

MODELAGEM DO TRANSPORTE DE CONTAMINANTES E IDENTIFICAÇÃO DE FONTES COM ESTUDO DE CASO NO BAIXO MACAÉ

Pedro Paulo Gomes Watts Rodrigues (UERJ) · Wagner Rambaldi Telles (UFF)
Radael de Souza Parolin (UNIPAMPA) · Jader Lugon Junior (IFFluminense) · Antônio José da Silva Neto (UERJ)

Introdução

Uma das questões mais relevantes que se apresentam para a sociedade contemporânea é a conservação dos recursos hídricos existentes. O correto manejo desses recursos a cada dia torna-se mais crítico, uma vez que sua escassez e deterioração já afetam parcela significativa da população mundial. Pode-se dizer que virtualmente todo e qualquer corpo de água do planeta está submetido a alguma alteração de suas condições naturais. Nesse contexto, foi elaborada e promulgada a Lei 9433/97, que veio disciplinar os usos das águas no país, instituindo a Política Nacional de Recursos Hídricos e criando o Sistema Nacional de Gerenciamento de Recursos Hídricos. Essa lei veio estabelecer alguns fundamentos, dentre os quais a água ser tida como um recurso finito, de domínio público e valor econômico definido, devendo a sua gestão ter a participação de toda a sociedade. A Lei 9433/97 define, ainda, que a aplicação do quadro normativo hídrico terá como unidade territorial a “bacia hidrográfica”. De fato, o planejamento e gerenciamento de recursos hídricos na escala de bacias se justifica porque há uma “conexão hidráulica” entre os seus usuários¹.

O diagnóstico da qualidade de um corpo hídrico convencionalmente se baseia na análise de alguns parâmetros. No Brasil, as Resoluções CONAMA 01/1986 e 357/2005 estabeleceram níveis de concentração de acordo com os usos aos quais se destina a água. A gestão de recursos hídricos não envolve, entretanto, somente diagnóstico, mas também monitoramento e previsão de cenários futuros. Historicamente, a avaliação do comportamento de constituintes dissolvidos e em suspensão em rios, canais e estuários iniciou-se pelo desenvolvimento de modelos chamados do tipo “caixa-preta”, em que a remoção ou produção do constituinte era avaliada pelo balanço de massa existente entre sua entrada e sua saída em um dado trecho do corpo hídrico. Tal abordagem baseia-se em monitoramento intensivo, com óbvias limitações logísticas e econômicas. Alternativamente, o comportamento de substâncias nesses corpos d’água pode ser estimado por modelos

¹ KELMAN, J. Evolution of Brazil’s Water Resources Management System. In: CANALI, G. V. et al. **Water Resources Management**. Porto Alegre: ABRH, 1999. p. 19–36.

matemáticos e computacionais². Tais modelos possibilitam descrever a hidrodinâmica e o transporte de solutos ou suspensões dentro do corpo hídrico estudado. Idealmente, apresentam-se como as ferramentas mais adequadas de diagnóstico e prognóstico de ambientes aquáticos, pois, uma vez calibrados, diversos cenários podem ser gerados, bastando-se que para isso sejam modificadas algumas das informações impostas ao modelo.

São inúmeras as aplicações da modelagem matemática e computacional na solução de problemas de qualidade de água de rios, canais e estuários, como, por exemplo, o estudo do comportamento de plumas de efluentes industriais nesses corpos. Nesse aspecto, a resolução CONAMA 357/2005 estabeleceu que o melhor entendimento do comportamento e extensão da zona de mistura de efluentes é uma das premissas básicas para a definição dos limites aceitáveis de poluentes em corpos hídricos. Em seu texto, a resolução destaca, ainda, que o critério de diluição de efluentes deve se basear em pesquisas específicas que definam a zona de mistura³.

