

UFRRJ
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL

DISSERTAÇÃO

**Uma aplicação dos algoritmos genéticos e do método
das diferenças finitas para a identificação de
parâmetros físico-hídricos do solo**

Danilo Vasconceilos dos Santos

2026



**UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DO RIO DE JANEIRO
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM
MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL**

**UMA APLICAÇÃO DOS ALGORITMOS GENÉTICOS E DO MÉTODO
DAS DIFERENÇAS FINITAS PARA A IDENTIFICAÇÃO DE
PARÂMETROS FÍSICO-HÍDRICOS DO SOLO**

DANILO VASCONCELOS DOS SANTOS

Sob orientação de
WILIAN JERONIMO DOS SANTOS

e co-orientação de
RENAN DE SOUZA TEIXEIRA

Dissertação submetida como requisito parcial para obtenção do grau de **Mes-
tre** no Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional, Área de Concentração em Modelagem Matemática e Computacional.

Seropédica, RJ, Brasil
Março de 2026

Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro
Biblioteca Central / Seção de Processamento Técnico

Ficha catalográfica elaborada
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

S237u

Santos, Danilo Vasconceilos dos, 30/12/1998-
Uma aplicação dos algoritmos genéticos e do
método das diferenças finitas para a identificação de
parâmetros físico-hídricos do solo / Danilo Vasconceilos
dos Santos. - Seropédica, 2026.
57 f.: il.

Orientador: Wilian Jeronimo Dos Santos.
Coorientador: Renan De Souza Teixeira.
Dissertação(Mestrado). -- Universidade Federal
Rural do Rio de Janeiro, Programa de Pós-Graduação em
Modelagem Matemática e Computacional, 2026.

1. Equações Parciais. 2. Otimização. 3. Métodos
Numéricos. I. Jeronimo Dos Santos, Wilian, 08/11/1984
, orient. II. De Souza Teixeira, Renan, 22/03/1983-,
coorient. III Universidade Federal Rural do Rio de
Janeiro. Programa de Pós-Graduação em Modelagem
Matemática e Computacional. IV. Título.



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO

UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DO RIO DE JANEIRO

INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL

Seropédica-RJ, 12 de março de 2026.

DANILO VASCONCELOS DOS SANTOS

Dissertação submetida como requisito parcial para a obtenção de grau de Mestre, no Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional PPGMMC, área de Concentração em Modelagem Matemática e Computacional.

DISSERTAÇÃO APROVADA EM 12/03/2026

Wilian Jerônimo dos Santos Drº (membro interno titular-Presidente- UFRRJ)

Edivaldo Figueiredo Fontes Junior Drº (membro titular externo ao Programa-UFRRJ)

Renan Vicente Pinto Drº (membro titular externo à Instituição-UFRJ)



ATA Nº ata/2026 - ICE (12.28.01.23)

(Nº do Documento: 712)

(Nº do Protocolo: NÃO PROTOCOLADO)

(Assinado digitalmente em 13/03/2026 15:46)

EDIVALDO FIGUEIREDO FONTES JUNIOR
COORDENADOR CURS/POS-GRADUACAO - SUBSTITUTO
CoordCGM (12.28.01.00.00.00.57)
Matrícula: ###648#5

(Assinado digitalmente em 13/03/2026 14:51)

WILIAN JERONIMO DOS SANTOS
PROFESSOR DO MAGISTERIO SUPERIOR
DeptM (12.28.01.00.00.00.63)
Matrícula: ###287#1

(Assinado digitalmente em 13/03/2026 15:09)

RENAN VICENTE PINTO
ASSINANTE EXTERNO
CPF: ###.###.777-##

Visualize o documento original em <https://sipac.ufrj.br/documentos/> informando seu número: **712**, ano: **2026**, tipo:
ATA, data de emissão: **13/03/2026** e o código de verificação: **682ed77456**

*"Uma mente que se abre a uma nova
ideia jamais volta ao seu tamanho
original." Albert Einstein*

Agradecimentos

Agradeço, primeiramente, a Deus por essa oportunidade única de estar aqui, realizando um trabalho que representa tanto para mim. Aos meus queridos pais, que sempre me guiaram pelo caminho da curiosidade e do conhecimento, e cujo apoio incondicional é a base de tudo que conquistei.

Ao José Armando, que mesmo do outro lado do país esteve presente em cada momento difícil, com palavras certas e uma generosidade que não tem distância; à minha querida Vivia, companheira de laboratório e de reflexões sobre o futuro nossas conversas tornaram os dias mais leves e significativos; e à minha melhor amiga Natty, sempre presente para uma boa conversa, entre muitos "xadrezinhos", cafés e a cumplicidade que só os grandes amigos sabem oferecer.

Agradeço de coração ao coordenador Carlos, que exerce seu papel com uma dedicação e uma paciência que o tornam muito mais do que um gestor é como um pai dentro deste programa, sempre disposto a ouvir e a ajudar com seriedade e afeto. Ao Márcio, da secretaria, cuja eficiência e boa vontade foram essenciais para resolver os inúmeros desafios técnicos e burocráticos da vida na pós-graduação.

Ao honrado Wilian Jeronimo, que acreditou no meu potencial e me deu a oportunidade de desenvolver este trabalho, permitindo que eu crescesse tanto profissional quanto pessoalmente. Ao Renan Teixeira, pelas conversas enriquecedoras, pelas instruções valiosas e pelo ambiente acolhedor que soubemos construir em nosso pequeno laboratório.

Por fim, agradeço ao alojamento de pós-graduação, que me recebeu com hospitalidade no início desta jornada e me ofereceu um lar quando mais precisei.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Finance Code 001

O conhecimento dos parâmetros físico-hídricos do solo é fundamental para aplicações em engenharia agrícola, hidrologia e gestão de recursos hídricos. Este trabalho propõe uma metodologia computacional para estimação desses parâmetros através do acoplamento entre Algoritmos Genéticos (AG) e o Método das Diferenças Finitas (MDF). A pesquisa está estruturada em dois eixos principais: (i) o problema direto, que consiste na modelagem numérica do fluxo de água em solos não saturados através da equação de Richards, e (ii) o problema inverso, que visa identificar parâmetros hidrodinâmicos a partir de medições de umidade volumétrica.

Na solução do problema direto, foram implementados e comparados esquemas explícito (Euler progressivo) e implícito (Euler regressivo), sendo o último linearizado pelo método de Picard modificado e resolvido via algoritmo de Thomas. Três modelos constitutivos foram avaliados: Haverkamp, van Genuchten-Mualem e Brooks-Corey. Os resultados demonstraram que o esquema implícito permite passos temporais maiores que o explícito, mantendo estabilidade numérica e precisão comparável ($MSE < 10^{-3}$).

Para o problema inverso, desenvolveu-se um AG utilizando seleção por torneio, cruzamento aritmético e mutação gaussiana, com função objetivo baseada na maximização do coeficiente de determinação (R^2). Testes com dados sintéticos contaminados por ruído gaussiano demonstraram a consistência da metodologia, alcançando $R^2 > 0,997$ na estimativa simultânea de cinco parâmetros do modelo de van Genuchten-Mualem (θ_r , θ_s , α , n , K_s). A metodologia foi avaliada considerando perfis de umidade em 7 pontos de profundidade, bem como fixando a profundidade em 12 cm e avaliando a variação da umidade ao longo do tempo, apresentando resultados consistentes em ambas as abordagens e validando a aplicabilidade do método.

Os resultados apresentados no presente trabalho indicam que o acoplamento AG-MDF pode constituir uma alternativa viável aos métodos laboratoriais tradicionais para caracterização hidrodinâmica de solos, possibilitando a estimativa de múltiplos parâmetros a partir de um único conjunto de dados experimentais.

Palavras-chave: análise inversa, otimização, recursos hídricos.

ABSTRACT

Knowledge of soil hydro-physical parameters is fundamental for applications in agricultural engineering, hydrology, and water resources management. This work proposes a computational methodology for estimating these parameters through the coupling of Genetic Algorithms (GA) and the Finite Difference Method (FDM). The research is structured around two main axes: (i) the forward problem, which consists of the numerical modeling of water flow in unsaturated soils through the Richards equation, and (ii) the inverse problem, which aims to identify hydrodynamic parameters from volumetric moisture measurements.

In solving the forward problem, explicit (forward Euler) and implicit (backward Euler) schemes were implemented and compared, the latter being linearized by the modified Picard method and solved via the Thomas algorithm. Three constitutive models were evaluated: Haverkamp, van Genuchten–Mualem, and Brooks–Corey. The results demonstrated that the implicit scheme allows larger time steps than the explicit scheme while maintaining numerical stability and comparable accuracy ($MSE < 10^{-3}$).

For the inverse problem, a GA was developed using tournament selection, arithmetic crossover, and Gaussian mutation, with an objective function based on the maximization of the coefficient of determination (R^2). Tests with synthetic data contaminated by Gaussian noise demonstrated the consistency of the methodology, achieving $R^2 > 0.997$ in the simultaneous estimation of five parameters of the van Genuchten–Mualem model (θ_r , θ_s , α , n , K_s). The methodology was evaluated considering moisture profiles at 7 depth points, as well as fixing the depth at 12 cm and evaluating the variation of moisture content over time, yielding consistent results in both approaches and validating the applicability of the method.

The results presented in this work indicate that the GA–FDM coupling may constitute a viable alternative to traditional laboratory methods for soil hydrodynamic characterization, enabling the estimation of multiple parameters from a single experimental dataset.

Keywords: inverse analysis, optimization, water resources.

1 INTRODUÇÃO	1
1.1 Introdução	1
1.2 Justificativa	2
1.3 Revisão Bibliográfica	3
1.4 Objetivos	4
1.4.1 Objetivos Específicos	4
2 MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL DA DINÂMICA DA ÁGUA NO SOLO	5
2.1 Modelagem Matemática	5
2.2 Curvas de Retenção e de Condutividade	7
2.2.1 Modelo de Brooks e Corey (1964)	8
2.2.2 Modelo de Haverkamp	8
2.2.3 Modelo de van Genuchten (1980)	8
2.3 Discretização do Modelo Matemático	9
2.3.1 Esquema Explícito (Euler Progressivo)	10
2.3.1.1 Estabilidade e Limitações do Esquema Explícito	10
2.3.2 Esquema Implícito (Euler Regressivo)	10
2.3.2.1 Linearização pelo Método de Picard Modificado	11
2.3.2.2 Sistema Tridiagonal e Algoritmo de Thomas	12
2.3.2.3 Critério de Convergência e Controle do Passo Temporal	13
3 ANÁLISE INVERSA COM ALGORITMOS GENÉTICOS.....	15
3.1 Problemas direto e inverso	15
3.2 Algoritmo Genético para Estimação de Parâmetros	20
3.2.1 Inicialização da População	21
3.2.2 Cálculo de Aptidão (Fitness)	21
3.2.3 Seleção por Torneio	22
3.2.4 Cruzamento	22
3.2.5 Mutação	22
3.2.6 Elitismo	22

4	RESULTADOS	24
4.1	Problema direto: simulações numéricas da equação de Richards	24
4.2	Problema inverso: identificação dos parâmetros físico-hídricos do solo	36
5	CONSIDERAÇÕES GERAIS	40
6	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	41

Lista de Figuras

2.1	Elemento de volume de solo unidimensional onde a solução escoar na direção vertical z	6
3.1	Relação dual entre problemas direto e inverso: no problema direto, causas conhecidas permitem calcular efeitos; no problema inverso, efeitos medidos permitem estimar causas.	16
3.2	Problema direto: perfil de umidade simulado com os parâmetros de Carsel e Parrish (1988) para o modelo de van Genuchten.	17
3.3	Comparação entre o perfil observado (linha azul contínua, parâmetros de Carsel e Parrish (1988) e o perfil simulado com parâmetros aleatórios (linha tracejada vermelha).	19
3.4	Fluxograma do Algoritmo Genético	21
4.1	Simulação do método explícito ($\Delta t = 0,01$ s), com o modelo de Haverkamp.	25
4.2	Simulação do método implícito ($\Delta t = 5,0$ s), com o modelo de Haverkamp.	26
4.3	Comparação entre os métodos explícito ($\Delta t = 0,001$ s) e implícito ($\Delta t = 5,0$ s) para o modelo de Haverkamp, no instante $t = 720$ s.	27
4.4	Curva de retenção do modelo de Haverkamp.	27
4.5	Curva de condutividade hidráulica do modelo de Haverkamp.	27
4.6	Evolução temporal dos perfis de umidade do solo utilizando o método explícito ($\Delta t = 0,001$ s) com o modelo van Genuchten–Mualem.	29
4.7	Evolução temporal dos perfis de umidade do solo utilizando o método implícito ($\Delta t = 5,0$ s) com o modelo van Genuchten–Mualem.	29
4.8	Comparação entre os métodos explícito ($\Delta t = 0,001$ s) e implícito ($\Delta t = 5,0$ s) para o modelo de van Genuchten–Mualem, no instante $t = 720$ s.	30
4.9	Curva de retenção do modelo de van Genuchten–Mualem.	31
4.10	Curva de condutividade hidráulica do modelo de van Genuchten–Mualem.	31
4.11	Evolução temporal dos perfis de umidade utilizando o método explícito ($\Delta t = 0,001$ s), com o modelo de Brooks–Corey.	33
4.12	Evolução temporal dos perfis de umidade utilizando o método implícito ($\Delta t = 5,0$ s), com o modelo de Brooks–Corey.	33
4.13	Comparação entre os métodos explícito ($\Delta t = 0,001$ s) e implícito ($\Delta t = 5,0$ s) para o modelo de Brooks–Corey, no instante $t = 720$ s.	34
4.14	Curva de retenção do modelo de Brooks–Corey.	35
4.15	Curva de condutividade hidráulica do modelo de Brooks–Corey.	35

4.16	Resultados da análise inversa com estimativa de cinco parâmetros utilizando AG-MDF e dados sintéticos com ruído.	37
4.17	Evolução temporal da umidade volumétrica em $z = 12$ cm gerada pelo modelo de van Genuchten.	38
4.18	Resultados da análise inversa temporal com estimativa de cinco parâmetros utilizando AG-MDF e dados sintéticos com ruído.	39

Lista de Abreviações e Siglas

MDF	Método de Diferenças Finitas
AG	Algoritmo Genético
EDP	Equação Diferencial Parcial
MEF	Método de Elementos Finitos
MVF	Método de Volumes Finitos
TDR	Time Domain Reflectometry
CC	Capacidade de Campo
PMP	Ponto de Murcha Permanente

Lista de Símbolos

q	Vazão específica
K_s	Condutividade hidráulica saturada
θ	Teor de umidade volumétrico
ψ_m	Potencial mátrico
ψ_t	Potencial total
ψ_g	Potencial gravitacional
$C(\psi_m)$	Capacidade específica do solo
$D(\theta)$	Difusividade hidráulica
Δz	Distância ao longo da direção do fluxo
Δt	Incremento temporal
α, β, γ	Parâmetros empíricos de modelos de retenção
m, n	Parâmetros do modelo de van Genuchten
S_e	Saturação efetiva
θ_s	Umidade volumétrica na saturação
θ_r	Umidade residual
R^2	Coefficiente de determinação
$F(x)$	Função objetivo
L	Número total de dados observados
$\bar{\theta}_{obs}$	Média dos dados observados
$\theta_i^{est}(x)$	Valor estimado pelo modelo para o dado i-ésimo
θ_i^{obs}	Valor observado correspondente
$\ e\ _{L_2}$	Norma L2 do erro

1.1 Introdução

O solo constitui um meio poroso complexo onde ocorrem diversos processos físicos, químicos e biológicos essenciais para a manutenção dos ecossistemas terrestres. Entre esses processos, o movimento e a retenção de água desempenham papel central, sendo objeto de intensa investigação científica nas últimas décadas (JURY; HORTON, 2004; ASSOULINE; OR, 2013; VEREECKEN et al., 2016). A compreensão do comportamento hídrico do solo é fundamental não apenas do ponto de vista teórico, mas também para aplicações práticas em engenharia agrícola, hidrologia e ciências ambientais.

O fluxo de água em meios porosos não saturados é governado pela equação de Richards (RICHARDS, 1931), uma equação diferencial parcial não linear que relaciona o conteúdo de água no solo, o potencial matricial e a condutividade hidráulica. Devido à sua natureza não linear, essa equação raramente admite soluções analíticas, o que motivou o desenvolvimento de diversos métodos numéricos para sua resolução. Abordagens baseadas em diferenças finitas, elementos finitos e volumes finitos têm sido amplamente utilizadas para simular processos de infiltração, redistribuição e drenagem em diferentes escalas espaciais e temporais (CELIA; BOULOUTAS; ZARBA, 1990; SOUZA, 2020; SOUZA et al., 2021; MOURA, 2022; QUEIRÓZ, 2017; SUK; PARK, 2019).

A aplicação desses modelos numéricos depende fundamentalmente do conhecimento dos parâmetros físico-hídricos que caracterizam cada tipo de solo. Esses parâmetros incluem a condutividade hidráulica saturada, a umidade residual, a umidade de saturação e os coeficientes empíricos que definem as funções de retenção e condutividade hidráulica. A abordagem convencional para obtenção desses parâmetros envolve a realização de ensaios laboratoriais específicos (RICHARDS, 1965), onde amostras de solo são submetidas a diferentes condições de pressão e os dados resultantes são ajustados a modelos matemáticos mediante técnicas de mínimos quadrados.

Este trabalho apresenta uma metodologia alternativa para a estimativa de parâmetros físico-hídricos do solo, baseada no acoplamento entre um algoritmo genético (AG) e o método das diferenças finitas (MDF). A proposta consiste em formular um problema inverso onde os parâmetros desejados são determinados a partir de medições diretas de umidade no perfil do solo ao longo do tempo. Diferentemente da abordagem tradicional, que requer múltiplos ensaios laboratoriais independentes, a metodologia proposta permite estimar simultaneamente a umidade residual, a umidade de saturação, a condutividade hidráulica saturada e demais parâmetros relevantes a partir de um único conjunto de dados experimentais.

