

Uma Aplicação de Algoritmos Genéticos e do Método das Diferenças Finitas na identificação de parâmetros hídricos do solo

Danilo Vasconcelos dos Santos

Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro (UFRRJ)

danilo36011@gmail.com

Renan de Souza Teixeira

Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro (UFRRJ)

rsteixeira@ufrj.br

Rosane Ferreira de Oliveira

Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro (UFRRJ)

rosaneol@uol.com.br

Wilian Jeronimo dos Santos

Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro (UFRRJ)

wilianj@gmail.com

Resumo: Este trabalho tem como proposta identificar parâmetros físico-hídricos do solo, presentes em modelos de curvas de retenção e de condutividade hidráulica, a partir de dados de umidade mensurados no solo, combinando métodos para resolver equações diferenciais e técnicas de otimização. No que tange à simulação numérica, a discretização da famosa equação de Richards é realizada por meio do método das diferenças finitas, considerando a forma explícita para a aproximação temporal. Para a análise inversa, é proposta uma metodologia que acopla um algoritmo genético com o método das diferenças finitas. Os resultados apresentados no presente texto, apesar de preliminares, mostram as possíveis vantagens dessa metodologia, em especial no que diz respeito ao custo de tempo para a execução dos experimentos necessários para a obtenção dos dados. Dessa forma, a pesquisa visa contribuir para o aprimoramento das técnicas de modelagem da dinâmica da água no solo, oferecendo possíveis estratégias para a otimização dos recursos hídricos.

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

Introdução

O solo é um recurso natural essencial para a manutenção da vida na Terra, atuando como base para o crescimento vegetal, reservatório de água e nutrientes, filtro natural de contaminantes e alicerce para infraestruturas humanas. Sua importância transcende os limites da agricultura, estendendo-se a processos ambientais, geotécnicos e climáticos. No entanto, apesar de sua relevância, o solo é um recurso finito, frequentemente submetido a degradações provocadas por práticas inadequadas de uso e manejo, mudanças climáticas e pressões antrópicas. Nesse contexto, torna-se indispensável o estudo de suas propriedades físicas e hídricas, a fim de promover seu uso sustentável e a preservação de suas funções ecossistêmicas (REICHARDT; TIMM, 2022).

Entre os diversos aspectos relacionados à física do solo, destaca-se a dinâmica da água, cuja compreensão é fundamental para o manejo adequado da irrigação, a prevenção de erosão, a recarga de aquíferos e o desenvolvimento saudável das plantas. A equação de Richards que descreve o movimento da água

em meios porosos não saturados é um instrumento matemático central nesse estudo Libardi (2005). No entanto, sua solução apresenta desafios computacionais consideráveis devido à sua natureza não linear, exigindo o emprego de métodos numéricos como diferenças finitas e elementos finitos para sua resolução.

A obtenção precisa de parâmetros físico-hídricos do solo, como a curva de retenção de água e a condutividade hidráulica, é fundamental para o desenvolvimento de modelos realistas da infiltração e retenção de água no solo. Tradicionalmente, esses parâmetros são obtidos por meio de experimentos laboratoriais, como o proposto por Richards (1931), que relaciona umidade e potencial matricial. Com base nesses dados, formula-se um problema de mínimos quadrados não linear para ajustar modelos teóricos às curvas observadas. No entanto, tais experimentos podem ser limitados em termos de representatividade em campo e custos operacionais, podendo durar em média de 1 a 3 meses, dependendo do tipo de solo e número de tensões aplicadas.

Neste trabalho, propõe-se uma abordagem alternativa baseada em análise inversa, utilizando o acoplamento entre algoritmos genéticos (AG) e o método das diferenças finitas (MDF). Essa metodologia visa estimar os parâmetros físico-hídricos diretamente a partir de dados de umidade obtidos em campo, sem a necessidade de experimentos laboratoriais que determinam uma coleção de pares de umidade do solo correspondente a dado potencial matricial aplicado. Técnicas como a TDR (Time Domain Reflectometry), por exemplo, possibilitam medições mais práticas da umidade do solo, viabilizando a implementação do problema inverso. A proposta deste estudo busca, portanto, integrar conhecimentos de física do solo, modelagem matemática e técnicas de otimização para aprimorar a estimativa de propriedades essenciais ao manejo hídrico e à sustentabilidade agrícola.

