

PARÂMETROS DA EQUAÇÃO VAN GENUCHTEN OBTIDOS PELO MÉTODO LEVENBERG-MARQUARDT COM RESTRIÇÕES

Fábio Freitas Ferreira¹ - fabiofreitasferreira@id.uff.br

Antônio José da Silva Neto² - ajsneto@iprj.uerj.br

Ranulfo Martins Carneiro Neto² - ranulfocarneiro@macae.uff.br

Gustavo Bastos Lyra³ - gblyra@gmail.com

¹Universidade Federal Fluminense - Rio das Ostras, RJ, Brazil

²Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto Politécnico - Nova Friburgo, RJ, Brazil

³Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro - Seropédica, RJ, Brazil

Resumo. Problemas inversos vem sendo utilizados em diversas áreas visando otimizar o tempo dos processos e os recursos financeiros. O problema direto da infiltração de água no solo, aplicação de relevante importância na agricultura, é descrito matematicamente pela equação de Richards. A resolução do problema inverso é de grande importância, pois a obtenção dos parâmetros necessários para resolução da equação de Richards são demorados e custosos. A resolução do problema inverso utilizando o método Levenberg Marquardt apresenta algumas dificuldades, devido a alta sensibilidade dos parâmetros. Dessa forma, nesse trabalho é proposto a imposição de restrições ao método Levenberg-Marquardt, onde algumas restrições do Métodos Luus-Jaakola, são incorporados ao método Levenberg-Marquardt. Os resultados são avaliados através de ferramentas estatísticas, especialmente a ferramenta gráfica box plot. Os resultados dos parâmetros da melhor rodada apresentaram excelente aproximação quando comparados com os valores reais.

Palavras-chave: Solo, Problemas inversos, Levenberg Marquardt, Curva de retenção, van Genuchten

1. INTRODUÇÃO

Problemas inversos são utilizados em diversas áreas afim de diminuir custos financeiros e de tempo na busca de parâmetros para a solução de problemas diretos. A equação de Richards (1931), é modelo matemático para prever a infiltração e percolação de água no solo, no espaço e tempo. A equação de Richards é uma combinação da equação da continuidade e a equação de fluxos em meios porosos - equação de Darcy, (Freitas Ferreira et al., 2018). Este problema foi tratado por vários autores, entre eles Temperini (2018), Guterres (2013), Kroes et al. (2008), Queiróz (2017), Haverkamp et al. (1977), e Silva Neto e White (1994), utilizando-se de métodos como Diferenças Finitas, Elementos Finitos

e Volumes Finitos. A equação de Richards é uma equação diferencial parcial não linear, que relaciona duas grandezas, umidade volumétrica do solo e a pressão que a água exerce no processo de infiltração e percolação, denominada curva de retenção de água no solo. Neste trabalho, utiliza-se a curva de retenção proposta por Genuchten (1980).

Problemas inversos podem ser classificados como determinísticos e estocásticos, (Moura Neto e Silva Neto, 2012; Silva Neto et al, 2016). Cervi (2009) obteve parâmetros das propriedades físicas do solo utilizando-se como dados experimentais a evaporação. Alguns autores utilizam-se de *softwares* fechados. Foi o caso de Scarpate (2010) que utilizou-se do software PEST para obter parâmetros da curva de retenção. Os parâmetros de van Genuchten foram obtidos por Temperini (2018) utilizando-se o método Luus-Jaakola, (Luu e Jaakola, 1973). Foram obtidos resultados satisfatórios, porém o mesmo relata dificuldades em resolver o problema inverso utilizando-se o método Levenberg-Marquardt. Uma constatação se dá pelo fato de que o método Levenberg-Marquardt procura por mínimos locais, o que pode resultar em um direcionamento para regiões não desejadas e podendo ir para regiões não desejadas. O problema de infiltração de água no solo é sensível, sendo que os parâmetros da equação de van Genuchten devem estar numa faixa de valores definidos previamente de acordo com a literatura existente e experimentos de campo. Assim, quando o método Levenberg-Marquardt leva o conjunto de parâmetros para fora desta faixa de valores, o problema se torna difícil de ser resolvido. É neste sentido que o objetivo deste trabalho é utilizar o método Levenberg-Marquardt adaptando as restrições do método Luus-Jaakola, o Levenberg-Marquardt com Restrições.

