

Calibração de Modelo de Fluxo Subsuperficial em Escala Menor Adotando os Algoritmos NSGA II, PADDs E MOPSO

Calibration of Throughflow Model in Small Scale Adopting NSGA II, PADDs and MOPSO Algorithms

Domingo Stalin Aguero-Martinez ¹, Thiago Barros Murari ², Francisco Bruno Souza Oliveira ³, Marcelo Albano Moret ⁴

RESUMO

A calibração de um modelo de fluxo de água em meio não saturado é uma tarefa difícil devido a que esse tipo de modelo utiliza parâmetros que dependem de variáveis. As equações parciais diferenciais, que simulam o experimento, adotam hipóteses muito restritivas para as condições de contorno do domínio físico tanto no tempo como no espaço. Modelos clássicos da literatura como o modelo inverso associado ao modelo constitutivo em solos não saturados foram utilizados pelos pesquisadores com relativo sucesso. No entanto, a incerteza em relação à determinação de valores das propriedades hidráulicas em solo não saturado continuam sendo desafiantes. Nesse contexto, este estudo visa contribuir em elucidar conceitos de calibração automática de um modelo proposto do fluxo de água em solo não saturado utilizando técnicas revolucionárias como são os Algoritmos de Otimização Multiobjetivo, especialmente, o MOPSO (*Multiobjective Particle Swarm Optimization*), o NSGA II (*Nondominated Sorting Genetic Algorithm*) e o PADDs (*Pareto Dynamically Dimensioned Search*). A técnica da fronteira de Pareto apresenta-se como ferramenta útil para fins de otimização do modelo proposto. O estudo de caso foi coletado da literatura sendo de relevância a disponibilidade de dados observados de potenciais matriciais e fluxo subsuperficial, especialmente, em relação ao controle experimental dos lençóis freáticos transientes. Em conclusão, a calibração automática foi atingida com razoabilidade e os Algoritmos de Otimização Multiobjetivo obtiveram resultados aceitáveis, no entanto, os valores dos parâmetros hidráulicos ainda permanecem na incerteza.

Palavras-chave: Calibração, Multiobjetivo, Fronteira de Pareto, Solo não saturado.

ABSTRACT

Calibration of a model of flow of water in an unsaturated soils is a hard task to tackle due parameters which depends on variables. The partial differential equation, which simulates the experience, has limited hypotheses about contour of the domain and discretization both in time and in space. Classic approaching such as inverse modelling in connection to constitutive models in the context of small scale are being using intensively in literature with relative successful. Further, remain the uncertainty with regard of hydraulic properties of the physical domain and hypotheses. In this context, this study is aimed at contributing knowledge about automatic calibration of a throughflow model in a vadose zone employing three multiobjective optimization algorithms, which were: MOPSO (*Multiobjective Particle Swarm Optimization*), NSGA II (*Nondominated Sorting Genetic Algorithm*) & PADDs (*Pareto Dynamically Dimensioned Search*). Pareto Front technique proved to being a useful tool to approaching the study of the phenomenon. The case of study collected from literature was handful due input data, such as, matric suction and throughflow, especially, in dealing with transient water table. Conclusively, calibration is possible and multiobjective optimization algorithms reached a reasonable successful, however, hydraulic parameters persist at being unpredictable.

Keywords: Calibration, Multiobjective, Pareto Front, Unsaturated soil.

¹ Doutorando em Modelo Computacional e Tecnologia Industrial no Centro Universitário Senai-Cimatec.

E-mail:

domingo.martinez@ifg.edu.br

² Professor Doutor no Centro Universitário Senai-Cimatec.

³ Professor Doutor na Universidade Estadual de Santa Cruz.

⁴ Professor Doutor no Centro Universitário Senai-Cimatec.

1. INTRODUÇÃO

A gestão de recursos hídricos encara desafios difíceis de solucionar. Uma maneira que os pesquisadores abordaram esse problema é pelo estudo do comportamento do fluxo da água subsuperficial através de modelos matemáticos (Wöhling et al., 2007, Rujner et al. 2018). Esses modelos matemáticos utilizam equações diferenciais parciais – EDP - em que os parâmetros hidráulicos dependem de variáveis (Fullhart et al., 2017).

Para calibrar esse tipo de modelos foram utilizadas diferentes técnicas, sendo relevantes os experimentos executados em escala menor de laboratório onde existe um melhor controle do fenômeno físico (Argyrokastritis et al., 2009). As EDP na sua vez podem ser resolvidas pela utilização de métodos numéricos como são a discretização no espaço do domínio do fenômeno físico utilizando o Método de Elementos Finitos (MEF) e a discretização no tempo utilizando o Método das Diferenças Finitas (MDF).

Adicionalmente, o modelo inverso é outra técnica conhecida na literatura que auxilia na calibração de modelos, especialmente quando os dados observados são escassos (Vitali et al., 2018). Na última década, modelos inversos foram aplicados aos modelos hidrológicos em conexão com sistemas complexos obtendo-se um bom desempenho (Ding et al., 2018, Chuang-Bing et al., 2015, Vaezinejad et al., 2018).

Uma grande variedade de sistemas complexos estão baseados em Algoritmos de Otimização Multiobjetivo – AOM (Esfe et al., 2018, Aghajani & Ghadimi, 2018, Guang-Yu et al., 2018). A técnica da fronteira de Pareto implementada na calibração automática foi utilizada com resultados aceitáveis. Nesse sentido, pesquisadores desenvolveram e continuam desenvolvendo diversos Algoritmos de Otimização Multiobjetiva – AOM - associado à fronteira de Pareto como critério de otimização.

Entre os diversos AOM existentes na literatura ressaltam-se aqueles com base na sobrevivência do ser com maior aptidão conhecido como o NSGA II (Nondominated Sorting Genetic Algorithm, Srinivas e Deb, 1994, Deb, 1999), um outro algoritmo baseado no estudo da movimentação da bandada de pássaros conhecido como o MOPSO (Multi Objective Particle Swarm Optimization, Alvarez-Benitez et al., 2005), e também, uma nova estratégia de otimização denominada o PADDs (Pareto Dynamically Dimensioned Search, Asadzadeh e Tolson, 2013), todos esses AOM citados utilizaram a técnica da fronteira de Pareto.

Para tanto, este trabalho, pretende oferecer maior entendimento sobre a calibração automática de fluxo de água em meio de solo não saturado e de como os Algoritmos de Otimização Multiobjetivo afetam a eficiência dessa calibração.

2. METODOLOGIA

2.1 Experimento de Referência

Este trabalho foi baseado nos resultados obtidos no experimento apresentado por Vauclin et al. (1979). Esse experimento foi realizado para testes de análise numérica e experimental do fluxo de água em zona parcialmente saturada visando à análise da recarga de aquíferos.

A Figura 1 apresenta o diagrama esquemático do experimento. Como na seção de simetria não há fluxo horizontal, apenas uma das seções do esquema foi montada no experimento. A Figura 2 apresenta o reservatório utilizado para o experimento com 3 m de largura, 2 m de altura e 5 cm de espessura. O reservatório foi preenchido com areia fina de distribuição granulométrica uniforme e o nível freático mantido constante a 135 cm do topo pela rede de drenagem. Na parte inferior do reservatório, a superfície foi considerado impermeável. Na parte superior esquerda, foi instalada uma bomba volumétrica, segundo detalhe A da Figura 2, na extensão de $x=0$ a $x=50$ cm. O restante da superfície superior do reservatório foi coberto para evitar a evaporação. Na lateral direita, segundo detalhe B na Figura 2, mantém-se o nível freático em $z=-135$ cm. Após ser estabilizado o nível freático, aplicou-se uma taxa de recarga constante de 14,8 cm/h, através da bomba.

