização utilizado no mesmo.

Palavras-chave: Modelo semi-empírico, Problema Inverso, Método de Levenberg-Marquardt.

Introdução

A agricultura é uma atividade geradora de alimentos e riqueza. O estudo do solo e suas propriedades além de ser indispensável para o desenvolvimento da agricultura, também abrange as obras de engenharia civil e o entendimento do ecossistema. No solo, os gradientes de temperatura e teor de água são importantes para a germinação de sementes, desenvolvimento de plantas e transporte de nutrientes e solutos.

AVI (2011) propõem um modelo semi-empírico, que consiste no acoplamento dos problemas hidráulico e térmico através de dados experimentais. Devido à indisponibilidade de dados experimentais de laboratório ou de campo realizaram simulações utilizando dados sintéticos (artificiais) supondo o comportamento das variáveis.

O modelo semi-empírico consiste na resolução simultânea do sistema de Equações Diferenciais Parciais formado pela Equação de Richards, que descreve a dinâmica da água no solo, e pela Equação do Calor, que descreve o comportamento da temperatura no solo. O





Modalidade do trabalho: Relatório técnico-científico

Evento: 2011 JP - XVI Jornada de Pesquisa

acoplamento é justificado por Hillel (1998), que afirma, que gradientes de temperatura induzem a transferência de água e, reciprocamente, gradientes de teor de água induzem a transferência de calor, o que leva a verificar que as propriedades hidráulicas sofrem influência da temperatura e as propriedades térmicas sofrem influência da dinâmica da água no solo.

Neste trabalho, O Problema Inverso foi utilizado para analisar o desempenho do modelo semi-empírico proposto, para a determinação dos parâmetros utilizados neste modelo e para análise do método utilizado em relação a precisão na determinação dos parâmetros e economia de tempo de simulação.

Quando se deseja encontrar os efeitos resultantes a partir do conhecimento das causas, trata-se de um *Problema Direto*. Por outro lado, quando se deseja encontrar as causas desconhecidas, através de observações dos efeitos desse fenômeno, trata-se de um *Problema Inverso*. Causas, num modelo matemático, são as condições iniciais e de contorno, termos de fonte e propriedades do sistema e/ou material (VELHO, 2008).

Neste trabalho, foi utilizado o Método de Levenberg-Marquardt (MLM) (OZISIK e ORLANDE, 2000), a opção por este método se deve ao grande número de parâmetros a serem determinados. Este é um método determinístico, assim como o Método de Newton e o Método de Quase-Newton. O MLM apresenta ótimas taxas de convergência devido ao parâmetro de regularização, que é determinado através de testes numéricos, sendo o que diferencia este método dos outros dois citados.

O Problema Inverso foi utilizado para verificar se o modelo semi-empírico proposto é viável do ponto de vista de tempo computacional para ser utilizado como Problema Direto de um Problema Inverso, além da análise da eficácia do Método de Problema Inverso utilizado. E para determinação de sete parâmetros utilizados no modelo semi-empírico com base em dados sintéticos. Nesse caso, as causas são os conhecidos: teor de água e temperatura, já os efeitos são o que se pretende encontrar: os parâmetros.

Metodologia

Nas simulações do problema Inverso, o modelo semi-empírico caracteriza o problema Direto. O Modelo semi-empírico consiste na resolução simultânea do sistema de Equações Diferenciais Parciais formado pela Equação de Richards, que descreve a dinâmica da água no solo, e pela Equação do Calor, que descreve o comportamento da temperatura no solo. O acoplamento ocorre pela consideração da variação da difusividade térmica, utilizada na Equação do Calor, em função do teor de água e, simultaneamente, a variação da condutividade hidráulica, utilizada na Equação de Richards, em função do teor de água e da temperatura. Essas dependências se obtidas de forma empírica, são o que caracterizam o modelo semi-empírico, porém nas simulações foram utilizados dados sintéticos. O sistema de equações do modelo foi resolvido numericamente pelo Método de Diferenças Finitas, utilizando o esquema temporal Explícito Simples.

