
Análise de sensibilidade e estimação de uma fonte de contaminantes no estuário do Rio Macaé

Sensitivity analysis and estimation of a contaminant source in the Macaé River estuary

Radael de Souza Parolin¹, Pedro Paulo Gomes Watts Rodrigues², David Ernesto Marón Domínguez³,

Orestes Llanes Santiago⁴ e Antônio José da Silva Neto⁵

¹ UNIPAMPA - Universidade Federal do Pampa,
Itaqui, Brasil - radaelsp@gmail.com

² Departamento de Engenharia Mecânica e Energia, Instituto Politécnico, UERJ - Universidade do Estado do Rio de Janeiro,
Nova Friburgo, Brasil - pwatts@iprj.uerj.br

³ Centro de Estudios de Matemática para las Ciencias Técnicas, CUJAE - Instituto Superior Politécnico José Antonio Echeverría,
La Habana, Cuba - dmaron@cemat.cujae.edu.cu

⁴ Departamento de Automática y Computación, CUJAE - Instituto Superior Politécnico José Antonio Echeverría,
La Habana, Cuba - orestes@electronica.cujae.edu.cu

⁵ Departamento de Engenharia Mecânica e Energia, Instituto Politécnico, UERJ - Universidade do Estado do Rio de Janeiro,
Nova Friburgo, Brasil - ajsneto@iprj.uerj.br

Recebido: 19/12/13 - Revisado: 07/06/14 - Aceito: 15/09/14

RESUMO

A preservação dos recursos hídricos e seu correto manejo têm sido grandes desafios da atualidade. Uma forma de avaliar a qualidade de um corpo hídrico é através da análise de parâmetros biológicos, físicos e químicos, os quais podem ser convenientemente simulados através de modelos matemáticos e computacionais. Tais ferramentas são bastante úteis, por sua capacidade de geração de cenários que possam embasar, por exemplo, tomadas de decisão. A região de estudo compreendeu o estuário do Rio Macaé, localizado na costa norte do estado do Rio de Janeiro. Com o objetivo de identificar a procedência e magnitude de um hipotético lançamento de poluente nas águas deste estuário, neste trabalho foi implementada a solução do problema de transporte de constituintes e então realizada uma análise de sensibilidade, com o intuito de avaliar a possível identificação da fonte de contaminantes frente ao modelo de transporte. Com os resultados promissores desta análise, foi então aplicado o método estocástico Luus-Jaakola para a estimação da localização da fonte de contaminantes única, pontual e constante. Os estudos permitiram concluir que este método possa ser uma importante ferramenta para a gestão dos recursos hídricos, auxiliando na identificação de possíveis responsáveis por passivos ambientais.

Palavras Chave: Transporte de poluentes. Gestão de recursos hídricos. Análise de sensibilidade. Identificação de fontes de contaminantes.

ABSTRACT

The preservation of water resources and their proper management have been major challenges. One way to evaluate the quality of a water body is through the analysis of biological, physical and chemical parameters, which can be conveniently simulated using mathematical and computational models. Such tools are quite useful for their ability to generate scenarios that may support, for example, decision making. The study area comprised the River Macaé estuary, located on the north coast of the state of Rio de Janeiro. In order to identify the origin and magnitude of a hypothetical release of pollutant into the waters of this estuary, the solution of the constituent transport problem was implemented in this study and then a sensitivity analysis was performed to evaluate the possible identification of a contaminant source. Given the promising results of this analysis, the Luus-Jaakola stochastic method was then applied in order to estimate the location of the single, point and constant source of contaminants. The studies showed that this method can be an important tool for water resources management, helping to identify those that are potentially responsible for environmental liabilities.

Keywords: Pollutant transport. Water management. Sensitivity analysis. Contaminant source identification.

INTRODUÇÃO

Um corpo hídrico pode ser avaliado através da análise de parâmetros biológicos, físicos e químicos. Para a gestão de recursos hídricos, além do diagnóstico, é importante e necessário o monitoramento e a previsão de cenários futuros, abordagem esta, que impõe limitações logísticas e econômicas. Como alternativa, surgem modelos matemáticos e computacionais que permitem prever o comportamento de substâncias nos corpos d'água, tornando-se uma ferramenta útil para a criação de cenários e para a tomada de decisão.

O meio hídrico considerado neste trabalho é um estuário, ambiente este onde rios encontram o mar. A preservação de tais ambientes justifica-se pela grande diversidade biológica existente, devido às características hidrodinâmicas da circulação predominante que, aprisionando nutrientes, algas e outras plantas, estimula a produtividade desses corpos d'água (MIRANDA; CASTRO; KJERFVE, 2002). O estudo de caso é o estuário do Rio Macaé, situado na costa norte do estado do Rio de Janeiro.

O problema proposto consiste na identificação da procedência e magnitude de um hipotético lançamento de poluente diluído nas águas desse estuário. Para tal, é implementada a solução do problema direto, modelado pela equação de transporte integrada na vertical, que descreve o comportamento de um contaminante, envolvendo parâmetros hidrodinâmicos, de dispersão e um termo que representa fontes, no qual está inserida a informação da localização e intensidade da fonte. É então realizada uma análise de sensibilidade para avaliar a possibilidade de identificação da fonte frente ao modelo de transporte. Com os resultados obtidos, o modelo é acoplado a um método de inteligência computacional para a estimação de parâmetros (problema inverso) que possam expressar a localização e intensidade da fonte do poluente considerado. Dessa forma, tem-se por objetivo principal a avaliação do problema de estimação de fontes através da análise de sensibilidade e posterior estimação da fonte considerada.

Quanto à determinação de parâmetros referentes a fontes em modelos de transporte de poluentes seguem alguns trabalhos desenvolvidos. Shen e Kuo (2001) utilizam um modelo de eutrofização bidimensional integrado lateralmente para modelar oito variáveis de estado de qualidade de água. Do modelo, 13 parâmetros são estimados do termo fonte, representando funções que descrevem a taxa de tempo de crescimento de massa por reações bioquímicas e adição externa das variáveis de estado. Revelli e Ridolfi (2005) e Revelli, Ridolfi e Massarotti (2004) estimam uma função pertencente a um termo fonte de um problema de transporte unidimensional de poluentes em canais. O termo fonte é composto por duas funções (uma espacial e outra temporal), sendo calculada a função temporal, dadas as condições de fronteira e concentrações em uma localização determinada. Yang e Hamrick (2005) estimam condições de fronteira aberta em um modelo de transporte tridimensional de salinidade em um estuário. Shen, Jia e Sisson (2006) estimam fontes não pontuais de coliformes fecais em um estuário. Especificamente, quanto à estimação da localização de fontes ou sumidouros em modelos de transporte de poluentes, não foram encontrados trabalhos desenvolvidos na literatura.