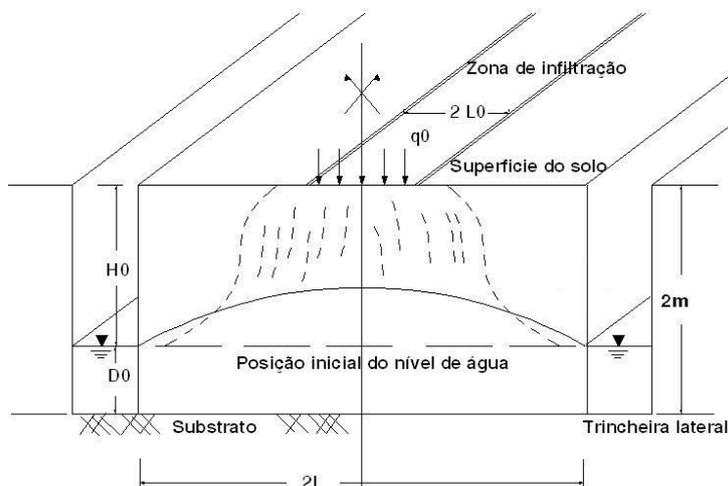


Figura 1. Diagrama esquemático do experimento (modificado – Vauclin et al., 1979)

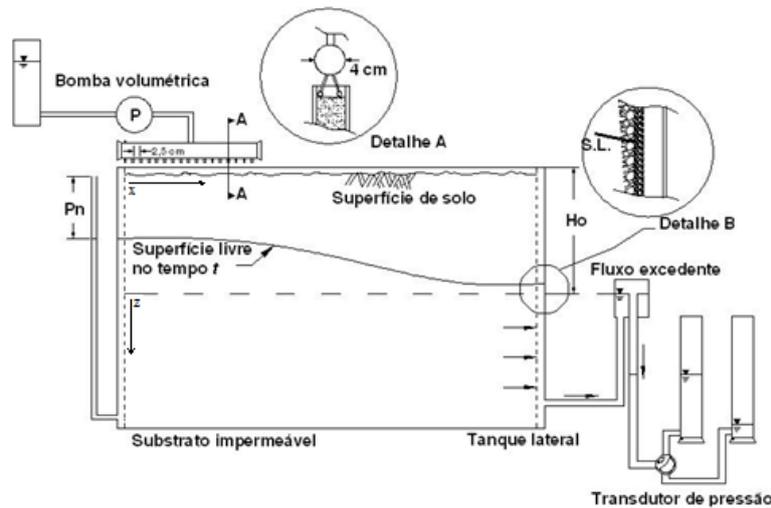


Figura 2. Detalhes do experimento, com vazão constante igual a 14,8cm/h (modificado – Vauclin et al., 1979)

O experimento contou com quinze pontos de controle que determinaram as diferentes posições do lençol freático nos intervalos de tempo de duas horas, três horas, quatro horas e oito horas. A Figura 3 apresenta esses pontos de controle e as curvas que indicam as mudanças de posição do nível freático em função do tempo, sendo esses pontos unidos em linhas intermitentes. As linhas sólidas representam os níveis freáticos modelados pelo autor do experimento.

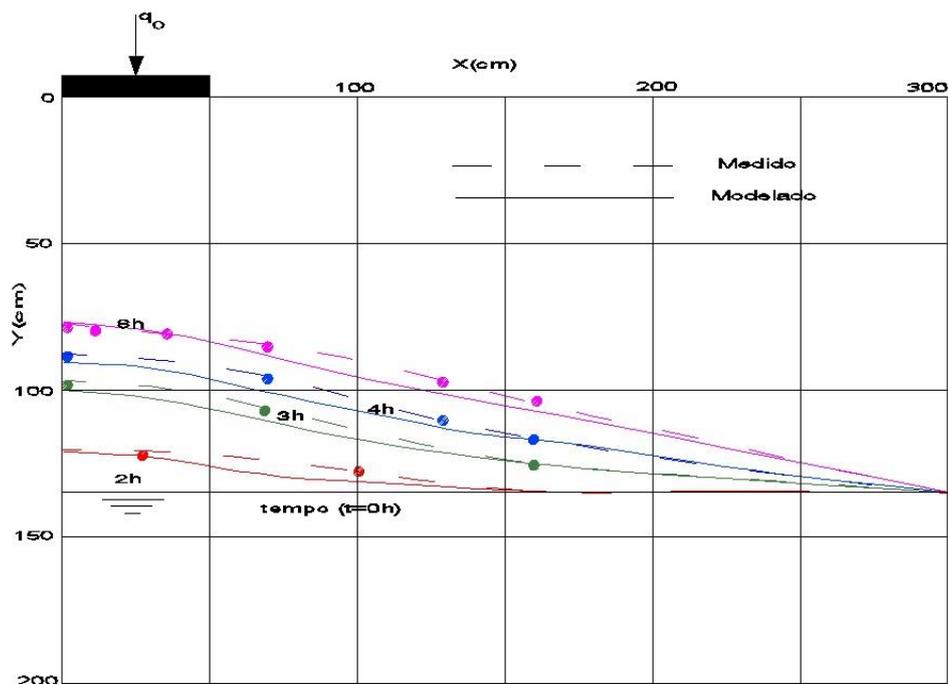


Figura 3. Posição do nível freático em diferentes tempos. As linhas intermitentes indicam os níveis freáticos observados por Vauclin *et al.* (1979). As linhas sólidas representam os níveis freáticos modelados por esse autor

Além dos valores de potencial mátrico ao longo do tempo para os quinze pontos de controle mencionados anteriormente, os valores de vazão subsuperficial também foram registrados, como pode-se observar na Figura 4, onde: V_1 é o volume de água acumulada total (V_2+V_3) (litros); V_2 refere-se ao volume de água subsuperficial coletada fora do experimento valores esses que foram utilizadas para fins deste trabalho (litros), e; V_3 é o volume de água armazenada no domínio físico do experimento (litros). Com base em amostras do solo empregadas, foi possível também ajustar uma curva de retenção de água no solo, apresentada na Figura 5.

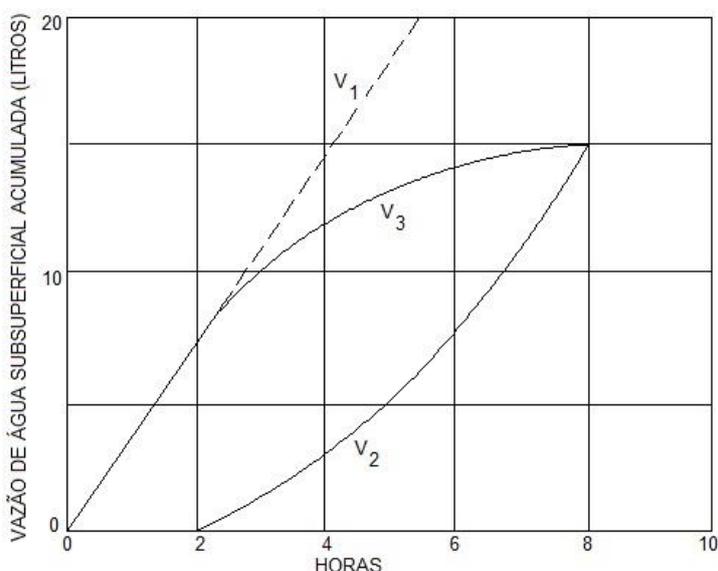


Figura 4. Volumes de água subsuperficial acumulado coletados em relação ao tempo de uma hora até oito horas do experimento de Vauclin et al. (1979)

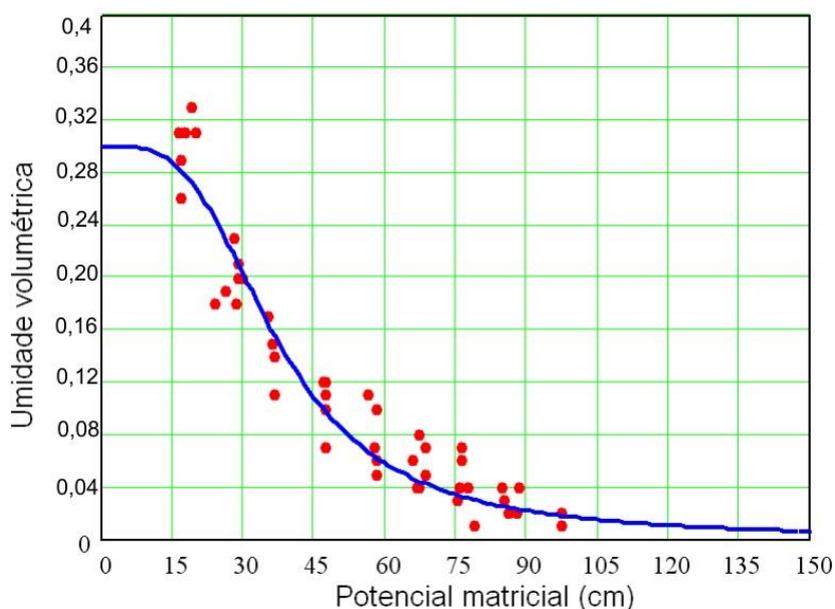


Figura 5. Curva de retenção da água no solo (modificado – Vauclin et al., 1979).

2.2 Modelo Matemático

O fluxo de água em solo não saturado é governado pela equação de Richards (1931), apresentada abaixo como função do potencial mátrico,

$$\frac{d\theta_w}{dt} = \frac{d}{dx} \left[K_x(\psi) \left(\frac{d\psi}{dx} \right) \right] + \frac{d}{dy} \left[K_y(\psi) \left(\frac{d\psi}{dz} \right) \right] + \frac{d}{dz} \left[K_z(\psi) \left(\frac{d\psi}{dz} + 1 \right) \right] \quad (1)$$

onde $d\theta_w/dt$ representa a taxa de variação da umidade volumétrica ($L^3L^{-3}T^{-1}$), $K_i(\psi)$ é a condutividade hidráulica em função do potencial matricial nas direções $i = x, y, z$, (LT^{-1}), $d\psi/dx$, $d\psi/dy$, $d\psi/dz$, são as taxas de potencial matricial nas direções x, y, z , sendo z a direção da gravidade.