Neste capítulo são apresentadas duas aplicações de modelos computacionais na previsão e identificação do comportamento de descargas de poluentes, respectivamente, em meio fluvial e estuarino. Os resultados decorrem de pesquisas que vêm sendo conduzidas no Centro de Tecnologia Aplicadas ao Meio Ambiente (CETEMA) e no Laboratório Patrícia Oliva Soares de Experimentação e Simulação Numérica em Transferência de Calor e Massa (LEMA), ambos do Instituto Politécnico Campus Regional da Universidade do Estado do Rio de Janeiro, em Nova Friburgo. Esses laboratórios trabalham em parceria há mais de uma década na construção, calibração e validação de modelos aplicados ao transporte de substâncias em meios hídricos. Essas pesquisas já geraram diversas dissertações de mestrado e teses de doutorado, além de dezenas de publicações em periódicos nacionais e internacionais.

Os casos estudados referem-se a cenários hipotéticos envolvendo o baixo curso do rio Macaé. Qualquer estudo que se desenvolva nesse trecho do rio se reveste de muita importância, pois é aí que se dá a captação de água para abastecimento doméstico e industrial do município de Macaé. Além disso, nas margens do rio, na altura do limite superior de sua região estuarina, está instalada a termoeletrica Mário Lago, o que, potencialmente, pode representar risco de eventuais acidentes e derramamentos nas águas do rio. Por fim, deve-se destacar que boa parte da sede do município de Macaé está assentada no entorno da região estuarina do rio Macaé, sendo que, nesse trecho, o rio recebe o aporte de diversos canais que drenam a região urbana da cidade de Macaé, muitas vezes transportando cargas consideráveis de esgotos domésticos.

Implementação de um modelo de qualidade de água

Nesta seção, são discutidos os principais procedimentos a serem seguidos na implementação de um modelo matemático ou computacional de qualidade de água. Para fins de simplificação e adequação aos estudos de caso aqui apresentados, todo o desenvolvimento se baseia no hipotético lançamento de um poluente em meio fluvial.

² RODRIGUES, P.P.G.W.; LUGON JUNIOR, J.; TAVARES, M.C. Importância de modelos matemáticos em estudos ambientais: estudo de caso: o Rio Macaé. **Boletim do Observatório Ambiental Alberto Ribeiro Lamego**, v. 1, n. 2, p. 115–128, 2007.

³ RODRIGUES, P.P.G.W. et al. 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, 2013.

Definição do domínio

O primeiro passo na construção de um modelo dessa natureza consiste em se delimitar a região do corpo hídrico que será estudada. Embora arbitrário, esse procedimento deve atender às necessidades do estudo para o qual se pretende implementar a simulação. Assim, se o objetivo é avaliar o impacto de um dado lançamento em um rio qualquer, não faz sentido que o curso em toda a sua totalidade seja contemplado na simulação, mas apenas um trecho em que o lançamento efetivamente possa ter alguma consequência. Dessa forma, as margens do curso, bem como uma dada distância a montante e jusante do ponto de lançamento, irão delimitar o espaço físico de interesse. Finalmente, a geometria da região de interesse estará completamente definida se for imposta ao modelo a distribuição espacial das profundidades, entendida como a batimetria do trecho abordado.

Equações governantes

Estabelecido o domínio físico do problema, devem ser definidas as equações matemáticas cuja solução fornecerá a distribuição no espaço e no tempo da concentração do poluente que hipoteticamente está sendo lançado. Considerando que essa descarga se dê de forma instantânea, ou mesmo durante um lapso finito de tempo, ainda que a vazão do rio se mantenha inalterada durante o tempo de simulação, o problema aqui tratado é transiente. Ainda, estritamente falando, ele deve ser considerado nas três dimensões, embora os gradientes das concentrações progressivamente sejam atenuados a partir do ponto de descarga e com o transcorrer do tempo. O modelo matemático que normalmente é utilizado para simular problemas dessa natureza se divide em três grupos de equações que, respectivamente, podem ser denominados como “Equação de Transporte (ET)”, “Equações do Movimento (EMs)” e “Equações de Reação (ERs)”. A solução desse conjunto de equações diferenciais irá, portanto, gerar a simulação do comportamento do poluente que uma vez tenha atingido o meio fluvial. A equação de transporte (ET), como o nome sugere, modela o transporte desse poluente por meio do seguinte balanço de massa

$$\text{Variação no tempo} = \text{difusão} - \text{advecção} \pm \text{reação} \quad (1)$$