A metodologia de problemas inversos vem sendo empregada em modelos de transporte, tais como em trabalhos desenvolvidos por Domínguez e Hernández (2007) que calibram parâmetros de um modelo de transporte unidimensional de contaminantes em canais ou rios, por Lugon Junior, Silva Neto e Rodrigues (2008) que estimam os coeficientes de dispersão longitudinal e transversal de um modelo de transporte bidimensional em um rio, e por Rodrigues et al. (2012, 2013) que estimam parâmetros de dispersão em um modelo de transporte unidimensional.

PROBLEMA DE TRANSPORTE DE CONSTITUINTES

Modelo Matemático e Computacional

O transporte de constituintes pode ser descrito pela equação de advecção-difusão (ANDERSON JR, 1995; PATANKAR, 1980), que, integrada verticalmente, assume que a variação da concentração é desprezível na direção vertical. Assim, a representação bidimensional do transporte de constituintes é expressa por

$$H \frac{\partial C}{\partial t} + H \bar{v} \bar{\nabla} C - \bar{\nabla} (HD \bar{\nabla} C) + HQ = 0 \quad (1)$$

onde:

$C(x, y, t)$ é a concentração do constituinte ($kg \cdot m^{-3}$),

$H(x, y, t)$ é a profundidade total de água (m),

$\bar{v} = (u, v)$ é o vetor velocidade do fluido ($m \cdot s^{-1}$),

$Q(x, y, t)$ é o termo fonte do constituinte ($kg \cdot m^{-3} \cdot s^{-1}$),

x e y são as variáveis independentes horizontais (m),

t é o tempo (s),

D é o coeficiente de dispersão turbulenta ($m^2 \cdot s^{-1}$), dado por

$$D = \begin{bmatrix} D_{xx} & D_{xy} \\ D_{yx} & D_{yy} \end{bmatrix}$$

$\bar{\nabla} = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y} \right)$ é o operador vetorial gradiente (m^{-1}).

As condições de contorno nas fronteiras fluvial e marinha foram impostas de modo a garantir fluxo zero do constituinte modelado nessas fronteiras, sendo dadas pela condição de Neumann, expressa pela Eq. (2). Como condição inicial, considerou-se concentração nula para todo o domínio,

$$\frac{\partial C(x_l, y_l, t)}{\partial \bar{n}} = 0 \quad \text{sendo representada pela Eq. (3),} \quad (2)$$

$$C(x, y, 0) = 0 \quad (3)$$

onde (x_l, y_l) representam as coordenadas nas fronteiras e \bar{n} o vetor normal às mesmas.

O modelo de transporte contém parâmetros de dispersão, os quais na prática podem variar muito, tanto em resultados experimentais realizados em ambientes naturais quanto em estimativas teóricas (DYER, 1997). Sendo assim, os parâmetros adotados foram $D_{xx} = 2m^2 \cdot s^{-1}$, $D_{xy} = D_{yx} = 0m^2 \cdot s^{-1}$, $D_{yy} = 2m^2 \cdot s^{-1}$, valores estimados por Lima et al. (2013) em estudo do mesmo estuário.

Se o estuário for pensado como um corpo receptor que irá receber uma dada carga de poluente, é certo que no período de estio ele irá apresentar uma maior sensibilidade ambiental. Nesse período, o aporte fluvial que chega ao estuário do Macaé pode chegar a valores tão baixos quanto $6m^3 \cdot s^{-1}$ (AMARAL, 2003). Nessas condições, uma pequena amplitude da maré deve garantir eficiente homogeneização vertical da coluna d'água, de modo que o estuário pode ter sua hidrodinâmica modelada pela formulação bidimensional das "Equações de Águas Rasas" (MIRANDA; CASTRO; KJERFVE, 2002; PATANKAR, 1980), que resolvem as variáveis do escoamento assumindo que essas pouco variam na direção vertical (estuário homogêneo verticalmente), expressas por

$$\frac{\partial h_s}{\partial t} + \bar{\nabla}(H\bar{v}) = 0 \quad (4)$$

$$\frac{\partial(\rho H u)}{\partial t} + \bar{\nabla}(\rho u H \bar{v}) - \rho f_c H v + \rho g H \frac{\partial h_s}{\partial x} + \frac{g E_s H^2}{2} \frac{\partial C_s}{\partial x} + \tau_{bx} - \tau_{wx} = 0 \quad (5)$$

$$\frac{\partial(\rho H v)}{\partial t} + \bar{\nabla}(\rho v H \bar{v}) - \rho f_c H u + \rho g H \frac{\partial h_s}{\partial y} + \frac{g E_s H^2}{2} \frac{\partial C_s}{\partial y} + \tau_{by} - \tau_{wy} = 0 \quad (6)$$

onde:

$h_s(x, y, t)$ representa a superfície do nível da água acima do nível médio do mar (m),

$H(x, y, t) = h_s(x, y, t) + Z_b(x, y)$ representa a profundidade total de água (m),

$Z_b(x, y)$ é a profundidade do fundo ou batimetria (m),

ρ é a massa específica do fluido ($kg \cdot m^{-3}$),

f_c é o coeficiente de Coriolis (s^{-1}),

g é a constante de aceleração da gravidade ($9,81m \cdot s^{-2}$),

τ_{bx} e τ_{by} representam as tensões de cisalhamento devido ao atrito com o fundo nas direções x e y , respectivamente,

τ_{wx} e τ_{wy} representam as tensões de cisalhamento devido à força do vento na superfície da água nas direções x e y , respectivamente,

$C_s(x, y, t)$ é a concentração de sal ($kg \cdot m^{-3}$),

$E_s = 0,7142$ é um coeficiente constante adimensional (massa de fluido/massa de sal).

As componentes horizontais de velocidade, tratadas como dados de entrada para o problema direto aqui resolvido, foram obtidas da solução do modelo hidrodinâmico implementado por Lima (2012) utilizando a plataforma MOHID (MOHID,

2002). Esse autor adotou as seguintes condições de contorno no modelo hidrodinâmico:

a) Fronteira fluvial: vazão do rio de $7,8m^3 \cdot s^{-1}$. Condição típica da estação seca para o Rio Macaé (AMARAL, 2003).

b) Fronteira marítima: simulada uma maré astronômica com 17 componentes (FEMAR, 1974 apud LIMA, 2012), com amplitude e fase dadas por Lima (2012).