Como mencionado, as técnicas do Método de Elementos Finitos (MEF) e o Método de Diferenças Finitas (MDF) foram aplicadas para ajustar a equação diferencial parcial que governa o fluxo de água em solo não saturado.

A Figura 6 apresenta a discretização do fenômeno físico que consta de uma malha do Método de Elementos Finitos (MEF) com elementos triangulares. Essa figura também apresenta os quinze pontos de controle, os quais foram monitorados em laboratório, que indicam a mudança de posição do nível freático em diferentes períodos de duas, três, quatro e oito horas, respectivamente. Os valores da variável de potenciais matriciais obtidos em relação ao tempo e ao espaço nos pontos de controle foram interpolados para os nós do elemento finito obtendo-se assim os valores de potenciais matriciais simulados.

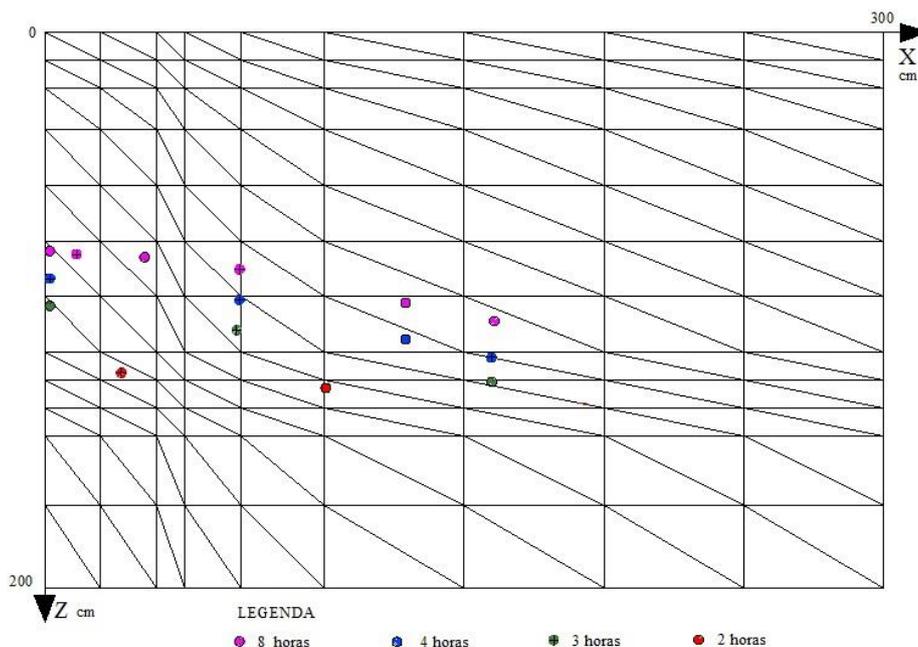


Figura 6. Malha adotada para simulação numérica aplicada ao experimento de Vauclin et al. (1979), apresenta-se os pontos de controle

A equação 2 reflete um exemplo da representação dessas duas técnicas MEF e MDF na direção x ,

$$\frac{\theta_i^{j+1} - \theta_i^j}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta x} \left[k_{i+1/2}^{j+u} \left(\frac{\psi_{i+1}^{j+u} - \psi_i^{j+u}}{\Delta x} \right) - k_{i-1/2}^{j+u} \left(\frac{\psi_i^{j+u} - \psi_{i-1}^{j+u}}{\Delta x} \right) \right] \quad (2)$$

onde θ^j é a umidade volumétrica no espaço i e no tempo j (L^3L^{-3}), em qual $j+1$ é o avanço no tempo, Δt é o intervalo no tempo (T), Δx é o intervalo no espaço na direção x (sem ser a direção da gravidade) (L), sendo $u = 0, 1$ ou $0,5$ quando o MDF é explícito, implícito ou semi-implícito, respectivamente, as outras notações foram já definidas.

Para solucionar a Equação 2 deve existir uma relação entre as variáveis potencial matricial e umidade volumétrica, pelo que os pesquisadores desenvolveram um modelo conhecido na literatura como Modelo Constitutivo que passa a ser detalhado na seguinte seção.

2.3 Modelo Constitutivo

Neste trabalho foi utilizado o modelo constitutivo de Van Genuchten – MVG (1980) que encontra-se expressado na Equação 3 em relação ao tempo e ao espaço,

$$\frac{\theta_i^j - \theta_{res}}{\theta_{sat} - \theta_{res}} = \left[\frac{1}{1 + (\alpha |\psi_i^j|)^n} \right]^m \quad (3)$$

onde i configura os pontos de controle no espaço e j caracteriza o índice que representa o avanço no tempo, θ^j foi já definido, θ_{sat} é a umidade volumétrica saturada (L^3L^{-3}), θ_{res} é a umidade volumétrica residual (L^3L^{-3}), ψ^j é o potencial matricial no espaço i e no tempo j (L), α é um fator empírico (L^{-1}), n é um fator adimensional e $m = (n-1)/(n)$.

2.4 Funcionamento do Modelo

No procedimento de calibração automática é necessário um processo iterativo, pelo que estabeleceu-se um conjunto inicial de parâmetros do modelo constitutivo – MVG. Na sequência, o Método dos Elementos Finitos (MEF) estabelece soluções aproximadas do potencial matricial (ψ) em cada elemento finito. Utilizaram-se funções de aproximação, denominados na literatura como “funções de interpolação”, que obedecem às condições de contorno do fenômeno físico. Os potenciais matriciais simulados no inteiro domínio originam

valores residuais, denominados de soluções aproximadas. O método de resíduos ponderados redistribui os valores residuais em todo o domínio através de funções ponderadas. Quando utilizado o método de Galerkin, essas funções ponderadas representam as mesmas das funções de interpolação. Os resíduos ponderados foram resolvidos mediante a integração por partes. Estabelecida dessa forma, a equação que governa o fluxo de água em meio não saturado pode ser solucionada formando matrizes em cada elemento finito como mostrado na Equação 4.

$$\overline{Matriz Fluxo} |\psi| + \overline{Matriz Retenção} \left| \frac{d\psi}{dt} \right| = \overline{Vazões Nodais} - \overline{Vazão Gravita} \quad (4)$$

em que: $\overline{Matriz Fluxo}$ é a matriz que isola o elemento de fluxo; $\overline{Matriz Retenção}$ é a matriz de capacidade de retenção; $\overline{Vazão Gravita}$ é a matriz de fluxo que inclui os efeitos gravitacionais; $\overline{Vazões Nodais}$ é a matriz do fluxo através do contorno; $|\Psi|$ = vetor com o valor de Ψ (potencial matricial ou poropressão) em todos os nós; $\left| \frac{d\Psi}{dt} \right|$ = vetor com a taxa de variação de Ψ no tempo em cada nó.

No entanto, para continuar com a calibração automática é necessário utilizar os Algoritmos de Otimização Multiobjetivo como explicado a seguir.

2.5 Algoritmos de Calibração Multiobjetivo

Desenvolveram-se e continuam desenvolvendo-se Algoritmos de Otimização (AO) que calibraram modelos de caráter uniobjetivo (Rao e Waghmare, 2014), mas destaca-se três que foram muito estudados no campo da hidrologia, entre esses, os Algoritmos Genéticos (AG) com um ponto de vista evolutivos que requer de uma “população” de indivíduos e de “gerações” para formação de cromossomos continuando a busca do ótimo global (Holland, 1992), o PSO (*Particle Swarm Optimization* do Inglês, Kennedy e Eberhart, 1995) cuja característica é utilizar um enxame de partículas dentro do domínio de busca determinando possíveis respostas, assim, a quantidade de partículas associada às respostas, com o decorrer das iterações, define o ótimo global. Uma menção especial é um AO que surgiu recentemente de conotação heurística, o DDS (*Dynamically Dimensioned Search*, do Inglês Tolson e Shoemaker, 2007). Os autores apresentam esse AO como uma alternativa audaciosa de convergência ao ótimo global. A calibração de modelo utilizando uma Função Objetiva mostrou problemas de unicidade de respostas, pois existem diversos conjuntos de parâmetros que simulam o mesmo fenômeno físico. Desse modo, a

comunidade científica direcionou os esforços na utilização de algoritmos de otimização multiobjetiva, entre esses, o Enxame de Partículas (Coello Coello e Lechuga, 2002). Paralelo a esse acontecimento, aconteceu que a existência de diferentes respostas podiam ser consideradas soluções do modelo físico, surgindo assim um critério de avaliação que foi a curva de Pareto, mostrando que existe um conjunto de possíveis respostas que realmente simulam o fenômeno físico e que uma resposta independe da outra, isto é, sem ser dominada uma resposta pela outra. Após essas descobertas, os Algoritmos de otimização foram expostas na sua forma multiobjetiva como o MOPSO (*Multiobjective Particle Swarm Optimization*) (Alvarez-Benitez et al., 2005), o trabalho de Deb propondo o NSGA II (*Nondominated Sorting Genetic Algorithm*) (Srinivas e Deb, 1994, Deb, 1999) e o PADDs (*Pareto Dynamically Dimensioned Search*) (Asadzadeh e Tolson, 2013), todas utilizando o conceito de Fronteira de Pareto. Dessa forma, os pesquisadores direcionaram as análises desses Algoritmos de Otimização Multiobjetiva (AOM) sob o conceito de diminuir o tempo de cálculo e obter maior exatidão no valor de índice de desempenho das Funções Objetivo. Devido à quantidade de AOM desenvolvidas, os pesquisadores formularam maneiras para a avaliação desses AOM mediante sua utilização em problemas de referência, por exemplo, Mattot utilizou modelos ambientais de um aterro e fez a avaliação de diferentes AOM (Mattot et al., 2012), Razavi et al. (2012) fez um resumo de diversos Algoritmos de Otimização e o tempo de computo utilizado.

