AJUSTE DE PARÂMETRO EM TESTE DE AQÜÍFERO

SÉRGIO KOIDE *

O ajuste de parâmetros em testes de bombeamento em aqüíferos tem sido tradicionalmente feito através de métodos gráficos. Sugere-se aqui o ajuste de parâmetros pelo método dos mínimos quadrados, utilizando o método de Levenberg-Marquardt, que permite a fácil adaptação do programa para outros casos, mesmo que o usuário tenha apenas noções de programação.

INTRODUÇÃO

A utilização de micro-computadores na determinação de parâmetros de aqüíferos tem se ampliado grandemente, conforme mostrado por CLEARY (1989). No estudo do problema inverso de determinação dos parâmetros de aqüíferos a partir de testes de bombeamento, os estudiosos do problema tem hoje a opção de utilizar programas que automaticamente fornecem curvas-padrão a serem ajustadas aos dados, como alternativa à utilização dos métodos gráficos propostos por Theis, Jacob e outros.

Sugere-se aqui a utilização do método dos mínimos quadrados para a obtenção dos parâmetros T e S do aquífero a partir de dados de bombeamento de um poço. Na forma apresentada, o programa torna-se extremamente simples, com duas partes distintas: um módulo adptável pelo usuário, onde as particularidades do problema podem ser implantadas, e um módulo de ajuste de parâmetros, comum a qualquer problema de gênero.

O estudo de caos particulares de aqüíferos sob as mais variadas condições pode levar a diferentes equações (ver, p.ex.., BEAR, 1979), e mesmo a diferentes números de parâmetros. Assim, em alguns casos, pode ser desejável uma adaptação do problema para o estudo em questão (KOIDE, 1992). A facilidade de adaptação do método de Levenberg-Marquardt (PRESS et al., 1986) a diferentes problemas (e número de parâmetros) tem feito com que este método seja amplamente utilizado no ajuste de equações não-lineares.

ESCOAMENTO NÃO-PERMANENTE PARA UM POÇO EM AQÜÍFERO CONFINADO

Analisando o rebaixamento da carga em um aqüífero confinado, devido ao bombeamento a vazão constante de um poço totalmente penetrante, Theis propos a solução:

$$s(r,t) = \frac{Q}{4p\,T}W(u), \qquad u = \frac{r^2 S}{4Tt} \tag{1}$$

Onde:

$s(r,t)$=rebaixamento a uma distância radial r e um instante t
Q = vazão de bombeamento (constante)
T = transmissibilidade do aqüífero
S = coeficiente de armazenamento
$W(u)$= função do poço

A função do poço pode ser obtida a partir da série infinita:

$$W(u) - \int_{x-u}^{\infty} \frac{e^{-x}}{x} dx \tag{2}$$

COOPER e JACOB (1946) obtiveram uma fórmula simplificada para a equação de $s(r,t)$ acima desprezando do 3º termo em diante, para os casos em que u é suficientemente

* UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL

pequeno (<0, 01):

$$s(r,t) = \frac{Q}{4p\,T}\ln\frac{2{,}25Tt}{r^2S} \qquad (4)$$

Caso não se deseje verificar as hipóteses de Jacob, basta utilizar o método Theis, considerando os demais termos da função $W(u)$. A partir de tabelas de u x $W(u)$ transformadas em curvas em papel log-log, pode-se obter graficamente os valores de S e T sobreposição com a curva s x t, também em papel log-log (ver JOHNSON DIVISION, 1978, BEAR, 1979, TODD, 1980, etc). No desenvolvimento que será feito a seguir, serão utilizados os termos da série (eq. 3) até a potencia 4. A utilização de mais termos, apesar de extremamente simples, não alternaria os resultados obtidos.

A MINIMIZAÇÃO DO QUI-QUADRADO

Seja $y= y(x,a)$ a equação a ser ajustada aos dados experimentais (x_i,y_i), onde a é o vetor de parâmetros da equação $(a_1, a_2,....a_M)$.

Um bom estimador do afastamento da curva em relação aos pontos experimentais é o qui-quadrado:

$$\chi^2(a) = \sum_{i=1}^{N}\left[\frac{y_i - y(x_i,a)}{\sigma_i}\right]^2 \qquad (5)$$

Onde σ_i o desvio padrão de cada par (x_i,y_i). Caso somente uma série de medidas de campo tenha sido feita, não se pode estimar o desvio padrão dos dados, e neste caso uma alternativa é adotar para todo s_i o valor 1, recaindo assim num problema de mínimos quadrados.