Ou seja, a variação da concentração no tempo (lado esquerdo da expressão) resultará do balanço entre três mecanismos de transporte (lado direito da expressão). A difusão, que pode ser meramente molecular ou turbulenta, é impulsionada pelo gradiente de concentração do poluente. Isso significa dizer que, mesmo em águas paradas, um poluente irá ser transportado das regiões em que ocorra em maiores concentrações para aquelas em que esteja em menores concentrações. Já a advecção é um mecanismo conduzido pelo campo de velocidades que prevaleça no meio. No caso de um rio, ela se dará necessariamente de montante para jusante. Por último, a reação contempla todos os processos biogeoquímicos que possam resultar em adição ou subtração do poluente do meio hídrico.

O balanço expresso pela equação 1 (ET) impõe a necessidade de aplicação dos outros dois conjuntos de equações. Para a definição do campo de velocidades do curso, é necessário resolver as equações de movimento (EM), compostas por duas equações diferenciais, cuja solução gera, simultaneamente, o campo de velocidades e a altura da lâmina de água do meio hídrico que está sendo simulado. Essas equações são compostas por termos que modelam as principais forças capazes de controlar o movimento das águas, como o gradiente de pressão, os aportes laterais de água, o arrasto do vento, bem como todos os mecanismos dissipativos, como o atrito nas margens e no fundo do curso.

Finalmente, as reações que interferem na concentração do poluente obedecerão igualmente a diversas formulações matemáticas que compõem as equações de reação (ER), sendo que a escolha do conjunto a ser utilizado dependerá do poluente considerado. Se conservativo, as equações de reação (ER) sequer serão empregadas. Caso contrário, cada um dos processos biogeoquímicos que alteram a concentração do poluente será expresso por uma equação. Exemplificando, para o caso de metais pesados, adsorção, quelação e complexação serão consideradas. No caso de compostos nitrogenados, amonificação, nitrificação e desnitrificação serão contempladas. No caso de materiais em suspensão, tanto a sedimentação como a ressuspensão deverão estar devidamente equacionadas.

Condições de Contorno e Iniciais

438

O problema matemático assim formulado será dito “fechado” se condições de contorno e iniciais forem impostas. No caso específico das simulações aqui descritas, entendem-se como condições de contorno as concentrações definidas para as fronteiras que delimitam o espaço físico do problema. Exemplificando, no caso de um estuário, serão, respectivamente, as concentrações medidas ou impostas na região oceânica adjacente (fronteira marinha) e no limite detectável da intrusão salina no continente (fronteira fluvial), para uma dada condição de maré e vazão fluvial. Ainda, nos locais em que ocorram aportes laterais – oriundos, por exemplo, de lançamentos pontuais ou confluência com tributários – também terão que ser especificadas concentrações. As condições de contorno podem ou não se manter constantes ao longo do período de tempo simulado.

Já a condição inicial deve ser compreendida como a distribuição espacial da concentração do poluente no momento que antecede o início da simulação.

Simplificações

O conjunto de equações que compõem a equação 1 (ET) e as equações de movimento (EMs) consideram em princípio as três dimensões. No entanto, dependendo da geometria do corpo hídrico considerado, é razoável que se adotem simplificações.