Esse modelo hidrodinâmico gerou a variação temporal dos campos de velocidades (u e v) e o nível da superfície livre (h_s), dadas pelas Eqs. (4), (5) e (6), para um período de simulação de $24h$, incluindo uma maré de sizígia. Para a discretização espacial foram utilizadas células quadradas de $20m$ de lado, e uma discretização temporal de $20s$.

Discretização e Solução do Problema de Transporte

Para as discretizações do modelo de transporte foi realizada a aplicação do Método de Elementos Finitos (MEF) para a discretização no espaço (DOMÍNGUEZ; HERNÁNDEZ, 2007; ZIENKIEWICZ; TAYLOR, 1994) e do Método de Diferenças Finitas (MDF) para a discretização no tempo (SMITH, 2004). A aplicação do MEF transforma uma equação diferencial parcial em um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDO's) e a aplicação do MDF transforma cada sistema de EDO's em um sistema de equações lineares algébricas (SELA) escrito em termos de vetores e matrizes. O sistema de equações é dado por

$$MC^k = E \quad (7)$$

$$M = \sum_{e=1}^{N_e} H_e^k A_e \left\{ \frac{1}{12\Delta t} K t_3 + \frac{\alpha_e^k h_e^k}{6\Delta t |\bar{v}_e^k|} (u_e^k A_i + v_e^k B_i) + \right.$$

$$\left. \frac{W}{3} (u_e^k A_j + v_e^k B_j) + \right.$$

$$W \left(\frac{\alpha_e^k h_e^k (u_e^k)^2}{2|\bar{v}_e^k|} + D_{xx}^k \right) AA + W \left(\frac{\alpha_e^k h_e^k u_e^k v_e^k}{2|\bar{v}_e^k|} + D_{xy}^k \right) AB +$$

$$W \left(\frac{\alpha_e^k h_e^k u_e^k v_e^k}{2|\bar{v}_e^k|} + D_{yx}^k \right) BA + W \left(\frac{\alpha_e^k h_e^k (v_e^k)^2}{2|\bar{v}_e^k|} + D_{yy}^k \right) BB \left. \right\} -$$

$$\sum_{e=1}^{NL} \left\{ WH_{2e}^k q_e^k \Delta t_e \left(\frac{1}{6} K t_2 + \frac{\alpha_e^k h_e^k u_e^k}{4|\bar{v}_e^k|} A_{i2} + \frac{\alpha_e^k h_e^k v_e^k}{4|\bar{v}_e^k|} B_{i2} \right) \right\} \quad (8)$$

com

$$\begin{aligned}
 E = & \sum_{e=1}^{Ne} H_e^{k-1} A_e \left\{ \frac{H_e^k}{12\Delta t H_e^{k-1}} Kt_3 + \right. \\
 & \frac{\alpha_e^{k-1} h_e^{k-1}}{6\Delta t |\vec{v}_e^{k-1}|} (u_e^{k-1} A_i + v_e^{k-1} B_i) - \frac{(1-W)}{3} (u_e^{k-1} A_j + v_e^{k-1} B_j) - \\
 & (1-W) \left(\frac{\alpha_e^{k-1} h_e^{k-1} (u_e^{k-1})^2}{2|\vec{v}_e^{k-1}|} + D_{xx}^{k-1} \right) AA - \\
 & (1-W) \left(\frac{\alpha_e^{k-1} h_e^{k-1} u_e^{k-1} v_e^{k-1}}{2|\vec{v}_e^{k-1}|} + D_{xy}^{k-1} \right) AB - \\
 & (1-W) \left(\frac{\alpha_e^{k-1} h_e^{k-1} u_e^{k-1} v_e^{k-1}}{2|\vec{v}_e^{k-1}|} + D_{yx}^{k-1} \right) BA - \\
 & (1-W) \left(\frac{\alpha_e^{k-1} h_e^{k-1} (v_e^{k-1})^2}{2|\vec{v}_e^{k-1}|} + D_{yy}^{k-1} \right) BB \left. \right\} C^{k-1} - \\
 & \sum_{e=1}^{Ne} A_e \left\{ \frac{1}{3} (WH_e^k Q_e^k + (1-W)H_e^{k-1} Q_e^{k-1}) K_1 + \right. \\
 & \left(W \frac{\alpha_e^k h_e^k H_e^k Q_e^k u_e^k}{2|\vec{v}_e^k|} + (1-W) \frac{\alpha_e^{k-1} h_e^{k-1} H_e^{k-1} Q_e^{k-1} u_e^{k-1}}{2|\vec{v}_e^{k-1}|} \right) A + \\
 & \left. \left(W \frac{\alpha_e^k h_e^k H_e^k Q_e^k v_e^k}{2|\vec{v}_e^k|} + (1-W) \frac{\alpha_e^{k-1} h_e^{k-1} H_e^{k-1} Q_e^{k-1} v_e^{k-1}}{2|\vec{v}_e^{k-1}|} \right) B \right\} \quad (9)
 \end{aligned}$$

onde:

- k é o iterador temporal,
- e é o iterador dos elementos,
- C^k é o vetor das incógnitas na iteração k ($kg \cdot m^3$),
- Ne é o número total de elementos finitos da discretização da região de estudo,
- C^{k-1} é o vetor das incógnitas na iteração $k-1$ ($kg \cdot m^3$),
- h_e^k e h_e^{k-1} é o comprimento característico do elemento finito e na direção \vec{v}_e (m), nas iterações k e $k-1$ respectivamente,
- α_e^k e α_e^{k-1} é uma constante da formulação de Petrov-Galerkin, nas iterações k e $k-1$ respectivamente,
- A_e é a área do elemento finito (m^2),
- Δt é o incremento no tempo (s),
- W é o parâmetro de peso do MDF no intervalo [0 1],

$$Kt_3 = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix}, \quad A_i = \begin{bmatrix} a_1 & a_1 & a_1 \\ a_2 & a_2 & a_2 \\ a_3 & a_3 & a_3 \end{bmatrix},$$

$$B_i = \begin{bmatrix} b_1 & b_1 & b_1 \\ b_2 & b_2 & b_2 \\ b_3 & b_3 & b_3 \end{bmatrix}, \quad A_j = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \\ a_1 & a_2 & a_3 \\ a_1 & a_2 & a_3 \end{bmatrix},$$

$$AA = \begin{bmatrix} a_1 a_1 & a_1 a_2 & a_1 a_3 \\ a_2 a_1 & a_2 a_2 & a_2 a_3 \\ a_3 a_1 & a_3 a_2 & a_3 a_3 \end{bmatrix}, \quad BA = \begin{bmatrix} b_1 a_1 & b_1 a_2 & b_1 a_3 \\ b_2 a_1 & b_2 a_2 & b_2 a_3 \\ b_3 a_1 & b_3 a_2 & b_3 a_3 \end{bmatrix},$$

$$B_j = \begin{bmatrix} b_1 & b_2 & b_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \end{bmatrix}, \quad AB = \begin{bmatrix} a_1 b_1 & a_1 b_2 & a_1 b_3 \\ a_2 b_1 & a_2 b_2 & a_2 b_3 \\ a_3 b_1 & a_3 b_2 & a_3 b_3 \end{bmatrix},$$

$$BB = \begin{bmatrix} b_1 b_1 & b_1 b_2 & b_1 b_3 \\ b_2 b_1 & b_2 b_2 & b_2 b_3 \\ b_3 b_1 & b_3 b_2 & b_3 b_3 \end{bmatrix},$$

$$K_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad A = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix},$$