Modelo Matemático

Para descrever o fluxo de água em meios porosos não saturados, utiliza-se a equação de Richards, derivada da Lei de Darcy–Buckingham combinada com a equação da continuidade. Sua forma mista unidimensional pode ser escrita como

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

onde θ é a umidade volumétrica (cm^3/cm^3), t o tempo (s), z a profundidade (cm), $k(\psi_m)$ a condutividade hidráulica (cm/s) e ψ_m o potencial matricial (cm).

A equação de Richards envolve tanto o potencial matricial quanto a umidade do solo, o que exige o uso de modelos para descrever as curvas de retenção e de condutividade hidráulica. Dentre os modelos amplamente utilizados para a condutividade hidráulica e curva de retenção, destacam-se as formulações (GENUCHTEN, 1980; BROOKS; COREY, 1964; HAVERKAMP et al., 1977). Este trabalho utiliza o modelo de Haverkamp (HAVERKAMP et al., 1977), cuja a curva de retenção é dada por

$$\theta(\psi_m) = \frac{\alpha(\theta_s - \theta_r)}{\alpha + |\psi_m|^\beta} + \theta_r, \quad (2)$$

onde θ_r e θ_s são as umidades residual e de saturação (m^3/m^3), respectivamente, enquanto α e β são parâmetros de ajuste adimensionais. O modelo para a condutividade hidráulica é como segue

$$K(\psi_m) = K_s \frac{A}{A + |\psi_m|^\gamma}, \quad (3)$$

onde K_s é a condutividade à saturação (cm/s)

A equação de Richards é uma equação não linear, o que impossibilita, em geral, a obtenção de sua solução por métodos analíticos tradicionais, como o método da separação de variáveis, com exceção de alguns casos específicos. No entanto, este trabalho aborda a Equação (1) em sua forma geral. Sendo assim, recorre-se a métodos numéricos para sua resolução (FARTHING; OGDEN, 2017; CELIA; BOULOUTAS; ZARBA, 1990). Neste estudo, emprega-se o MDF, que discretiza o domínio e transforma a

equação diferencial parcial em uma equação puramente algébrica. Sendo assim, a Equação (1) foi resolvida pelo esquema explícito, ficando, por conseguinte, da seguinte forma discretizada

$$\frac{\theta_i^{n+1} - \theta_i^n}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta z} \left[\frac{K_{i+1}^n + K_i^n}{2} \left(\frac{\psi_{i+1}^n - \psi_i^n}{\Delta z} - 1 \right) - \frac{K_i^n + K_{i-1}^n}{2} \left(\frac{\psi_i^n - \psi_{i-1}^n}{\Delta z} - 1 \right) \right] \quad (4)$$

Parâmetros: Δt e Δz são os passos de tempo (s) e espaço (cm); θ_i^n e ψ_i^n são a umidade e o potencial no ponto i e tempo n ; $K_i^n = k(\psi_i^n)$.

Análise Inversa & Algoritmos Genéticos

O problema direto se caracteriza por uma modelagem matemática que descreve um fenômeno físico de forma objetiva, utilizando equações diferenciais ou integrais juntamente com condições iniciais e de contorno. No contexto do estudo da dinâmica da água no solo, o problema direto é governado pela equação de Richards, que descreve o movimento da água no solo em função do tempo e do espaço. Os dados de entrada incluem parâmetros físico-hídricos do solo, como os relacionados às curvas de retenção e condutividade hidráulica. A partir dessas informações, é possível resolver numericamente o problema para obter os valores de umidade da água no solo e o potencial matricial em função do tempo e da profundidade.

Na simulação numérica realizada por (CELIA; BOULOUTAS; ZARBA, 1990), foi considerado um problema direto de infiltração vertical em uma coluna de solo com 40 cm de profundidade, sujeita às seguintes condições de contorno: $\psi_m(t, 0) = -20,7 \text{ cm}$ ($\theta = 0,26756$) na superfície e $\psi_m(t, 40) = -61,5 \text{ cm}$ ($\theta = 0,09985$) na base. A condição inicial adotada foi $\psi_m(0, z) = -61,5 \text{ cm}$ ($\theta = 0,09985$) ao longo de toda a coluna. Os parâmetros utilizados no modelo de Haverkamp foram:

$$\alpha = 1611000,0, \quad \theta_r = 0,075, \quad \theta_s = 0,287, \quad k_s = 0,0094444 \text{ cm/s}, \quad A = 1175000,0, \quad \beta = 3,96, \quad \gamma = 4,74.$$

Por outro lado, o problema inverso consiste em determinar os parâmetros físico-hídricos do solo a partir de dados observacionais, como os de umidade volumétrica. Nesse caso, as saídas do problema direto (perfis de umidade) são conhecidas e o objetivo é estimar as entradas (parâmetros). Esse tipo de problema é essencial para o estudo da dinâmica da água no solo, pois os parâmetros encontrados estão presentes tanto na curva de retenção quanto na curva de condutividade hidráulica, necessárias para simulações numéricas mais precisas.