2.6 Estabelecimento do campo de busca

A Tabela 1 apresenta a faixa de valores empregadas para cada um dos parâmetros calibrados quesito importante para a utilização dos AOM.

Tabela 1. Faixa de valores maior e menor utilizados para o processo de busca

Parâmetros	n	α cm ⁻¹	K_{sat} cm/h	θ_{sat} cm ³ /cm ³	θ_{res} cm ³ /cm ³
Valor maior	5,00	0,5000	300,00	0,50	0,20
Valor menor	1,01	0,0001	0,00	0,20	0,00

2.7 Estabelecimento das funções objetivo

A formulação da Função Objetivo (FO) foi fundamental no processo de calibração, pois essa equação determinará o processo de simulação dos dados observados. Intuitivamente em programação é sempre desejável uma formulação que não conduza a

resultados elevados que é um fator de instabilidade e colapso do programa. Sendo que essas dificuldades apareceram no ajuste da variável de potencial matricial do estudo de caso de recarga de aquíferos com a formulação de Nash e Sutcliffe (1970), optou-se pela definição própria de autoria da FO apresentada na Equação 5:

$$FO = \frac{1}{1 + \sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^n \left| P_{i_{Observado}}^j - P_{i_{Simulado}}^j \right|} \quad (5)$$

sendo:

- $P_{i_{Observado}}^j$ o valor da variável (potencial matricial) observado no ponto de controle i em relação ao espaço e j em relação ao tempo;
- $P_{i_{Simulado}}^j$ o valor de potencial matricial simulado no ponto de controle i em relação ao espaço e j em relação ao tempo;
- n o número total de pontos de controle em função do tempo m , assim, para o experimento de Vauclin et al. (1979), $n=2$ para $m=1$ (2 horas), $n=3$ para $m=2$ (4 horas), $n=4$ para $m=3$ (6 horas), $n=6$ para $m=4$ (8 horas), e;

- $\sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^n \left| P_{i_{Observado}}^j - P_{i_{Simulado}}^j \right|$ o resultante do somatório dos valores absolutos das diferenças entre o $P_{i_{Observado}}^j$ e o $P_{i_{Simulado}}^j$ em todos os pontos de controle do experimento.

O valor da FO (chamado de índice de desempenho) sempre possui um valor positivo na faixa de zero para um. Desse modo, a Equação 3 evita valores de resultados altos que ocasionem problemas de computo. O melhor índice de desempenho obtém o valor de “um” quando todos os valores dos dados simulados sejam iguais aos valores dos dados observados em relação ao espaço e ao tempo.

A segunda FO avaliada, FO2, foi a formulação de Nash e Sutcliffe (1970) utilizando a variável de vazão subsuperficial, da seguinte forma:

$$FO2 = \max \left(1 - \frac{\sum_{i=1}^n (Q_{obs,i} - Q_{sim,i})^2}{\sum_{i=1}^n (Q_{obs,i} - \bar{Q}_{obs,i})^2} \right) \quad (6)$$

sendo: Q_{obs} a série de vazões subsuperficiais observadas; Q_{sim} a série de vazões subsuperficiais simuladas; n o comprimento da série em horas, e; \bar{Q}_{obs} a média das vazões observadas.

2.8 Esquema de Processo do Modelo

O modelo proposto neste trabalho de calibração automática de fluxo de água em meio de solo não saturado encontra-se esquematizado na Figura 7 onde conforme essa figura, o primeiro passo é estabelecer um vetor inicial de parâmetros. Dessa maneira, foram determinados cinco parâmetros (n , α , K_{sat} , θ_{sat} , θ_{res}) que constituíram o vetor inicial arbitrário que, na sua vez, foi encaminhado ao modelo matemático que soluciona a equação que governa o fluxo de água em meio não saturado.

Continuando com a iteração, os valores das variáveis obtidas passam a ser ajustados nas funções objetivo (FO), sendo que os valores de índice de desempenho dessas FO configuram as frentes de Pareto. Os valores de índice de desempenho e a fronteira de Pareto assim obtidos foram submetidos às tolerâncias impostas, que se não forem satisfeitas o processo se reinicia. Nessa sequência, o processo de iteração recomeça com a criação de um novo conjunto de parâmetros determinados arbitrariamente pelos Algoritmos de Otimização Multiobjetivo continuando esse procedimento até atingir as tolerâncias estabelecidas.

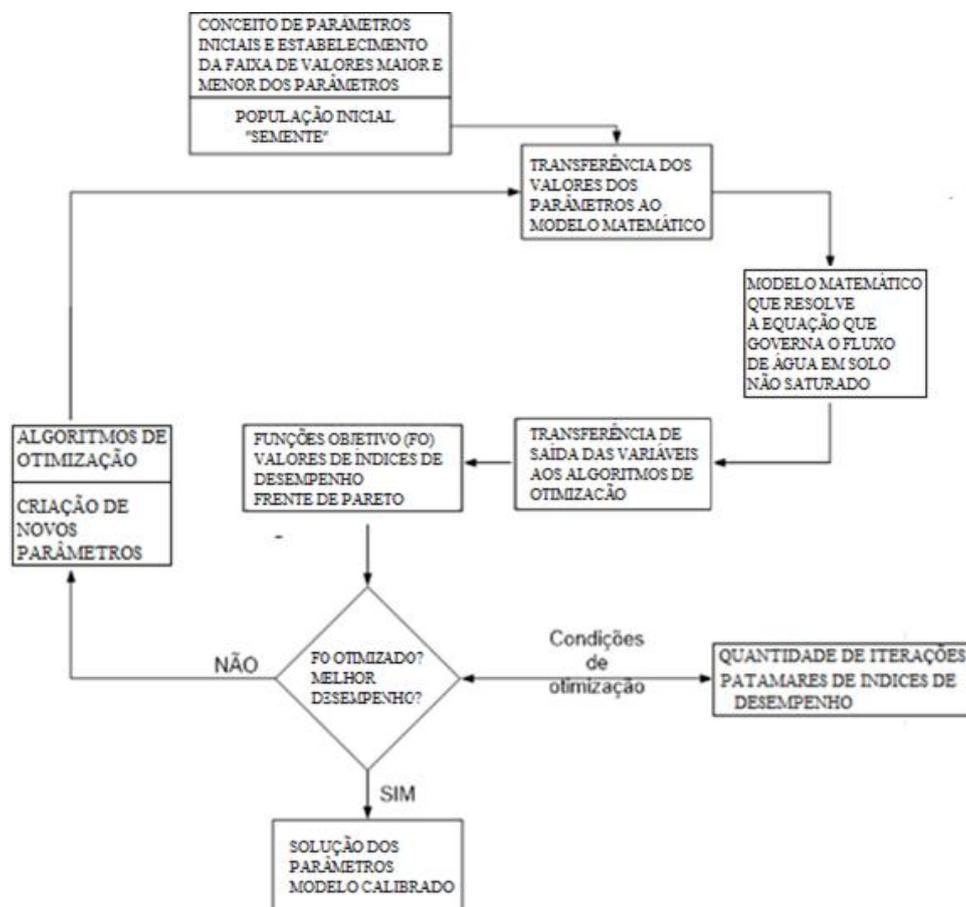


Figure 7. Fluxograma do modelo inverso proposto e sua respectiva calibração automática via Algoritmos de Otimização Multiobjetivo

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Como foi supramencionado, foi analisado nesta seção três Algoritmos de Otimização Multiobjetiva (AOM), o MOPSO (*Multiobjective Particle Swarm Optimization* do Inglês), o NSGA II (*Nondominated Sorting Genetic Algorithm* do Inglês) e o PADDs (*Pareto Dynamically Dimensioned Search* do Inglês), aplicados à calibração automática do estudo de caso de fenômeno físico de recarga de aquíferos.

3.1 Resultados do MOPSO na Calibração Multiobjetiva

O algoritmo MOPSO foi empregado duas vezes de forma independente com a seguinte configuração, utilizando o jargão do algoritmo: 10 enxames com 10 viagens cada ($2 \times 10 \times 10$). A fronteira de Pareto obtida consistia de várias soluções com valores das funções objetivo muito similares, de forma que, do ponto de vista prático, o algoritmo encontrou apenas uma solução, apresentada na Tabela 2.