1.2 Justificativa

O conhecimento preciso das propriedades hídricas do solo tem implicações diretas em diversas áreas de interesse prático e científico. No contexto agrícola, a disponibilidade de água no solo determina a produtividade das culturas e a eficiência dos sistemas de irrigação. Em estudos hidrológicos, esses parâmetros são essenciais para modelar a recarga de aquíferos, o escoamento superficial e os processos erosivos. Na engenharia geotécnica, o comportamento hídrico do solo influencia a estabilidade de taludes, fundações e obras de terra.

A curva de retenção de água no solo expressa matematicamente a relação entre o conteúdo volumétrico de água e o potencial matricial, caracterizando a energia com que a água está retida na matriz porosa. Essa relação permite identificar parâmetros operacionais importantes como a capacidade de campo e o ponto de murcha permanente. A capacidade de campo, normalmente associada a um potencial matricial de aproximadamente $-0,03$ MPa, representa a quantidade de água retida no solo após a drenagem gravitacional, constituindo uma referência para o limite superior de água disponível para as plantas (KLAR, 1988; KLAR, 1991). Já o ponto de murcha permanente, geralmente correspondente a $-1,5$ MPa, indica o limite inferior de extração de água pelas raízes, abaixo do qual as plantas entram em murcha irreversível (KLUTE, 1986; TEIXEIRA et al., 2017).

A determinação experimental dos parâmetros físico-hídricos do solo tradicionalmente envolve procedimentos laboratoriais específicos e relativamente demorados. O método mais utilizado para construir a curva de retenção é o ensaio em câmara de pressão (ou placa de pressão de Richards), onde amostras de solo são colocadas sobre placas porosas cerâmicas com alta entrada de ar e submetidas a pressões crescentes (RICHARDS, 1965; KLUTE, 1986). À medida que a pressão aumenta, a água é extraída gradualmente dos poros maiores para os menores, e o conteúdo de umidade é determinado por pesagem após o equilíbrio hidráulico em cada nível de pressão aplicado. Esse processo pode levar várias semanas para ser completado, pois cada ponto da curva de retenção requer tempo considerável para atingir o equilíbrio.

A condutividade hidráulica saturada, por sua vez, é obtida através de ensaios de permeabilidade, que podem ser realizados tanto em laboratório quanto em campo. Em laboratório, utilizam-se permeâmetros de carga constante ou variável, onde se mede o fluxo de água através de uma amostra saturada sob gradiente hidráulico conhecido (KLUTE, 1986). Em campo, ensaios de infiltração como o do infiltrômetro de anel duplo ou o permeâmetro Guelph podem ser empregados. Embora esses métodos sejam bem estabelecidos e confiáveis, apresentam algumas limitações práticas: são trabalhosos, requerem equipamentos específicos, demandam tempo considerável e fornecem informações pontuais que podem não representar adequadamente a variabilidade espacial do solo.

A abordagem de análise inversa proposta neste trabalho oferece uma alternativa metodológica a esses procedimentos convencionais. Ao invés de realizar múltiplos ensaios laboratoriais independentes para cada parâmetro, a metodologia utiliza medições de umidade ao longo do perfil do solo em diferentes instantes de tempo. Essas medições podem ser obtidas com sensores de umidade instalados em colunas de solo ou diretamente em campo, permitindo capturar o comportamento dinâmico do sistema. O acoplamento entre um modelo numérico de fluxo (método das diferenças finitas) e um algoritmo de otimização (algoritmo genético) possibilita estimar simultaneamente todos os parâmetros físico-hídricos relevantes através da minimização da diferença entre os valores de umidade medidos e simulados. Essa estratégia apresenta vantagens em termos de eficiência, pois reduz significativamente o tempo e os recursos necessários para a caracterização do solo, além de fornecer parâmetros que refletem o comportamento integrado do sistema sob condições de fluxo real.

1.3 Revisão Bibliográfica

Desde os primórdios da civilização, a interação entre água e solo tem sido objeto de observação e estudo prático, especialmente no contexto agrícola. Civilizações antigas, como os egípcios e mesopotâmicos, desenvolveram técnicas rudimentares de irrigação e drenagem, demonstrando um entendimento empírico da dinâmica hídrica no solo. Esses conhecimentos permitiram o cultivo em regiões áridas ou semiáridas, garantindo a subsistência e o desenvolvimento de sociedades complexas (BRANCO, 2021). Contudo, foi apenas a partir do século XIX, com o advento da ciência do solo, que os processos envolvidos no movimento da água no solo começaram a ser investigados de maneira sistemática.

Um marco fundamental nesse campo foi a formulação da Lei de Darcy (DARCY, 1856). Esta lei descreve o fluxo de água em meios porosos saturados e estabelece uma relação linear entre o gradiente hidráulico e a velocidade de escoamento. A Lei de Darcy é amplamente utilizada na hidrogeologia e na ciência do solo para modelar o movimento da água em condições saturadas (MARINELLI, 2024). No entanto, a compreensão do comportamento da água em solos não saturados só avançou significativamente com as contribuições de pesquisadores como Edgar Buckingham e Sterling A. Taylor no início do século XX. Eles introduziram conceitos como potencial mátrico e condutividade hidráulica variável, fundamentais para o estudo de sistemas mais complexos (BROOKS; COREY, 1964).

Em 1928, Lorenzo A. Richards combinou a equação de Darcy-Buckingham com a equação da continuidade, resultando na equação de Richards. Esta equação diferencial parcial (EDP) descreve o fluxo de água em solos não saturados em regime transiente, ou seja, quando o fluxo varia com o tempo. Entretanto, a equação de Richards raramente admite soluções analíticas exatas, exceto em casos particulares, como regimes estacionários ou simplificações específicas das funções de condutividade hidráulica.

A solução numérica de EDPs, como a equação de Richards, pode ser abordada por meio de diferentes formulações matemáticas, como por exemplo a formulação forte que é aplicada diretamente na EDP, exigindo que a solução aproximada possua derivadas contínuas de alta ordem (STRANG; FIX, 2008). Por outro lado, a conhecida formulação fraca torna-se uma alternativa que diminui tais exigências de regularidade da solução. Ela pode ser obtida multiplicando a EDP por uma função teste e integrando-a sobre um domínio. A integração por partes transfere as derivadas de alta ordem da solução para a função teste, que pode ser escolhida para ser mais suave. Essa abordagem permite encontrar soluções em espaços de funções mais amplos, como os espaços de Sobolev, que incluem funções com derivadas descontínuas (EVANS, 2010).

Os dois métodos amplamente utilizados para a simulação numérica da equação de Richards são MDF e o método dos volumes finitas (MVF), como pode ser visto nas referências (VASCONCELLOS; AMORIM, 2001; BOUCHEMELLA; SERIDI; ALIMI-ICHOLA, 2015; SHANMUGAM et al., 2019; CAVIEDES-VOULLIÈME et al., 2013; FARTHING; OGDEN, 2017; LAI; OGDEN, 2015). O MDF, estudado no presente trabalho de pesquisa, se baseia na forma forte da EDP, onde as derivadas são aproximadas por diferenças finitas em pontos discretos do domínio (LEVEQUE, 2007). Já o MVF se baseia na formulação integral de uma EDP, forma fraca, dividindo o domínio do problema em volumes de controle e integrando a EDP sobre cada volume. As derivadas são aproximadas por diferenças finitas nas faces dos volumes de controle, garantindo a conservação das quantidades físicas (LEVEQUE, 2002).

A análise de estabilidade e convergência é essencial para validar a precisão dos métodos numéricos, como o MDF. A estabilidade garante que pequenos erros não se amplifiquem durante os cálculos, enquanto a convergência assegura que a solução numérica se aproxime da solução exata à medida que o tamanho dos passos diminui. O Teorema de Lax estabelece que,

para um problema bem posto, um método de diferenças finitas é convergente se, e somente se, for consistente e estável (LAX; RICHTMYER, 1956).

O presente trabalho combina métodos numéricos para a solução da equação de Richards com técnicas de otimização. Na literatura, pode-se citar o software Hydrus, que utiliza um modelo de elementos finitos, que numericamente resolve a equação de Richards, com o método de Levenberg-Marquardt como a técnica de otimização para estimar parâmetros físico-hídricos do solo via análise inversa (HOPMANS et al., 2002).

Nos campos da otimização e da análise inversa, os algoritmos genéticos (AGs) vêm se apresentando como um dos mais utilizados algoritmos de busca. Este fato se deve ao fato de que, diferente dos algoritmos tradicionais de otimização, os AGs não necessitam que a função objetivo seja positiva definida ou contínua e possuem baixa probabilidade de convergir para um ótimo local (GOLDBERG, 1989). Outra característica dos algoritmos genéticos é seu bom desempenho em problemas que envolvem grandes espaços de busca.

Na presente dissertação de mestrado almejou-se utilizar um AG para estimar parâmetros físico-hídricos do solo considerando dados de umidade conhecidos e o MDF para a solução numérica da equação de Richards. Foram comparados, ainda, diferentes modelos de curvas de retenção encontrados na literatura, citados no decorrer deste texto, assim como diferentes tipos de solo.

1.4 Objetivos

O objetivo principal deste trabalho é propor uma metodologia computacional eficiente para a estimativa de parâmetros físico-hídricos do solo usando o acoplamento entre um AG e o MDF.

1.4.1 Objetivos Específicos

Para alcançar o objetivo principal deste trabalho de pesquisa, os seguintes objetivos específicos devem ser alcançados.

- Implementar de maneira eficiente o MDF para a solução numérica da equação de Richards, considerando diferentes formas da equação e esquemas de discretização.
- Implementar os algoritmos genéticos (AGs) para problemas que envolvem otimização e análise inversa.
- Identificar os parâmetros físico-hídricos do solo usando a metodologia proposta de análise inversa, usando dados conhecidos de umidade no solo, considerando diferentes modelos de curvas de retenção da água no solo.

Modelagem matemática e computacional da dinâmica da água no solo

Este capítulo apresenta os fundamentos da modelagem matemática e computacional da dinâmica da água no solo, abordando os principais conceitos teóricos e metodológicos envolvidos na descrição do fluxo de água na direção z (1-D), em meios porosos não saturados. Inicialmente, é introduzida a formulação matemática da Equação de Richards, que constitui o modelo clássico para representar o movimento da água no solo a partir dos princípios de conservação de massa e da generalização da Lei de Darcy. Em seguida, são discutidas as relações constitutivas que descrevem as propriedades hidráulicas do solo, com ênfase nas curvas de retenção de água e nas funções de condutividade hidráulica, fundamentais para a caracterização do comportamento hidrodinâmico do meio poroso. Posteriormente, o capítulo apresenta a modelagem computacional do problema, contemplando a discretização das equações governantes por meio de esquemas de diferenças finitas, destacando aspectos relacionados à implementação numérica e à obtenção de soluções aproximadas. Dessa forma, busca-se estabelecer uma base teórica e computacional que subsidie as análises e aplicações desenvolvidas nos capítulos subsequentes.

2.1 Modelagem Matemática

O experimento de Darcy foi projetado para estudar o fluxo de água através de um meio poroso granular, como a areia, e deu origem à equação empírica que descreve esse comportamento, podendo ser expressa na forma diferencial como (LIBARDI, 2005)

$$q_z = -K_s \frac{\partial \psi}{\partial z}, \quad (2.1)$$

onde $\frac{\partial \psi}{\partial z}$ representa o gradiente de potencial hidráulico e K_s é a condutividade hidráulica do meio poroso saturado. O sinal negativo reflete o fato de que o fluxo ocorre na direção oposta ao gradiente de potencial hidráulico, isto é, da região de maior potencial para a de menor potencial. Além disso, considera-se o potencial total da água no solo como a soma do potencial matricial e do potencial gravitacional (RICHARDS, 1931), $\psi = \psi_m + z$.

A Lei de Darcy descrita pela Equação (2.1) foi desenvolvida para descrever o fluxo de fluidos em meios porosos saturados. Porém, quando se trata de solos não saturados (isto é, quando parte dos poros está preenchida por ar), o comportamento do fluxo de água é mais complexo, pois depende da interação entre a água e a matriz sólida do solo. Dessa forma, Buckingham (1907) reconheceu que o fluxo de água em solos não saturados poderia ser ca-

racterizado considerando a condutividade hidráulica K como uma função do potencial mátrico ψ_m , obtendo-se a conhecida equação de Darcy-Buckingham

$$q_z = -K(\psi_m) \frac{\partial \psi}{\partial z}. \quad (2.2)$$

A Equação (2.2) é aplicável em situações de estado estacionário, ou seja, quando não há variações temporais. Contudo, a natureza é predominantemente transitória, exigindo o uso da Equação da Continuidade para modelar tais processos. Essa equação, fundamentada na lei da conservação de massa, estabelece que a massa é invariável, não podendo ser gerada ou eliminada. Para ilustrar sua dedução, considera-se um elemento de solo infinitesimal unidimensional na direção vertical z , conforme representado na Figura 2.1.

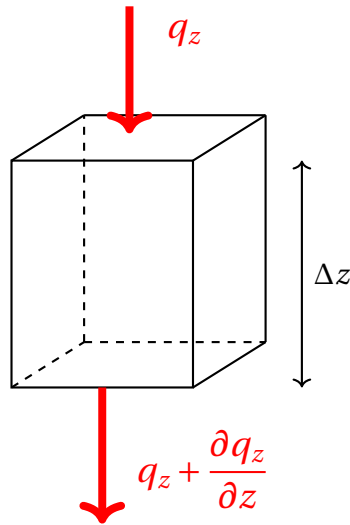


Figura 2.1: Elemento de volume de solo unidimensional onde a solução escoar na direção vertical z .

Fonte: Elaborado pelo autor.

O elemento possui volume $dV = A\Delta z$, onde A é a área da seção transversal e Δz é a altura infinitesimal. A água entra pela face superior com fluxo q_z e sai pela face inferior com fluxo $q_{z+\Delta z}$. De acordo com o princípio da continuidade, a diferença entre os fluxos de entrada e saída deve equivaler à variação temporal do volume de solução dentro do elemento:

$$q_z A - q_{z+\Delta z} A = \frac{\partial V_{sol}}{\partial t}. \quad (2.3)$$

Aplicando a expansão em série de Taylor de primeira ordem para o fluxo de saída, tem-se:

$$q_{z+\Delta z} = q_z + \frac{\partial q_z}{\partial z} \Delta z. \quad (2.4)$$

Substituindo a Equação (2.4) na Equação (2.3) e cancelando os termos opostos, obtém-se:

$$-\frac{\partial q_z}{\partial z} A \Delta z = \frac{\partial V_{sol}}{\partial t}. \quad (2.5)$$

Considerando que o teor de umidade volumétrica é dado por $\theta = \frac{V_{sol}}{dV} = \frac{V_{sol}}{A\Delta z}$, a Equação (2.5) pode ser reescrita como:

$$-\frac{\partial q_z}{\partial z} = \frac{\partial \theta}{\partial t}. \quad (2.6)$$

Combinando a equação de Darcy-Buckingham (2.2) com a equação da continuidade (2.6), obtém-se a equação de Richards. Para a dedução completa e discussão rigorosa das diferentes formulações desta equação, incluindo suas hipóteses e limitações, recomenda-se consultar (LIBARDI, 2005). Em sua forma mista unidimensional, a equação de Richards é expressa como:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K(\psi_m) \left(\frac{\partial \psi_m}{\partial z} - 1 \right) \right], \quad (2.7)$$

onde ψ_m é o potencial matricial e o termo -1 representa o gradiente do potencial gravitacional, considerando o sistema de coordenadas com z positivo para baixo a partir da superfície do solo.

A equação de Richards pode ser formulada de três maneiras: a forma mista dada pela Equação (2.7), a forma expressa em termos do potencial matricial ψ_m e a forma em função do teor de umidade θ . Definindo a capacidade específica do solo $C(\psi_m) = \frac{\partial \theta}{\partial \psi_m}$ e a difusividade hidráulica $D(\theta) = K(\theta) \frac{\partial \psi_m}{\partial \theta}$, obtém-se as formas ψ_m e θ , respectivamente:

$$C(\psi_m) \frac{\partial \psi_m}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K(\psi_m) \left(\frac{\partial \psi_m}{\partial z} - 1 \right) \right], \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial z} - K(\theta) \right). \quad (2.9)$$

A Equação de Richards constitui um modelo matemático fundamental para descrever o fluxo de água em solos não saturados, sendo formulada em termos do potencial matricial e do conteúdo volumétrico de água no solo. Entretanto, essa equação envolve simultaneamente essas duas variáveis interdependentes, o que torna o problema matematicamente indeterminado caso não sejam estabelecidas relações constitutivas adicionais. Nesse contexto, torna-se necessária a introdução das funções que caracterizam as propriedades hidráulicas do solo, destacando-se a curva de retenção de água, que relaciona o conteúdo de água ao potencial matricial, e a função de condutividade hidráulica não saturada, que expressa a dependência da condutividade em relação ao estado hídrico do solo. Essas relações são fundamentais para o fechamento do modelo matemático e para a adequada representação do comportamento hidrodinâmico do meio poroso. Dessa forma, a próxima seção apresenta os principais modelos para as curvas de retenção de água no solo e das funções de condutividade hidráulica.

2.2 Curvas de Retenção e de Condutividade

Para resolver a equação de Richards utilizando métodos numéricos é necessário determinar inicialmente parâmetros que podem ser obtidos a partir de dados empíricos. Esses dados são obtidos para estabelecer relações entre a umidade volumétrica do solo, θ , e o potencial matricial, ψ_m . Assim, é possível ajustar os parâmetros usando diferentes modelos que descrevem as curvas de retenção de água no solo, da forma $\theta = \theta(\psi_m)$, para que, em seguida, de forma teórica, uma curva possa ser modelada para a condutividade hidráulica, $K = K(\theta)$ ou $K = K(\psi_m)$. A seguir, são apresentados três dos principais modelos citados na literatura.