Para resolver o problema inverso, utilizou-se um método de otimização que minimiza o erro entre os valores observados (θ_{obs}) e os valores estimados ($\theta_{\text{est}}(x)$) obtidos ao resolver o problema direto com parâmetros aproximados. A função objetivo mais comum é baseada no método dos mínimos quadrados não linear, que mede o erro quadrático médio entre os valores observados e estimados, apresentada na equação a seguir.

$$F(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^L (\theta_{\text{est},i}(x) - \theta_{\text{obs},i})^2, \quad (5)$$

onde L é o número de pontos de medição, $\theta_{\text{est},i}(x)$ é o valor de umidade estimado pelo modelo para o i -ésimo ponto, $\theta_{\text{obs},i}$ é o valor de umidade observado no i -ésimo ponto, e $x = (\alpha, \theta_r, \theta_s, A, \beta, \gamma, k_s)$ são os parâmetros a serem estimados. Outra alternativa para abordar o problema inverso é maximizar o coeficiente de correlação R^2 , que mede a qualidade do ajuste da seguinte maneira.

$$R^2(x) = 1 - \frac{\sum_{i=1}^L (\theta_{\text{est},i}(x) - \theta_{\text{obs},i})^2}{\sum_{i=1}^L (\theta_{\text{est},i}(x) - \bar{\theta}_{\text{obs}})^2}, \quad (6)$$

onde $\bar{\theta}_{\text{obs}}$ representa a média dos valores observados. A resolução do problema inverso frequentemente emprega métodos de otimização, onde as abordagens determinísticas mais utilizadas destacam-se o método de Gauss-Newton e o método de Levenberg-Marquardt (NOCEDAL; WRIGHT, 2006).

Aqui, visando abordar este problema de maximização apresentado na Equação (6), propõe-se um AG de representação real, conforme apresentado em Linden (2000) e descrito brevemente abaixo.

Para as simulações numéricas apresentadas no presente estudo, o AG é iniciado randomicamente por uma população composta por 20 soluções candidatas. Cada indivíduo da população representa um conjunto de valores dos parâmetros do modelo, sendo eles: $\alpha, \theta_r, \theta_s, A, \beta, \gamma, k_s$. Assim, tem-se uma população inicial do tipo:

$$(\alpha_1, \theta_{r1}, \theta_{s1}, A_1, \beta_1, \gamma_1, k_{s1}), \dots, (\alpha_{20}, \theta_{r20}, \theta_{s20}, A_{20}, \beta_{20}, \gamma_{20}, k_{s20})$$

Cada valor é gerado aleatoriamente dentro de um intervalo $[a, b]$, definido com base em dados observados na literatura, respeitando as condições físicas e o comportamento natural do solo.

Após esta inicialização, a população passa por um processo evolutivo baseado na seleção natural, em que os indivíduos mais aptos, aqueles que produzem melhores valores da função objetivo, têm maior probabilidade de permanecer e gerar descendentes nas próximas gerações. A aptidão de cada indivíduo é determinada pelo valor obtido na função objetivo, neste trabalho.

A seleção é realizada de forma probabilística, favorecendo os indivíduos mais adaptados, mas mantendo ocasionalmente indivíduos menos aptos, a fim de preservar a diversidade genética da população. Os métodos de seleção utilizados comumente incluem a Roda da Roleta e a Seleção por Torneio, sendo utilizado o este primeiro nos resultados apresentados no decorrer do texto.

Novos indivíduos são gerados por meio de operadores genéticos. O *cruzamento* combina dois indivíduos para formar novos candidatos, enquanto a *mutação* altera aleatoriamente partes de um indivíduo, promovendo variação genética e evitando a convergência prematura. Além disso, é utilizado o *elitismo*, que garante a permanência do melhor indivíduo em cada geração.