2. MODELO MATEMÁTICO

Os problemas de infiltração de água no solo relaciona duas grandezas, ψ (cm), que é a pressão exercida no processo, e θ (cm^3/cm^3) que representa a umidade volumétrica do solo. A relação entre ψ e θ é chamada curva de retenção de água no solo. Neste trabalho considerou-se a curva de van Genuchten, dada por

$$\theta(h) = \theta_{res} + (\theta_{sat} - \theta_{res}) (1 + |\alpha h|^n)^{-m} \quad (1)$$

em que θ_{sat} é a umidade volumétrica do solo saturada (cm^3/cm^3), θ_{res} é a umidade volumétrica do solo residual (cm^3/cm^3), α (cm^{-1}), n e m (adimensionais) são fatores empíricos de forma. Tem-se que m pode ser obtido pela relação $m = 1 - 1/n$, (Kroes et al., 2008).

A umidade volumétrica do solo, θ , é uma função que depende da pressão, ψ , além dos parâmetros descritos anteriormente, e que tem duas assíntotas, θ_s e θ_r . Para se obter θ e ψ realiza-se experimentos de campo em que pode-se obter os valores dos parâmetros, a umidade e a pressão. Estes experimentos são custosos financeiramente e demandam tempo. Porém, há um modelo matemático capaz de obter tais grandezas apenas sabendo-se as condições de contornos adequadas e os parâmetros. Assim é possível prever a umidade e a pressão ao longo do tempo por meio da Equação de Richards. Entretanto, mesmo neste caso há de se fazer experimentos de campo para obter-se os valores dos parâmetros da equação da curva de retenção de van Genuchten.

Neste trabalho utiliza-se a equação de Richards ψ -baseada. Dadas as condições de contorno e a condição inicial, e os parâmetros de van Genuchten, obtém-se a pressão ao longo da profundidade do solo adotada, e no tempo desejado. Utilizando-se a curva de van Genuchten, equação (1), obtém-se a umidade volumétrica do solo.

Desta forma, dado o valor experimental de θ , o resíduo entre a grandeza calculado e a experimental é dado por $\mathbf{R} = \theta_c - \theta_e$ em que o subscrito c indica o valor de θ calculado computacionalmente, e o subscrito e indica o valor de θ obtido experimentalmente em campo. Espera-se que o resíduo tenda a zero. Tem-se então um problema de minimização.

Seja o funcional dos resíduos quadrados por

$$Q(\mathbf{P}) = \frac{1}{2}|\mathbf{R}|^2 = \frac{1}{2}\mathbf{R}^T\mathbf{R}, \quad (2)$$

em que $\mathbf{R} = (R_1, \dots, R_M)^T \in \mathbb{R}^M$, M é a quantidade de dados experimentais, e $\mathbf{P} = (\alpha, n, \theta_r, \theta_s)$ é o vetor que contém os parâmetros a serem estimados.

Substituindo \mathbf{R} em (2), tem-se

$$Q(\mathbf{P}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^M (\theta_{c_i} - \theta_{e_i})^2. \quad (3)$$

2.1 Levenberg-Marquardt

Para minimizar o funcional (3), determina-se o seu ponto crítico, isto é,

$$\nabla Q(\mathbf{P}) = 0 \quad (4)$$

Para resolver a equação (4), utiliza-se o método modificado de Newton, que consiste em usar a expansão em série de Taylor de \mathbf{R} em torno de \mathbf{P}^N , apenas para os termos de primeira ordem, em que N representa o índice das iterações no procedimento iterativo. Assim, obtém-se a equação matricial, dada por

$$J^T\mathbf{R} + J^T(J\Delta\mathbf{P}) = 0 \quad (5)$$

em que J é a matriz Jacobiano.

