

Estimação de Parâmetros de um Modelo Semi-Empírico de Transferência Simultânea de Calor e Água no Solo

Emanuelli Bandeira Avi, Peterson Cleyton Avi,

Depto de Ciências Exatas e Engenharias, DCEEng, UNIJUI
98700-000, Ijuí, RS

E-mail: emanuelli.b@hotmail.com; peterson.avi@unijui.edu.br

Pedro Augusto Pereira Borges

Universidade Federal da Fronteira Sul - UFFS
89812-000, Centro, Chapecó, SC

E-mail: papborges@gmail.com

Resumo: No solo, o calor e água são importantes na germinação de sementes, no desenvolvimento de plantas e no transporte de nutrientes e solutos. Sendo assim, é proposto 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 estimar parâmetros com base em dados sintéticos e 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. Devido ao grande número de parâmetros a serem determinados foi utilizado o Método de Levenberg-Marquardt, que se mostrou eficiente quanto à precisão e tempo computacional. 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 que gera alimentos e riquezas. O estudo do solo e suas propriedades além de ser indispensável para o desenvolvimento da agricultura também abrange estudos importantes para o desenvolvimento de obras de engenharia civil, bem como o entendimento do ecossistema. No solo, os gradientes de temperatura e o teor de água são importantes na germinação de sementes, no desenvolvimento de plantas e no transporte de nutrientes e solutos.

AVI (2011) propôs 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 foram realizadas simulações utilizando dados sintéticos (artificiais) supondo o comportamento das variáveis.

O modelo semi-empírico consiste na resolução do sistema de Equações Diferenciais Parciais composto pela equação que descreve a dinâmica da água no solo (Equação de Richards) e pela equação que descreve o comportamento da temperatura no solo (Equação do Calor). O acoplamento é justificado por Hillel (1998) que afirma que gradientes de temperatura induzem a transferência de água, assim como, gradientes de teor de água induzem a transferência de calor. Essa reciprocidade nos sugere 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; bem como, para a análise do método utilizado em relação a precisão na determinação dos parâmetros e a economia do tempo de simulação.

Quando se objetiva analisar os efeitos resultantes a partir do conhecimento das causas, trata-se de um *Problema Direto*. Já no *Problema Inverso* deseja-se conhecer as causas, através

de observações dos efeitos que são conhecidos. Entende-se por causas, num modelo matemático, as condições iniciais e de contorno das equações diferenciais parciais, termos de fonte e propriedades do sistema e/ou material (VELHO, 2008).

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 isto o que diferencia este método dos outros dois citados.

METODOLOGIA

Problema Direto

Nas simulações do problema Inverso, o modelo semi-empírico caracteriza o problema Direto, que consiste na resolução simultânea do sistema de Equações Diferenciais Parciais formado pela Equação de Richards, que por sua vez descreve a dinâmica da água no solo, dado pela Equação (1), com suas respectivas condições de contorno e inicial, (Eqs. (2), (3) e (4)):

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K \frac{\partial \Psi_m}{\partial z} \right] \quad \text{para } 0 < z < H \text{ e } 0 < t < t_f \quad (1)$$

$$\theta(0,t) = \theta_1(t) \quad \text{para } 0 < t < t_f \quad (2)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial z}(H,t) = C \quad \text{para } 0 < t < t_f \quad (3)$$

$$\theta(z,0) = \theta_0(z) \quad \text{para } 0 < z < H \quad (4)$$

Onde: θ é o teor de água (*adimensional*); K é a condutividade hidráulica (*m/s*); Ψ_m 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 ($^{\circ}\text{C}$); θ_1 é a condição de contorno para a superfície (*adimensional*); θ_0 é a condição inicial (*adimensional*). Juntamente com a Equação do Calor, que descreve o comportamento da temperatura no solo, dado pela Equação (5), com suas respectivas condições de contorno e inicial, (Eqs. (6), (7) e (8)):

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \quad \text{para } 0 < z < H \text{ e } 0 < t < t_f \quad (5)$$

$$T(0,t) = T_2(t) \quad \text{para } 0 < t < t_f \quad (6)$$

$$T(H,t) = T_1(t) \quad \text{para } 0 < t < t_f \quad (7)$$

$$T(z,0) = T_0(z) \quad \text{para } 0 < z < H \quad (8)$$

Onde: α é a difusividade térmica (m^2/s); T_2 e T_1 são, respectivamente, as condições de contorno para a superfície e fundo ($^{\circ}\text{C}$); T_0 é a condição inicial ($^{\circ}\text{C}$).