Tabela 2. Comparação de valores dos parâmetros observados contra os valores de parâmetros simulados obtidos pelo MOPSO

	n	α cm^{-1}	K_{sat} (cm h^{-1})	θ_{sat} $(\text{cm}^3 \text{cm}^{-3})$	θ_{res} $(\text{cm}^3 \text{cm}^{-3})$
Valores do experimento de Vauclin <i>et al.</i> (1979)	-	-	35,00	0,30	0,00
Valores simulados pelo MOPSO	2,0987	0,1869	39,9842	0,3089	0,1593

A Figura 8 apresenta o avanço do lençol freático obtido pelo modelo, com os parâmetros ajustados pelo MOPSO, nos diferentes momentos (duas, três, quatro e oito horas) onde há informação disponível sobre o potencial mátrico nos pontos de controle, chamados de T1, T2 ... T15. Os potenciais dos quinze pontos de controle observados (O) e simulados (S) são identificados na figura para fins de comparação. Essa figura apresenta em detalhe os dois primeiros pontos de controle para potenciais observados (T1-O, T2-O) e os outros dois potenciais simulados (T1-S, T2-S) correspondentes a duas horas de infiltração. Os potenciais simulados em duas horas sobre-estimam os potenciais observados. Ressalta-se a pouquíssima diferença que existe entre o potencial simulado obtido sob interpolação em elemento finito e o lençol freático representado em linha intermitente obtido a partir dos nós de malha do MEF (Método dos Elementos Finitos), o que garante a eficiência da simulação em todo o domínio do fenômeno físico. Destaca-se

também que para um tempo de 3 horas de infiltração os pontos observados e simulados em T4 praticamente se sobrepõem, excetuando-se os pontos observado e simulado em T3 e T5 onde existe uma diferença de aproximada de 6 cm em valor absoluto. Contudo, o lençol freático simulado acompanhou os pontos simulados com alguma deficiência em T3, atribuindo-se essa deficiência aos motivos de interpolação dentro do modelo matemático e para tanto deficiência na simulação do fenômeno físico. Para quatro horas de infiltração apresenta-se nos pontos de controle T6 e T7 uma diferença de 6 cm entre observados contra simulados, mas o T8 e T9 aparecem melhor ajustados para os valores observados e simulados de potencial. Adicionalmente, nota-se que o lençol freático simulado acompanha bem os pontos simulados exceto para o ponto T6 indicando a dificuldade do modelo para simular os pontos próximos ao patamar do lençol. Essa carestia do modelo pode ser corroborada em oito horas de infiltração onde o lençol freático simulado ficou acima dos pontos simulados, obtendo-se uma diferença de 15 cm entre o patamar do lençol freático contra o ponto simulado T10-S.

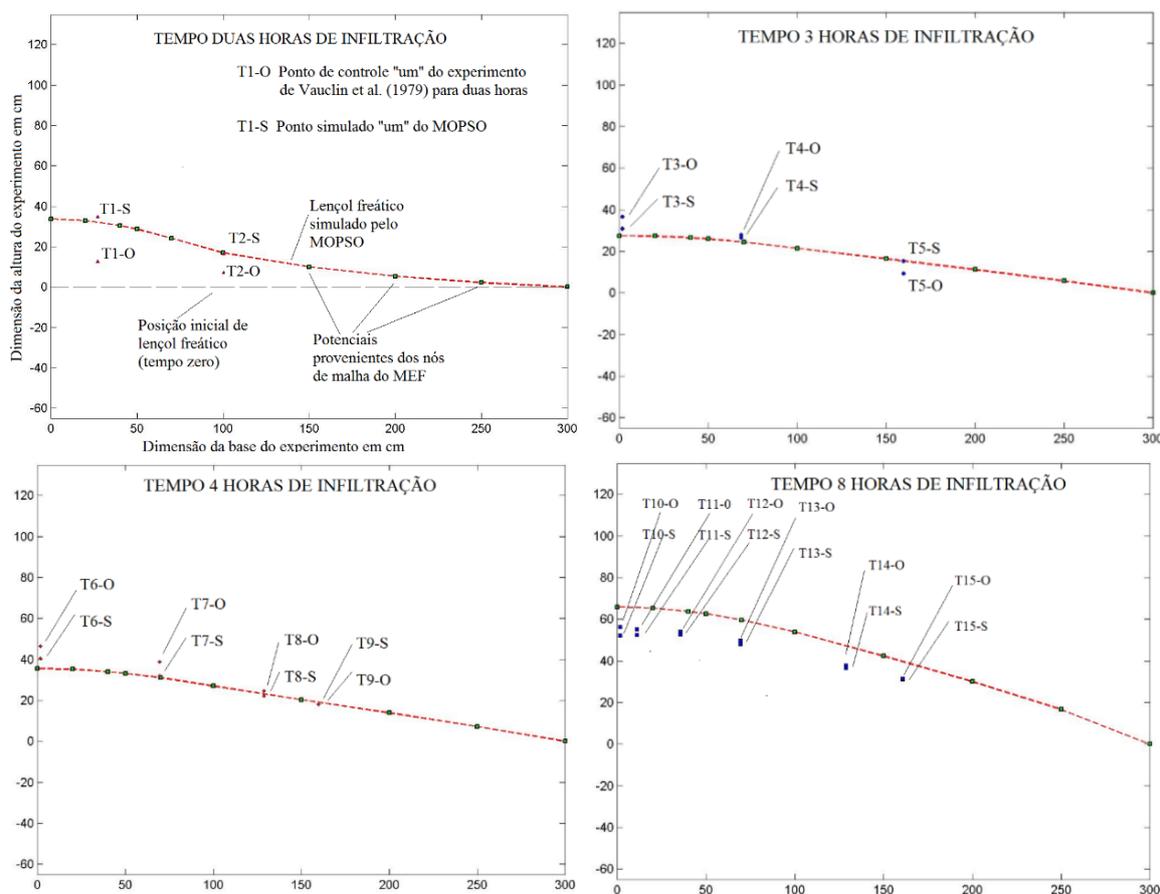


Figura 8. Avanço do lençol freático simulado pelo MOPSO em linhas intermitentes em duas, três, quatro e oito horas, respectivamente. Também se apresenta em pontos denotados como T1, T2, ..., T15 os potenciais observados e simulados

A Figura 9 ilustra a comparação de curvas de vazões subsuperficiais observadas contra os simulados em cada hora, encontrando-se razoavelmente ajustadas. Adicionalmente, destaca-se dessa figura que a curva dos volumes de água subsuperficial acumulados simulados pelo MOPSO ficou acima da curva dos dados observados, mas atingiu uma pequena diferença de 0,4 litros no final de 8 horas.

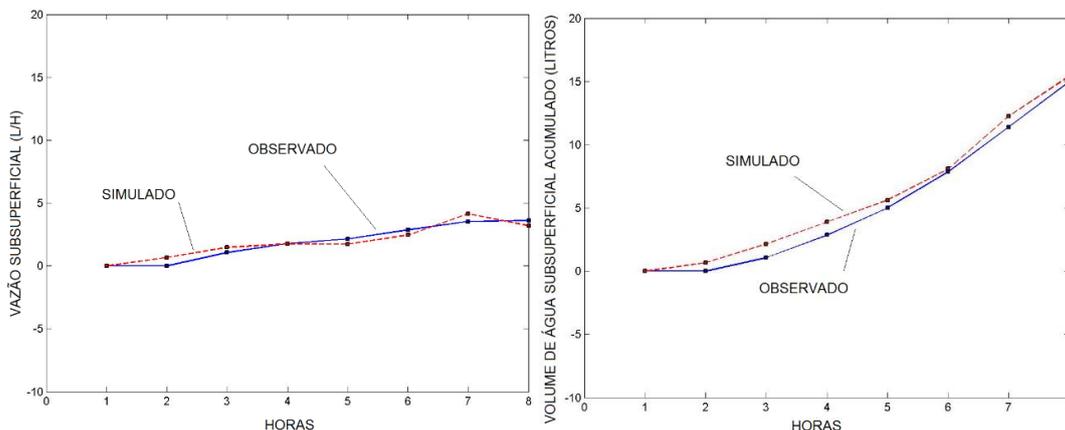


Figura 9. Comparação de vazões subsuperficiais (em litros/hora) ao longo do tempo entre simuladas pelo MOPSO contra os observados, também se apresenta a comparação de volume de água subsuperficial acumulado (em litros) entre simulados contra os observados

3.2 Resultados do NSGA II

A aplicação do algoritmo NSGA II se deu com duas baterias 1x10x1 e 1x10x10. A fronteira de Pareto obtida continha mais soluções do que aquela obtida pelo algoritmo MOPSO, entretanto, a qualidade das soluções encontradas foi inferior ou igual às obtidas pelo MOPSO. Por exemplo, a melhor solução do NSGA II em termos de potencial matricial possui um índice de desempenho igual a 0,72%, enquanto que a do MOPSO atingiu o valor de 1,5%. Em relação às vazões superficiais, os resultados obtidos pelos dois algoritmos foram similares. Além disso, o tempo computacional exigido pelo NSGA II para obter as respostas foi de 37 horas, enquanto o exigido pelo MOPSO foi de 14 horas.