$a_1, b_1, c_1, a_2, b_2, c_2, a_3, b_3, c_3$ são os coeficientes das funções base da interpolação linear nos elementos finitos triangulares.

Por fim, o SELA é solucionado utilizando o Método de Gauss-Seidel (MGS) que é convergente considerando que o sistema tem diagonal dominante (CUNHA, 2000).

Domínio de Estudo – Estuário do Rio Macaé

O Rio Macaé atravessa três municípios fluminenses: Nova Friburgo, Casimiro de Abreu e Macaé. Sua bacia caracteriza-se como área com extensa rede de drenagem ($1.765 km^2$), localizada em região úmida, tendo uma população estimada de cerca de 141.000 habitantes. Como as demais grandes bacias do estado do Rio de Janeiro, a do rio Macaé recebe poluição por esgotos domésticos e também por agrotóxicos. Em seu curso inferior, que sofreu obras de retificação e alargamento de calha, apresenta leito arenoso, com margens de pouca sobrelevação com relação ao nível médio das águas. O rio se encontra atualmente dragado e retificado nesse trecho, por cerca de $26 km$, tendo perdido suas curvas e meandros originais, tomando o lugar dos antigos mangues e desaguando direto no Oceano Atlântico. Apesar da cidade de Macaé estar dotada em grande parte de rede coletora, lança, sem tratamento, os esgotos na zona estuarina do Rio Macaé. A largura do rio no limite superior de sua região estuarina fica entre 40 e $50 m$, atingindo cerca de $150 m$ em sua desembocadura. A profundidade média nessa região é de cerca de $2 m$. Já suas vazões típicas de períodos de estio e chuvas são de, respectivamente, $6 m^3 \cdot s^{-1}$ e $45 m^3 \cdot s^{-1}$ (AMARAL, 2003).

O domínio de estudo do estuário do Rio Macaé, situado no município de Macaé, foi definido através de fotos por satélite, estendendo-se por quase $20 km$, desde a cabeceira até a



Figura 1 – Foto por satélite do estuário do Rio Macaé
Fonte: Google Maps, 2012

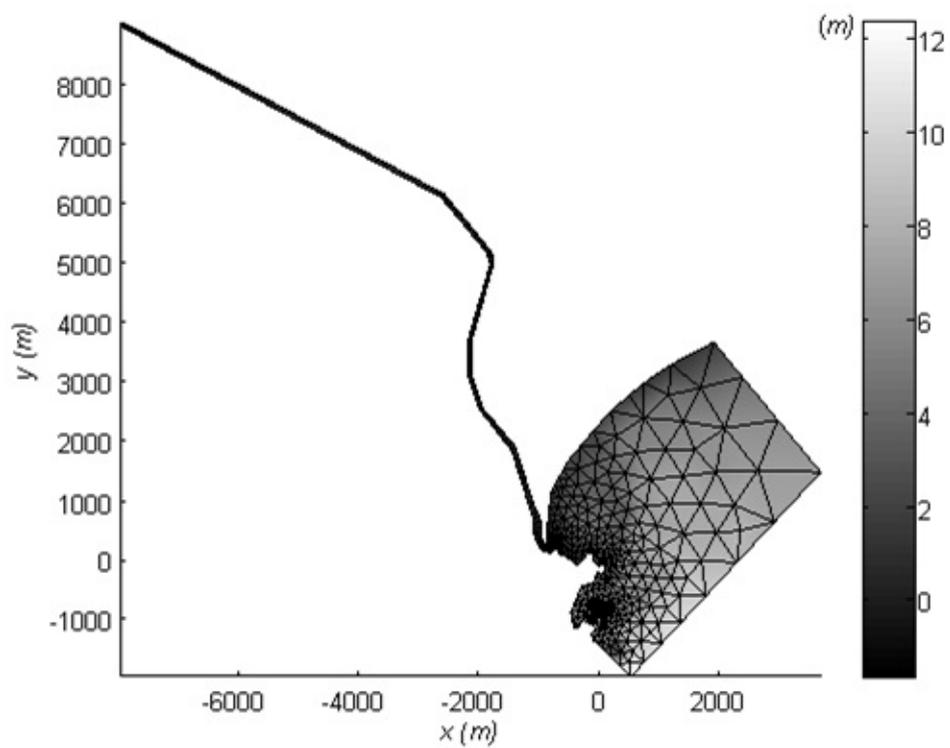


Figura 2 – Geometria e dados de batimetria (m) do estuário do Rio Macaé

costa. Os dados de batimetria (profundidade de acordo com o nível médio do mar) da região da costa foram tomados a partir da carta náutica 1507, editado pela Marinha do Brasil em 1974, enquanto que da região superior foi obtida a partir de Amaral (2003). Devido à existência de poucos dados de batimetria disponíveis da região superior, foram utilizados dados interpolados linearmente. Para a costa, os dados se referenciaram com a batimetria existente mais próxima dos pontos da malha. Vale salientar ainda que esses dados estão defasados, devido às diversas modificações no estuário e nas proximidades, realizadas pela ação humana nas últimas décadas. No entanto, tais dados não interferem na eficiência da metodologia de estimação da fonte.

Na Figura 1 é apresentado um exemplo de foto por satélite utilizado para a definição do domínio de estudo. Na Figura 2 são apresentados a geometria do estuário e os dados de batimetria adotados. A malha espacial é composta por 600 nós com 917 elementos finitos triangulares, definida após um estudo de consistência, estabilidade e convergência do método de discretização.