Neste trabalho, foi adotada a representação real dos indivíduos e o critério de parada foi definido por um número máximo de gerações, sendo 30 nas simulações realizadas e apresentadas na próxima seção.

Esses passos descritos correspondem ao funcionamento simples do um AG. No entanto, para este problema, foi utilizado um AG acoplado ao MDF. A geração da população inicial segue o mesmo procedimento, mas os valores dos parâmetros gerados são aplicados diretamente na equação de Richards, resolvida numericamente pelo MDF. Com isso, obtêm-se as curvas de umidade e potencial matricial. A partir desse ponto, o algoritmo segue normalmente com os mesmos passos do AG tradicional, utilizando os resultados da simulação para avaliar a função objetivo e conduzir o processo do AG, conforme pode ser visto na Figura 1.

Resultados

A primeira simulação feita na linguagem de programação Octave consistiu em acoplar um AG com o MDF. As probabilidades de cruzamento e mutação foram variáveis, assumindo valores entre 80% e 60% para cruzamento e entre 20% e 40% para mutação.

Em relação às variáveis de projeto, para um primeiro teste, apenas três parâmetros foram considerados: θ_r , θ_s e k_s . Esses parâmetros foram delimitados nos seguintes domínios de busca: $\theta_r \in [0.0001, 0.1]$, $\theta_s \in [0.2, 0.5]$ e $k_s \in [0.0001, 0.1]$. Essa configuração permitiu explorar de forma eficiente o espaço de soluções, ajustando os parâmetros de forma a maximizar a função objetivo associada ao problema inverso.

Os dados observados consistiram de 7 medições obtidas por meio do MDF explícito, simulado por 60 segundos, com incremento temporal $\Delta T = 0,1$ s, para as profundidades $z = 5, 10, 15, 20, 25, 30$ e 35 cm, considerando o modelo de Haverkamp e os mesmos parâmetros já utilizados nos exemplos anteriores.

O AG foi implementado para maximizar o coeficiente de correção R^2 como função objetivo, convergindo para esta primeira análise na geração 14 para as seguintes variáveis de projeto.