Tais simplificações reduzem a complexidade do problema, muitas vezes sem perda considerável de informação. Considerando que essas equações muitas vezes não possuem solução analítica, somente numérica, a adoção de hipóteses simplificadoras pode reduzir drasticamente o custo computacional das simulações. Exemplificando, se o domínio físico a ser modelado apresenta largura e profundidades com ordens de grandeza inferior a seu comprimento, qualquer substância lançada em seu interior apresentará homogeneização proporcionalmente muito mais eficaz nas direções lateral e vertical do que na direção longitudinal. Tal é o caso de trechos estreitos e pouco profundos de rios e estuários. Nessas condições, uma abordagem unidimensional, que considere apenas a variação longitudinal das concentrações, seria satisfatória.

Modelagem do transporte de contaminantes em meio fluvial - estudo de caso baixo Macaé

Nesta seção é apresentada a modelagem matemática e computacional da simulação do transporte de uma pluma de contaminante em um trecho do rio Macaé, tendo como base um trabalho de campo realizado nas proximidades da Usina Termoelétrica (UTE) Mário Lago.

Os resultados apresentados aqui referem-se a uma versão revisada e compactada do trabalho de Telles e colaboradores datado de 2013⁴.

Descrição da região de interesse

A região de interesse na qual foi realizado o estudo envolvendo a modelagem do problema de transporte de contaminantes localiza-se no baixo curso do rio Macaé. Nesse trecho, a rede de drenagem do referido rio sofreu várias alterações em sua geometria, sendo a principal delas uma retificação de 25 km em seu curso, realizada pelo Departamento Nacional de Obras e Saneamento (DNOS) – extinto em 1990 (SEMADS, 2001)⁵. Segundo Costa, essa retificação fez com que o rio sofra com problemas de assoreamento ocasionados pela falta de mata ciliar⁶. Na Figura 1, é apresentada a região de interesse, onde está localizada essa retificação.

⁴ TELLES, W. *et al.* Simulação de uma Pluma de Contaminantes no Rio Macaé Utilizando Redes Neurais Artificiais. **Revista Brasileira de Recursos Hídricos**, v. 18, n. 2, p. 165–174, 2013.

⁵ SEMADS. **Bacias hidrográficas e rios fluminenses**: síntese informativa por macrorregião ambiental. Rio de Janeiro: [S.n.], 2001.

⁶ RIO DE JANEIRO (Estado). Secretaria de Estado de Meio Ambiente e Desenvolvimento Sustentável, Rio de Janeiro. **Subsídios para gestão dos recursos hídricos das bacias hidrográficas dos rios Macacu, São Joao, Macaé e Macabu**. Rio de Janeiro, 1999. Projeto PLANAGUA SEMADS, GTZ de Cooperação Técnica Brasil - Alemanha, 1999.

Nessa região, o rio apresenta profundidade média em torno de 1 m e largura praticamente uniforme de 40 m, assemelhando-se a um canal. No cenário aqui simulado (estio), as velocidades médias não excedem 1 m/s, sendo que as vazões se situam em torno de $6 \text{ m}^3/\text{s}^{10}$, condições que propiciam uma maior sensibilidade à diluição de efluentes¹¹.

O lançamento da solução salina – o traçador – no rio ocorreu de maneira instantânea, de modo que os dois recipientes foram imersos simultaneamente no leito do rio no ponto de lançamento, localizado a 0,50 m da margem do rio. As coletas das amostras foram obtidas em dois pontos situados a 50 m a jusante do local de lançamento, o primeiro situado a 0,50 m, e o segundo, a 3,00 m da margem. O trecho simulado compreendeu uma região com 182 m de comprimento por 40 m de largura. Todo o experimento foi conduzido em um intervalo de tempo de 360 s. As concentrações coletadas são apresentadas na Tabela 1.