O acoplamento ocorre pela consideração da variação da condutividade hidráulica saturada em função da temperatura, Equação (9), que vem a contribuir para determinar a condutividade

hidráulica utilizada na Equação de Richards dada por Van Genuchten (1980), conforme Equação (10).

$$K_o = (c_1 \cdot T + c_2) \cdot 2.7 \cdot 10^{-6} \tag{9}$$

$$K(\Theta, T) = K_o \Theta^l [1 - (1 - \Theta^{1/m})^m]^2 \tag{10}$$

Onde: c_1, c_2 são parâmetros de ajuste a serem determinados; K_o é a condutividade hidráulica saturada (m/s). Simultaneamente, também é considerado a variação da difusividade térmica, utilizada na Equação do Calor, em função do teor de água, conforme Equação (11).

$$\alpha(\Theta) = (c_3 \cdot e^{(c_4 \cdot \Theta)} + c_5) \cdot 10^{-7} \tag{11}$$

Onde: c_3, c_4, c_5 são parâmetros de ajuste a serem determinados.

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.

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. O algoritmo foi implementado no software MATLAB.

Problema Inverso

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 separadamente os parâmetros de cada problema, sendo criados dois vetores de parâmetros. No vetor do problema hidráulico ($X\Theta$), tem-se os parâmetros c_1 e c_2 da Eq. (9) e os coeficientes a e n da curva característica do solo, assumindo que $m=1-\frac{1}{n}$ de acordo com VAN GENUCHTEN (1980), portanto, $X\Theta = [c_1; c_2; a; n]$. No vetor do problema térmico (XT), tem-se os parâmetros c_3, c_4, c_5 da Eq. (11), portanto, $XT = [c_3; c_4; c_5]$. Em seguida, é apresentado o algoritmo utilizado:

1º Passo: Resolver o Problema Direto: problema hidráulico PD_Θ e problema térmico PD_T com as estimativas iniciais ~~$X\Theta_0$~~ e ~~XT_0~~ .

2º Passo: Calcular a soma dos erros quadrados ou função objetivo pela Eq. (12).

$$\begin{aligned} S\Theta(X\Theta_k) &= [Y\Theta - PD_\Theta(X\Theta_k)]^T \cdot [Y\Theta - PD_\Theta(X\Theta_k)] \\ ST(XT_k) &= [YT - PD_T(XT_k)]^T \cdot [YT - PD_T(XT_k)] \end{aligned} \tag{12}$$

onde

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

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

$$J\Theta = \begin{bmatrix} \frac{\partial PD_{\Theta_1}}{\partial X\Theta_1} & \frac{\partial PD_{\Theta_1}}{\partial X\Theta_2} & \dots & \frac{\partial PD_{\Theta_1}}{\partial X\Theta_4} \\ \frac{\partial PD_{\Theta_2}}{\partial X\Theta_1} & \frac{\partial PD_{\Theta_2}}{\partial X\Theta_2} & \dots & \frac{\partial PD_{\Theta_2}}{\partial X\Theta_4} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial PD_{\Theta_n}}{\partial X\Theta_1} & \frac{\partial PD_{\Theta_n}}{\partial X\Theta_2} & \dots & \frac{\partial PD_{\Theta_n}}{\partial X\Theta_4} \end{bmatrix} \quad JT = \begin{bmatrix} \frac{\partial PD_{T_1}}{\partial XT_1} & \frac{\partial PD_{T_1}}{\partial XT_2} & \frac{\partial PD_{T_1}}{\partial XT_3} \\ \frac{\partial PD_{T_2}}{\partial XT_1} & \frac{\partial PD_{T_2}}{\partial XT_2} & \frac{\partial PD_{T_2}}{\partial XT_3} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial PD_{T_n}}{\partial XT_1} & \frac{\partial PD_{T_n}}{\partial XT_2} & \frac{\partial PD_{T_n}}{\partial XT_3} \end{bmatrix}$$