Avalia-se \mathbf{P}^N a partir de uma estimativa inicial, \mathbf{P}^0 , em que um novo valor para o vetor \mathbf{P} , é dado por

$$\mathbf{P}^{N+1} = \mathbf{P}^N + \Delta\mathbf{P}^N \quad (6)$$

Segundo Moura Neto e Silva Neto (2012), o método modificado de Newton apresenta dificuldade de convergência dependendo do chute inicial. Assim, utilizaremos o método de Levenberg-Marquardt, que consiste em adicionar um termo na diagonal de $J^T J$. Desta forma, a equação (5) será reescrita como

$$\Delta\mathbf{P} = - \left[(J^T J)^{-1} J^T + \lambda I \right] \mathbf{R}. \quad (7)$$

Ao trabalhar com a equação (7), não foi possível obter uma solução para o problema inverso. A matriz $(J^T J)^{-1} J^T$ é mau condicionada. O algoritmo proposto por Moura Neto e Silva Neto (2012) para atribuir valores a λ também não foi eficaz. Desta forma, a equação (6) foi modificada para $\mathbf{P}^{N+1} = \mathbf{P}^N + \eta \Delta\mathbf{P}^N$, em que η é um fator de amortização ou amplificação de \mathbf{P} . O valor de η será obtido por meio de uma busca numérica, e dependerá intrinsecamente do valor de $\Delta\mathbf{P}^N$. Outro procedimento adotado foi fixar o valor de λ , também por meio de uma busca numérica, para que a matriz $(J^T J)^{-1} J^T + \lambda I$ seja bem condicionada.

2.2 Restrições

O problema de infiltração de água no solo depende intrinsecamente dos valores dos parâmetros da curva de retenção, os quais há uma restrição. O método Levenberg-Marquardt busca um mínimo local, porém não há uma preocupação em relação qual intervalo estes valores devem estar. Esta é uma característica do método, que caminha sempre na direção deste mínimo. É neste sentido que a proposta deste trabalho é agregar ao método Levenberg-Marquardt a imposição de restrições aos parâmetros que se desejam otimizar. Restrições estas que já são impostas nos métodos Luus-Jaakola e Algoritmo de Colisão de Partículas, (Silva Neto et al, 2016).

As restrições são definidas por

$$MIN_{\mathbf{P}} < \mathbf{P} < MAX_{\mathbf{P}} \quad (8)$$

em que $MIN_{\mathbf{P}}$ e $MAX_{\mathbf{P}}$ são respectivamente os vetores que contém os limites inferior e superior de cada intervalo dos parâmetros de interesse (vetor \mathbf{P}).

O algoritmo que descreve o método Levenberg-Marquardt com Restrições é apresentado a seguir.

Algoritmo 1: LEVENBERG-MARQUARDT COM RESTRIÇÕES

Entrada: Dados experimentais θ_e

Saída: \mathbf{P} otimizado.

```

1  início
2  Definir as restrições, equação (8), de acordo com a literature existente.
3  Impor a condição inicial por  $\mathbf{P}^0 = (MAX_{\mathbf{P}} + MIN_{\mathbf{P}})/2$ 
4  Calcular o erro inicial, Residuo0, equação (3).
5  enquanto Total de Iterações < N ou  $\Delta\mathbf{P}^N > \textit{Erro}$  faça
6      Resolver a equação (7) e obter  $\Delta\mathbf{P}$ .
7       $\mathbf{P}^{N+1} = \mathbf{P}^N + \eta\Delta\mathbf{P}^N$ .
8      Impor as restrições conforme descrito no algoritmo na seção 2.3.
9      Calcular o novo resíduo, ResiduoNovo, utilizando-se  $\mathbf{P}^{N+1}$ .
10     se ResiduoNovo < Residuo0 então
11         Residuo0 = ResiduoNovo
12          $\mathbf{P}_{otimo} = \mathbf{P}^{N+1}$ 
13     fim
14     N ← N + 1
15 fim
16 fim
17 retorna  $\mathbf{P}$  otimizado.
```

O *Total de Iterações* é definido previamente. No caso das simulações realizadas, foi fixado um valor arbitrário *Total de Iterações* = 500. *Erro* foi definido em 10^{-2} , porém em nenhuma das simulações atingiu-se tal valor. Ressalta-se ainda que ao impor as restrições, linha 8 do Algoritmo 1, o resíduo pode aumentar, pois o método Levenberg-Marquardt interpreta como um novo chute inicial candidato a solução do problema inverso. Logo, faz-se necessário o condicional apresentado entre as linhas 10 e 13, que guarda sempre o vetor \mathbf{P} que melhor otimiza o funcional definido na equação 3.