A correspondência entre os dados do modelo hidrodinâmico e o aqui proposto foi realizada através da aproximação das malhas espacial e temporal. Como o modelo proposto contém elementos de diferentes tamanhos e bem maiores, os dados hidrodinâmicos foram aproximados com os dados existentes mais próximos na geometria do modelo de referência. Da mesma maneira, buscou-se o uso de uma discretização temporal com passo maior e múltiplo da adotada no modelo hidrodinâmico.

De posse das variáveis hidrodinâmicas e já definida a geometria do estuário em estudo, o passo temporal utilizado foi definido de acordo com o método de discretização. Para a aplicação combinada do Método de Elementos Finitos e do Método de Diferenças Finitas na solução do problema de transporte apresentada anteriormente, Zienkiewicz e Taylor (1994) recomendam fazer o número de *Courant* tão próximo da unidade quanto possível para o menor elemento do domínio. Nestas condições, o incremento temporal foi definido como $\Delta t = 1800$ s.

ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS

O problema de transporte de constituintes, representado pela equação de advecção-difusão integrada na vertical (Eq. 1), com as condições de contorno (Eqs. 2 e 3), variáveis hidrodinâmicas e parâmetros adotados é definido como o Problema Direto (PD).

O problema de estimação da fonte de contaminantes foi formulado como um Problema Inverso (PI), onde é assumido conhecer medidas experimentais de concentração e pretende-se estimar a localização e a intensidade de uma fonte, representados por parâmetros do problema de transporte (PD).

Como o número de dados experimentais é usualmente superior ao número de incógnitas, o problema inverso é formulado como um problema de otimização de dimensão finita, onde se procura minimizar a função objetivo, que é o somatório do quadrado dos resíduos entre os valores calculados e os valores

medidos experimentalmente da variável observável,

$$SQR = \{ \vec{G}_{calc}(\vec{P}) - \vec{G}_{med} \}^T \{ \vec{G}_{calc}(\vec{P}) - \vec{G}_{med} \} = \vec{R}^T \vec{R} \quad (10)$$

onde:

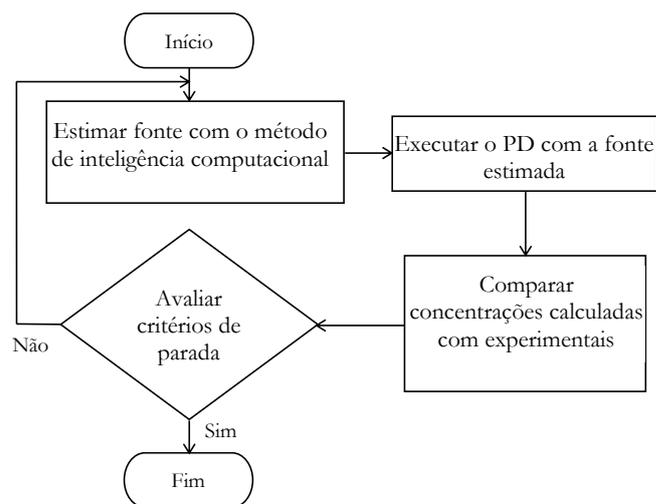
\vec{G}_{med} é o vetor das medidas disponíveis,

\vec{G}_{calc} é o vetor dos valores calculados,

\vec{P} é o vetor de incógnitas,

\vec{R} é o vetor dos resíduos.

O processo iterativo do problema inverso na estimação



da fonte de contaminantes é representado pela Figura 3.

Figura 3 – Fluxograma do Problema Inverso

Neste estudo buscou-se estimar a localização e a intensidade de uma fonte única, pontual e constante. Em meio a este cenário, é importante compreender que a localização da fonte não é apenas um parâmetro do modelo de transporte proposto, mas uma posição pontual (nó) no meio bidimensional discretizado do estuário. Dessa forma, é necessário um tratamento diferenciado de qualquer outro parâmetro de análise, uma vez que o parâmetro de intensidade da fonte ($kg \cdot m^{-3} \cdot s^{-1}$) pode ser sensível à dimensão dos elementos finitos (triângulos) que incluam a localização estimada para a fonte, sem contar o fato de que o nó dessa localização pode, ainda, pertencer a mais do que um elemento.

ANÁLISE DE SENSIBILIDADE DOS PARÂMETROS DA FONTE

Para avaliar a possibilidade de identificação dos parâmetros propostos frente ao modelo de transporte foram analisados coeficientes de sensibilidade modificados, que possuem a mesma unidade de medida da concentração C ($kg \cdot m^{-3}$). Se tais coeficientes são pequenos ou correlacionados um com outro, o problema de estimação é difícil e muito sensível a erros de medida (BECK; BLACKWELL; CLAIR JR, 1985). Os dois coeficientes de sensibilidade utilizados são

$$X_{ip,it}^L = L \frac{\partial C_{ip,it}}{\partial L} \quad \text{e} \quad X_{ip,it}^F = F \frac{\partial C_{ip,it}}{\partial F} \quad (11)$$

onde:

L é a localização da fonte (m),

F é a intensidade da fonte ($kg \cdot m^{-3} \cdot s^{-1}$),

ip compreendem as posições dos dados de amostragem,

$ip = 1, 2, \dots, np$

it compreendem os tempos dos dados de amostragem,

$it = 1, 2, \dots, nt$

Para o coeficiente de sensibilidade da localização foi necessária uma adaptação, por L representar a localização espacial da fonte no estuário. No cálculo da derivada numérica

$$\frac{\partial C}{\partial L} \approx \frac{\Delta C}{\Delta L}$$

ΔL é aproximado pela distância de dois nós da malha espacial, dada em m . Com isso, L deve ter a mesma unidade de medida, sendo assumido um valor $L = 100m$, com referência à escala da geometria do estuário e os menores elementos da malha.