2.2.1 Modelo de Brooks e Corey (1964)

Este modelo, proposto por Brooks e Corey (1964), é uma das abordagens mais elementares para representar a curva de retenção de água no solo, considerando a saturação efetiva S_e como a razão entre a umidade presente e a faixa disponível entre a umidade residual e a máxima. Assim, a relação entre S_e e o potencial matricial ψ_m é expressa por:

$$S_e = \begin{cases} \left(\frac{\psi_m}{\psi_b} \right)^{-\lambda}, & \text{se } \psi_m > \psi_b, \\ 1, & \text{se } \psi_m \leq \psi_b, \end{cases} \quad (2.10)$$

onde ψ_b é o potencial de entrada de ar (ou potencial de borbulhamento) e λ é o índice de distribuição de tamanho de poros. A saturação efetiva S_e também é definida por

$$S_e = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r}, \quad (2.11)$$

em que θ representa a umidade volumétrica, θ_r é a umidade residual e θ_s é a umidade saturada. Ademais, a condutividade hidráulica é formulada como

$$K(\psi_m) = K_s \left(\frac{\psi_m}{\psi_b} \right)^{2+2.5\lambda}, \quad (2.12)$$

ou, em termos de saturação efetiva,

$$K(\theta) = K_s S_e^{2\lambda+2.5}, \quad (2.13)$$

onde K_s é a condutividade hidráulica saturada.

2.2.2 Modelo de Haverkamp

A proposta de Haverkamp et al. (1977) caracteriza a curva de retenção por meio de uma transição suave entre os estados de umidade, onde os parâmetros de ajuste influenciam diretamente a resposta do solo ao potencial matricial ψ_m . A relação entre a umidade volumétrica θ e ψ_m é dada por:

$$\theta(\psi_m) = \frac{\alpha(\theta_s - \theta_r)}{\alpha + |\psi_m|^\beta} + \theta_r, \quad (2.14)$$

com $\alpha > 0$ e $\beta > 0$. A condutividade hidráulica segue a forma:

$$K(\psi_m) = \frac{K_s A}{A + |\psi_m|^\gamma}, \quad (2.15)$$

onde A e γ são determinados empiricamente, proporcionando uma descrição consistente dos dados experimentais.

2.2.3 Modelo de van Genuchten (1980)

O modelo de Van Genuchten (1980) é reconhecido por sua versatilidade, oferecendo uma transição não linear que abrange desde a saturação plena até condições de umidade residual. A função de retenção é definida por:

$$\theta(\psi_m) = \begin{cases} (\theta_s - \theta_r) [1 + (\alpha|\psi_m|)^n]^{-m} + \theta_r, & \text{se } \psi_m \leq 0, \\ \theta_s, & \text{se } \psi_m > 0, \end{cases} \quad (2.16)$$

com $m = 1 - \frac{1}{n}$, $\alpha > 0$ e $n > 1$. A saturação efetiva é expressa por

$$S_e = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r}, \quad (2.17)$$

e a condutividade hidráulica é dada por:

$$K(\theta) = K_s S_e^{1/2} \left[1 - (1 - S_e^{1/m})^m \right]^2. \quad (2.18)$$

2.3 Discretização do Modelo Matemático

O primeiro passo do MDF consiste em substituir o domínio contínuo por uma malha discreta de pontos. O domínio espacial $[0, L]$ é dividido em N subintervalos de comprimento uniforme, gerando os nós

$$\Delta z = \frac{L}{N}, \quad z_i = i \Delta z, \quad i = 0, 1, \dots, N. \quad (2.19)$$

O domínio temporal é igualmente particionado com passo de tempo constante Δt , definindo-se $t_n = n \Delta t$ para $n = 0, 1, \dots, M$, com $M \Delta t = T$. A notação adotada ao longo de todo o desenvolvimento é a seguinte

$$\theta_i^n \equiv \theta(z_i, t_n), \quad \psi_i^n \equiv \psi_m(z_i, t_n), \quad K_i^n = K(\psi_i^n), \quad C_i^n = C(\psi_i^n) = \frac{d\theta}{d\psi_m} \Big|_i^n.$$

Os fluxos não são calculados nos próprios nós da malha, mas sim nas interfaces $z_{i \pm 1/2}$, que são os pontos médios entre nós consecutivos. Essa estratégia, conhecida como diferenças centradas por células, é essencial para garantir a conservação de massa local, pois o balanço do volume de controle entre dois nós consecutivos é avaliado com base nos fluxos que efetivamente atravessam as faces desse volume. Os fluxos nas interfaces são definidos como

$$q_{i+1/2}^n = -K_{i+1/2}^n \left(\frac{\psi_{i+1}^n - \psi_i^n}{\Delta z} - 1 \right), \quad (2.20)$$

$$q_{i-1/2}^n = -K_{i-1/2}^n \left(\frac{\psi_i^n - \psi_{i-1}^n}{\Delta z} - 1 \right). \quad (2.21)$$

As condutividades nas interfaces, $K_{i+1/2}$ e $K_{i-1/2}$, não correspondem diretamente a nenhum nó da malha e precisam ser interpoladas a partir dos valores nos nós adjacentes. A média aritmética simples

$$K_{i+1/2}^n = \frac{K_i^n + K_{i+1}^n}{2}, \quad K_{i-1/2}^n = \frac{K_{i-1}^n + K_i^n}{2}, \quad (2.22)$$

é a escolha mais comum e, segundo Celia, Bouloutas e Zarba (1990), fornece resultados melhores para a Equação de Richards do que outras médias (geométrica ou harmônica) na maioria das situações práticas. Esse procedimento introduz um erro de truncamento de ordem $\mathcal{O}(\Delta z^2)$, compatível com o esquema de segunda ordem adotado para a derivada espacial. A divergência do fluxo no nó i é então aproximada por diferenças centradas entre as duas interfaces adjacentes

$$\frac{\partial q}{\partial z} \Big|_i^n \approx \frac{q_{i+1/2}^n - q_{i-1/2}^n}{\Delta z} + \mathcal{O}(\Delta z^2). \quad (2.23)$$

2.3.1 Esquema Explícito (Euler Progressivo)

Na formulação explícita, os termos espaciais são avaliados no nível n , já conhecido, o que permite calcular diretamente θ^{n+1} sem precisar resolver nenhum sistema de equações. Substituindo a aproximação de Euler progressivo para a derivada temporal e os fluxos no nível n , a Equação de Richards discretizada explicitamente é

$$\frac{\theta_i^{n+1} - \theta_i^n}{\Delta t} = \frac{q_{i+1/2}^n - q_{i-1/2}^n}{\Delta z} + \mathcal{O}(\Delta t, \Delta z^2). \quad (2.24)$$

Expandindo os fluxos e reorganizando, obtém-se a Expressão explícita completa

$$\theta_i^{n+1} = \theta_i^n + \frac{\Delta t}{(\Delta z)^2} \left[K_{i+1/2}^n (\psi_{i+1}^n - \psi_i^n) - K_{i-1/2}^n (\psi_i^n - \psi_{i-1}^n) \right] + \frac{\Delta t}{\Delta z} (K_{i+1/2}^n - K_{i-1/2}^n). \quad (2.25)$$

A Equação (2.25) é um método de marcha no tempo onde conhecidos todos os valores no nível n , os valores em $n+1$ são obtidos de forma direta, nó a nó, sem necessidade de resolver qualquer sistema linear. Esta simplicidade, no entanto, tem um preço elevado em termos de estabilidade.

2.3.1.1 Estabilidade e Limitações do Esquema Explícito

O principal problema com a formulação explícita é a dificuldade em garantir a estabilidade. Para analisar essa questão, considera-se o caso linearizado da Equação de difusão com difusividade hidráulica $D = K/C$. A análise de von Neumann mostra que o método será estável somente se o número de Fourier satisfizer

$$F_o = \frac{D\Delta t}{(\Delta z)^2} < \frac{1}{2}. \quad (2.26)$$

(SMITH, 1985). Essa condição relaciona o passo temporal Δt ao passo espacial Δz de forma bastante restritiva. Como a difusividade $D(\psi_m) = K(\psi_m)/C(\psi_m)$ varia fortemente com ψ_m (podendo ser vários ordens de magnitude maior em solos próximos à saturação do que em solos secos), o critério (2.26) precisa ser avaliado com o valor máximo de D no domínio. Na prática, isso impede o uso de passos de tempo maiores do que frações de segundo em muitas situações, tornando o custo computacional proibitivo para simulações de duração relevante. Note também que, paradoxalmente, a redução de Δz para melhorar a precisão espacial exige uma redução quadrática de Δt para manter a estabilidade, agravando ainda mais o problema. Por essas razões, o esquema explícito raramente é utilizado em simulações práticas da Equação de Richards, sendo substituído pelo esquema implícito descrito a seguir.

2.3.2 Esquema Implícito (Euler Regressivo)

Na formulação implícita, os termos espaciais são avaliados no nível de tempo $n+1$, ainda desconhecido. Ao contrário do esquema explícito, a formulação implícita é incondicionalmente estável, não impondo nenhuma restrição sobre a razão $\Delta t/\Delta z^2$. Essa estabilidade é fundamental para a Equação de Richards, pois sem ela seria necessário um Δt proibitivamente pequeno para manter a simulação estável em solos com frentes de umidade abruptas. A Equação de Richards discretizada implicitamente no nó i e no nível de tempo $n+1$ é

$$\frac{\theta_i^{n+1} - \theta_i^n}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta z} \left[K_{i+1/2}^{n+1} \left(\frac{\psi_{i+1}^{n+1} - \psi_i^{n+1}}{\Delta z} - 1 \right) - K_{i-1/2}^{n+1} \left(\frac{\psi_i^{n+1} - \psi_{i-1}^{n+1}}{\Delta z} - 1 \right) \right]. \quad (2.27)$$

O preço pago pela estabilidade incondicional é que a Equação (2.27) é não linear, pois as quantidades θ_i^{n+1} , $K_{i\pm 1/2}^{n+1}$ e C_i^{n+1} dependem da própria incógnita ψ_i^{n+1} , por meio das relações funcionais $\theta(\psi_m)$, $K(\psi_m)$ e $C(\psi_m)$. Isso significa que, a cada passo temporal, é preciso resolver um sistema de equações não lineares, o que exige um método iterativo de linearização, apresentado na próxima seção.

2.3.2.1 Linearização pelo Método de Picard Modificado

O método de Picard modificado, proposto originalmente por Celia, Bouloutas e Zarba (1990), é a abordagem iterativa mais difundida para linearizar a Equação de Richards discreta. A ideia central é que, em cada passo temporal $n + 1$, realiza-se uma sequência de iterações indexadas por $m = 0, 1, 2, \dots$, em que os coeficientes não lineares K e C são “congelados” nos valores da iteração anterior m , obtendo-se assim uma Equação linear para $\psi^{n+1, m+1}$. Esse processo se repete até que a solução convirja, momento em que se avança para o próximo passo temporal.

A inicialização de cada passo temporal consiste em tomar a solução do passo anterior como estimativa inicial, ou seja, $\psi_i^{n+1, 0} = \psi_i^n$ e $\theta_i^{n+1, 0} = \theta_i^n$. A partir daí, a expansão de $\theta_i^{n+1, m+1}$ em série de Taylor ao redor de $\psi_i^{n+1, m}$, truncada na primeira ordem, fornece

$$\theta_i^{n+1, m+1} \approx \theta_i^{n+1, m} + C_i^{n+1, m} \underbrace{(\psi_i^{n+1, m+1} - \psi_i^{n+1, m})}_{\delta\psi_i^m}, \quad (2.28)$$

onde $C_i^{n+1, m} = d\theta/d\psi_m$ avaliada no ponto $\psi_i^{n+1, m}$ da iteração m . A quantidade $\delta\psi_i^m$ é chamada de correção de Picard e é a verdadeira incógnita do sistema linear resolvido em cada iteração.

Definindo a correção $\delta\psi_i^m = \psi_i^{n+1, m+1} - \psi_i^{n+1, m}$ e substituindo a Expansão (2.28) na Equação implícita (2.27), obtém-se uma Equação linear em $\delta\psi^m$. O lado direito dessa Equação é o resíduo da iteração corrente

$$R_i^{n+1, m} = \frac{K_{i+1/2}^{n+1, m}(\psi_{i+1}^{n+1, m} - \psi_i^{n+1, m}) - K_{i-1/2}^{n+1, m}(\psi_i^{n+1, m} - \psi_{i-1}^{n+1, m})}{(\Delta z)^2} + \frac{K_{i+1/2}^{n+1, m} - K_{i-1/2}^{n+1, m}}{\Delta z} - \frac{\theta_i^{n+1, m} - \theta_i^n}{\Delta t}. \quad (2.29)$$

O resíduo $R_i^{n+1, m}$ mede o quanto a solução atual $\psi^{n+1, m}$ falha em satisfazer a Equação discreta (2.27). Quando $R_i^{n+1, m} \rightarrow 0$ para todo i , o método convergiu e a solução está autoconsistente com os coeficientes K e C avaliados nela própria. Substituindo a linearização de Taylor na Equação discreta e reorganizando os termos, chega-se ao seguinte sistema linear para as correções $\delta\psi_i^m$, válido para cada nó interior $i = 1, \dots, N - 1$

$$\boxed{a_i \delta\psi_{i-1}^m + b_i \delta\psi_i^m + c_i \delta\psi_{i+1}^m = d_i} \quad (2.30)$$

Os coeficientes são definidos explicitamente como

$$a_i = -\frac{K_{i-1/2}^{n+1,m}}{\Delta t C_i^{n+1,m} (\Delta z)^2}, \quad (2.31)$$

$$c_i = -\frac{K_{i+1/2}^{n+1,m}}{\Delta t C_i^{n+1,m} (\Delta z)^2}, \quad (2.32)$$

$$b_i = \frac{1}{\Delta t} - a_i - c_i, \quad (2.33)$$

$$d_i = \frac{R_i^{n+1,m}}{C_i^{n+1,m}}. \quad (2.34)$$

Esses coeficientes têm interpretação física clara. Os coeficientes a_i e c_i representam a difusão hidráulica entre o nó i e seus vizinhos à esquerda e à direita, respectivamente, ponderada pela capacidade capilar local $C_i^{n+1,m}$ e pelo passo de tempo Δt . Como $K \geq 0$ e $C > 0$, ambos são negativos, o que garante que o coeficiente diagonal b_i seja maior em módulo do que a soma dos outros dois

$$b_i = \frac{1}{\Delta t} - a_i - c_i = \frac{1}{\Delta t} + \frac{K_{i+1/2}^{n+1,m} + K_{i-1/2}^{n+1,m}}{\Delta t C_i^{n+1,m} (\Delta z)^2} > 0.$$

Isso significa que a matriz tridiagonal é diagonal dominante, o que garante a existência e unicidade da solução do sistema linear e assegura a estabilidade numérica do algoritmo de Thomas. Vale reforçar que todos os coeficientes K e C utilizados no cálculo de a_i , b_i e c_i são avaliados na iteração m atual, sendo tratados como constantes durante a resolução do sistema linear. É essa propriedade que torna o sistema linear, pois a não linearidade foi transferida inteiramente para o processo iterativo externo de Picard.

Uma vez resolvido o sistema linear (2.30)–(2.34) para $\delta\psi^m$ pelo algoritmo de Thomas, detalhado na subseção a seguir, a solução é atualizada por adição simples

$$\psi_i^{n+1,m+1} = \psi_i^{n+1,m} + \delta\psi_i^m. \quad (2.35)$$

Em seguida, os coeficientes K e C são recalculados com o novo valor de ψ , um novo resíduo é formado pela Equação (2.29), e o processo se repete. Quando o critério de convergência

$$\varepsilon_\theta = |\delta\psi^m| < 10^{-6} \quad (2.36)$$

é satisfeito, define-se $\psi_i^{n+1} = \psi_i^{n+1,m}$ e avança-se ao próximo nível temporal.

2.3.2.2 Sistema Tridiagonal e Algoritmo de Thomas

O conjunto de Equações lineares (2.30) para todos os nós interiores $i = 1, \dots, N-1$ constitui um sistema tridiagonal. Cada Equação envolve no máximo três incógnitas consecutivas ($\delta\psi_{i-1}$, $\delta\psi_i$, $\delta\psi_{i+1}$), e a matriz de coeficientes possui entradas não nulas apenas na diagonal principal e nas duas diagonais imediatamente adjacentes

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & 0 & \cdots & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & \cdots & 0 \\ 0 & a_3 & b_3 & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & c_{N-2} \\ 0 & \cdots & 0 & a_{N-1} & b_{N-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta\psi_1 \\ \delta\psi_2 \\ \delta\psi_3 \\ \vdots \\ \delta\psi_{N-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \vdots \\ d_{N-1} \end{pmatrix}. \quad (2.37)$$

Esta estrutura esparsa é uma consequência direta do esquema de diferenças finitas local e é extremamente vantajosa computacionalmente. Enquanto a eliminação gaussiana geral tem custo $\mathcal{O}(N^3)$, um sistema tridiagonal $N \times N$ pode ser resolvido em apenas $\mathcal{O}(N)$ operações aritméticas pelo algoritmo de Thomas (TDMA — *TriDiagonal Matrix Algorithm*) (BURDEN; FAIRES; BURDEN, 2016). O algoritmo opera em duas varreduras sequenciais.

Na primeira varredura, chamada de eliminação progressiva (*forward sweep*), percorre-se os nós de $i = 2$ até N e os coeficientes são modificados para eliminar a diagonal inferior. Definem-se $\beta_1 = b_1$ e $\gamma_1 = d_1/b_1$. Para os nós seguintes, as recursões são

$$\beta_i = b_i - \frac{a_i c_{i-1}}{\beta_{i-1}}, \quad (2.38)$$

$$\gamma_i = \frac{d_i - a_i \gamma_{i-1}}{\beta_i}. \quad (2.39)$$

Na segunda varredura, chamada de substituição regressiva (*back substitution*), percorre-se de $i = N - 1$ até 1 para recuperar as soluções $\delta\psi_i$ a partir das quantidades modificadas

$$\delta\psi_{N-1} = \gamma_{N-1}, \quad (2.40)$$

$$\delta\psi_i = \gamma_i - \frac{c_i}{\beta_i} \delta\psi_{i+1}. \quad (2.41)$$

A estabilidade numérica do algoritmo de Thomas é garantida quando a matriz tridiagonal é diagonal dominante, condição que, como demonstrado na seção anterior, é sempre satisfeita pelos coeficientes gerados pela discretização da Equação de Richards. Isso assegura que o algoritmo não amplifica erros de arredondamento ao longo das varreduras, independentemente do número de nós N utilizado.