4º Passo: Cálculo da nova estimativa para $X\Theta_{k+1}$ e XT_{k+1} , através da Eq. (13)

$$X\Theta_{k+1} = X\Theta_k + [(J\Theta)^T \cdot J\Theta + \mu_k \Omega_k]^{-1} \cdot [Y\Theta - PD_{\Theta}(X\Theta_k)]$$

$$XT_{k+1} = XT_k + [(JT)^T \cdot JT + \mu_k \Omega_k]^{-1} \cdot [YT - PD_T(XT_k)]$$

(13)

onde: μ_k é um parâmetro de regularização e Ω_k é a matriz diagonal denominada termo de regularização.

5º Passo: Resolver o Problema Direto PD_{Θ} e PD_T com a nova estimativa $X\Theta_{k+1}$ e XT_{k+1} .

6º Passo: Calcular $S(X\Theta_{k+1})$ e $ST(XT_{k+1})$ com a Eq. (12).

7º Passo: Se $S(X\Theta_{k+1}) > S(X\Theta_k)$ e/ou $ST(XT_{k+1}) > ST(XT_k)$ substituir μ_k por $X\mu_k$, onde X é um numero real maior que 1. Retornar para o passo 4.

8º Passo: Se $S(X\Theta_{k+1}) < S(X\Theta_k)$ e $ST(XT_{k+1}) < ST(XT_k)$ utilizar a nova estimativa e substituir μ_k por $D\mu_k$, onde D é um numero real menor que 1 e maior que 0.

9º Passo: Verificar o critério de parada $S\Theta \leq S\Theta$ e $ST \leq ST$, 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

Na Figura 1 é apresentada a distribuição do teor de água e temperatura para todo o domínio espacial e $t = 50400$ s.

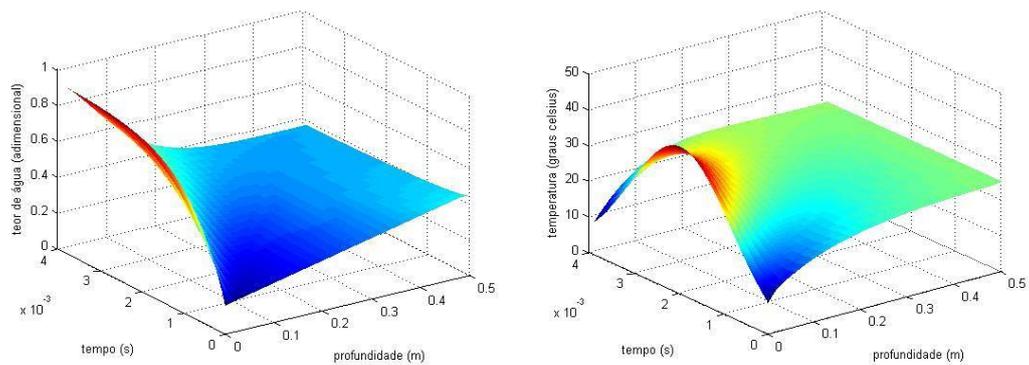


Figura 1 – Distribuição do teor de água e temperatura para $t = 50400$ s.

Na superfície percebe-se um processo lento de irrigação, enquanto que na profundidade de 0,5 m o fluxo de água é considerado nulo. Os gradientes mais significativos de teor de água acontecem próximos a superfície, enquanto que para profundidades maiores os gradientes são mínimos. Em relação a temperatura percebe-se que na superfície o comportamento é de um dia de sol com poucas nuvens, onde a temperatura do solo aumenta até um ponto máximo e após passa a diminuir. Na profundidade de 0,5 m a temperatura é constante, sendo assim, os principais gradientes de temperatura ocorrem próximos a superfície, enquanto em profundidades maiores a temperatura sofre variação mínima durante o dia.