Foram analisadas três possíveis posições de fontes

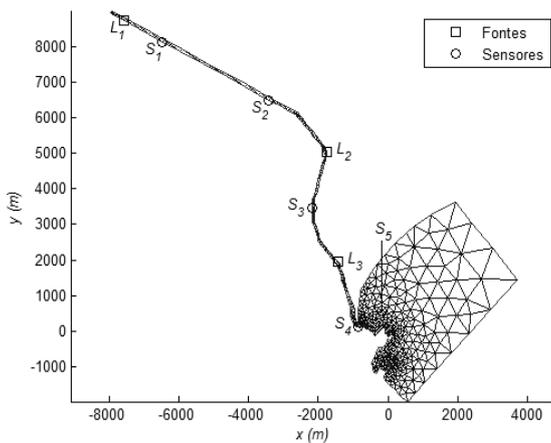


Figura 4 – Localização das fontes e dos sensores de coleta de dados

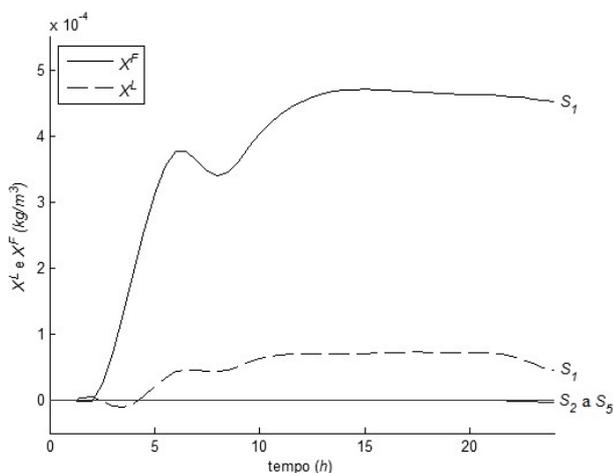


Figura 5 – Coeficientes de sensibilidade para a fonte na posição L_1

(escolhidas aleatoriamente na região fluvial), separadamente, considerando um fluxo de massa de $0,1 kg \cdot s^{-1}$ (o parâmetro de intensidade é calculado de acordo), com cinco possíveis posições de sensores de coleta dos dados de concentração. Na figura 4 são apresentadas as localizações das fontes e dos sensores.

Nas Figuras 5 a 7 são apresentados os coeficientes de sensibilidade para as três fontes propostas em um tempo total de $24h$ ($86400s$).

Para a fonte localizada em L_1 , somente o sensor S_1 apresenta sensibilidade significativa para os dois parâmetros. Para a fonte localizada em L_2 , o sensor S_1 não tem sensibilidade alguma, não captando variação da concentração, o mesmo que ocorre com o sensor S_5 . Já o sensor S_4 apresenta uma leve sensibilidade ao final do tempo considerado, enquanto que os sensores S_2 e S_3 são sensíveis para os dois parâmetros analisados. Para a fonte localizada em L_3 , o sensor S_1 não é sensível, os sensores S_2 e S_5 apresentam leve sensibilidade, enquanto que os sensores S_3 e S_4 têm sensibilidade significativa em ambos os parâmetros.

Como alguns sensores apresentam sensibilidade em localizações distintas da fonte, este aspecto é crucial para defini-los como uma boa localização para a captura de dados de amostragem, já que ao avaliar duas possíveis localizações de

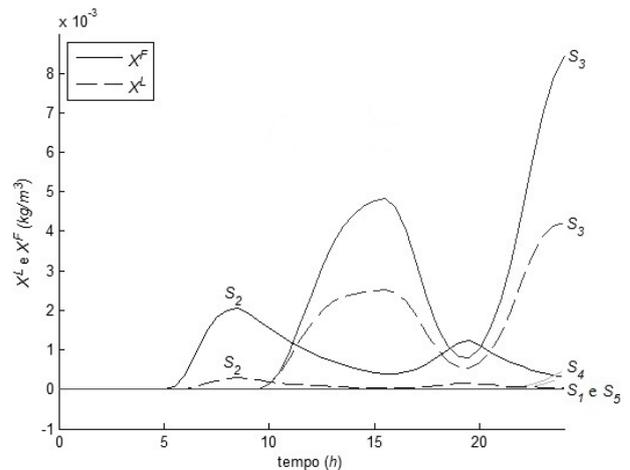


Figura 6 – Coeficientes de sensibilidade para a fonte na posição L_2

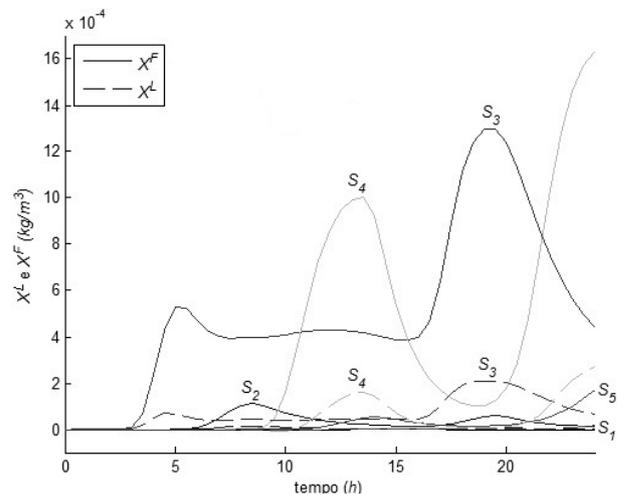


Figura 7 – Coeficientes de sensibilidade para a fonte na posição L_3

fontes, esta distinção torna-se evidenciada.

Para avaliar a correlação linear entre os parâmetros analisados, foi calculado o coeficiente de correlação de Pearson (MANN, 2004) para os coeficientes de sensibilidade não-nulos em cada sensor para cada fonte. Estes coeficientes são apresentados na tabela 1.

Tabela 1 – Coeficientes de Pearson para os coeficientes de sensibilidade das fontes localizadas em L_1 , L_2 e L_3

Fonte/ Sensor	S_1	S_2	S_3	S_4	S_5
L_1	0,9335	0,8531	–	–	–
L_2	–	0,9858	0,9940	0,9997	–
L_3	–	0,9998	0,9766	0,9723	0,9721

Os resultados mostram que a maioria dos coeficientes de Pearson apresentou valores muito próximos da unidade, o que mostra uma correlação linear forte (MANN, 2004) entre os parâmetros de estimação localização e intensidade da fonte.

Devido à correlação linear forte entre os dois parâmetros, o processo de estimação pode ser prejudicado, caso se estime os dois parâmetros simultaneamente. Contudo, podem-se tomar duas perspectivas: estimar primeiramente a localização e depois a intensidade da fonte utilizando-se de tal correlação; ou a cada estimação de uma localização da fonte, estimar sua intensidade para esta localização.

Embora a primeira perspectiva possa parecer mais viável, um único parâmetro de intensidade pode gerar fluxos de massa distintos para localizações diferentes, o que dificulta ao se fixar uma intensidade para estimar primeiro a localização. Sendo assim, a segunda perspectiva torna-se mais interessante, já que a cada localização, o parâmetro de intensidade da fonte ajusta-se especificamente para tal localização, de acordo com os dados de concentração. Nesse caso, durante o processo de estimação da localização, a cada nova localização aplica-se um método para estimar a intensidade.

ESTIMAÇÃO DA FONTE DE CONSTITUIN- TES

Os dados de amostragem aqui considerados são dados sintéticos sem ruído, gerados a partir da solução do problema de transporte (PD), utilizando-se parâmetros conhecidos para a fonte em um período de 24h.