$$k_s^* = 0.0086, \quad \theta_s^* = 0.305, \quad \theta_r^* = 0.071.$$

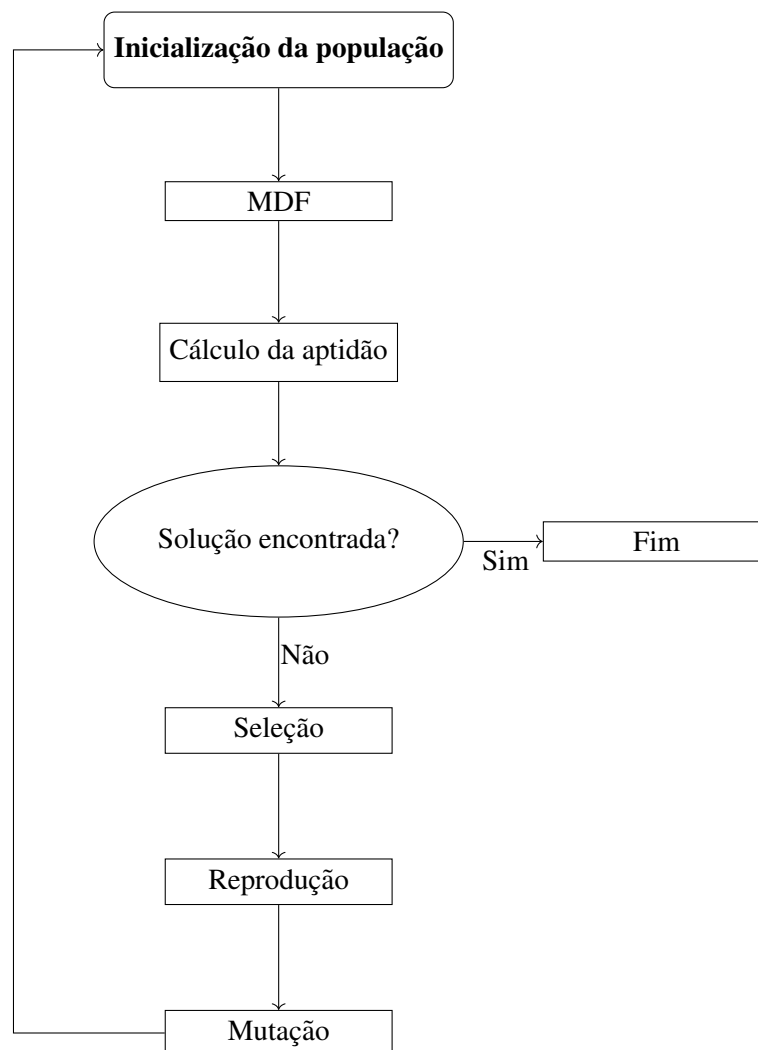


Figura 1: Esquema de um AG acoplado com o MDF para a análise inversa

Os valores exatos dessas variáveis são

$$k_s = 0.0094, \quad \theta_s = 0.287, \quad \theta_r = 0.075.$$

O ajuste realizado apresentou um coeficiente de correlação de $R^2 = 0.998$, indicando excelente aderência entre os valores estimados e os dados observados. A Figura 2 apresenta os resultados obtidos pelos parâmetros exatos (problema direto) e os gerados pela análise inversa.

Um segundo teste foi proposto considerando dados de umidade coletados em diferentes profundidades do solo, a saber para $z = 2, 4, 6, 8, 10, 20$ e 30 cm. Neste caso, o AG convergiu na 16ª geração, fornecendo estimativas para as variáveis de projeto: $k_s^* = 0,0090$, $\theta_s^* = 0,305$ e $\theta_r^* = 0,066$ e coeficiente de correlação $R^2 = 0,998$, cujos resultados são apresentados na Figura 3.

Conclusões

Este trabalho explorou a aplicação de um AG acoplado ao MDF para a estimativa de parâmetros físico-hídricos do solo, essenciais para modelagem da dinâmica da água em meios porosos não saturados. A abordagem proposta demonstrou ser uma alternativa eficiente aos métodos tradicionais de

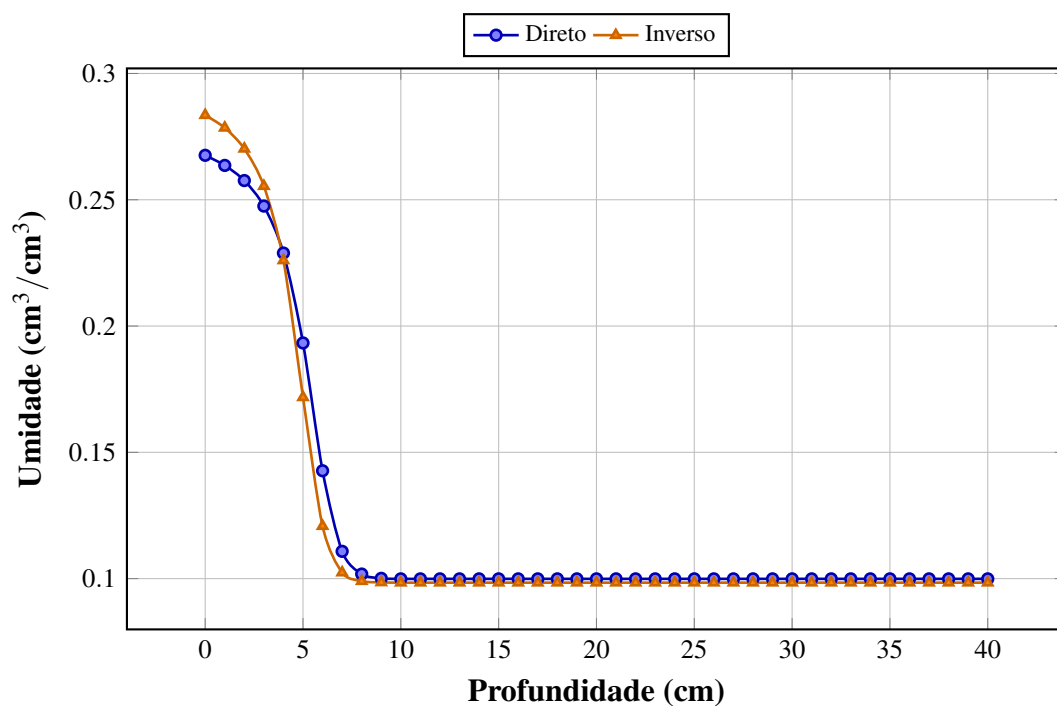


Figura 2: Comparação com o problema direto e inverso e medições de umidade em $z = 5, 10, 15, 20, 25, 30$ e 35 cm.