O problema então é determinar os valores de $(a_1,a_2,...,a_M)$ que minimizem o qui-quadrado, ou seja, que minimizem o afastamento da curva adotada em relação aos dados de campo.

Fazendo-se a aproximação por série de Taylor para a função do qui-quadrado, e tomando a forma quadrática, temos:

$$\chi^2(a) \approx \chi^2(a_o) + \sum_{i}^{M}\frac{\partial\chi}{\partial a_i}a_i + \frac{1}{2}\sum_{i,j}\frac{\partial^2\chi}{\partial a_i\partial a_j}a_i a_j \qquad (6)$$

Pode-se demonstrar (PRESS et al., 1986) que sucessivas aproximações dos parâmetros a para minimização da função pode ser dada por:

$$a_{n+1} = a_n - constante \times \nabla\chi^2(a_n) \qquad (7)$$

onde $\nabla\chi^2$ é o gradiente do qui-quadrado, cujos termos são dados por:

$$\frac{\partial\chi^2}{\partial a_k} = -2\sum_{i=1}^{N}\frac{[y_i - y(x_i,a)]}{\sigma_i^2}\frac{\partial y(x_i,a)}{\partial a_k} \qquad (8)$$

Na determinação da constante está envolvido a cálculo da matriz Hessiana, cujos termos dependem das primeiras e segundas derivadas da função em relação aos parâmetros. PRESS et al. (1986) observaram que a inclusão das segundas derivadas pode de fato ser um fator de instabilidade se o modelo ajustar-se mal aos pontos, ou se existem pontos fora de curva. Assim, no processo de otimização dos parâmetros só estarão envolvidos os cálculos dos valores da função e de suas primeiras derivadas em relação aos parâmetros, avaliados nos pontos experimentais.

O reduzido número de parâmetros (dois) permitiria que fosse elaborado um programa muito mais eficiente que o apresentado neste trabalho, desenvolvido por PRESS et al. (1986). Porém, o reduzido tempo de processamento necessário para o cálculo dos parâmetros permite que se trabalhe com esta forma menos "eficiente". Como contrapartida, como o programa permite que se tenha um número variável de parâmetros a determinar, isto introduz uma flexibilidade que possibilita o usuário a, com pequenas modificações, resolver diferentes classes de problemas.

O PROGRAMA DE AJUSTE DOS PARÂMETROS *S* E *T*

Para a implementação do algoritmo é necessário que se tenha no programa principal a entrada de dados e a saída dos resultados após a minimização do qui-quadrado, além de uma subrotina onde se calcule o valor da função e de suas derivadas com relação aos parâmetros, em pontos determinados.

Adotou-se para cálculo de rebaixamento a equação (1), com a função $W(u)$ sendo aproximada pela série da equação (2), até o termo de expoente 4. Assim, as derivadas de $s(r,t)$ em relação a S e T são dadas por:

$$\frac{\partial s}{\partial S} = \frac{Q}{4\pi TS}\left(-1 + u - u^2 + \frac{u^3}{6} - \frac{u^4}{24}\right) \qquad (9)$$

$$\frac{\partial s}{\partial T} = \frac{Q}{4\pi T^2}\left(+0{,}5772 + \ln u + 1 - 2u + \frac{3}{4}u^2 - \frac{2}{9}u^3 + \frac{5}{96}u^4\right)$$

Na execução do programa é necessário arbitrar-se os valores iniciais dos parâmetros, que levam então a uma solução local. A "qualidade" da solução pode ser avaliada pelo valor do qui-quadrado (em geral reduzido à soma dos afastamentos aos quadrado). Caso este valor seja grande, há duas possibilidades: o modelo não se ajusta bem aos dados obtidos no campo, ou então os valores iniciais levaram a um ótimo local distante do global. Na segunda hipótese, usualmente de 1 a 3 tentativas com valores iniciais para os parâmetros, dentro do intervalo usual para o tipo de solo, são suficientes para se obter o valor ótimo.

Como exemplo de verificação do programa, os parâmetros *S* e *T* foram ajustados aos dados dos problemas apresentados por TODD (1980) e pela JOHNSON DIVISION (1978). Os valores iniciais e finais dos parâmetros e o valor do x^2 para cada tentativa estão apresentados nas tabelas (1) e (2), e as curvas nas figuras (1) e (2). Em ambos os casos, o ajuste da curva aos dados é muito bom, e foram obtidos os mesmos valores para os parâmetros que nas publicações citadas.