A localização da fonte considerada real é a localização L_2 (Figura 4) com um fluxo de massa de $0,1 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$. Os dados de amostragem são dados de concentração nas localizações S_1, S_2, S_3, S_4, S_5 (Figura 4) para cada hora (1, 2, ..., 24 [h]).

Para a estimação da localização da fonte foi aplicado o método estocástico Luus-Jaakola (LUUS; JAAKOLA, 1973)

e para a estimação da intensidade o método Seção Áurea (BAZARAA; SHERALI; SKETTY, 2006). Os pseudocódigos destes métodos são apresentados nas figuras 8 e 9.

A escolha dos operadores dos métodos foi conduzida empiricamente através de testes. Os operadores do método Luus-Jaakola (LJ) foram definidos como $n^{ext}=20$, $n^{int}=5$ e $\varepsilon=0,3$, com o uso de projeções aos pontos da malha. Para o uso do método Seção Áurea (SA) foi utilizado o intervalo inicial de $[0; 7,7078 \cdot 10^{-5}]$ com o critério de parada $l_j=10^{-5}$ (PAROLIN, 2013).

A resolução do problema inverso obteve 95% de êxito,

```

Definir o número de iterações externas  $n^{ext}$  e internas  $n^{int}$ , a região de busca  $r^{(0)}$  e o fator de contração  $\varepsilon > 0$ .

Gerar a solução inicial  $XN$ 
 $f = \text{Aptidão}(XN) \rightarrow$  função objetivo
 $X = XN$ 
 $X^* = XN$  é a melhor solução

Para  $j = 1$  a  $n^{ext}$  iterações
     $X = X^*$ 
    Para  $i = 1$  a  $n^{int}$  iterações
        Para  $k = 1$  a dimensão do problema
             $XN_k^i = X_k + \text{aleatório}(-0,5; 0,5) \cdot r_k^{(j-1)}$ 
        Fim
        Se  $\text{Aptidão}(XN^i) < f$ 
             $f = \text{Aptidão}(XN^i)$ 
             $X^* = XN^i$ 
        Fim
    Fim
    Para  $k = 1$  a dimensão do problema
         $r_k^{(j)} = (1-\varepsilon) \cdot r_k^{(j-1)}$ 
    Fim
Fim
    
```

Figura 8 – Pseudocódigo para Luus-Jaakola estimando o ponto da fonte e o parâmetro de intensidade preci-

```

Definir o intervalo inicial  $[a_1, b_1]$ , escolher um tamanho final de incerteza  $l_j > 0$  e definir  $\alpha_s = 0,618$ .

 $\lambda_1 = a_1 + (1 - \alpha_s)(b_1 - a_1)$ 
 $\mu_1 = a_1 + \alpha_s(b_1 - a_1)$ 
Avaliar  $\lambda_1 \rightarrow$  função objetivo
Avaliar  $\mu_1 \rightarrow$  função objetivo
 $k = 1$ 

Enquanto  $(b_k - a_k) \geq l_j$ 
    Se  $\text{Aptidão}(\lambda_k) > \text{Aptidão}(\mu_k)$ 
         $a_{k+1} = \lambda_k, b_{k+1} = b_k, \lambda_{k+1} = \mu_k$ 
         $\mu_{k+1} = a_{k+1} + \alpha_s(b_{k+1} - a_{k+1})$ 
        Avaliar  $\mu_{k+1}$ 
    Senão
         $a_{k+1} = a_k, b_{k+1} = \mu_k, \mu_{k+1} = \lambda_k$ 
         $\lambda_{k+1} = a_{k+1} + (1 - \alpha_s)(b_{k+1} - a_{k+1})$ 
        Avaliar  $\lambda_{k+1}$ 
    Fim
     $k = k + 1$ 
Fim
    
```

Figura 9 – Pseudocódigo para Seção Áurea

samente. Os resultados para 20 execuções são apresentados na tabela 2. Embora a execução 2 não tenha sido precisa, o ponto estimado está a uma distância menor do que 100m da localização real da fonte, além do fluxo de massa ser aproximadamente 13,5% maior do real.

CONCLUSÕES

Para a estimação da localização e da intensidade da fonte no problema de transporte proposto ao estuário do Rio Macaé, percebeu-se, através da análise de sensibilidade, que ambos os parâmetros são correlacionados, o que torna o procedimento de estimação difícil através do problema inverso. Devido a isto, optou-se por estimar primeiramente a localização da fonte, e durante este processo, para cada localização em específico, estimou-se o parâmetro de intensidade.

Tabela 2 – Soluções de 20 execuções do método LJ-SA

Execução (Êxito)	Distância da Fonte (m)	Diferença da Fonte ($kg \cdot s^{-1}$)	Tempo (s)
1 (Sim)	0	0	1670
2 (Não)	62,87	0,0135	1959
3 (Sim)	0	0	1558
4 (Sim)	0	0	1605
5 (Sim)	0	0	1372
6 (Sim)	0	0	1870
7 (Sim)	0	0	1559
8 (Sim)	0	0	1750
9 (Sim)	0	0	1683
10 (Sim)	0	0	2047
11 (Sim)	0	0	1760
12 (Sim)	0	0	1425
13 (Sim)	0	0	1816
14 (Sim)	0	0	1802
15 (Sim)	0	0	1104
16 (Sim)	0	0	2208
17 (Sim)	0	0	1528
18 (Sim)	0	0	1384
19 (Sim)	0	0	1441

20 (Sim)	0	0	1620
Média	3,14	$6,75 \cdot 10^{-4}$	1658,05
Des. Pad.	14,06	$3,02 \cdot 10^{-3}$	257,60

Além disso, considerando distintas localizações para a fonte e cinco hipotéticas posições de coleta de dados de amostragem (sensores), percebeu-se que o posicionamento de tais sensores é sensível à localização da fonte. Dessa forma, mesmo que um sensor não seja sensível à real localização da fonte, ao ter sensibilidade a uma outra localização estimada, induz a solução do problema direto a erros no cálculo das concentrações, acarretando, como consequência, na eliminação dessa própria estimativa como solução do problema inverso.

Em aplicações reais, a estimação de fontes através da metodologia do problema inverso, necessita da solução dos problemas de transporte e hidrodinâmico do meio hídrico considerado, e de um estudo preliminar do posicionamento de sensores, por meio da análise de sensibilidade.