Em relação ao Problema Inverso, nas simulações foi variado o parâmetro de regularização (μ) 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 $XT = [15;5;10]$.

μ	Critério de parada	Itera.	Tempo	Parâmetros (Θ)	Parâmetros (T)	R^2
0,05	$\ \Theta - \Theta_0\ = 10^{-5}$ $\ T - T_0\ = 10^{-5}$	8	2min49s	$c_1=0,08$ $c_2=21,352$ $a=0,4$ $n=13$	$c_3=8,6911$ $c_4=2,065$ $c_5=12,185$	$\Theta \cong 1$ $T \cong 1$
0,45	$\ \Theta - \Theta_0\ = 10^{-5}$ $\ T - T_0\ = 10^{-5}$	18	10min12s	$c_1=0,08$ $c_2=21,352$ $a=0,4$ $n=13$	$c_3=8,6912$ $c_4=2,065$ $c_5=12,184$	$\Theta \cong 1$ $T \cong 1$

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

Os valores dos parâmetros sintéticos a serem determinados são $X\Theta = [0,08;21,352;0,4;13]$ e $XT = [8,6911;2,0644;12,185]$. O Método de Levenberg-Marquardt, é um método eficiente na determinação de uma grande quantidade de parâmetros utilizando tempo computacional curto se comparado, por exemplo, com o Método de Procura em Rede Modificado. Essa eficiência no tempo computacional se deve ao parâmetro de regularização (μ) que acelera a convergência.

A Tabela 1 mostra a importância da análise do parâmetro de regularização (μ). Foram feitos testes numéricos exaustivos na procura de um valor eficiente para este parâmetro. Considerando a malha escolhida o valor eficiente encontrado para (μ) é 0,05, tendo em vista que para valores menores a solução do Problema Direto é divergente.

O modelo semi-empírico proposto pode ser utilizado como Problema Direto em um Problema Inverso, sendo que a convergência na determinação de parâmetros acontece de forma satisfatória. Portanto, o modelo semi-empírico proposto é uma alternativa interessante na determinação acoplada da temperatura e teor de água do solo e na determinação de parâmetros específicos do solo como a difusividade térmica e a condutividade hidráulica.

CONCLUSÃO

O Método de Levenberg-Marquardt se mostrou uma eficiente técnica na determinação de parâmetros quando em se tratando de um grande número de parâmetros se comparado com outros métodos como o de 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 ganho de tempo computacional.

O modelo semi-empírico representa uma alternativa eficiente para a simulação das transferências de calor e água no solo, desde que, sejam obtidas experimentalmente as dependências da condutividade hidráulica do solo saturado em função da temperatura e da difusividade térmica em função do teor de água. O acoplamento é evidente e deve ser utilizado para quantificar com melhor precisão a temperatura e o teor de água no solo, tornando as análises relacionadas ao solo mais significativas. A principal contribuição do modelo semi-empírico está na determinação do teor de água, que é realizado geralmente com a equação de Richards desconsiderando a influência da temperatura. Com o modelo semi-empírico o teor de água é determinado tendo em vista essa influência da temperatura, tornando o valor mais preciso.

REFERÊNCIAS

- [1] P. C. Avi, “Modelo Semi-empírico para a Modelagem da Transferência Simultânea de Calor e Água no Solo”. Dissertação de Mestrado, Unijui. Ijuí-RS, 2011.
- [2] D. Hillel, “Environmental soil physics”. London: Academic Press. 1998.
- [3] M. N. Özisik, H. R. B. Orlande, “Inverse Heat Transfer: Fundamentals and Applications”. Taylor Francis. New York, 2000.
- [4] M. Van Genuchten, “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.
- [5] H. F. C. Velho, “Introdução aos problemas inversos: aplicações em pesquisa espacial”. Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais. São José dos Campos, SP, 2008.