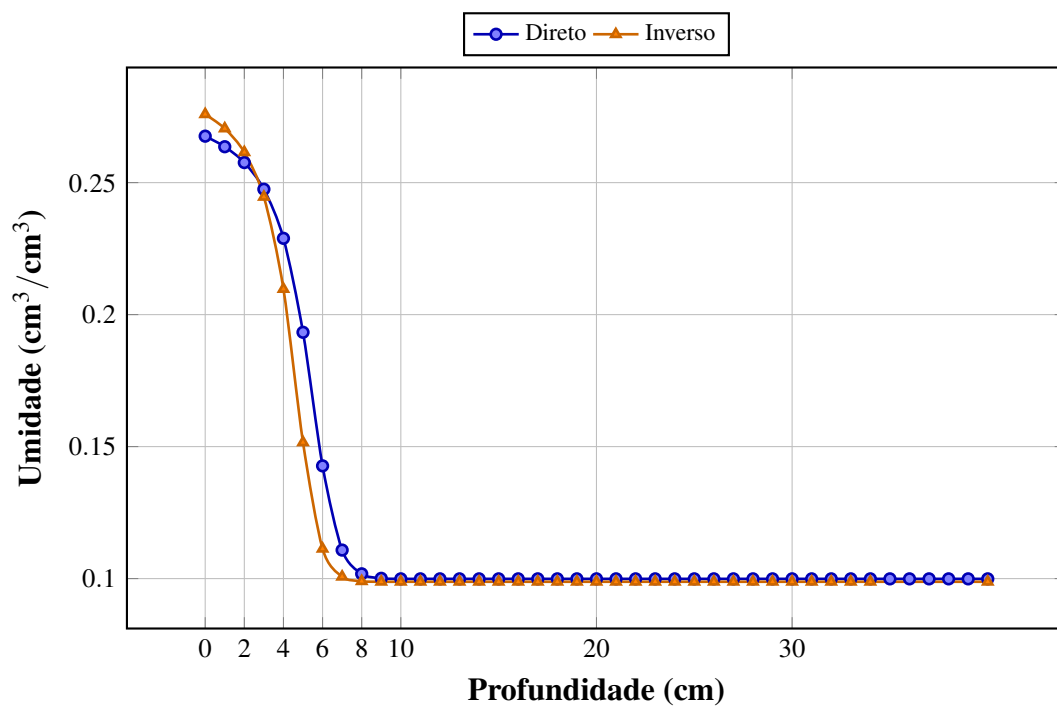


Figura 3: Comparação com o problema direto e inverso e medições de umidade em $z = 2, 4, 6, 8, 10, 20$ e 30 cm.

obtenção de parâmetros, que frequentemente demandam experimentos laboratoriais custosos e tempo intensivo. A principal contribuição deste estudo reside na integração de técnicas de otimização heurística com métodos numéricos consolidados, oferecendo uma estratégia viável para reduzir dependência de dados experimentais diretos e acelerar a obtenção de parâmetros para modelos hidrológicos. Isso abre perspectivas para aplicações em manejo sustentável de recursos hídricos, simulações de irrigação e estudos de contaminação de solos.

Agradecimentos

Agradeço à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo financiamento da bolsa, que esta sendo essencial para o desenvolvimento deste trabalho.

Referências

- BROOKS, R.; COREY, A. T. *Hydraulic Properties of Porous Media*. Fort Collins, Colorado: Colorado State University, 1964.
- 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.
- FARTHING, M. W.; OGDEN, F. L. Numerical solution of richards' equation: A review of advances and challenges. *Soil Science Society of America Journal*, 2017.
- GENUCHTEN, M. T. van. 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.
- 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.
- LIBARDI, P. L. *Dinâmica da Água no Solo*. São Paulo: EDUSP, 2005. ISBN 8531407567.
- LINDEN, R. *Algoritmos Genéticos*. Rio de Janeiro: Ciência Moderna, 2000. ISBN 9788539901951.
- NOCEDAL, J.; WRIGHT, S. J. *Numerical Optimization*. 2. ed. New York: Springer, 2006. (Springer Series in Operations Research and Financial Engineering). ISBN 978-0-387-30303-1.
- REICHARDT, K.; TIMM, L. C. *Solo, planta e atmosfera: conceitos, processos e aplicações*. 4. ed. Barueri: Manole, 2022.
- RICHARDS, L. A. Capillary conduction of liquids through porous mediums. *Physics*, v. 1, p. 318–333, 1931.