Tabela 1 - Valores das concentrações obtidas durante o experimento

Concentração das amostras coletadas					
0,5 m da margem				3,0 m da margem	
t(s)	C (mg/l)	t(s)	C (mg/l)	t(s)	C (mg/l)
0	37,00	214	112,84	0	37,00
12	40,29	222	108,82	100	44,97
24	38,16	230	102,39	108	111,93
35	39,48	240	93,22	116	130,01
42	38,48	258	82,11	124	179,56
49	37,99	275	70,16	136	251,26
75	39,77	280	67,34	180	144,02
86	41,67	300	56,56	212	110,75
92	41,34	307	57,63	266	79,04
100	126,88	312	57,36	314	55,58
109	196,70	320	56,56	342	47,01
136	363,12	328	52,03		
146	230,86	335	47,34		

Modelagem do problema proposto

Equação de Advecção-Difusão

A modelagem do transporte de contaminantes em corpos hídricos é dada pela equação de advecção-difusão, correspondente à equação 1 mencionada na seção 1.1, a qual tem como base a equação de conservação da massa¹². Matematicamente, a equação 2 de advecção-difusão é expressa por Bird¹³:

¹⁰ AMARAL, J. **Estuário do Rio Macaé**: Modelagem Computacional como Ferramenta para o Gerenciamento Integrado de Recursos Hídricos. 2003. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil) - Instituto Alberto Luiz Coimbra de Pós-Graduação e Pesquisa de Engenharia, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro/RJ, COPPE, 2003.

¹¹ LUGON; SILVA NETO; RODRIGUES. Assessment of dispersion mechanisms in rivers by means of an inverse problem approach.

¹² MARTIN, J. L.; MCCUTCHEON, S. C. **Hydrodynamics and Transport for Water Quality Modeling**. Boca Raton: CRC Press, 2017. Disponível em: <https://www.crcpress.com/Hydrodynamics-and-Transport-for-Water-Quality-Modeling/Martin-McCutcheon/p/book/9780873716123>. Acesso em: 25 mar. 2017.

¹³ BIRD, R. B.; STEWART, W.E.; LIGHTFOOT, E.N. **Transport Phenomena**. 2nd ed. New York: Toronto: John Wiley & Sons Inc., 2006.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\nabla \cdot (E\nabla C) - \nabla \cdot (VC) + S \quad (2)$$

onde:

$C = C(x, y, z, t)$ é a concentração do poluente em análise [mg/l];

t é o tempo [s];

$V = (u, v, w)$ corresponde ao vetor de velocidade nas direções x, y e z , respectivamente [m/s];

$E = E(x, y, z, t)$ representa o coeficiente de dispersão do poluente no rio [m²/s];

$S = S(x, y, z, t)$ é o termo fonte ou sumidouro relativo ao poluente.

O trecho do rio Macaé em que foi realizado o experimento aqui descrito apresenta geometria bastante regular, podendo ser considerado como um canal, uma vez que sua largura e profundidade são praticamente constantes ao longo de seu curso, praticamente retilíneo. Além disso, de acordo com Amaral¹⁴, a região em questão possui baixa profundidade e pode ser classificada como bem misturada verticalmente, levando a quase homogeneidade ao longo da coluna d'água¹⁵. Medições realizadas durante o trabalho de campo constataram pequenas variações da velocidade longitudinal – podendo esta ser considerada constante – ao passo que, no sentido transversal, foi constatada uma velocidade muito pequena, podendo esta ser desprezada.

Diante dessas considerações, apesar de um modelo tridimensional ser sempre preferível, uma abordagem bidimensional, levando em consideração apenas as variações dispersivas na longitudinal e transversal, bem como os gradientes de velocidade no sentido longitudinal, pode ser adotada. Assim, tomando constantes os coeficientes de dispersão longitudinal e transversal, a simulação do transporte de contaminantes para o problema descrito aqui é dada por:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = E_l \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial C}{\partial x} \right) + E_t \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial C}{\partial y} \right) - u \frac{\partial C}{\partial x} \quad (3)$$