O modelo semi-empírico proposto com as dependências assumidas (Eqs. (1) e (2)) é composto pelo sistema de Equações (3) e (7), com suas respectivas condições de contorno e inicial, conforme apresentado a seguir:



Modalidade do trabalho: Relatório técnico-científico
Evento: 2011 JP - XVI Jornada de Pesquisa

(1)

(2)

para $0 < z < H$ e $0 < t < t_f$ (3)

para $0 < t < t_f$ (4)

para $0 < t < t_f$ (5)

para $0 < z < H$ (6)

para $0 < z < H$ e $0 < t < t_f$ (7)

para $0 < t < t_f$ (8)

para $0 < t < t_f$ (9)

para $0 < z < H$ (10)

Onde: α são parâmetros de ajuste a serem determinados; K é a condutividade hidráulica saturada (m/s); θ é o teor de água (*adimensional*); K é a condutividade hidráulica (m/s); ψ é o potencial matricial (Pa); z é a profundidade (m); H é a altura da coluna de solo (m); t é o tempo (s); t_f é o tempo final (s); T é a temperatura ($^{\circ}C$); ϕ é a condição de contorno para a superfície (*adimensional*); ψ_0 é a condição inicial (*adimensional*); λ é a difusividade térmica (m^2/s); T_s e T_b são, respectivamente, as condições de contorno para a superfície e fundo ($^{\circ}C$); T_0 é a condição inicial ($^{\circ}C$).

Foi desenvolvido um algoritmo utilizado para o cálculo da distribuição de temperatura e teor de água em cada posição na coluna de solo e tempo que foi implementado no software MATLAB.

Problema Inverso



Modalidade do trabalho: Relatório técnico-científico

Evento: 2011 JP - XVI Jornada de Pesquisa

O MLM foi utilizado para determinar os coeficientes a , m , n da equação característica do solo e os parâmetros das funções de dependências assumidas a partir do modelo semi-empírico (Problema Direto). Para tanto, foi necessário determinar os parâmetros de cada problema de forma separada, sendo criados dois vetores de parâmetros. No vetor do problema hidráulico ($X\theta$), tem-se os parâmetros α e β da Eq. (1) e os coeficientes a e n da curva característica do solo, assumindo que γ de acordo com VAN GENUCHTEN (1980), portanto, $\gamma = \frac{1}{1 + \frac{2.32}{\alpha}}$. No vetor do problema térmico (XT), tem-se os parâmetros δ , ϵ , da Eq. (2), portanto, $\delta = \frac{1}{1 + \frac{2.32}{\beta}}$. Em seguida, é apresentado o algoritmo utilizado:

1° Passo: Resolver o Problema Direto: problema hidráulico $X\theta$ e problema térmico XT com as estimativas iniciais θ_0 e T_0 .

2° Passo: Calcular a soma dos erros quadrados ou função objetivo pela Eq. (11).

$$(11)$$

onde

$Y\theta$ e YT são os dados sintéticos.

3° Passo: Cálculo da matriz Jacobiana para ambos os casos.

Modalidade do trabalho: Relatório técnico-científico
Evento: 2011 JP - XVI Jornada de Pesquisa

4º Passo: Cálculo da nova estimativa para α e β , através da Eq. (12)

$$(12)$$

onde: λ é um parâmetro de regularização e D é a matriz diagonal denominada termo de regularização.

5º Passo: Resolver o Problema Direto $AX = B$ e $CX = D$ com a nova estimativa α e β

6º Passo: Calcular α e β com a Eq. (4.11).

7º Passo: Se $\alpha < \alpha_{min}$ e/ou $\beta < \beta_{min}$ substituir α por $X\alpha$, onde X é um numero real maior que 1. Retornar para o passo 4.