A Tabela 3 compara os valores de parâmetros de modelo em escala real observados de Vauclin et al. (1979) contra os valores de parâmetros simulados pelo NSGA II. As respostas simuladas encontram-se deficientes, com exceção da umidade residual.

Tabela 3. Comparação de valores de parâmetros de modelo em escala real observados contra os simulados pelo NSGA II.

	n	α cm^{-1}	K_{sat} (cm h^{-1})	θ_{sat} $(\text{cm}^3 \text{cm}^{-3})$	θ_{res} $(\text{cm}^3 \text{cm}^{-3})$
Valores do experimento de Vauclin <i>et al.</i> (1979)	-	-	35,00	0,30	0,00

Valores de parâmetros simulados pelo NSGA II.	4,3916	0,1651	103,6437	0,4932	0,0003
---	--------	--------	----------	--------	--------

A Figura 10 apresenta as mudanças do lençol freático em tempos de 1h até 8h, esses lençóis freáticos simulados mostram grande diferença em relação aos pontos de controle simulados e observados, devendo-se à pobre simulação do fenômeno físico e possivelmente precisando de maior quantidade de iterações. Em duas horas a simulação fica sem mudança de lençol freático simulado, em 3 horas o lençol freático simulado fica embaixo dos pontos simulados, em 4 horas o lençol freático só consegue atingir dois pontos simulados T8-S e T9-S, ficando embaixo dos restantes pontos simulados. Finalmente, para 8 horas observa-se que os pontos simulados ficaram afastados dos pontos observados e o lençol freático ficou embaixo dos pontos simulados com exceção de T14-S e T15-S.

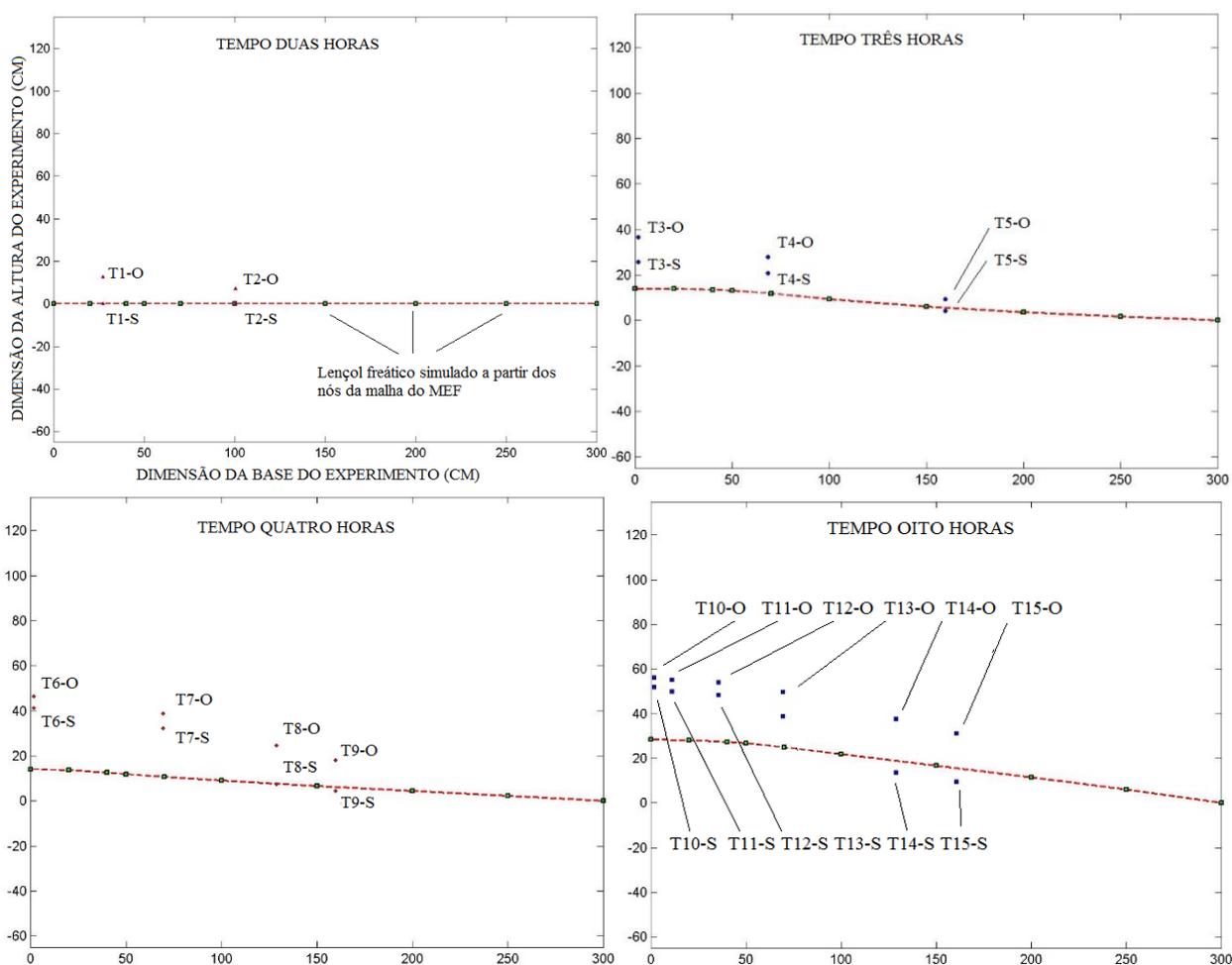


Figura 10. Mudanças do lençol freático simulados pelo NSGA II em relação ao tempo, mostrando também os pontos de controle observados e simulados

A Figura 11 ilustra a comparação em forma de curvas entre a melhor resposta simulada contra os dados observados, apresentando leve diferença a partir de cinco horas. Adicionalmente, essa figura apresenta em curvas a comparação dos volumes de água subsuperficial acumulado entre os simulados contra os dados observados, notando-se que as curvas se ajustam razoavelmente até cinco horas, atingindo ao final de oito horas uma diferença de 2,0 litros. Conclui-se que o ajuste atingido pelo NSGAII se apresenta razoável, refletindo-se no melhor índice de desempenho de 0,8913 (89,13%).

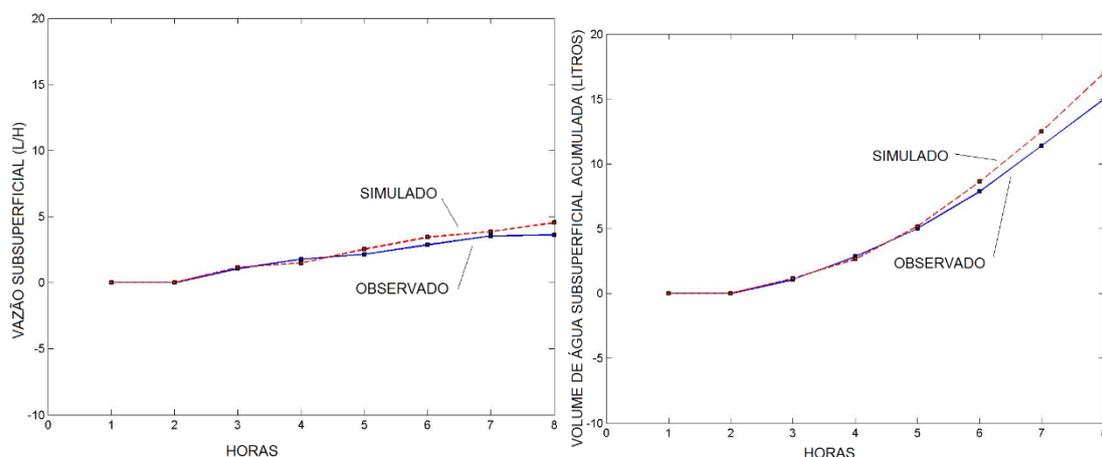


Figura 11. Comparação em forma de curvas de vazões subsuperficiais, da curva de vazão subsuperficial correspondente à melhor resposta e a curva de volume de água subsuperficial acumulada entre o simulado pelo NSGA II contra os dados observados

3.3 Resultados do PADDs

O algoritmo PADDs foi empregado em uma bateria de teste de duas rodadas, iterações locais da função objetivo de dez e uma quantidade global total de iterações de dez (segundo linguagem do PADDs) (2x10x10). A fronteira de Pareto obtida com o algoritmo PADDs continha poucas soluções, assim como aconteceu com o MOPSO e NSGA II. E as poucas soluções obtidas apresentaram valores de função objetivo muito similares, levando à conclusão, mais uma vez, que do ponto de vista prático, encontrou-se apenas uma solução.