com as seguintes condições de contorno e inicial:

$$\begin{aligned} C(0, y, t) &= C_0, 0 \leq y \leq L_y, t > 0 \\ \frac{\partial C(L_x, y, t)}{\partial x} &= 0, 0 \leq y \leq L_y, t > 0 \\ \frac{\partial C(x, 0, t)}{\partial y} &= \frac{\partial C(x, L_y, t)}{\partial y} = 0, 0 \leq x \leq L_x, t > 0 \\ C(x, y, 0) &= C_1(x, y), 0 \leq x \leq L_x, 0 \leq y \leq L_y \end{aligned} \quad (4)$$

¹⁴ AMARAL. **Estuário do Rio Macaé**: Modelagem Computacional como Ferramenta para o Gerenciamento Integrado de Recursos Hídricos, op. cit.

¹⁵ TELLES. **Simulação do transporte bidimensional horizontal de substância conservativa**, op.cit.

onde:

x , y e z são as coordenadas cartesianas no domínio espacial [m];

u e v são as componentes do vetor velocidade, correspondente às direções x e y , respectivamente [m/s];

E_l e E_t são os coeficientes de dispersão longitudinal e transversal, respectivamente [m²/s];

L_x é o comprimento longitudinal do trecho do rio em análise [m];

L_y é o comprimento transversal do trecho do rio em análise [m].

Redes Neurais Artificiais

As equações que modelam o problema aqui tratado possuem parâmetros cujos valores são de difícil determinação. Como a solução dessas equações muitas vezes é bastante sensível a esses parâmetros, faz-se necessário defini-los com a maior precisão possível. Alternativamente, prescindindo-se, portanto, dessa definição para os parâmetros, podem ser adotadas algumas técnicas computacionais, como as Redes Neurais Artificiais (RNAs), conforme pode ser visto em diversos trabalhos^{16,17,18,19}. Usando operações computacionais bem simples, as redes conseguem resolver problemas matemáticos mal definidos, complexos, não lineares e estocásticos²⁰.

As RNAs são estruturas paralelas compostas de neurônios artificiais – os quais simulam os neurônios biológicos humanos – densamente conectados que apresentam duas fases distintas de operação: a aprendizagem ou treinamento e a execução ou generalização²¹. Basicamente, um neurônio artificial pode ser entendido como uma estrutura matemática, a qual transforma uma ou mais entradas, associadas a um peso, em uma saída, conforme é mostrado na Figura 2.

¹⁶ LIMA, E. B. **Problemas inversos aplicados à identificação de parâmetros hidrodinâmicos de um modelo do estuário do rio Macaé**. Tese (Doutorado) - Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, Brasil, 2012.

¹⁷ DORNELLES, F.; PEDROLLO, O. C.; GOLDENFUM, J. A. A. Análise comparativa da aplicação de redes neurais e sistemas de inferência difusa na previsão de nível do rio Quaraí, utilizando previsão de chuva. In: SIMPÓSIO BRASILEIRO DE RECURSOS HÍDRICOS DO SUL-SUDESTE, 2006. **Anais** [...]. Curitiba: ABRH, 2006. v. 1.

¹⁸ GONÇALVES, F. V.; RAMOS, H. M.; REIS, L. F. R. Produção de energia em sistemas de abastecimento baseada em fontes renováveis: Redes Neurais. In: SIMPÓSIO BRASILEIRO DE RECURSOS HÍDRICOS, 18., 2009. **Anais** [...]. Campo Grande: ABRH, 2009. v. 1.

¹⁹ GOMES, L. F. C. Modelo Baseado na Técnica de Redes Neurais para Previsão de Vazões na Bacia do Rio São Francisco. **RBRH, Revista Brasileira de Recursos Hídricos**, v. 15, n. 1, p. 5–15, 2010.

²⁰ GRAUPE, D. **Principles of artificial neural networks**. 2. ed. [S.l.]: World Scientific, 2007. v. 6.