2.3.2.3 Critério de Convergência e Controle do Passo Temporal

O laço de iterações de Picard continua enquanto a variação entre iterações sucessivas superar uma tolerância predefinida. O critério mais comum acompanha a norma do máximo (norma ℓ^∞) da correção $\delta\psi^m$

$$\max_i |\psi_i^{n+1, m+1} - \psi_i^{n+1, m}| \leq \varepsilon_\psi \quad (\text{tipicamente } \varepsilon_\psi \sim 10^{-4} \text{ m}). \quad (2.42)$$

Um critério complementar, que avalia diretamente a variável de interesse hidrológico, é baseado na variação de umidade

$$\max_i |\theta_i^{n+1, m+1} - \theta_i^{n+1, m}| = \max_i |C_i^{n+1, m} \delta\psi_i^m| \leq \varepsilon_\theta \quad (\varepsilon_\theta \sim 10^{-6}). \quad (2.43)$$

Nas simulações apresentadas na seção de resultados, implementadas em MATLAB, adotou-se uma tolerância mais rigorosa de $\varepsilon = 10^{-8}$, aplicada ao máximo entre a correção $\delta\psi$ e o resíduo do sistema, garantindo assim elevada precisão numérica nos perfis de umidade calculados.

Além dos critérios de convergência, é prática padrão limitar o número máximo de iterações de Picard por passo temporal a um valor $m_{\max}$ (tipicamente entre 10 e 50). Quando esse limite é atingido antes que a convergência seja alcançada, interpreta-se que o passo Δt é demasiado grande para as condições do problema, e adota-se uma estratégia de redução adaptativa onde Δt é diminuído por um fator (por exemplo, $\Delta t \leftarrow \Delta t/2$) e o passo temporal é recomeçado

desde a solução ψ^n do nível anterior. Por outro lado, quando a convergência ocorre em poucas iterações (por exemplo, $m < 4$), o método pode aumentar Δt no próximo passo para acelerar a simulação, por exemplo fazendo $\Delta t \leftarrow \min(f_{\text{inc}} \Delta t, \Delta t_{\text{max}})$. Todas essas estratégias adaptativas foram implementadas no simulador desenvolvido neste trabalho.

Esse controle adaptativo do passo temporal é fundamental para o desempenho e a robustez do simulador, especialmente em problemas com frentes de infiltração abruptas ou variações bruscas nas condições de contorno. A escolha das tolerâncias ε_ψ e ε_θ envolve um compromisso entre precisão e custo computacional. Valores muito grandes permitem que o método prossiga com soluções pouco convergidas, acumulando erros ao longo da simulação. Valores muito pequenos aumentam o número de iterações de Picard por passo e podem levar à redução excessiva de Δt sem ganho significativo de precisão, uma vez que o erro de truncamento do próprio esquema MDF é de primeira ordem em Δt e segunda ordem em Δz . Na prática, as tolerâncias recomendadas pela literatura ($\varepsilon_\psi \sim 10^{-4}$ m e $\varepsilon_\theta \sim 10^{-6}$) equilibram bem esses aspectos para a grande maioria dos cenários de fluxo não saturado, e foram adotadas como valores de referência nas simulações realizadas neste trabalho.

Análise Inversa com Algoritmos Genéticos

3.1 Problemas direto e inverso

A ciência se constrói sobre uma relação fundamental entre causas e efeitos. Em seu cerne, toda investigação científica busca compreender como propriedades intrínsecas de um sistema manifestam-se em comportamentos observáveis, ou, inversamente, como deduzir essas propriedades a partir de observações experimentais. Esta dualidade epistemológica permeia toda a física, engenharia e ciências naturais, configurando-se no que se denomina problemas direto e inverso (TARANTOLA, 2005).

Quando são conhecidos completamente os parâmetros que governam um fenômeno físico e deseja-se prever seu comportamento, está-se diante de um problema direto. Considere um hidrólogo que, dispondo das características hidráulicas do solo, prevê como a água infiltrará após um evento de precipitação. Nesse caso, parte-se das causas conhecidas e computam-se os efeitos esperados. Trata-se de um exercício dedutivo onde as equações governantes, combinadas com condições iniciais e de contorno bem definidas, conduzem deterministicamente a uma solução única

O problema inverso, por sua vez, inverte esta lógica causal. O comportamento de um sistema é observado através de medições experimentais e busca-se descobrir quais propriedades internas produziram aquele comportamento, conforme ilustrado na Figura 3.1. Este tipo de problema revela-se geralmente mais desafiador que seu correspondente direto. Matematicamente, problemas inversos frequentemente são mal-postos no sentido de Hadamard (HADAMARD, 1923), podendo não admitir solução única, apresentar instabilidades numéricas significativas e extrema sensibilidade a ruídos experimentais nas medições.

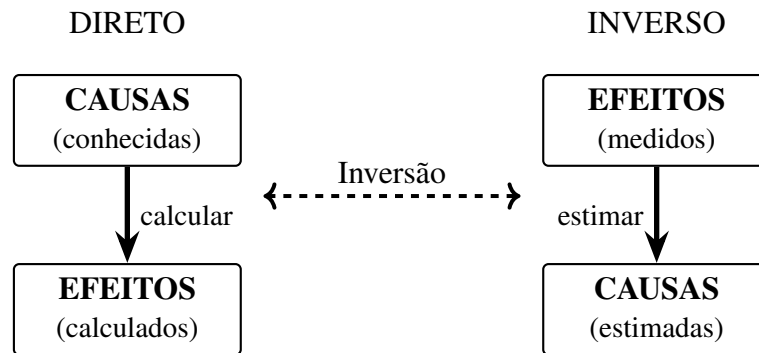


Figura 3.1: Relação dual entre problemas direto e inverso: no problema direto, causas conhecidas permitem calcular efeitos; no problema inverso, efeitos medidos permitem estimar causas.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Resolver o problema inverso, portanto, constitui-se geralmente em um problema de otimização: encontrar o conjunto de parâmetros que minimiza a discrepância entre os valores modelados e os observados. Como o espaço de soluções possíveis é geralmente muito amplo, tornando inviável a busca exaustiva, podem ser utilizadas *heurísticas* para nele navegar. Uma heurística é uma estratégia de busca que não garante encontrar a solução ótima, mas que, em troca dessa garantia, é capaz de produzir soluções de boa qualidade em um tempo computacional razoável (MICHALEWICZ, 2013). Quando essas estratégias são de propósito geral, sem pressupor estrutura específica do problema, recebem a denominação de *metaheurísticas*. Muitas delas são inspiradas em fenômenos naturais e aplicadas de forma iterativa ao longo de gerações, sendo então chamadas de métodos evolucionários. O algoritmo genético, objeto de estudo deste trabalho, é um dos mais relevantes métodos dessa classe (HOLLAND, 1975).

Em laboratório, técnicas como o extrator de Richards e a panela de pressão permitem medir experimentalmente a curva de retenção de água no solo (relação entre umidade θ e potencial matricial ψ_m). A partir desses dados, utiliza-se ajuste por mínimos quadrados para estimar os parâmetros do modelo constitutivo escolhido (van Genuchten, Brooks-Corey, Haverkamp etc.). Uma vez determinados os parâmetros, resolve-se numericamente a equação de Richards (o problema direto) para simular o fluxo de água no perfil do solo. Neste trabalho, adota-se o MDF para a solução numérica da equação de Richards.

Para uma aplicação numérica do problema direto, apenas para fixar as ideias, foram utilizados os parâmetros coletados em Carsel e Parrish (1988), apresentados na Tabela 3.1, considerando um solo arenoso e o modelo de van Genuchten.

Tabela 3.1: Parâmetros para o modelo de van Genuchten.

Parâmetro	Símbolo	Valor
Umidade residual	θ_r	0,045 cm ³ /cm ³
Umidade saturada	θ_s	0,430 cm ³ /cm ³
Parâmetro de escala	α	0,145 cm ⁻¹
Parâmetro de forma	n	2,68
Condutividade hidráulica saturada	K_s	0,00525 cm/s

Fonte: Elaborado pelo autor com dados de Carsel e Parrish (1988).

O domínio a ser considerado corresponde a uma coluna de solo com 40 cm de profundidade. As condições iniciais e de contorno foram definidas da seguinte forma: no contorno superior ($z = 0$), a pressão matricial foi fixada em $\psi_m(0, t) = 0$ cm, correspondendo à saturação da superfície; no contorno inferior ($z = 40$ cm), adotou-se uma condição de carga constante com $\psi_m(40, t) = -200$ cm; a condição inicial em todo o domínio foi $\psi_m(z, 0) = -200$ cm, representando um solo uniformemente seco. A discretização espacial adotada foi de $\Delta z = 0,5$ cm e o passo de tempo de $\Delta t = 5$ s. A simulação foi conduzida por um período total de $t = 3600$ s. A Figura 3.2 apresenta o perfil de umidade simulado em função da profundidade, caracterizando o problema direto resolvido.

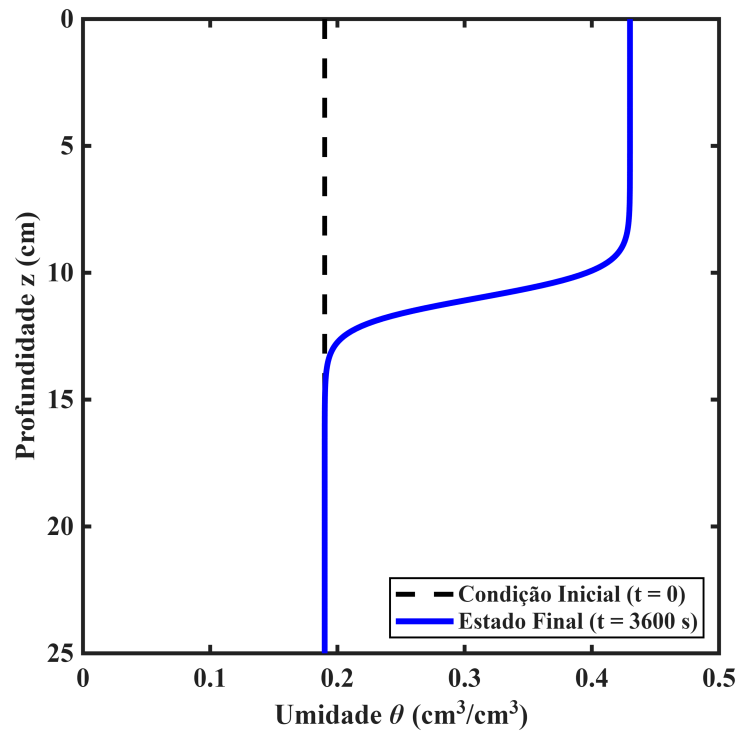


Figura 3.2: Problema direto: perfil de umidade simulado com os parâmetros de Carsel e Parrish (1988) para o modelo de van Genuchten.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Na prática, no entanto, a situação inversa tende a ocorrer com frequência: dispõe-se de medições de umidade $\theta^{\text{obs}}(z_i, t_j)$ obtidas por sensores digitais ou analógicos (TDR, sondas capacitivas, tensiômetros com transdutores, entre outros), mas os parâmetros que caracterizam hidraulicamente o solo são desconhecidos.

Desse modo, o que se deseja determinar é justamente quais valores dos parâmetros $\mathbf{x} = (\theta_r, \theta_s, \alpha, n, K_s)$ do modelo de van Genuchten são capazes de reproduzir as umidades observadas. A abordagem mais comum consiste em propor valores candidatos para os parâmetros desconhecidos, simular o perfil de umidade com esses valores e comparar os resultados com as medições experimentais. Uma estratégia simples para essa busca é a amostragem aleatória no espaço de parâmetros, cujo pseudocódigo é apresentado no Algoritmo 1.

Algorithm 1: Busca Aleatória no Espaço de Parâmetros

Data: Limites **lb** e **ub** para cada parâmetro $(\theta_r, \theta_s, \alpha, n, K_s)$; número de tentativas N

Result: Conjunto de vetores candidatos $\mathbf{x}_{\text{cand}}$

```

1  $k \leftarrow 1$ 
2 while  $k \leq N$  do
3   Sortear  $\theta_r \in [lb_{\theta_r}, ub_{\theta_r}]$ 
4   Sortear  $\theta_s \in [lb_{\theta_s}, ub_{\theta_s}]$ 
5   Sortear  $\alpha \in [lb_{\alpha}, ub_{\alpha}]$ 
6   Sortear  $n \in [lb_n, ub_n]$ 
7   Sortear  $K_s \in [lb_{K_s}, ub_{K_s}]$ 
8    $\mathbf{x}_{\text{cand}} \leftarrow (\theta_r, \theta_s, \alpha, n, K_s)$ 
9    $k \leftarrow k + 1$ 
10 end
```

Utilizando os parâmetros $\mathbf{x}_{\text{cand}}$ escolhidos aleatoriamente pelo algoritmo, resolve-se novamente a equação de Richards e obtém-se um novo perfil de umidade simulado. A Figura 3.3 compara esse perfil estimado com o perfil observado, obtido com os parâmetros de Carsel e Parrish (1988) apresentados na Tabela 3.1.

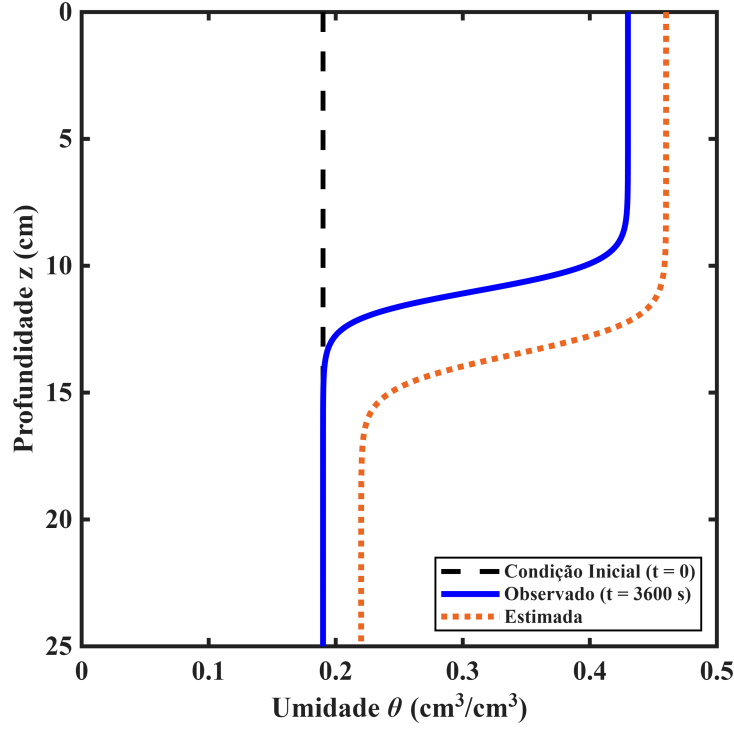


Figura 3.3: Comparação entre o perfil observado (linha azul contínua, parâmetros de Carsel e Parrish (1988) e o perfil simulado com parâmetros aleatórios (linha tracejada vermelha).

Fonte: Elaborado pelo autor.

A diferença entre as curvas é evidente, uma vez que o pseudocódigo apresentado consiste em uma amostragem puramente aleatória no espaço de parâmetros, sem qualquer critério de direcionamento da busca. O objetivo do problema inverso é justamente minimizar essa discrepância: para cada ponto (z_i, t_j) , deseja-se que $\theta^{\text{sim}}(z_i, t_j; \mathbf{x})$ seja o mais próximo possível de $\theta^{\text{obs}}(z_i, t_j)$, o que exige uma estratégia de otimização mais eficiente do que a busca aleatória.

Nesse sentido o problema inverso pode ser formulado como um problema de otimização. Para o modelo de van Genuchten, seja $\mathbf{x} = (\theta_r, \theta_s, \alpha, n, K_s)$ o vetor de parâmetros. Define-se a função objetivo:

$$\min_{\mathbf{x}} F(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^L \left(\theta_i^{\text{sim}}(\mathbf{x}) - \theta_i^{\text{obs}} \right)^2 \quad (3.1)$$

onde L é o número total de pontos de medição, $\theta_i^{\text{sim}}(\mathbf{x})$ é a umidade simulada no ponto i com parâmetros $\mathbf{x}$, e θ_i^{obs} é a umidade observada no ponto i . Uma formulação alternativa é a maximização do coeficiente de determinação:

$$\max_{\mathbf{x}} R^2(\mathbf{x}) = 1 - \frac{\sum_{i=1}^L \left(\theta_i^{\text{sim}}(\mathbf{x}) - \theta_i^{\text{obs}} \right)^2}{\sum_{i=1}^L \left(\theta_i^{\text{obs}} - \bar{\theta}^{\text{obs}} \right)^2} \quad (3.2)$$

onde $\bar{\theta}^{\text{obs}} = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L \theta_i^{\text{obs}}$ é a média das umidades observadas. Esse problema pode ser resolvido por métodos determinísticos, tais como Levenberg–Marquardt (LEVENBERG, 1944; MARQUARDT, 1963), gradiente conjugado (HESTENES; STIEFEL, 1952) e quasi-Newton

(BROYDEN, 1970), ou por métodos heurísticos, como Algoritmos Genéticos (GOLDBERG, 1989), *Simulated Annealing* (KIRKPATRICK; GELATT; VECCHI, 1983) e PSO (KENNEDY; EBERHART, 1995). No presente trabalho, adota-se o Algoritmo Genético, que será detalhado na seção seguinte.

3.2 Algoritmo Genético para Estimação de Parâmetros

O algoritmo genético (AG) é uma metaheurística inspirada no mecanismo da seleção natural (HOLLAND, 1975). A ideia central é a seguinte: na natureza, indivíduos que possuem características mais favoráveis ao ambiente têm maior probabilidade de sobreviver e de se reproduzir, transmitindo essas características para as gerações seguintes. Com o tempo, a população tende a se tornar cada vez mais adaptada ao ambiente. O AG transporta essa lógica para o domínio da otimização.

O método mantém uma *população* de soluções candidatas, denominadas *indivíduos*, onde cada indivíduo representa uma possível configuração de parâmetros do problema. Em cada iteração chamada de *geração* a população é avaliada quanto à sua qualidade, ou *aptidão*, mediante, geralmente, pela função objetivo. Os indivíduos com maior aptidão são mais prováveis de ser selecionados para se reproduzir. A reprodução se dá por meio de operadores genéticos cruzamento e mutação que combinam e perturbam as características dos indivíduos selecionados, gerando novos indivíduos para a próxima geração. Ao longo das gerações, a população evolui naturalmente em direção a soluções cada vez melhores (GOLDBERG, 1989).