O trabalho em questão estimou um tipo de fonte de contaminantes específico, e, portanto, é de interesse, em trabalhos futuros, a ampliação do problema inverso aplicado a outros tipos de fontes. Nesse contexto, é também de suma importância otimizar tanto o número de sensores quanto seus posicionamentos, para realizar a estimação com menor número de dados de concentração.

Por fim, com o êxito obtido na estimação da fonte de contaminantes pontual e constante, a resolução do problema inverso pode ser uma ferramenta útil e de possível aplicação, tanto para compreender o comportamento de substâncias em corpos d'água, quanto na gestão dos recursos hídricos, possibilitando identificar possíveis responsáveis por passivos ambientais.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem o suporte provindo da CAPES, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior, do CNPq, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, e da FAPERJ, Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro.

REFERÊNCIAS

- AMARAL, K. Estuário do Rio Macaé: modelagem computacional como ferramenta para o gerenciamento integrado de recursos hídricos. 2003. 150 f. Dissertação (Mestrado) – COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2003.
- ANDERSON JR., J. D. Computational fluid dynamics: the basics with applications. Singapore: McGraw-Hill, 1995.
- BAZARAA, M.; SHERALI, H. D.; SKETTY, C. M. Nonlinear programming: theory and algorithms. 3rd ed. New Jersey: Wiley

- Interscience, 2006.
- BECK, J. V.; BLACKWELL, B. C.; ST. CLAIR JR., C. R. Inverse heat conduction: III-Posed Problems. New York: Wiley Interscience Publication, 1985.
- CUNHA, M. C. C. Métodos numéricos. Campinas: Editora da UNICAMP, 2000.
- DOMÍNGUEZ, D. E. M.; HERNÁNDEZ, O. R. Un Modelo Numérico del Transporte de Contaminantes en Canales Aplicando el Método de los Elementos Finitos. Ingeniería Hidráulica y Ambiental, v. 28, n. 3, 2007.
- DYER, K. R. Estuaries: a physical introduction. 2nd ed. Chichester: John Wiley, 1997.
- GOOGLE MAPS. Dados cartográficos [homepage na Internet]. Google, 2012. Disponível em: <<http://maps.google.com.br>>. Acesso em: 10 jan. 2012.
- LIMA, E. B. Problemas inversos aplicados à identificação de parâmetros hidrodinâmicos de um modelo do estuário do Rio Macaé. 2012. 103 f. Tese (Doutorado em Modelagem Computacional) – Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2012.
- LIMA, E. B.; RODRIGUES, P. P. G. W.; SILVA NETO, A. J.; LUGON JUNIOR, J.; MESA, M. I.; SANTIAGO, O. L. Ocean modelling for coastal management – Case studies with MOHID. In: COUPLING MOHID with optimization algorithms: perspectives on the development of automatic calibration tools. Lisboa: IST Press, 2013. v. 1, p. 117-130.
- LUGON JUNIOR, J.; SILVA NETO, A. J.; RODRIGUES, P. P. G. W. Assessment of Dispersion Mechanisms in Rivers by Means of an Inverse Problem Approach. Inverse Problems in Science and Engineering, v. 16, n. 8, p. 967-979, Dec. 2008.
- LUUS, R.; JAAKOLA, T. H. I. Optimization by Direct Search and Systematic Reduction of the Size of Search Region. AIChE Journal, v. 19, n. 4, p. 760-766, July 1973.
- MANN, P. S. Introductory statistics. 5th ed. USA: John Wiley, 2004.
- MIRANDA, L. B.; CASTRO, B. M.; KJERFVE, B. Princípios de oceanografia física de estuários. São Paulo: Editora da Universidade de São Paulo, 2002.
- MOHID - Water Modelling System [homepage na Internet]. Lisboa: Instituto Superior Técnico, 2002. [atualizada em 24 de março de 2011]. Disponível em: <<http://www.mohid.com/>>. Acesso em: 15 dez. 2012.
- PAROLIN, R. S. Determinação de uma fonte de contaminantes no estuário do Rio Macaé através da técnica de problemas inversos. 2013. 108 f. Tese (Doutorado em Modelagem Computacional) – Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2013.
- PATANKAR, S. V. Numerical heat transfer and fluid flow. USA: Taylor & Francis, 1980.
- REVELLI, R.; RIDOLFI, L. Nonlinear Convection-Dispersion Models with a Localized Pollutant Source, II – A Class of Inverse Problems. Mathematical and Computer Modelling, v. 42, n. 5-6, p. 601-612, Sept. 2005.
- REVELLI, R.; RIDOLFI, L.; MASSAROTTI, P. Nonlinear Convection-Dispersion Models with a Distributed Pollutant Source I: Direct Initial Boundary Value Problems. Mathematical and Computer Modelling, v. 39, n. 9-10, p. 1023-1034, May 2004.
- RODRIGUES, P. P. G. W.; GONZALEZ, Y. M.; SOUSA, E. P.; MOURA NETO, F. D. Estimativa dos parâmetros de dispersão em rios montanhosos através do algoritmo de Luus-Jaakola. RBRH: revista brasileira de recursos hídricos, v. 17, n. 1, p. 87-95, jan./mar. 2012.
- RODRIGUES, P. P. G. W.; GONZALEZ, Y. M.; SOUSA, E. P.; MOURA NETO, F. D. Evaluation of dispersion parameters for River São Pedro, Brazil, by the Simulated Annealing Method. Inverse Problems in Science and Engineering, v. 21, n. 1, p. 34-51, Jan. 2013.
- SHEN, J.; JIA, J.-J.; SISSON, G. M. Inverse Estimation of Nonpoint Sources of Fecal Coliform for Establishing Allowable Load for Wye River, Maryland. Water Research, v. 40, n. 18, p. 3333-3342, Oct. 2006.
- SHEN, J.; KUO, A. Y. Eutrophication Model Calibration as a Coupled Inverse Problem. In: ESTUARINE AND COASTAL MODELING INTERNATIONAL CONFERENCE, 17., St. Petersburg, 2001. Proceedings... New York: American Society of Civil Engineers, 2002. p. 585-599.
- SMITH, G. F. Numerical solution of partial differential equations: finite difference methods. 3rd ed. New York: Oxford University Press, 2004.
- YANG, Z.; HAMRICK, J. M. Optimal Control of Salinity Boundary Condition in a Tidal Model Using a Variational Inverse Method. Estuarine, Coastal and Shelf Science, v. 62, n. 1-2, p. 13-24, Jan. 2005.
- ZIENKIEWICZ, O. C.; TAYLOR, R. L. El método de los elementos finitos: mecánica de sólidos y fluidos. dinámica y no linealidad. 4. ed. Barcelona: CIMNE, 1994. v. 2.