2.3 Algoritmo para impôr as restrições

O método Levenberg-Marquardt sempre busca a direção onde a função descesse mais rapidamente. Porém, esta busca pode levar a mínimos locais fora do intervalo de busca desejável para o problema. É neste sentido que deseja-se impor restrições ao método. As restrições impostas são as mesmas utilizadas nos métodos Luus-Jaakola e o Algoritmo de Colisão de Partículas. Porém, esta técnica pode fazer com que o método fique preso nos limites definidos como restrição do problema. Assim, é acrescentado uma probabilidade para a estocasticidade da solução. Define-se então P_{alt} , que é um valor entre 0 e 1 pré-definido, e que será utilizado na tomada de decisão do algoritmo.

Na análise das restrições, gera-se primeiramente um número aleatório r . Se $P_{alt} < r$ e algum $P_i \notin [MIN_{P_i}, MAX_{P_i}]$, $i = 1 : total\ de\ parâmetros\ a\ ser\ estimados$, então gera-se um novo P_i de forma aleatória. Caso $P_{alt} > r$ e algum $P_i \notin [MIN_{P_i}, MAX_{P_i}]$, $i = 1 : total\ de\ parâmetros\ a\ ser\ estimados$, então P_i assume o valor de máximo ou mínimo do intervalo imposto na restrição. Desta forma, reinicia-se o método Levenberg-Marquardt. O novo candidato a solução passa a ser o novo chute inicial do método, o que possibilita o mesmo seguir outro caminho em busca de minimizar o funcional definido na equação (3).

Algoritmo 2: RESTRIÇÃO PARA O MÉTODO LEVENBERG MARQUARDT

Entrada: \mathbf{P}

Saída: \mathbf{P} satisfazendo as restrições.

```

1 início
2   Gera-se um número aleatório  $r$ 
3   se  $P_{alt} > r$  então
4     se  $\mathbf{P} < MIN_{\mathbf{P}}$  então
5        $\mathbf{P} = MIN_{\mathbf{P}}$ 
6     fim
7     se  $\mathbf{P} > MAX_{\mathbf{P}}$  então
8        $\mathbf{P} = MAX_{\mathbf{P}}$ 
9     fim
10  fim
11  senão
12    se  $\mathbf{P} < MIN_{\mathbf{P}}$  ou  $\mathbf{P} > MAX_{\mathbf{P}}$  então
13       $\mathbf{P} = MIN_{\mathbf{P}} + rand * (MAX_{\mathbf{P}} - MIN_{\mathbf{P}})$ 
14    fim
15  fim
16 fim
17 retorna Novo  $\mathbf{P}$ 

```

* $rand$ é um número aleatório entre 0 e 1.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Considerou-se o caso descrito em Vasnconcellos e Amorim (2001). Aqui a profundidade do solo é 100 cm, $Lz = 100\text{ cm}$, o tempo de simulação é 23400 s, e as condições de contorno são do tipo Dirichlet, $\psi(0, t) = -800, 0\text{ cm}$, $t > 0$, e $\psi(L_z, t) = 0, 0\text{ cm}$, $t > 0$, e a condição inicial $\psi(z, 0) = -800, 0\text{ cm}$, $0 \leq z \leq Lz$.

Os parâmetros originais da curva de retenção de van Genuchten, equação (1), são $\alpha = 1,00 \times 10^{-2} \text{ cm}^{-1}$, $n = 1,53$, $\theta_r = 0,186 \text{ cm}^3 \text{ cm}^{-3}$ e $\theta_s = 0,363 \text{ cm}^3 \text{ cm}^{-3}$.

Foram otimizados os parâmetros α , n , θ_r e θ_s . As restrições são dadas dentro de um intervalo de busca, ou seja, $0,01 \leq \alpha \leq 0,1$, $1 \leq n \leq 3$, $0,01 \leq \theta_r \leq 0,2$ e $0,1 \leq \theta_s \leq 0,5$.