Figura 1

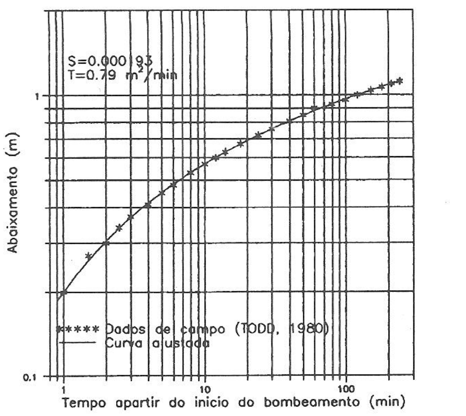
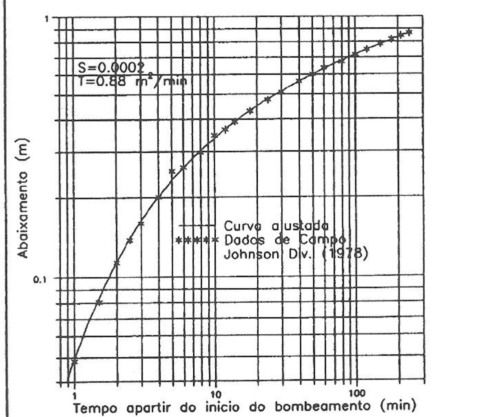


Figura 2



CONCLUSÃO

O problema de ajuste dos parâmetros para o caso discutido é extremamente simples, porém o programa apresentado oferece uma alternativa bastante rápida e pouco sujeita a erros para a determinação de seus valores. Além disso, talvez a característica mais importante para o que se propõe, é o fato de se poder adaptar o programa para diversos casos, sem entrar no mérito do processo de otimização envolvido, tendo assim o usuário que se concentrar apenas na elaboração da rotina de cálculo da função e de suas derivadas com relação aos parâmetros. O programa completo pode ser obtido com o autor.

Tabela 1: Ajuste dos parâmetros S e T para os dados de TODD (1980)

VALORES INICIAIS		VALORES FINAIS		
S	T	S	T	X^2
0,01	0,5	0,000193	0,79	$6{,}8\times10^{-4}$
0,0001	1,0	0,000193	0,79	$6{,}8\times10^{-4}$
0,00001	0,1	0,000193	0,79	$6{,}8\times10^{-4}$

Tabela 2: Ajuste dos parâmetros S e T para os dados de JOHNSON DIV.(1978)

VALORES INICIAIS		VALORES FINAIS		
S	T	S	T	X^2
0,01	0,1	0,016	0,43	$1{,}3\times10^{12}$
0,001	0,1	0,000205	0,88	$6{,}5\times10^{-4}$
0,01	1,0	0,000205	0.88	$6{,}5\times10^{-4}$
0,001	0,01	0,000205	0,88	$6{,}5\times10^{-4}$
0,0001	0,01	0,000205	0,88	$6{,}5\times10^{-4}$

REFERÊNCIAS

BEAR, J. (1979) Hydraulics of Groundwater. McGraw-Hill. New York, 569p.

CLEARY, R. (1989) águas subterrâneas, In: Ramos, F.; Occhipinti, A. G..; Villa Nova, N.A. & Reichardt, K.; Magalhães, P.C.; Engenharia Hidrológica, Coleção ABRH de Recursos Hídricos, Vol.1, Editora da UFRJ, Rio de Janeiro, 404p.

COOPER, H.H.Jr. & JACOB, C.E. (1946) A generalized graphical method for evaluating formation constants and summarizing well field hystory, Trans. Am. Geophys. Un., 27, 526-534.

JOHNSON DIVISION (1978) Águas Subterrâneas e poços tubulares, CETESB, São Paulo, 482p.

KOIDE, S. (1992) Determinação de parâmetros de aqüíferos freáticos a partir de dados de ensaios de bombeamento, (em preparação)

PRESS, W.H.; FLANNERY, B.P.; TEUKOLSKY S.A.; VETTERLING, W.T. (1986) Numerical Recipes, Cambridge University Press, Cambridge, 818p.

TODD, D.K. (1980) Groundwater Hydrology, John Wiley, 2nd. ed., New York, 535p.