Para o problema inverso envolvendo a equação de Richards, o AG opera iterativamente com os passos apresentados na Figura 3.4, os quais são detalhados nas subseções a seguir.

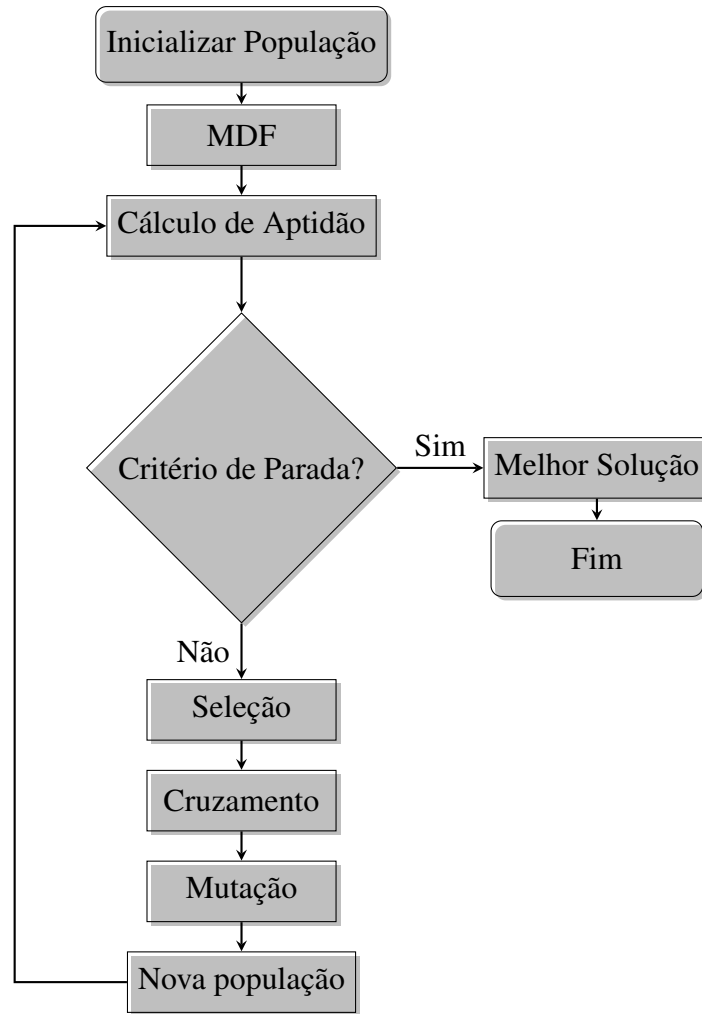


Figura 3.4: Fluxograma do Algoritmo Genético

Fonte: Elaborado pelo autor.

3.2.1 Inicialização da População

A população inicial é formada por um conjunto de indivíduos, onde cada um representa uma possível solução do problema. Cada indivíduo é um vetor contendo os parâmetros do modelo hidráulico escolhido, tais como

$$\mathbf{x}^{(i)} = [\theta_r, \theta_s, K_s, \dots]. \quad (3.3)$$

Cada parâmetro é sorteado aleatoriamente dentro de seu intervalo físico permitido: $\theta_r \in [a_1, b_1]$, $\theta_s \in [a_2, b_2]$, $K_s \in [a_3, b_3]$ etc. Essa etapa garante que a população inicial seja diversa, cobrindo diferentes regiões do espaço de busca. Cada vetor de parâmetros é então utilizado no modelo hidráulico a fim de resolver o problema direto correspondente, estimando assim os valores de umidade no solo, que são comparados à posteriori com os dados experimentais.

3.2.2 Cálculo de Aptidão (Fitness)

Cada indivíduo é avaliado pela função objetivo adotada neste trabalho como o coeficiente de determinação R^2 , definido na Equação (3.2). O valor de R^2 mede a proporção da

variância nos dados observados que é explicada pelo modelo. Quanto mais próximo de 1, melhor é a aptidão do indivíduo, indicando que o conjunto de parâmetros $(\theta_r, \theta_s, K_s, \dots)$ reproduz com maior fidelidade os dados experimentais, após a solução numérica da equação de Richards via MDF.

3.2.3 Seleção por Torneio

A seleção determina quais indivíduos gerarão descendentes. O método do torneio funciona da seguinte forma: sorteiam-se 3 indivíduos aleatoriamente da população, e o indivíduo com maior aptidão (R^2 mais próximo de 1) é selecionado como primeiro campeão. Em seguida, realiza-se um segundo sorteio de 3 indivíduos (podendo incluir o vencedor anterior), e o vencedor desse segundo torneio é selecionado como segundo campeão. Esses dois campeões serão cruzados na etapa seguinte para gerar um novo indivíduo. Essa estratégia favorece indivíduos de maior aptidão sem eliminar completamente os menos aptos, mantendo algum grau de diversidade na população (MITCHELL, 1998).

3.2.4 Cruzamento

Os dois pais selecionados geram um descendente através da média aritmética de seus parâmetros, ou seja,

$$\theta_r^{\text{filho}} = \frac{\theta_r^1 + \theta_r^2}{2}. \quad (3.4)$$

O mesmo vale para os demais parâmetros do modelo adotado. Essa operação permite combinar características favoráveis de dois indivíduos diferentes, explorando regiões intermediárias do espaço de busca que podem conter soluções de qualidade ainda maior (GOLDBERG, 1989).

3.2.5 Mutação

Como o AG proposto trabalha com codificação real, a mutação consiste em adicionar uma pequena perturbação aleatória nos valores dos parâmetros. Para cada parâmetro do indivíduo, há uma probabilidade previamente definida de sofrer mutação:

$$p^{\text{mutado}} = p^{\text{original}} + \delta, \quad (3.5)$$

em que δ é uma perturbação aleatória pequena. A mutação desempenha um papel fundamental na prevenção da convergência prematura: sem ela, a população tenderia a perder diversidade rapidamente, ficando presa em soluções locais que não correspondem ao ótimo global (MITCHELL, 1998). Por exemplo, antes da mutação, $\theta_s = 0,450$; após a mutação, $\theta_s = 0,453$, correspondendo a uma variação de 0,003.

3.2.6 Elitismo

O elitismo é um mecanismo que preserva os melhores indivíduos da geração atual, garantindo que eles passem intactos para a próxima geração, sem sofrer cruzamento nem mutação. Essa estratégia evita que soluções de alta qualidade já encontradas sejam perdidas durante a

aplicação dos operadores genéticos, assegurando que a melhor solução da população não piore ao longo das gerações (MITCHELL, 1998).

Resultados

Neste capítulo são apresentados e discutidos os resultados obtidos a partir da modelagem matemática e computacional do fluxo de água em meios não saturados, com base na equação de Richards. Inicialmente, aborda-se o problema direto, no qual são realizadas simulações numéricas da EDP utilizando o MDF, com esquemas explícito e implícito, de modo a analisar o comportamento da solução sob diferentes estratégias de discretização. Nessa etapa, são considerados distintos modelos constitutivos para a curva de retenção de água no solo e condutividade hidráulica, permitindo avaliar a influência dessas relações na dinâmica do escoamento. Em seguida, é tratado o problema inverso, no qual os resultados do problema direto são utilizados no contexto de uma metodologia de análise inversa que acopla o MDF com o AG, objetivando estimar determinados parâmetros físico-hídricos do solo. Essa abordagem possibilita investigar a eficiência, a robustez e as limitações do método proposto na identificação de parâmetros hidráulicos a partir de dados de umidade, estabelecendo uma conexão direta entre a modelagem numérica e a caracterização hidráulica do solo.

4.1 Problema direto: simulações numéricas da equação de Richards

Modelo de Haverkamp. Na primeira aplicação proposta foi avaliada a performance das formas explícita e implícita para a discretização temporal no MDF, utilizando o exemplo citado em Celia, Bouloutas e Zarba (1990), onde é empregado o modelo de Haverkamp, descrito nas Equações (2.14) e (2.15), para as curvas de retenção e de condutividade hidráulica, respectivamente. Nesta simulação numérica, considerou-se um problema de infiltração vertical para uma coluna de solo com 40 cm de profundidade, conforme apresentado na Tabela 4.1.

Tabela 4.1: Parâmetros do modelo de Haverkamp utilizados na primeira aplicação.

Parâmetro	Símbolo	Valor
Parâmetro de escala (retenção)	α	1 611 000,0
Umidade residual	θ_r	0,075
Umidade saturada	θ_s	0,287
Condutividade hidráulica saturada	K_s	0,0094444 cm/s
Parâmetro de escala (condutividade)	A	1 175 000,0
Parâmetro de forma	β	3,96
Parâmetro de forma	γ	4,74

Fonte: Elaborado pelo autor com dados de Celia, Bouloutas e Zarba (1990).

As condições iniciais e de contorno foram definidas da seguinte forma: no contorno superior ($z = 0$), a pressão matricial foi fixada em $\psi_m(t, 0) = -20,7$ cm, correspondendo a uma umidade de $\theta = 0,26756$; no contorno inferior ($z = 40$ cm), definiu-se $\psi_m(t, 40) = -61,5$ cm, com umidade de $\theta = 0,09985$; a condição inicial adotada em todo o domínio foi $\psi_m(0, z) = -61,5$ cm, correspondendo a $\theta = 0,09985$.

Foram realizadas simulações utilizando duas discretizações temporais distintas: o método explícito com espaçamento espacial de $\Delta z = 1,0$ cm e passo de tempo de $\Delta t = 0,01$ s, e o método implícito com o mesmo espaçamento espacial, porém com passo de tempo de $\Delta t = 5,0$ s. A utilização do método implícito permitiu empregar um passo de tempo consideravelmente maior, demonstrando sua superior estabilidade numérica em comparação com o esquema explícito.

As simulações numéricas foram executadas para os tempos representados por t de 180 s, 360 s e 720 s, conforme apresentadas nas Figuras 4.1 e 4.2. É possível observar o movimento da água nas camadas mais profundas do solo com o decorrer do tempo, mostrando um comportamento qualitativo esperado.

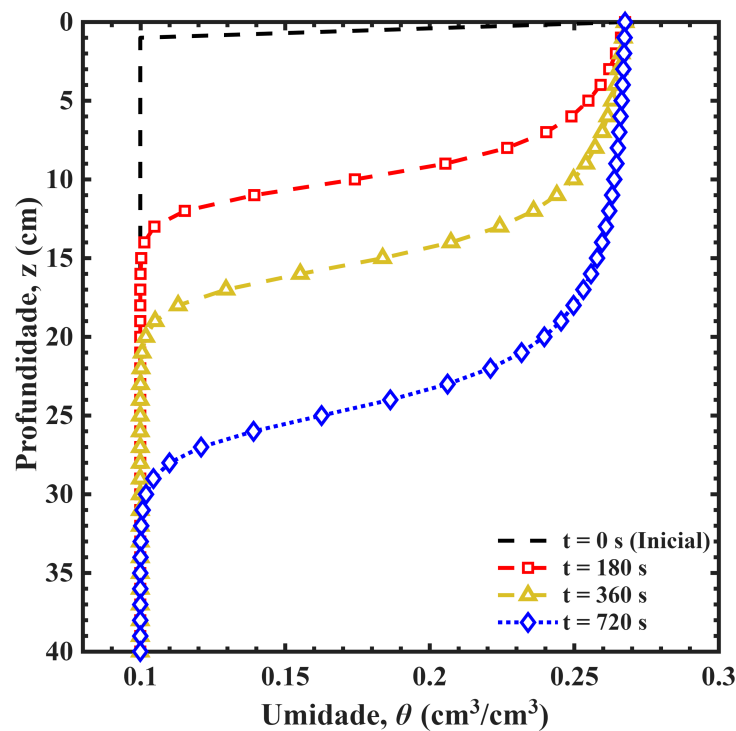


Figura 4.1: Simulação do método explícito ($\Delta t = 0,01$ s), com o modelo de Haverkamp.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Com base nas figuras apresentadas, é possível analisar adequadamente o processo de infiltração de água no solo ao longo do tempo. A condição inicial, indicada pela linha tracejada vertical em $t = 0$ s, representa um perfil de umidade uniforme em todo o domínio, com valor de $\theta = 0,09985$, correspondente a uma pressão matricial inicial de $-61,5$ cm.

Com a evolução do tempo, nos instantes $t = 180$ s, $t = 360$ s e $t = 720$ s, observa-se a progressiva modificação do perfil de umidade. As curvas evidenciam o avanço da frente de molhamento a partir da superfície do solo ($z = 0$ cm) em direção às camadas mais profundas. Nas regiões superiores, verifica-se um aumento significativo da umidade volumétrica em função da condição de contorno imposta no topo do domínio, onde $\theta = 0,26756$. Em contraste, as

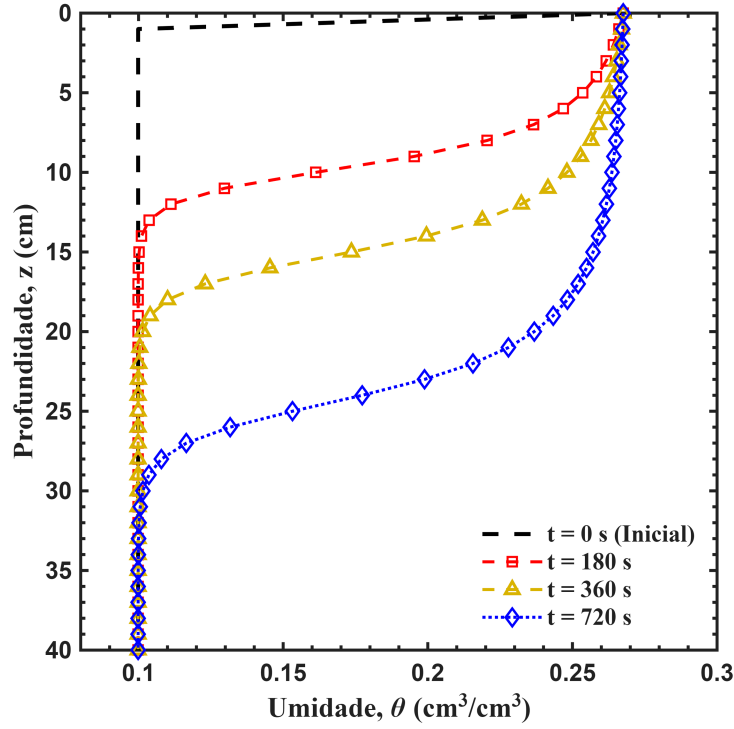


Figura 4.2: Simulação do método implícito ($\Delta t = 5,0$ s), com o modelo de Haverkamp.

Fonte: Elaborado pelo autor.

camadas mais profundas mantêm valores de umidade próximos à condição inicial durante os estágios iniciais do processo, indicando um atraso na propagação da frente de infiltração.

Comparando as soluções obtidas pelos métodos explícito e implícito, conforme ilustrado na Figura 4.3, observa-se uma excelente concordância entre os perfis de umidade, validando a implementação numérica de ambos os esquemas. O método implícito, apesar de exigir maior custo computacional por iteração devido à necessidade de resolver sistemas lineares, permite a utilização de passos de tempo significativamente maiores, resultando em maior eficiência computacional global para problemas de longo prazo.

Para quantificar essa concordância ao longo de toda a coluna de solo, calcula-se o Erro Quadrático Médio (MSE), dado por

$$\text{MSE} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\theta_{\text{imp},i} - \theta_{\text{exp},i})^2, \quad (4.1)$$

onde N é o número total de pontos (nós) avaliados ao longo da profundidade do solo; $\theta_{\text{imp},i}$ é a umidade volumétrica calculada pelo método implícito na profundidade i ; e $\theta_{\text{exp},i}$ é a umidade volumétrica calculada pelo método explícito na mesma profundidade i . Aplicando a Equação (4.1) aos perfis do modelo de Haverkamp, obtém-se

$$\text{MSE}_{\text{Hk}} = 8,8850 \times 10^{-6},$$

As Figuras 4.4 e 4.5 apresentam as curvas características do modelo de Haverkamp para os parâmetros utilizados. A curva de retenção (Figura 4.4) mostra a relação não linear entre a umidade volumétrica θ e a carga de pressão $|h|$, evidenciando a rápida variação da umidade em baixas pressões matriciais, característica de solos com poros de diferentes tamanhos. A curva de condutividade hidráulica (Figura 4.5) demonstra a dependência exponencial da condutividade

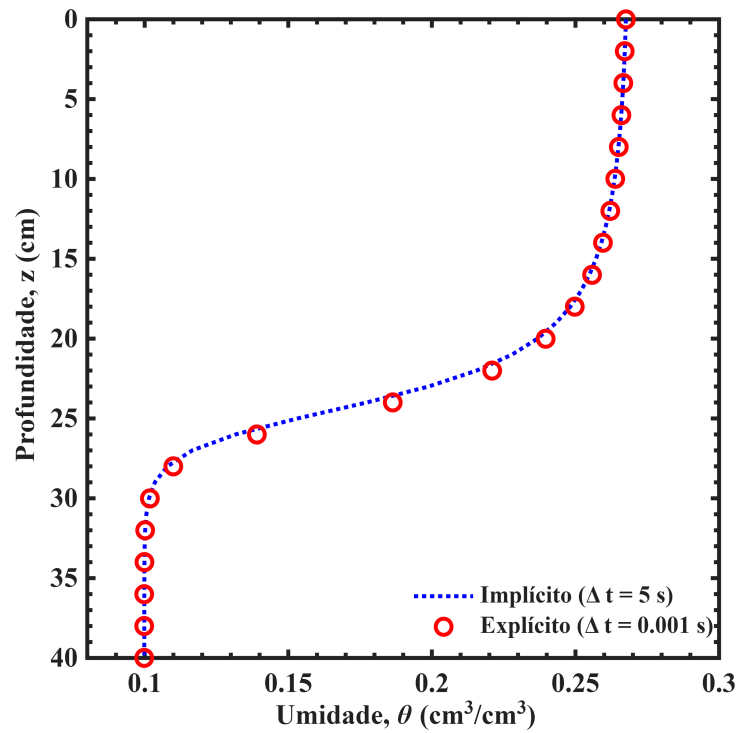


Figura 4.3: Comparação entre os métodos explícito ($\Delta t = 0,001$ s) e implícito ($\Delta t = 5,0$ s) para o modelo de Haverkamp, no instante $t = 720$ s.