A solução obtida pelo PADDs representou melhor o potencial matricial em termos de Índice de desempenho - ID (ID = 1.06 %) do que a melhor obtida pelo NSGA II (ID = 0.70%), porém inferior à solução encontrada pelo MOPSO (ID = 1.35%). Entretanto, se o foco for nas vazões superficiais geradas, a solução obtida pelo PADDs foi a de pior desempenho, ID = 76%, contra ID = 89% obtida pelo NSGA II e ID = 90% do MOPSO. A demanda do

tempo computacional foi de aproximadamente 55 horas, superior ao tempo exigido pelos outros dois algoritmos.

A Tabela 4 apresenta a comparação dos valores de parâmetros em escala real da melhor resposta do PADDs contra os valores de parâmetros obtidos experimentalmente por Vauclin et al. (1979). Deduz-se que a condutividade hidráulica simulada ficou sobrestimado em aproximadamente 40%, a umidade saturada simulada foi razoável e a umidade residual também se mostrou razoável.

Tabela 4. Comparação de valores de parâmetros do modelo obtidos pelo PADDs contra os valores experimentais de Vauclin *et al.* (1979)

	n	α cm ⁻¹	K_{sat} (cm h ⁻¹)	θ_{sat} (cm ³)	θ_{res} (cm ³ cm ⁻³)
Valores do experimento de Vauclin et al. (1979)	-	-	35,00	0,30	0,00
Valores de parâmetros obtidos pelo PADDs	3,2217	0,0376	49,8665	0,2880	0,0699

A Figura 12 apresenta as mudanças do lençol freático ao longo do tempo mostrando os pontos de controle simulados e observados, onde as notações T1, T2...T15, já foram definidas. O lençol freático simulado para duas horas acompanha os pontos simulados (T1S, T2S), que na sua vez, esses pontos encontram-se levemente acima dos pontos de controle observados (T1O, T2O). O lençol freático simulado em 3 horas acompanha bem os pontos simulados (T3S, T4S, T5S), sendo que os pontos observados (T3O, T4O, T5O) foram razoavelmente ajustados. Já para 4 horas o ajuste de lençol freático apresenta deficiência para o ponto simulado T6S, também, observa-se que começa a existir maior diferença entre os pontos simulados e observados T6S contra T6O e T7S contra T7O, já os outros pontos simulados e observados em T8 e T9 encontram-se razoavelmente ajustados. Para oito horas existe apreciável diferença para os pontos observados e simulados em T10, T11, T12, 13, T14, T15, respectivamente, refletindo-se o deficiente ajuste para oito horas da simulação de lençol freático que ficou embaixo dos pontos simulados com exceção de T14S e T15S. Conclui-se que, em geral, os pontos de controle foram razoavelmente ajustados com o uso do melhor índice de desempenho do potencial matricial, refletindo-se em uma melhor simulação do lençol freático.

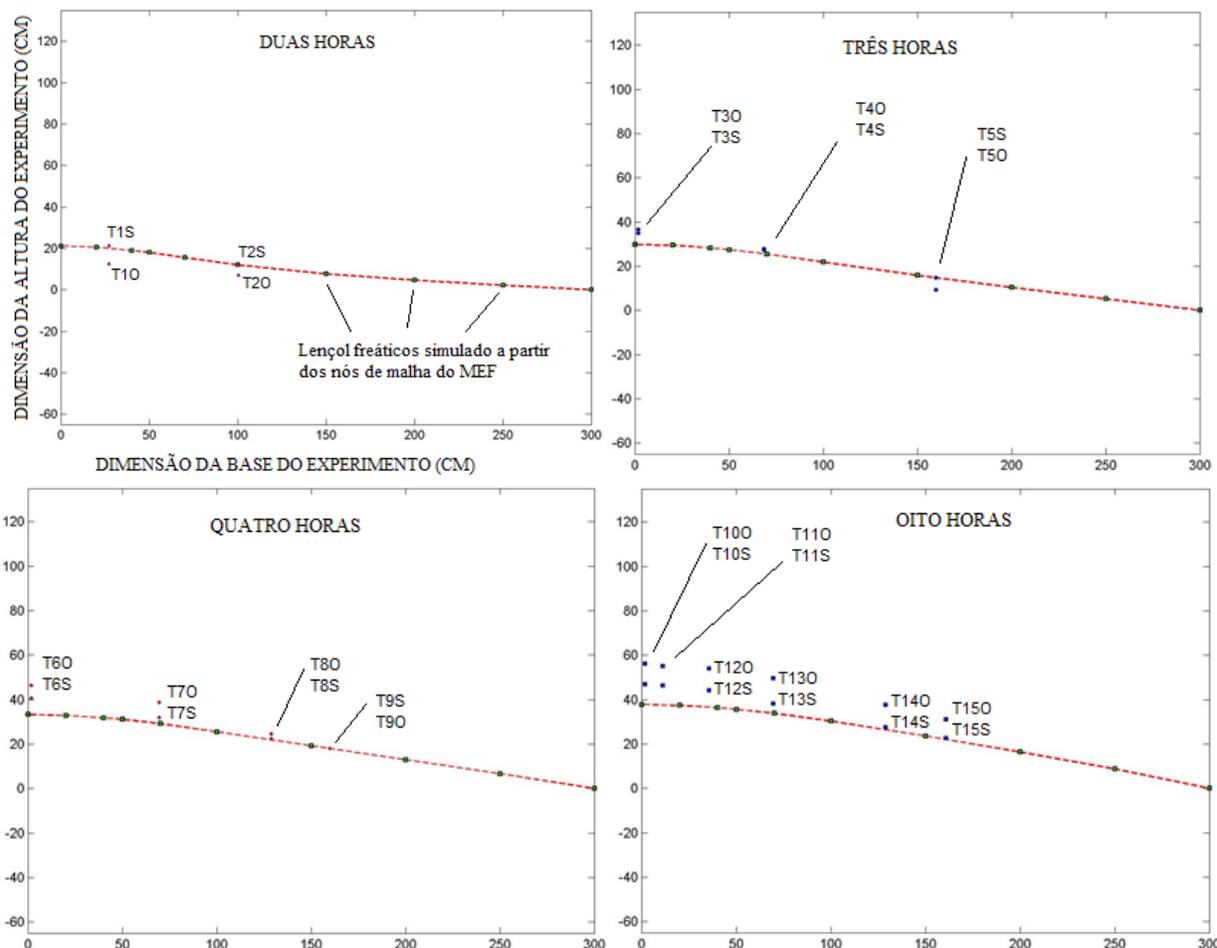


Figura 12. Mudanças do lençol freático ao longo do tempo, mostrando os pontos de controle simulados e observados para 2, 3, 4 e 8 horas, respectivamente

A Figura 13 expõe a comparação da melhor solução do PADDs da segunda rodada de vazões subsuperficiais contra as vazões subsuperficiais observadas, ressaltando-se que, inicialmente, para uma hora do fenômeno físico, a vazão subsuperficial simulada (0,0011 litros/hora) praticamente não se diferencia da vazão subsuperficial observada (zero), mas já para duas horas, aprecia-se uma maior diferença de $0,737 \text{ lh}^{-1}$ para o simulado contra $0,0019 \text{ lh}^{-1}$ para o observado. Contudo, essas diferenças se revertem a partir de 6 horas em que o simulado ($2,5404 \text{ lh}^{-1}$) fica menor do valor observado ($2,6183 \text{ lh}^{-1}$), continuando nessa mesma tendência até completar as 8 horas. Essa Figura 12 também apresenta o volume de água subsuperficial acumulada contra o tempo, observando-se que a curva de volume de água subsuperficial simulada aparece acima da curva de água subsuperficial observado, até em uma diferença de 2 litros para cinco horas, no entanto, ao final de oito horas o volume de água subsuperficial acumulado simulado foi quase igual ao observado.

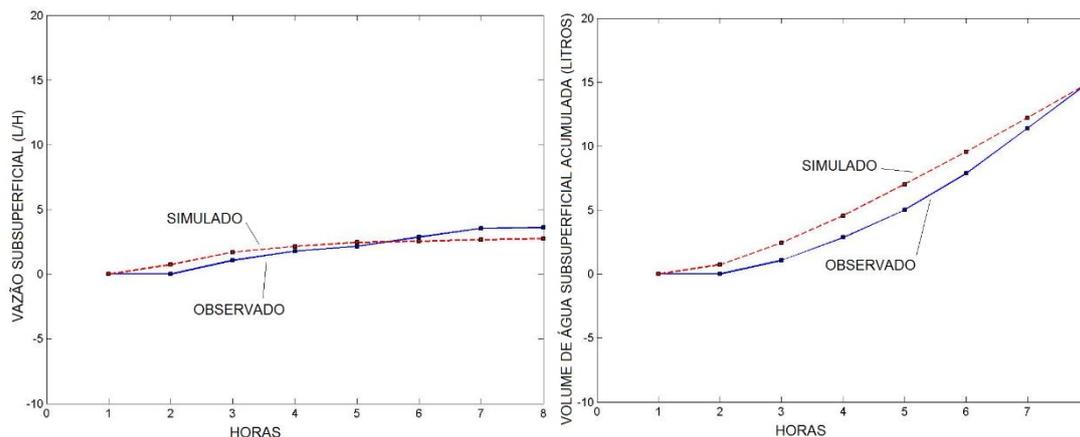


Figura 13. Gráfico de vazão subsuperficial escolhida como resposta simulado pelo PADDs observado e simulado contra o tempo. Mostra-se também a comparação de volume de água subsuperficial acumulado observado e simulado contra o tempo

4. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Os resultados apresentados esclarecem sobre a factibilidade de calibração de fluxo de água em solo não saturado, no entanto, permanece a incerteza de determinação das propriedades hidráulicas no meio insaturado, uma alternativa de abordagem desse enfoque seria o aumento do poder computacional.