²¹ BIONDI NETO, L. et al. Classificação de solos usando-se redes neurais artificiais. **Engvista (UFF)**, v. 8, p. 37–48, 2006.

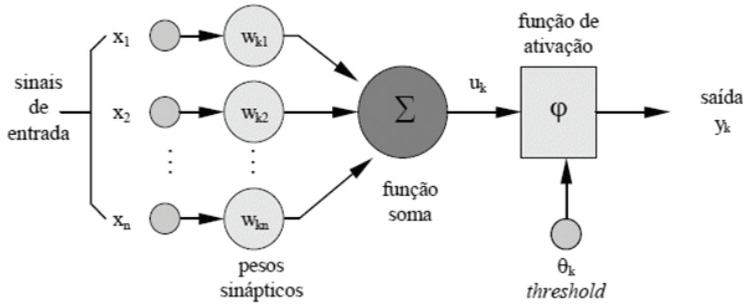


Figura 2 - Estrutura de um neurônio artificial

Fonte: Adaptado de Haykin (1994)²²

Os elementos mais importantes na estrutura de um neurônio artificial²³ são:

1. Sinapses: são representadas por um peso (w), o qual indica sua intensidade. Cada peso w_{kj} multiplica o sinal x_j na entrada da sinapse j , a qual está conectada a um neurônio k . O peso w_{kj} é positivo se a sinapse associada é excitatória, e negativo se a sinapse é inibitória;

Somatório: soma as entradas ponderadas pelos respectivos pesos, ou seja:

$$u_k = \sum_{i=1}^n w_{ij} \cdot x_j \quad (5)$$

2. Limiar (*threshold*) (θ_k): determina a ativação ou não do neurônio. Se o valor do somatório u_k for menor do que θ_k , então a saída do neurônio fica inibida. Caso contrário, o neurônio fica ativo.

3. Função de ativação (φ): funciona como um limitante à amplitude da saída do neurônio, ou seja, a entrada é normalizada dentro de um intervalo fechado, comumente $[0, 1]$ ou $[-1, 1]$;

Saída: resultado gerado pelo neurônio, k_y , onde:

$$y_k = \varphi(u_k - \theta_k) \quad (6)$$

A maioria dos modelos de redes neurais possui alguma regra de treinamento, em que os pesos e suas conexões são ajustados com os padrões apresentados, ou seja, elas aprendem por meio de exemplos²⁴.

Para o problema aqui descrito, foi utilizada a rede perceptron de múltiplas camadas (MLP), com o algoritmo *backpropagation* para o treinamento e o método de Levenberg-Marquardt para a determinação dos pesos e bias, o qual aumenta a velocidade de treinamento sem perda de desempenho da rede²⁵.

²² HAYKIN, S.S. **Neural networks**: a comprehensive foundation. New York : Toronto : New York: Macmillan; Maxwell Macmillan Canada; Maxwell Macmillan International, 1994.

²³ RAIJA JR., A. A. **Acessibilidade e mobilidade na estimativa de um índice de potencial de viagens utilizando redes neurais artificiais e sistemas de informações geográficas**. Tese (Doutorado em Engenharia Civil) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2000.

²⁴ YAMAMOTO, Y.; NIKIFORUK, P. N. A new supervised learning algorithm for multilayered and interconnected neural networks, **IEEE transactions on neural networks**, v. 11, n. 1, p. 36-46, 2000.

²⁵ KINOSHITA, S. K.; MARQUES, P. M.A.; FRÉRE, A. F. Utilização de análise de componentes principais e redes neurais artificiais para a classificação de nódulos em mamogramas digitalizados. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA BIOMÉDICA, 17., Florianópolis, 2000. **Anais [...]**. Florianópolis: [S.n.], 2000. v. 1, p. 1214-1216.