8º Passo: Se $\alpha > \alpha_{max}$ e $\beta > \beta_{max}$ utilizar a nova estimativa e substituir α por α/D , onde D é um numero real menor que 1 e maior que 0.

9º Passo: Verificar o critério de parada ϵ e δ , se os dois critérios de parada forem satisfeitos interromper o processo e gerar a solução; caso contrário, substituir k por $k+1$ e voltar ao passo 3.

Resultados e discussão

Nas simulações foi variado o parâmetro de regularização λ para verificar a influência desse parâmetro no desempenho do método, em relação à precisão na determinação dos parâmetros desejados e tempo computacional de simulação. Foi utilizada a seguinte estimativa inicial para verificar o comportamento do método: $X\Theta = [0,085;15;0,6;15]$ e $XT = [15;5;10]$.

Tabela 1 – Resultados dos testes numéricos do Método de Levenberg-Marquardt.

	Critério de parada	Itera.	Tempo	Parâmetros (Θ)	Parâmetros (T)	R^2
0,05		8	2min49s	$\alpha=0,08$ $\beta=21,352$ $a=0,4$ $n=13$	$\alpha=8,6911$ $\beta=2,065$ $a=12,185$	



Modalidade do trabalho: Relatório técnico-científico
Evento: 2011 JP - XVI Jornada de Pesquisa

0,45		18	10min12s	=0,08	=8,6912	
				=21,352	=2,065	
				$\alpha=0,4$	=12,184	
				$n=13$		

Os valores dos parâmetros sintéticos a serem determinados são $X\theta = [0,08;21,352;0,4;13]$ e $XT = [8,6911;2,0644;12,185]$. Percebe-se que o Método de Levenberg-Marquardt, é um método eficiente na determinação de uma quantidade grande de parâmetros utilizando um tempo computacional pequeno se comparado, por exemplo, com o Método de Procura em Rede Modificado. Essa eficiência em relação ao tempo computacional deste método se deve ao parâmetro de regularização que acelera a convergência.

A Tabela mostra a importância da análise do parâmetro de regularização. Foram feitos testes numéricos exaustivos na procura de um valor eficiente para este parâmetro. Considerando a malha escolhida o valor eficiente encontrado para é 0,05, pois para valores menores a solução do Problema Direto era divergente.

Conclusão

O Método de Levenberg-Marquardt se mostrou uma eficiente técnica de determinação de parâmetros quando trata-se de um número grande de parâmetros, se comparando com outros métodos como o Procura em Rede Modificado. É um método determinístico, que neste caso, apesar de serem determinados sete parâmetros, tem um tempo de simulação computacional satisfatório. Muito dessa economia de tempo, em relação a outras técnicas de Problema Inverso, se deve ao parâmetro de regularização utilizado como um acelerador da convergência. É necessária uma análise através de testes numéricos para encontrar o valor eficiente desse parâmetro que pode resultar em um grande ganho de tempo computacional.

Agradecimentos

À CAPES, pela bolsa concedida para a realização desta pesquisa;
 À UNIJUI, pela oportunidade de realização desta pesquisa.

Referências bibliográficas

AVI, P. C. Modelo Semi-empírico para a Modelagem da Transferência Simultânea de Calor e Água no Solo. Dissertação de Mestrado, Unijui. Ijuí-RS, p. 89, 2011.
 HILLEL, D. Environmental soil physics. London: Academic Press. 771p. 1998.





Modalidade do trabalho: Relatório técnico-científico

Evento: 2011 JP - XVI Jornada de Pesquisa

ÖZISIK, M. N.; ORLANDE, H. R. B. Inverse Heat Transfer: Fundamentals and Applications. Taylor Francis. New York, 2000.

VAN GENUCHTEN, M. Th. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. Soil Science Society of America Journal, Madison, v. 44, p. 892-898, 1980.

VELHO, H. F. C. **Introdução aos problemas inversos:** aplicações em pesquisa espacial. Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais. São José dos Campos, SP, 2008.