Fonte: Elaborado pelo Autor.

em relação à carga de pressão, com valores decrescendo várias ordens de grandeza à medida que o solo se torna mais seco.

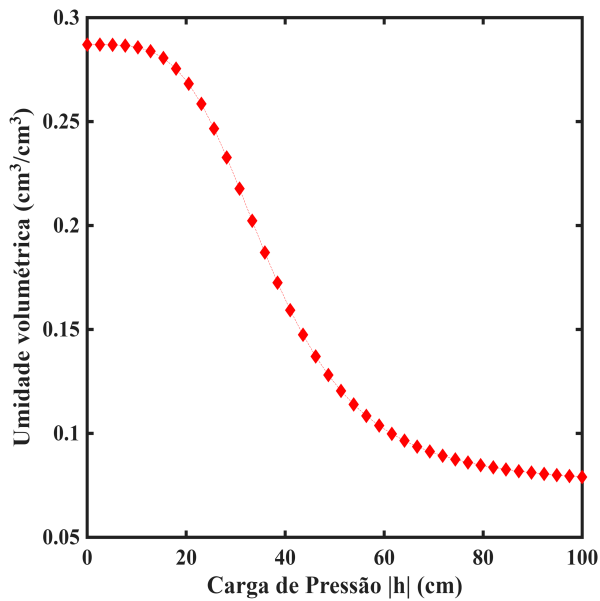


Figura 4.4: Curva de retenção do modelo de Haverkamp.

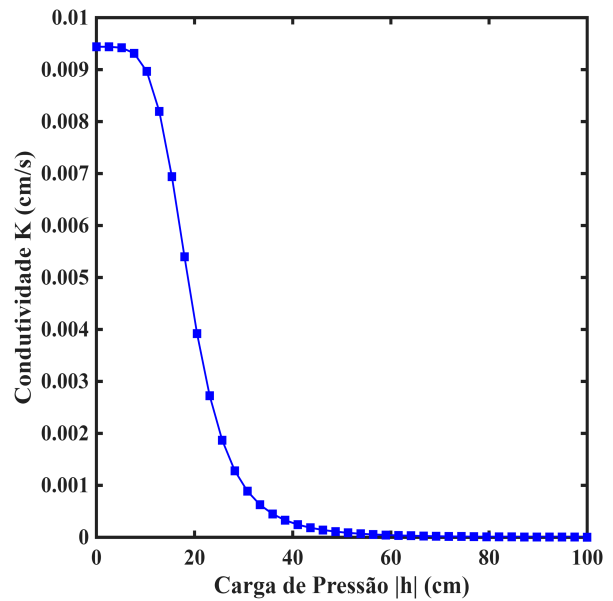


Figura 4.5: Curva de condutividade hidráulica do modelo de Haverkamp.

O comportamento apresentado nesta simulação numérica está de acordo com o esperado para problemas clássicos de infiltração em solos não saturados e é consistente com os resultados apresentados por Celia, Bouloutas e Zarba (1990), que validaram soluções numéricas da equação de Richards, bem como com estudos posteriores, como os de Souza (2020) e Queiróz (2017). O perfil de umidade apresenta a forma sigmoideal característica de processos de infiltração vertical, com um gradiente acentuado na região da frente de molhamento, refletindo a forte não linearidade do fluxo em meios porosos não saturados governados pela equação de Richards.

Modelo de van Genuchten–Mualem. Foi realizado um segundo teste numérico utilizando um novo conjunto de parâmetros do modelo de van Genuchten–Mualem, a fim de avaliar o comportamento da solução da equação de Richards para outra configuração hidráulica do solo. Os parâmetros adotados são apresentados na Tabela 4.2.

Tabela 4.2: Parâmetros do modelo de van Genuchten–Mualem utilizados no segundo teste numérico.

Parâmetro	Símbolo	Valor
Parâmetro de escala	α	$0,0335 \text{ cm}^{-1}$
Umidade saturada	θ_s	0,368
Umidade residual	θ_r	0,102
Parâmetro de forma	n	2
Parâmetro de forma	m	0,5
Condutividade hidráulica saturada	K_s	$0,00922 \text{ cm/s}$

Fonte: Elaborado pelo autor com dados de Celia, Bouloutas e Zarba (1990).

As condições iniciais e de contorno foram definidas como:

$$h(z, 0) = -1000 \text{ cm}, \quad h(0, t) = h_{\text{bottom}} = -1000 \text{ cm}, \quad h(60 \text{ cm}, t) = -5 \text{ cm}. \quad (4.2)$$

Analogamente ao modelo de Haverkamp, foram realizadas simulações utilizando tanto o método explícito quanto o implícito. Para o método explícito, empregou-se um espaçamento espacial de $\Delta z = 1,0 \text{ cm}$ e passo de tempo de $\Delta t = 0,001 \text{ s}$, sendo necessário um passo de tempo substancialmente menor devido às características de maior não linearidade do modelo de van Genuchten–Mualem. O método implícito foi implementado com o mesmo espaçamento espacial, porém com passo de tempo de $\Delta t = 5,0 \text{ s}$, novamente demonstrando sua estabilidade numérica.

Com base nas Figuras 4.6 e 4.7 apresentadas a seguir, observa-se o comportamento da infiltração de água no solo utilizando o modelo de van Genuchten–Mualem. A condição inicial, representada pela linha tracejada vertical em $t = 0 \text{ s}$, mostra um perfil de umidade uniforme em todo o domínio, com valor próximo à umidade residual $\theta_r = 0,102$, característico de um solo inicialmente seco.

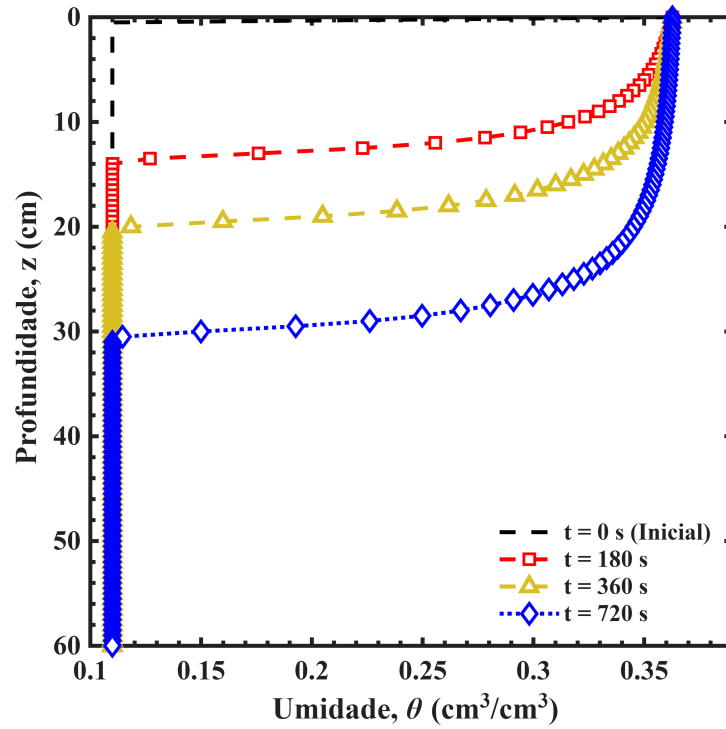


Figura 4.6: Evolução temporal dos perfis de umidade do solo utilizando o método explícito ($\Delta t = 0,001$ s) com o modelo van Genuchten–Mualem.

Fonte: Elaborado pelo autor.

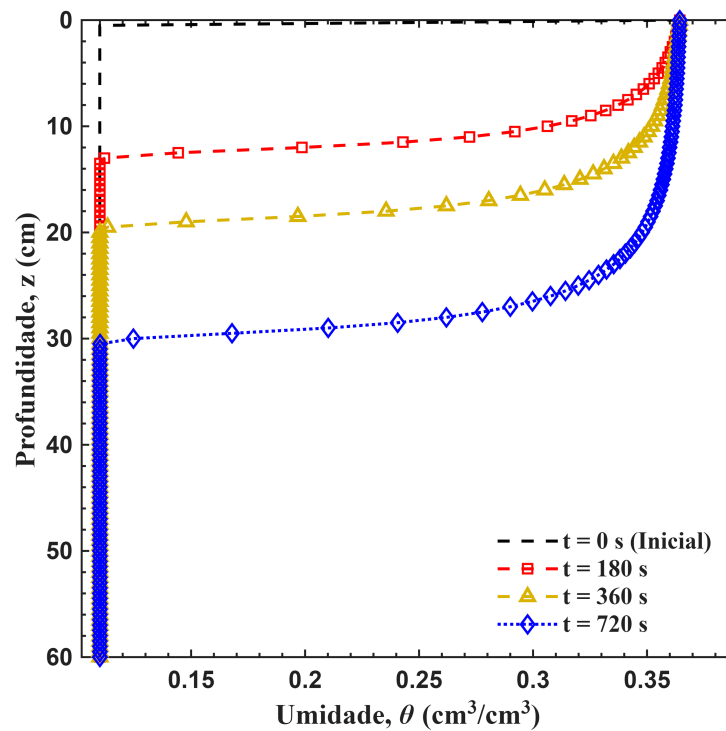


Figura 4.7: Evolução temporal dos perfis de umidade do solo utilizando o método implícito ($\Delta t = 5,0$ s) com o modelo van Genuchten–Mualem.

Fonte: Elaborado pelo autor.

À medida que o tempo evolui para $t = 180$ s, $t = 360$ s e $t = 720$ s, observa-se claramente o avanço da frente de molhamento a partir da superfície ($z = 0$ cm) em direção às camadas mais profundas do solo. O modelo de van Genuchten–Mualem captura adequadamente a transição abrupta entre a zona saturada próxima à superfície e a zona seca nas camadas inferiores, evidenciando uma frente de molhamento bem definida, que é uma característica típica deste modelo constitutivo.

Nota-se que nas camadas superiores, a umidade atinge valores próximos à umidade saturada $\theta_s = 0,368$, enquanto as camadas mais profundas permanecem praticamente inalteradas. A diferença nos passos de tempo utilizados ($\Delta t = 0,001$ s para o explícito versus $\Delta t = 5,0$ s para o implícito) evidencia a vantagem computacional do método implícito. Ambos os modelos constitutivos (Haverkamp e van Genuchten–Mualem) reproduzem adequadamente o comportamento esperado para infiltração vertical, sendo que o modelo de van Genuchten–Mualem apresenta maior flexibilidade na representação de diferentes tipos de solo, enquanto o de Haverkamp demonstrou superior estabilidade numérica.

A Figura 4.8 ilustra a comparação entre os métodos explícito e implícito, revelando excelente concordância entre os perfis de umidade. Aplicando a Equação (4.1), obtém-se

$$\text{MSE}_{\text{VG}} = 5,0614 \times 10^{-4},$$

confirmando a consistência entre os dois esquemas numéricos. sendo as pequenas discrepâncias associadas à maior não linearidade do modelo de van Genuchten–Mualem em comparação ao modelo de Haverkamp, o que impõe restrições mais severas à estabilidade do método explícito e justifica a adoção de um passo de tempo mais refinado.

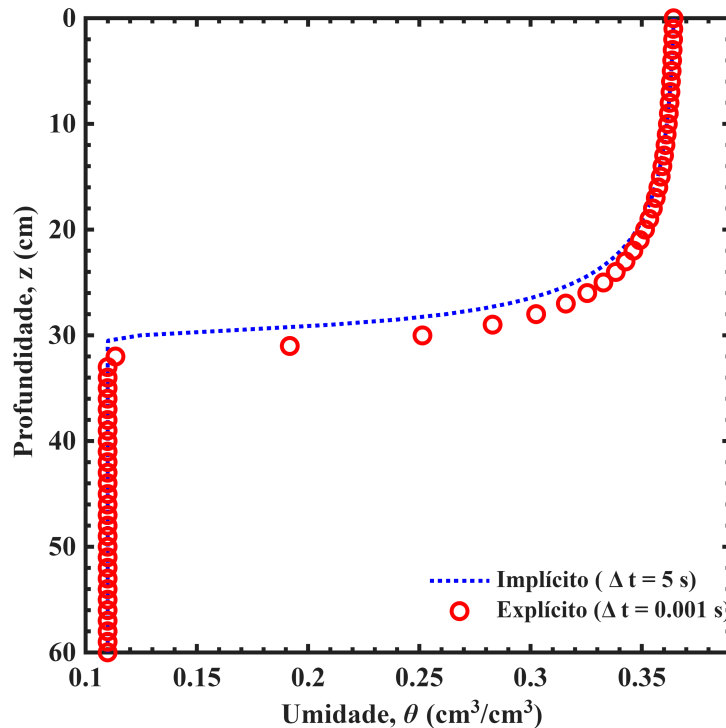


Figura 4.8: Comparação entre os métodos explícito ($\Delta t = 0,001$ s) e implícito ($\Delta t = 5,0$ s) para o modelo de van Genuchten–Mualem, no instante $t = 720$ s.

Fonte: Elaborado pelo autor.

As Figuras 4.9 e 4.10 apresentam as curvas características do modelo de van Genuchten–Mualem para os parâmetros utilizados. A curva de retenção (Figura 4.9) exibe o comportamento sigmoidal típico deste modelo, com uma transição suave entre os estados seco e saturado, controlada pelos parâmetros α e n . Esta característica torna o modelo particularmente adequado para representar solos com distribuição mais uniforme de tamanhos de poros. A curva de condutividade hidráulica (Figura 4.10) mostra a variação não linear da condutividade com a carga de pressão, apresentando uma redução mais gradual em comparação ao modelo de Haverkamp para a faixa intermediária de pressões matriciais.

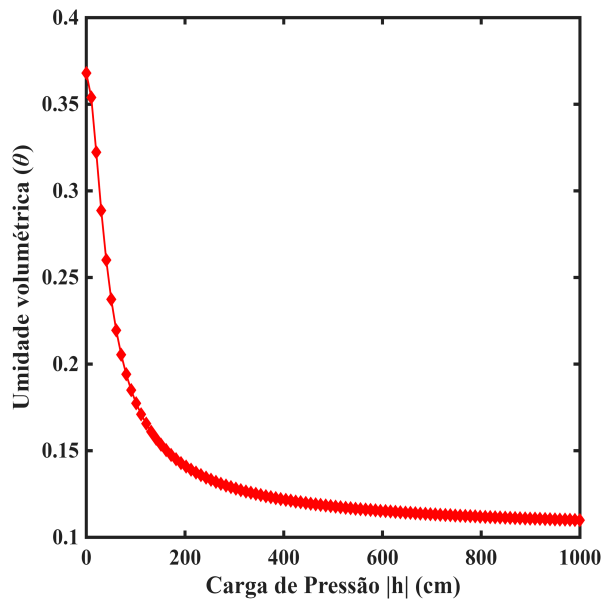


Figura 4.9: Curva de retenção do modelo de van Genuchten–Mualem.

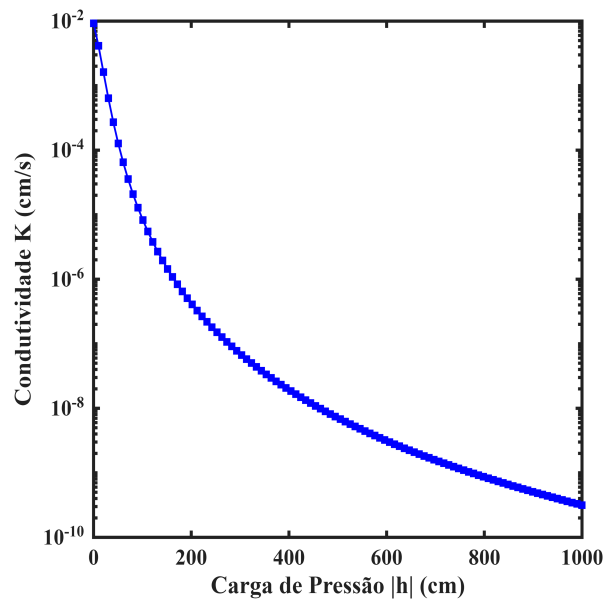


Figura 4.10: Curva de condutividade hidráulica do modelo de van Genuchten–Mualem.

Este comportamento está em conformidade com os resultados clássicos reportados por Celia, Bouloutas e Zarba (1990) e corroborados pelos trabalhos de Souza (2020) e Queiróz (2017), demonstrando a capacidade do modelo de van Genuchten–Mualem em representar adequadamente os processos de infiltração vertical em solos não saturados, com destaque para a natureza não linear do fluxo governado pela equação de Richards.

Modelo de Brooks–Corey. Nesta simulação numérica, foi considerado um problema de infiltração vertical em uma coluna de solo com 40 cm de profundidade utilizando o modelo constitutivo de Brooks–Corey. Os parâmetros adotados de Rawls, Brakensiek e Saxton (1982), apresentados na Tabela 4.3, são característicos de solo arenoso e foram obtidos com base em dados experimentais da literatura. O modelo de Brooks–Corey é particularmente adequado para representar solos grosseiros, nos quais a transição entre as zonas saturada e não saturada ocorre de forma mais abrupta em comparação com outros modelos constitutivos.

Tabela 4.3: Parâmetros hidrodinâmicos do modelo de Brooks–Corey para solo arenoso.

Parâmetro	Símbolo	Valor
Porosidade efetiva / Saturação	θ_s	0,417 cm ³ /cm ³
Umidade residual	θ_r	0,020 cm ³ /cm ³
Pressão de borbulhamento	ψ_b	–7,26 cm
Índice de distribuição de poros	λ	0,694
Condutividade hidráulica saturada	K_s	0,0058 cm/s ($\approx$ 21,0 cm/h)

Fonte: Elaborado pelo autor com dados de Rawls, Brakensiek e Saxton (1982).

O cenário físico simulado representa um solo inicialmente seco submetido a um alagamento súbito na superfície. As condições iniciais e de contorno foram estabelecidas da seguinte forma: a condição inicial em todo o domínio foi definida como $\psi(0, z) = -100,0$ cm, correspondendo a uma umidade inicial $\theta_{\text{ini}} \approx 0,025$ obtida a partir da curva de retenção característica do solo; no contorno superior ($z = 0$), impôs-se uma condição de saturação (Dirichlet) com $\psi(t, 0) = 0,0$ cm, equivalente à umidade saturada $\theta_s = 0,417$; no contorno inferior ($z = 40$ cm), manteve-se $\psi(t, 40) = -100,0$ cm, preservando a condição de solo seco na base do domínio.