Este estudo mostrou a importância da utilização dos três Algoritmos de Otimização Multiobjetivo – AOM (MOPSO, NSGAI e PADDs) atingindo resultados razoáveis no objetivo de calibração automática no meio não saturado.

Os resultados atingidos demonstram que utilizar uma escala menor em laboratório de experimento oferece um melhor controle das medições obtidas de potencial matricial e umidade volumétrica, pois foi obtida a simulação temporal de lenções freáticos.

Entre as funções objetivo (FO) utilizadas na calibração automática, a FO que ajusta os dados observados de fluxo subsuperficial apresentou melhores valores de Índice de desempenho em relação à outra FO que ajusta os potenciais matriciais, indicando uma maior confiabilidade ou menor perturbação dos dados coletados de vazão subsuperficial.

De fato, os lençóis freáticos foram dificilmente simulados tanto temporalmente como espacialmente, provavelmente devido às limitações da discretização espacial do domínio físico forçando à interpolação de potenciais matriciais através dos nós da malha do Método dos Elementos Finitos, isto é, sugere-se a utilização de outros tipos de elementos finitos.

Os três AOM encontraram grande dificuldade de obter quantidade de respostas para estabelecer a fronteira de Pareto, o que indica novamente a necessidade de maior poder computacional.

Dos três AOMs utilizados o MOPSO apresentou melhores valores de índice de desempenho utilizando um menor tempo computacional.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem ao professor Bryan A. Tolson, da Universidade de Waterloo, no Canadá, pela gentileza em fornecer os códigos computacionais do algoritmo PADDs.

REFERÊNCIAS

AGHAJANI, G. e GHADIMI, N. **Multi-objective Energy Management in a Micro-grid**. In: Energy Reports, v. 4, p. 218-225, 2018.

ALVAREZ-BENITEZ, J. E.; EVERSON, R. M.; FIELDSEND, J. E. **A MOPSO algorithm based exclusively on Pareto dominance concepts**. In: Proceedings of Third International Conference on Evolutionary Multi-Criterion Optimization, EMO 2005, Guanajuato, Mexico, p. 459-473, March 9 – 11, 2005.

ARGYROKASTRITIS, I; KARGAS, G; KERKIDES, P. **Simulation of Soil Moisture Profiles using K (h) from Coupling Experimental Retention Curves and One-Step Outflow Data**. In: Water Resources Manage, v. 23, n. 15, p. 3255-3266, 2009. DOI 10.1007/s11269-009-9423-3.

ASADZADEH, M.; TOLSON B. A. **Pareto archived dynamically dimensioned search with hypervolume-based selection for multi-objective optimization**. Journal Engineering Optimization, v. 45, n. 12, p. 1489-1509, 2013. <http://dx.doi.org/10.1080/0305215X.2012.748046>.

CHUANG-BING, Z; WU L.; YI-FENG, CH.; RAN, H.; KAI, W. **Inverse Modeling of Leakage through a Rockfill Dam Foundation during its Construction Stage using Transient Flow Model, Neural Network and Genetic Algorithm**. In: Engineering Geology, v. 187, p. 183-195, 2015.

COELLO COELLO, C. A.; LECHUGA, M. S. **MOPSO: a proposal for multiple objective particle swarm optimization**. In: Evolutionary Computation, 2002. CEC '02. Proceedings of the 2002 Congress on, v. 2, p. 1051-1056.

DEB, K. **Multi-objective Genetic Algorithms: Problem Difficulties and Construction of Test Problems**. Journal Evolutionary Computation, v. 7, n. 3, p. 205-230, MIT press Massachusetts, USA, 1999. doi:10.1162/evco.1999.7.3. 205.

DING, S.; CHEN, C.; XIN, B.; PARDALOS, P. **A Bi-objective load balancing model in a distributed simulation system using NSGA-II and MOPSO approaches**. In: Applied Soft Computing, v. 63, p. 249-267, 2018.

ESFE, MH.; HAJMOBAMMAD, MH.; WONGWISES, S. **Pareto Optimal Design of Thermal Conductivity and Viscosity of NDCo2O4 Nanofluids by MOPSO and NSGA II using Response Surface Methodology.** Journal Current Nanoscience, v.14, n 1, 2018.

FULLHART, A.; KELLENNERS, T.; CHANDLER, D.; McNAMARA, J.; SEYFRIED, M. **Water Flow Modeling with Dry Bulk Density Optimization to Determine Hydraulic Properties in Mountain Soils.** Soil Science Society of America Journal – Soil Physics & Hydrology, v.82, n.1, p.31-44, 2017.

GUANG-YU, Z.; LI-JUN, H.; XUE-WEI, J.; WEI-BO, Z. **A fitness assignment strategy based on the grey and entropy parallel analysis and its application to MOEA.** European Journal of Operational Research, v. 265, n. 3, p. 813-828, 2018.

HOLLAND, J. H. **Adaptation in Natural and Artificial Systems: An Introductory Analysis with Applications to Biology, Control and Artificial Intelligence.** MIT Press Cambridge, MA, USA 1992.

KENNEDY, J.; EBERHART, R. **Particle Swarm Optimization.** In: Proceedings of IEEE International Conference on Neural Networks, Piscataway, NJ, p. 1942-1948, 1995.

MATTOT, L. S.; TOLSON, B. A.; ASADZADEH, M. **A benchmarking framework for simulation-based optimization of environmental models.** Journal Environmental Modelling and Software, v. 35, p. 19-30, 2012.

NASH, J. E.; SUTCLIFFE, J. V. **River flow forecasting through conceptual models. Part 1: A discussion of principles.** Journal of Hydrology, v. 10, n. 3, p. 282-290, 1970

RAZAVI, S.; TOLSON, B. A.; BURN, D. H. **Numerical assessment of metamodelling strategies in computationally intensive optimization.** Journal Environmental Modelling & Software, v. 34, p. 67-86, 2012.

RAO, R. V.; WAGHMARE, G. G. **A comparative study of a teaching-learning-based optimization algorithm on multi-objective unconstrained and constrained functions.** Journal of King Saud University – Computer and Information Sciences, v. 26, n. 3, p. 332-346, 2014. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jksuci.2013.12.004>.

RICHARDS, L. A. **Capillary conduction of liquids in porous mediums.** Journal of Applied Physics, v. 1, n. 5, p. 318-333, 1931. Published Online: December 2004. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1745010>.

RUJNER H., LEONHARDT G., MARSALEK J., VIKLANDER M. **High-resolution modelling of the grass swale response to runoff inflows with Mike SHE.** Journal of Hydrology, v. 562, p. 411-422, 2018.

SRINIVAS, N.; DEB, K. **Multiobjective optimization using nondominated sorting in genetic algorithms.** Journal Evolutionary Computation, v. 2, n. 3, p. 221-248, MIT Press Cambridge, MA, USA, 1994.

TOLSON, B. A.; SHOEMAKER, C. A. **Dynamically dimensioned search algorithm for computationally efficient watershed model calibration.** Water Resources Research, v. 43, n. 1, p. 16, 2007. doi: 10.1029/2005WR004723.

VAEZINEJAD, S. M.; MARANDI, S. M.; SALAJEGHEH, E. **Inverse Modeling of Leakage through Earth Dams.** In: Geotechnical Research, ICE Publishing, 2018.

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

VAUCLIN, M.; KHANJI, D.; VACHAUD, G. **Experimental and numerical study of a transient, two-dimensional unsaturated-saturated water table recharge problem.** Water Resources Research, v. 15, n. 5, p. 1089-1101, 1979. doi: 10.1029/WR015i005p01089.

VITALI G., IOTTI M., ZAMBONELLI A. **In-situ Soil Parametrization from Multi-layer Moisture Data.** In: Geophysics, SciRate, <http://arxiv.org/abs/1805.06480>, 2018.

WÖHLING, T., VRUGT, J., BARKLE, G. **Comparison of Three Multiobjective Optimization Algorithms for Inverse Modeling of Vadose Zone Hydraulic Properties.** In: Soil Science Society of America Journal, v. 72, n 2, p. 305-319, 2007.