Foram utilizadas quatro configurações para testar o método Levenberg-Marquardt com Restrições: 1) $\lambda = 0,25$, $\eta = 1,5$ e $P_{alt} = 0,5$; 2) $\lambda = 0,25$, $\eta = 1,5$ e $P_{alt} = 0,8$; 3) $\lambda = 2$, $\eta = 2$ e $P_{alt} = 0,5$; e 4) $\lambda = 0,5$, $\eta = 0,7$ e $P_{alt} = 0,5$.

Na Figura 1 observa-se a distribuição dos resultados obtidos para as quatro configurações, em dez rodadas cada, por meio do *Boxplot*, (Usevicius, 2004). No *Boxplot*, existem três quartios, que limitam o retângulo que contém 50% dos resultados obtidos com as 10 rodadas para cada configuração. Observou-se que a configuração 1 foi a que melhor recuperou os valores esperados para os parâmetros.

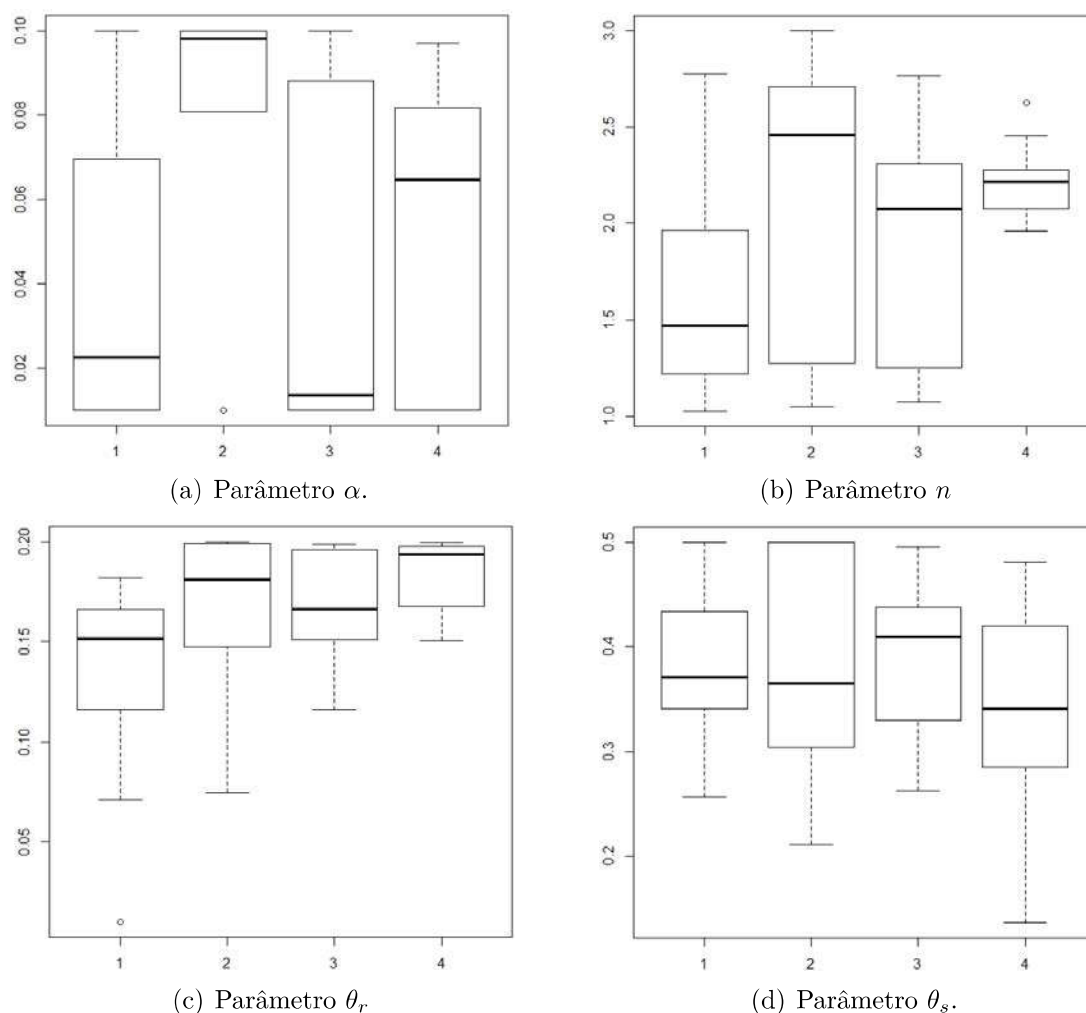


Figura 1- *Boxplot* dos parâmetros obtidos com 10 rodadas para cada configuração.