Foram realizadas simulações utilizando duas discretizações temporais distintas: o método explícito com espaçamento espacial de $\Delta z = 1,0$ cm e passo de tempo de $\Delta t = 0,001$ s, e o método implícito com o mesmo espaçamento espacial, porém com passo de tempo de $\Delta t = 5,0$ s.

A Figura 4.11 apresenta a evolução dos perfis de umidade nos instantes $t = 0, 180, 360$ e 720 s. O modelo de Brooks–Corey reproduz com fidelidade o avanço da frente de molhamento a partir da superfície em direção às camadas mais profundas, destacando-se pela formação de uma frente acentuada e descontínua, consequência direta da pressão de borbulhamento $\psi_b = -7,26$ cm característica de solos arenosos. Nas camadas superiores, a umidade evolui rapidamente em direção à saturação, enquanto as camadas inferiores permanecem próximas à condição inicial, evidenciando a propagação gradual da infiltração. Este comportamento está em concordância com os resultados reportados na literatura para solos arenosos submetidos à infiltração vertical.

A Figura 4.12 apresenta os resultados obtidos com o método implícito ($\Delta t = 5,0$ s), cujos perfis de umidade mostram o mesmo padrão de avanço da frente de molhamento observado anteriormente. A utilização de um passo de tempo consideravelmente maior evidencia a superior estabilidade numérica do esquema implícito, característica particularmente relevante para modelos com elevado grau de não linearidade, como o de Brooks–Corey.

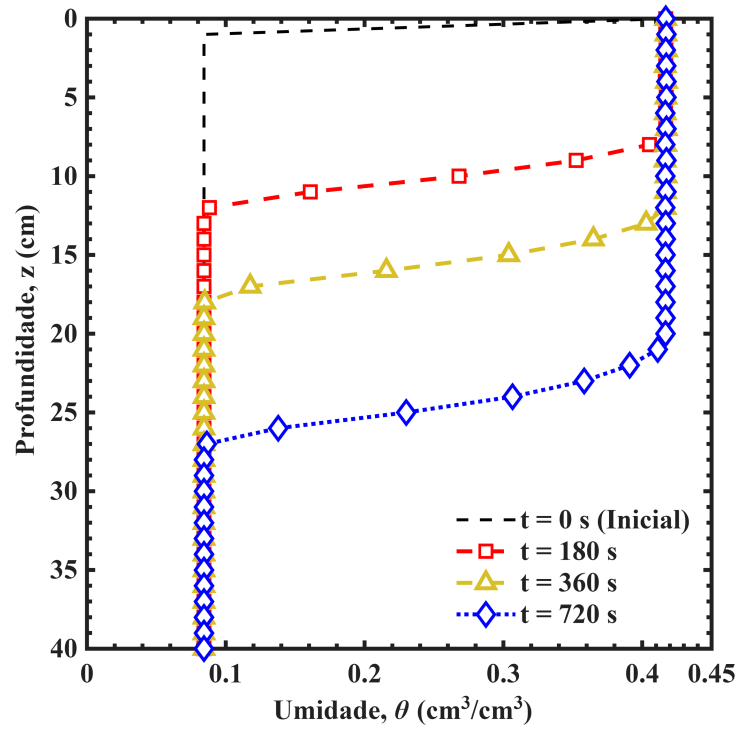


Figura 4.11: Evolução temporal dos perfis de umidade utilizando o método explícito ($\Delta t = 0,001$ s), com o modelo de Brooks–Corey.

Fonte: Elaborado pelo autor.

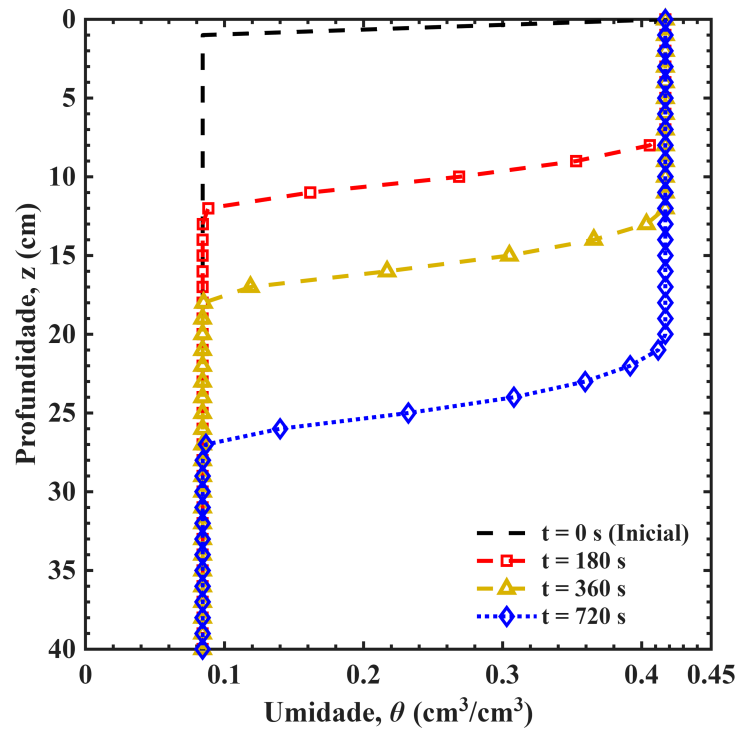


Figura 4.12: Evolução temporal dos perfis de umidade utilizando o método implícito ($\Delta t = 5,0$ s), com o modelo de Brooks–Corey.

Fonte: Elaborado pelo autor.

A Figura 4.13 ilustra a comparação entre os métodos explícito e implícito, revelando boa concordância entre os perfis de umidade e validando ambas as implementações. Para quantificar essa concordância, aplica-se a Equação (4.1), obtendo-se

$$\text{MSE}_{\text{BC}} = 9,3552 \times 10^{-4},$$

valor que confirma a consistência entre os dois esquemas, sendo as pequenas discrepâncias atribuídas à elevada não linearidade do modelo de Brooks–Corey.

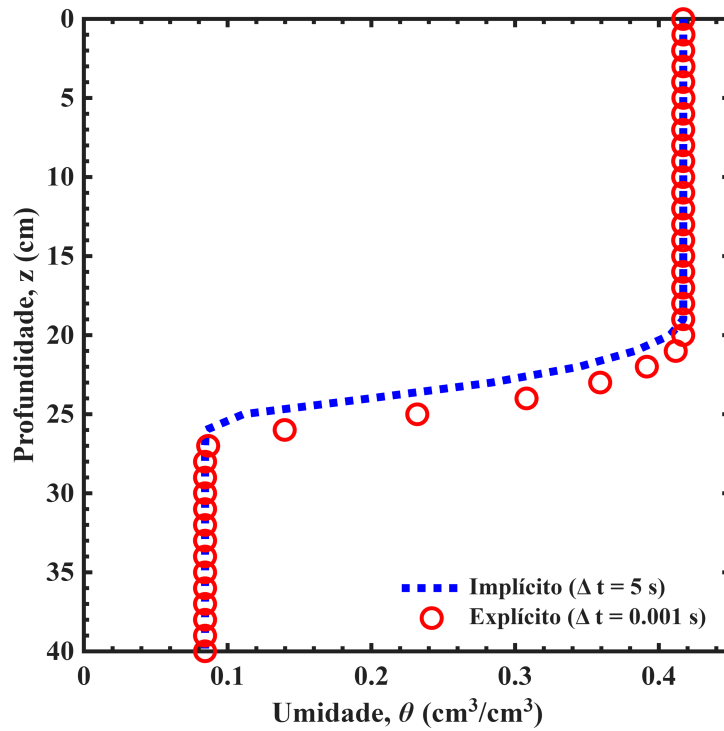


Figura 4.13: Comparação entre os métodos explícito ($\Delta t = 0,001$ s) e implícito ($\Delta t = 5,0$ s) para o modelo de Brooks–Corey, no instante $t = 720$ s.

Fonte: Elaborado pelo autor.

As Figuras 4.14 e 4.15 apresentam as curvas características do modelo de Brooks–Corey para os parâmetros utilizados. A curva de retenção (Figura 4.14) evidencia a relação não linear entre a umidade volumétrica θ e a carga de pressão $|\psi|$, destacando-se a presença de um ponto de não suavidade na pressão de borbulhamento $\psi_b = -7,26$ cm, abaixo do qual o solo passa do estado saturado para o não saturado de forma abrupta. Essa característica distingue o modelo de Brooks–Corey dos demais modelos constitutivos, que apresentam transições mais suaves. A curva de condutividade hidráulica (Figura 4.15) demonstra a drástica redução da condutividade em função do aumento da carga de pressão, com valores decrescendo várias ordens de grandeza

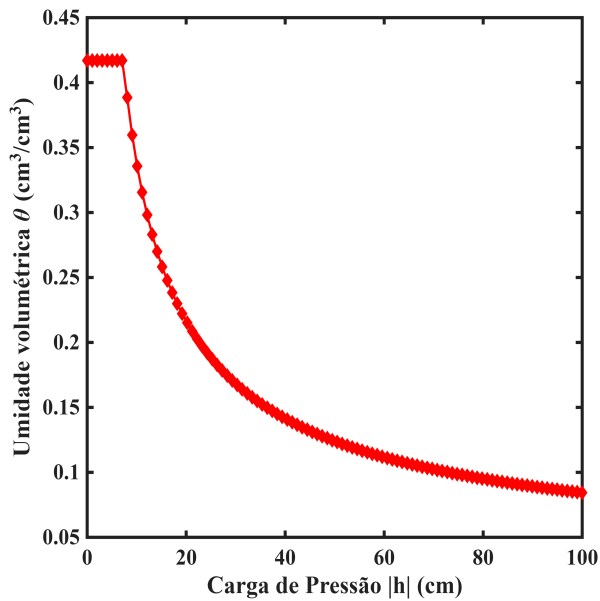


Figura 4.14: Curva de retenção do modelo de Brooks–Corey.

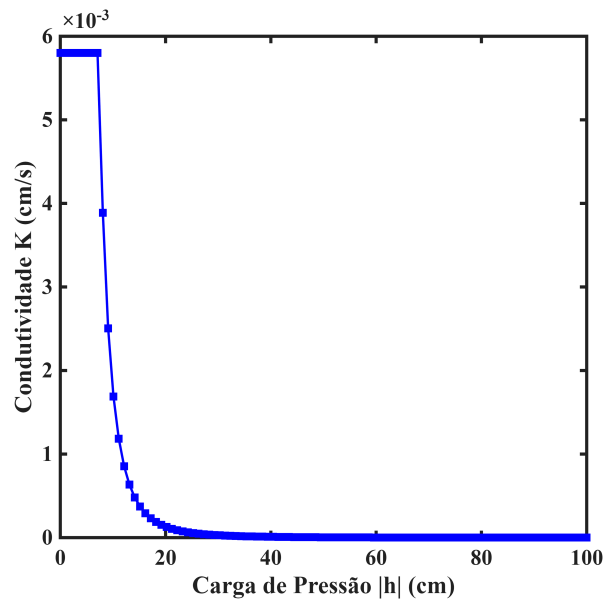


Figura 4.15: Curva de condutividade hidráulica do modelo de Brooks–Corey.

Fonte: Elaborado pelo autor.

4.2 Problema inverso: identificação dos parâmetros físico-hídricos do solo

Aplicação 1. O primeiro teste numérico envolvendo o AG acoplado ao MDF foi realizado com o modelo van Genuchten–Mualem, considerando a estimativa dos cinco parâmetros simultaneamente (θ_r , θ_s , α , n e K_s). As configurações do AG adotadas para a análise inversa incluem uma população inicial de 30 indivíduos, 60 gerações, probabilidade de cruzamento de 80%, e probabilidade de mutação entre 20% e 40%. A função objetivo utilizada foi a maximização do coeficiente de determinação R^2 , buscando obter o melhor ajuste entre os dados observados e os valores calculados pelo modelo.

Para avaliar o método frente a incertezas experimentais, foram gerados dados sintéticos a partir dos parâmetros de referência apresentados na Tabela 4.2, utilizando o modelo de van Genuchten–Mualem com o MDF Implícito. A esses dados foi adicionado ruído gaussiano com um desvio padrão característico de medições experimentais, simulando condições reais de campo. As medições consistiram de 7 pontos de observação ao longo da coluna de solo, nas profundidades $z = 5, 10, 15, 20, 25, 30$ e 35 cm, simulados por 720 segundos com incremento temporal $\Delta t = 5$ s através do MDF Implícito. A Tabela 4.4 apresenta os domínios de busca para as variáveis de projeto do problema de otimização.

Tabela 4.4: Domínios de busca para as variáveis de projeto na análise inversa.

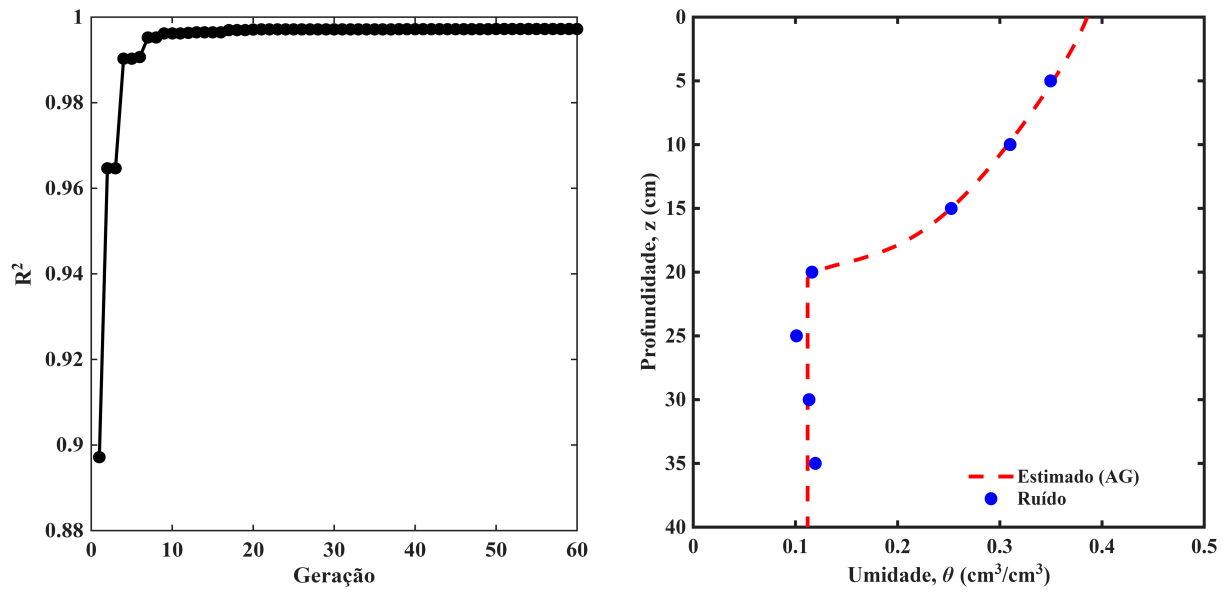
Variável	Domínio
Umidade residual (θ_r)	[0,0001, 0,15]
Umidade saturada (θ_s)	[0,2, 0,5]
Parâmetro de escala (α)	[0,001, 0,5] cm^{-1}
Parâmetro de forma (n)	[1,1, 10]
Condutividade hidráulica saturada (K_s)	[0,0001, 0,02] cm/s

Fonte: Elaborado pelo autor.

A Figura 4.16 apresenta os resultados da análise inversa. Na Figura 4.16a, vemos como o coeficiente R^2 evoluiu ao longo das 60 gerações. O algoritmo foi melhorando aos poucos e chegou a $R^2 = 0,99721$ no final, mostrando boa capacidade de busca e refinamento da solução mesmo com a presença de ruído nos dados. Na Figura 4.16b, são comparados os perfis de umidade obtidos com os dados ruidosos (pontos azuis) e os estimados pelo AG (linha tracejada vermelha). O algoritmo conseguiu captar bem a tendência geral dos dados, filtrando as perturbações e identificando os parâmetros hidrodinâmicos.

Os resultados da otimização, apresentados na Tabela 4.5, mostram os valores observados (verdadeiros) e estimados para os cinco parâmetros. O parâmetro α foi estimado em $0,0600 \text{ cm}^{-1}$ enquanto o valor de referência era $0,0335 \text{ cm}^{-1}$. Para θ_r , o valor estimado foi $0,1067$ contra $0,1020$ de referência. A umidade saturada θ_s ficou em $0,3980$ (referência: $0,3680$). O parâmetro n foi estimado em $1,9830$ (referência: $2,0000$). Por fim, K_s chegou a $0,0413 \text{ cm/s}$ quando o valor correto era $0,0092 \text{ cm/s}$.

As diferenças entre os valores estimados e observados foram maiores para α e K_s , com erros absolutos de $0,0265 \text{ cm}^{-1}$ e $0,0321 \text{ cm/s}$, respectivamente. Para os demais parâmetros, os erros ficaram abaixo de $0,05$. O elevado valor de $R^2 = 0,99721$ indica que a combinação dos cinco parâmetros estimados reproduz adequadamente o comportamento hidrodinâmico observado. Isso mostra que o método de acoplamento AG-MDF funcionou bem para a solução de problemas inversos em fluxo em meios porosos não saturados, mesmo na presença de ruído nos dados experimentais. A convergência adequada e o bom coeficiente de determinação confir-



(a) Evolução do coeficiente R^2 ao longo das gerações do AG.

(b) Comparação entre perfis de umidade com ruído e estimados pelo AG.

Figura 4.16: Resultados da análise inversa com estimativa de cinco parâmetros utilizando AG-MDF e dados sintéticos com ruído.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Tabela 4.5: Comparação entre parâmetros observados e estimados pela análise inversa com cinco variáveis.

Parâmetro	Observado	Estimado	Erro Absoluto
α (cm ⁻¹)	0,0335	0,0600	0,0265
θ_r	0,1020	0,1067	0,0047
θ_s	0,3680	0,3980	0,0300
n	2,0000	1,9830	0,0170
K_s (cm/s)	0,0092	0,0413	0,0321
Coeficiente de determinação: $R^2 = 0,99721$			

Fonte: Elaborado pelo autor.

mam a viabilidade da metodologia para aplicações práticas em caracterização hidrodinâmica de solos, onde as medições sempre apresentam incertezas.

Aplicação 2. Uma abordagem alternativa consistiu em fixar a profundidade de observação em $z = 12$ cm e variar o tempo de amostragem nos instantes $t = 120, 240, 360, 420, 540, 660$ e 720 segundos. Esta simulação representa, de forma mais fidedigna, o que é realizado na prática em campo, uma vez que a metodologia adotada segue o procedimento descrito por (SOUZA, 2020), no qual as leituras são efetuadas em uma profundidade fixa ao longo do tempo, em vez de variar a profundidade para um instante fixo. A Figura 4.17 ilustra a evolução temporal da umidade volumétrica nessa profundidade, evidenciando o comportamento sigmoidal.

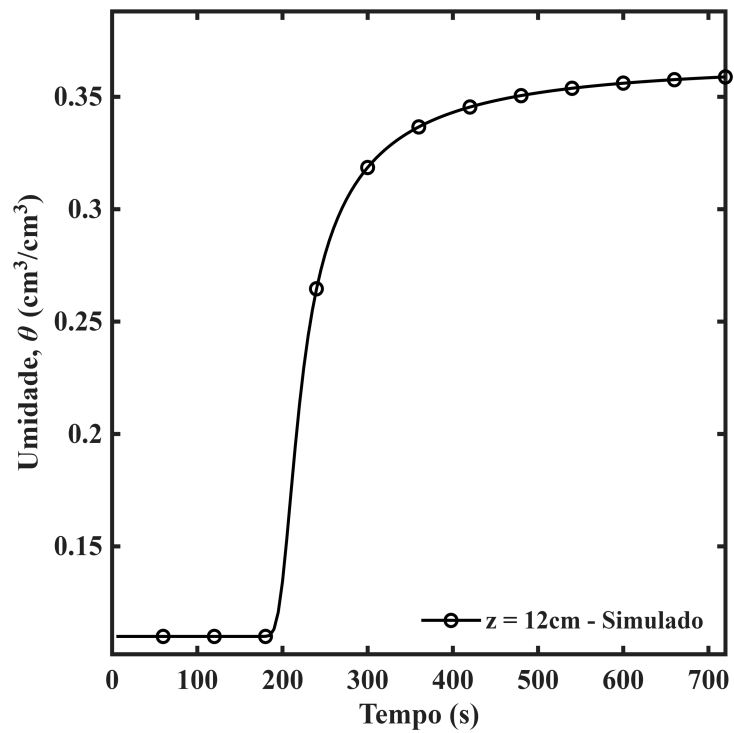


Figura 4.17: Evolução temporal da umidade volumétrica em $z = 12$ cm gerada pelo modelo de van Genuchten.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Com esses dados, também adicionados de ruído gaussiano, desse modo foram estimados cinco parâmetros do modelo mantendo-se as configurações anteriores, à exceção do número de gerações e do tamanho da população, fixados em 50 e 30 indivíduos, respectivamente. Os resultados são apresentados na Tabela 4.6 e na Figura 4.18.

Tabela 4.6: Parâmetros observados, estimados e erro absoluto análise temporal em $z = 12$ cm.

Parâmetro	Observado	Estimado	Erro Absoluto
α (cm ⁻¹)	0,0335	0,0379	0,0044
θ_r	0,1020	0,1023	0,0003
θ_s	0,3680	0,3433	0,0247
n	2,0000	2,2883	0,2883
K_s (cm/s)	0,0092	0,0119	0,0027
Coeficiente de determinação: $R^2 = 0,99677$			

Fonte: Elaborado pelo autor.

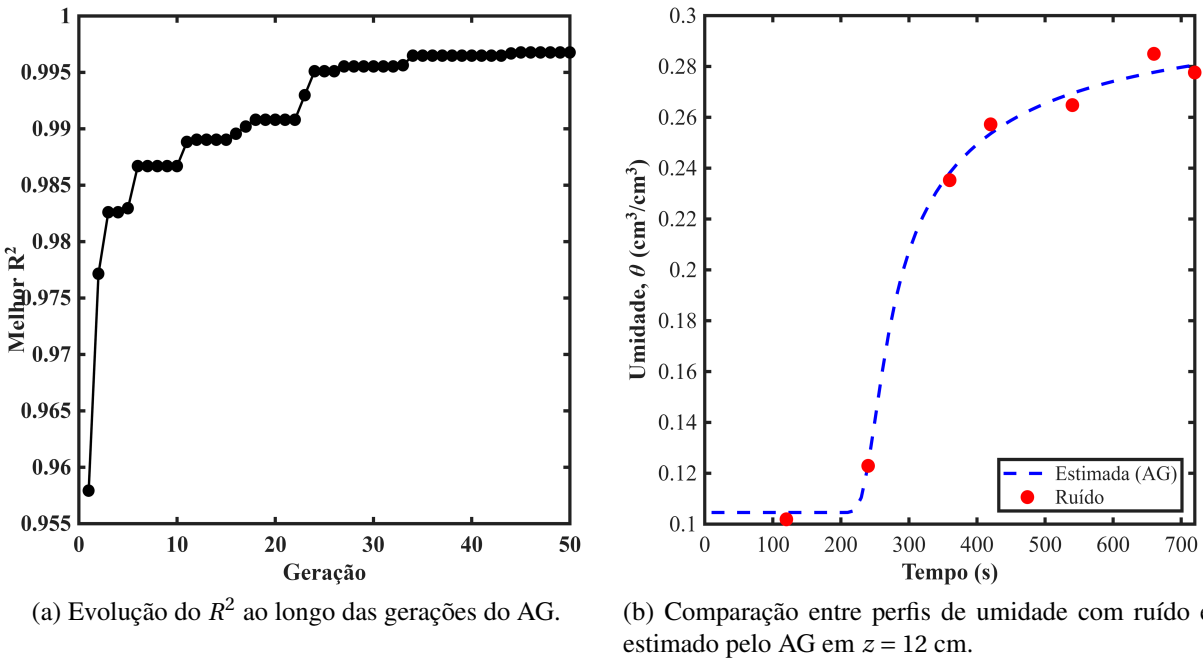


Figura 4.18: Resultados da análise inversa temporal com estimativa de cinco parâmetros utilizando AG-MDF e dados sintéticos com ruído.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Com $R^2 = 0,9968$, o algoritmo apresentou excelente convergência, com boa recuperação dos parâmetros θ_r e θ_s . Embora tenha ocorrido desvio superior em n .

Considerações gerais

A presente dissertação propôs uma metodologia de análise inversa para identificar parâmetros físico-hídricos do solo, integrando algoritmos genéticos ao método das diferenças finitas. O objetivo principal foi criar uma ferramenta computacional para estimar múltiplos parâmetros hidrodinâmicos simultaneamente, a partir de dados de umidade volumétrica, apresentando-se como uma alternativa aos tradicionais ensaios de laboratório. A implementação numérica da equação de Richards mostrou-se consistente e, como esperado, o esquema implícito destacou-se pela maior estabilidade, permitindo avanços de tempo significativos sem perda de precisão. A comparação entre os esquemas explícito e implícito, validada pelo Erro Quadrático Médio (EQM), confirmou a eficácia da solução para os três modelos constitutivos testados: Haverkamp, van Genuchten–Mualem e Brooks–Corey. Na etapa de análise inversa, o algoritmo genético estimou os parâmetros do modelo de van Genuchten–Mualem com elevada precisão. Mesmo em testes com dados sintéticos contaminados por ruído gaussiano, o método manteve coeficientes de determinação (R^2) superiores a 0,99, comprovando sua resiliência frente a incertezas experimentais. A metodologia proposta traz uma contribuição expressiva para a caracterização hidráulica de solos, possibilitando a estimativa de múltiplos parâmetros a partir de um único conjunto de dados de umidade, sem a necessidade de ensaios laboratoriais específicos para cada parâmetro. Como trabalhos futuros desta pesquisa, sugere-se a avaliação comparativa do algoritmo genético em relação a outros métodos de otimização, tanto heurísticos quanto determinísticos, além da implementação do algoritmo com dados reais de umidade em diferentes texturas de solo. Por fim, vislumbra-se o desenvolvimento de um software com interface gráfica intuitiva para democratizar o acesso a essas técnicas avançadas, facilitando a transferência do conhecimento acadêmico para a prática de profissionais de recursos hídricos e agricultura.

Referências bibliográficas

- ASSOULINE, S.; OR, D. Conceptual and parametric representation of soil hydraulic properties: A review. *Vadose Zone Journal*, v. 12, n. 4, p. 1–20, 2013.
- BOUCHEMELLA, S.; SERIDI, A.; ALIM-ICHOLA, I. Numerical simulation of water flow in unsaturated soils: comparative study of different forms of richards's equation. *European Journal of Environmental and Civil Engineering*, v. 19, n. 1, p. 1–26, 2015.
- BRANCO. *Avaliação da disponibilidade hídrica: conceitos e aplicabilidade*. 2021. Disponível em: <<https://www.ufjf.br/engsanitariaeambiental/files/2012/04/DisponibilidadeH%C3%ADrica.pdf>>. Acesso em: 25/07/2021.
- BROOKS, R.; COREY, A. T. *Hydraulic Properties of Porous Media*. Fort Collins, Colorado: Colorado State University, 1964.
- BROYDEN, C. G. The convergence of a class of double-rank minimization algorithms. *IMA Journal of Applied Mathematics*, v. 6, n. 1, p. 76–90, 1970.
- BUCKINGHAM, E. Studies on the movement of soil moisture. *U.S. Dept. Agric. Bur. Soils Bull.*, v. 38, 1907.
- BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D.; BURDEN, A. M. *Numerical Analysis*. 10. ed. [S.l.]: Cengage Learning, 2016.
- CARSEL, R. F.; PARRISH, R. S. Developing joint probability distributions of soil water retention characteristics. *Water Resources Research*, Wiley Online Library, v. 24, n. 5, p. 755–769, 1988.
- CAVIEDES-VOULLIÈME, D. et al. Verification, conservation, stability and efficiency of a finite volume method for the 1d richards equation. *Journal of Hydrology*, v. 480, p. 69–84, 2013.
- CELIA, M. A.; BOULOUTAS, E. T.; ZARBA, R. L. A general mass-conservative numerical solution for the unsaturated flow equation. *Water Resources Research*, v. 26, n. 7, p. 1483–1496, 1990.
- DARCY, H. *Les fontaines publiques de la ville de Dijon*. Paris: Dalmont, 1856.
- EVANS, L. C. *Partial Differential Equations*. 2. ed. Providence, RI: American Mathematical Society, 2010. v. 19. (Graduate Studies in Mathematics, v. 19).

- FARTHING, M. W.; OGDEN, F. L. Numerical solution of richards' equation: A review of advances and challenges. *Soil Science Society of America Journal*, 2017.
- GOLDBERG, D. E. *Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning*. Boston, MA, USA: Addison-Wesley Professional, 1989.
- HADAMARD, J. *Lectures on Cauchy's Problem in Linear Partial Differential Equations*. New Haven: Yale University Press, 1923. (Mrs. Hepsa Ely Silliman Memorial Lectures). London: Humphrey Milford, Oxford University Press.
- HAVERKAMP, R. et al. A comparison of numerical simulation models for one-dimensional infiltration. *Soil Science Society of America Journal*, v. 41, p. 285–294, 1977.
- HESTENES, M. R.; STIEFEL, E. Methods of conjugate gradients for solving linear systems. *Journal of Research of the National Bureau of Standards*, v. 49, n. 6, p. 409–436, 1952.
- HOLLAND, J. H. *Adaptation in Natural and Artificial Systems*. Ann Arbor, MI, USA: University of Michigan Press, 1975.
- HOPMANS, J. W. et al. Inverse modeling of transient water flow. In: DANE, J. H.; TOPP, G. C. (Ed.). *Methods of Soil Analysis, Part 1, Physical Methods*. 3rd. ed. Madison, WI: SSSA, 2002. cap. 3.6.2, p. 963–1008.
- JURY, W. A.; HORTON, R. *Soil Physics*. 6. ed. Hoboken, NJ: John Wiley and Sons, 2004.
- KENNEDY, J.; EBERHART, R. Particle swarm optimization. In: *Proceedings of ICNN'95 - International Conference on Neural Networks*. Perth, Australia: IEEE, 1995. v. 4, p. 1942–1948.
- KIRKPATRICK, S.; GELATT, C. D.; VECCHI, M. P. Optimization by simulated annealing. *Science*, v. 220, n. 4598, p. 671–680, 1983.
- KLAR, A. *A água no sistema solo-planta-atmosfera*. Nobel, 1988. ISBN 9788521301646. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=6EtQygAACAAJ>>.
- KLAR, A. E. *Irrigação: frequência e quantidade*. São Paulo, SP: Nobel, 1991. v. 1. 156 p.
- KLUTE, A. Water retention: Laboratory methods. In: KLUTE, A. (Ed.). *Methods of Soil Analysis: Part 1. Physical and Mineralogical Methods*. Madison, WI: American Society of Agronomy, 1986. p. 635–662.
- LAI, W.; OGDEN, F. L. A mass-conservative finite volume predictor-corrector solution of the 1d richards' equation. *Journal of Hydrology*, v. 523, p. 119–127, 2015.
- LAX, P. D.; RICHTMYER, R. D. Survey of the stability of linear finite difference equations. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, v. 9, n. 2, p. 267–293, 1956.
- LEVENBERG, K. A method for the solution of certain non-linear problems in least squares. *Quarterly of Applied Mathematics*, v. 2, n. 2, p. 164–168, 1944.
- LEVEQUE, R. J. *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2002.

LEVEQUE, R. J. *Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations*. SIAM, 2007. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1137/1.9780898717839>>.

LIBARDI, P. L. *Dinâmica da Água no Solo*. 1. ed. [S.l.]: Edusp, 2005.

MARINELLI. *Darcy's Law in Variable Density Groundwater Systems*. The Groundwater Project, 2024. Disponível em: <<https://doi.org/10.62592/VJGQ3476>>.

MARQUARDT, D. W. An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters. *Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics*, Society for Industrial and Applied Mathematics, v. 11, n. 2, p. 431–441, 1963.

MICHALEWICZ, Z. *Genetic Algorithms + Data Structures = Evolution Programs*. Berlin, Germany: Springer Science Business Media, 2013.

MITCHELL, M. *An Introduction to Genetic Algorithms*. Cambridge, MA, USA: MIT Press, 1998.

MOURA, M. J. dos R. *Avaliação de métodos iterativos aplicados à equação não-linear de Richards*. Dissertação (Dissertação de Mestrado) — Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Seropédica, RJ, Brasil, 2022. Instituto de Ciências Exatas, Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional.

QUEIRÓZ, B. F. de. *Estudo de soluções numéricas da equação de Richards através do método de elementos finitos e diferenças finitas para simulação de fluxo unidimensional em solo não-saturado*. Dissertação (Dissertação de Mestrado) — Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Seropédica, RJ, Brasil, 2017. Instituto de Ciências Exatas, Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional, 85 f.

RAWLS, W. J.; BRAKENSIEK, D. L.; SAXTON, K. E. Estimation of soil water properties. *Transactions of the ASAE*, American Society of Agricultural Engineers, v. 25, n. 5, p. 1316–1320, 1982.

RICHARDS, L. A. Capillary conduction of liquids through porous mediums. *Physics*, v. 1, p. 318–333, 1931.

RICHARDS, L. A. Physical condition of water in soil. In: _____. *Methods of Soil Analysis*. John Wiley Sons, Ltd, 1965. cap. 8, p. 128–152. ISBN 9780891182030. Disponível em: <<https://acsess.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.2134/agronmonogr9.1.c8>>.

SHANMUGAM, M. et al. Effective saturation-based weighting for interblock hydraulic conductivity in unsaturated zone soil water flow modelling using one-dimensional vertical finite-difference model. *Journal of Hydroinformatics*, p. 1–19, 2019.

SMITH, G. D. *Numerical Solution of Partial Differential Equations: Finite Difference Methods*. 3. ed. [S.l.]: Oxford University Press, 1985.

SOUZA, I. A. et al. Uma aplicação dos algoritmos genéticos e do método dos volumes finitos para simular o fluxo da água na zona vadosa. *Trends in Computational and Applied Mathematics*, v. 22, n. 1, p. 13–29, 2021. ISSN 2676-0029. Disponível em: <<https://www.scielo.br/tcam>>.

SOUZA, I. d. A. *Estudos de soluções numéricas para a equação de Richards através do método de volumes finitos para simulação de fluxo unidimensional: um estudo de campo*. 140 p. Dissertação (Dissertação (Mestrado em Modelagem Matemática e Computacional)) — Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Seropédica, 2020.

STRANG, G.; FIX, G. *An Analysis of the Finite Element Methods, New Edition*. Philadelphia, PA: Wellesley-Cambridge Press, 2008. Disponível em: <<https://epubs.siam.org/doi/abs/10.1137/1.9780980232707>>.

SUK, H.; PARK, E. Numerical solution of the kirchhoff-transformed richards equation for simulating variably saturated flow in heterogeneous layered porous media. *Journal of Hydrology*, v. 579, p. 124213, 2019. ISSN 0022-1694. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022169419309485>>.

TARANTOLA, A. *Inverse Problem Theory and Methods for Model Parameter Estimation*. Philadelphia, PA: SIAM, 2005.

TEIXEIRA, P. C. et al. (Ed.). *Manual de Métodos de Análise de Solo*. 3ª edição revista e ampliada. ed. Brasília, DF: Embrapa, 2017.

Van Genuchten, M. T. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Science Society of America Journal*, v. 44, n. 5, p. 892–898, 1980.

VASCONCELLOS, C. A. B.; AMORIM, J. C. C. Effective saturation-based weighting for interblock hydraulic conductivity in unsaturated zone soil water flow modelling using one-dimensional vertical finite-difference model. In: *Proceedings of COBEM, Fluid Mechanics*. [S.l.: s.n.], 2001. v. 8, n. 140.

VERECKEN, H. et al. Modeling soil processes: Review, key challenges, and new perspectives. *Vadose Zone Journal*, v. 15, n. 5, p. 1–57, 2016.