Na Tabela 1 é mostrado os resíduos obtidos em todas as rodadas, para cada configuração. Observa-se que na configuração 1 foram obtidos os melhores resultados. Praticamente todos os resíduos estão na ordem de 10^{-2} , corroborando as informações da Figura 1.

Tabela 1- Resíduo de cada configuração em cada rodada.

Rodada	Configuração 1		Configuração 2		Configuração 3		Configuração 4	
	Iter.	Resíduo	Iter.	Resíduo	Iter.	Resíduo	Iter.	Resíduo
1	95	0,05438	414	0,2142	422	0,11181	236	0,07302
2	201	0,06181	214	0,17835	91	0,09845	3	0,17045
3	399	0,04071	217	0,17745	186	0,05791	195	0,1902
4	21	0,05008	275	0,07514	301	0,17188	181	0,18378
5	129	0,09146	110	0,18755	488	0,09709	1	0,17882
6	26	0,08269	137	0,17942	239	0,03821	28	0,25891
7	473	0,04291	188	0,20462	285	0,13222	35	0,23224
8	465	0,04047	108	0,04002	325	0,17089	53	0,17057
9	14	0,09805	316	0,04313	8	0,17 7399	43	0,14664
10	19	0,14872	415	0,26214	403	0,069	496	0,05858

4. CONCLUSÕES

O método Levenberg-Marquardt com Restrições apresentou bons resultados com a configuração 1 mostrado na Tabela 1. O fato de permitir o método ser reiniciado todas as vezes que um parâmetro se encontra fora das restrições impostas permite que novos caminhos sejam percorridos em busca de um mínimo local. Como trabalhos futuros pode-se buscar uma melhor configuração para o método, apesar que entende-se que a mesma depende do problema a ser tratado.

REFERÊNCIAS

- Cervi, A. (2009). “Determinação dos parâmetros da equação característica de solos através de técnicas de solução de problemas inversos com base em dados de evaporação”, UNIJUI, Ijuí.
- Freitas Ferreira, F., Temperini, M. O., Lyra, G. B., e Telles, W. R. (2018). “Método de Volumes Finitos Aplicados a Problemas de Infiltração da Água no Solo”. In Encontro Nacional de Modelagem Computacional. Búzios, RJ, Brasil.
- van Genuchten, M. T., “A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils”, *Soil Science Society of America Journal*, 44 (5), 892-898.
- Guterres, M. X. (2013), “Avaliação dos algoritmos de Picard-Krylov e Newton-Krylov na solução da equação de Richards”, Tese de Doutorado, IPRJ/UERJ, Nova Friburgo.
- Haverkamp, R., Vauclin, M., Touma, J., Wierenga, P. J., Vachaud, G. (1977), “A comparison of numerical simulation models for one-dimensional infiltration”, *Soil Science Society of America Journal*, vol 41, 2, 285-294.
- Kroes, J. G., van Dam, J. C., Groenendijk, P., Hendriks, R. F. A., Jacobs, C. M. J. (2008), “SWAP version 3.2. Theory description and user manual”, *Alterra Report1649(02)*, Wageningen, Alterra, ISSN 1566-7197.
- Luus, R. and Jaakola, T. H. I. Optimization by Direct Search and Systematic Reduction of the Size of Search Region, *AIChE Journal*, volume 19:4:760-766, Toronto, Canadá, 1973.
- Moura Neto, F. D., Silva Neto, A. J. (2012). “An Introduction to Inverse Problems with Applications”, Springer-Verlag.
- Queiróz, B. F. (2017), “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 de Mestrado, ICE/PGMMC/UFRRJ, Seropédica.
- Richards, L. A. (1931), “Capillary conduction of liquids through porous mediums”, *Journal of Applied Physics*, 1, 318, DOI: 10.1063/1.1745010.