O método de Levenberg-Marquardt procura encontrar o melhor ajuste para um conjunto de dados tentando minimizar a soma dos quadrados dos resíduos, obtendo um novo vetor de pesos w_{n+1} que parta do vetor de pesos w_n , ou seja:

$$w_{n+1} = w_n + \Delta w_n \quad (7)$$

onde:

$$\Delta w_n = -[J_n^T J_n + \mu I]^{-1} J_n^T e(w) \quad (8)$$

sendo $e(w)$ a função erro, μ o parâmetro (fator de amortecimento) de Marquardt, I a matriz identidade e J a matriz Jacobiana que contém a derivada primeira dos erros da rede com relação aos pesos e bias.

Solução do problema proposto

Para gerar os padrões a serem utilizados no treinamento das RNAs, foi utilizada a solução do modelo de transporte. Para a solução do modelo matemático descrito pelas Eqs. (3) e (4), foi utilizado o método dos Volumes Finitos, baseado em uma formulação implícita e aproximação do termo advectivo por meio do esquema *UpWind* (UDS)²⁶. Essa discretização gera um sistema da forma $Ax = b$, onde A é uma matriz pentadiagonal, sendo então resolvida pelo Algoritmo de Thomas (TDMA)²⁷.

Para a concentração inicial $C(x,y,0) = C_1(x,y)$, foi adotada uma concentração igual à verificada no rio, ou seja, 37 mg/l, exceto na célula que receberá a descarga (lançamento instantâneo), que terá uma concentração variável de acordo com a discretização adotada para a malha. Já os coeficientes de dispersão longitudinal e transversal foram adotados como $E_l = 0,008\text{m}^2/\text{s}$ e $E_t = 0,033\text{m}^2/\text{s}$, respectivamente. Toda a implementação foi realizada na linguagem de programação C.

Por outro lado, para o modelo matemático baseado em redes neurais artificiais, foram passadas como padrão de treinamento 44 informações referentes a 6 parâmetros de influência significativa na modelagem da pluma de contaminante; são eles: posição de lançamento na direção longitudinal (50 m), posição de lançamento na direção transversal (0,5 m), concentração do traçador lançada no rio (175 g/l), posição de coleta na direção longitudinal (100 m), posição de coleta na direção transversal (0,5 m para o primeiro ponto e 3,0 m para o segundo ponto) e tempo de coleta das amostras (vide Tabela 1).

²² HAYKIN, S.S. **Neural networks: a comprehensive foundation**. New York : Toronto : New York: Macmillan; Maxwell Macmillan Canada; Maxwell Macmillan International, 1994.

²³ RAIJA JR., A. A. **Acessibilidade e mobilidade na estimativa de um índice de potencial de viagens utilizando redes neurais artificiais e sistemas de informações geográficas**. Tese (Doutorado em Engenharia Civil) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2000.

²⁴ YAMAMOTO, Y.; NIKIFORUK, P. N. A new supervised learning algorithm for multilayered and interconnected neural networks, **IEEE transactions on neural networks**, v. 11, n. 1, p. 36-46, 2000.

²⁵ KINOSHITA, S. K.; MARQUES, P. M.A.; FRÉRE, A. F. Utilização de análise de componentes principais e redes neurais artificiais para a classificação de nódulos em mamogramas digitalizados. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA BIOMÉDICA, 17., Florianópolis, 2000. **Anais [...]**. Florianópolis: [S.n.], 2000. v. 1, p. 1214-1216.

²⁶ TELLES. **Simulação do transporte bidimensional horizontal de substância conservativa**, op.cit.

²⁷ PLETCHER, R.H.; TANNEHILL, J.C.; ANDERSON, D. **Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer**. 3rd ed. Boca Raton: CRC Press, 2011.

De posse dessas informações, a rede pode ser caracterizada por uma matriz $P_{6 \times 44}$ como padrão de entrada, a qual mapeia um vetor $T_{1 \times 44}$ que representa as concentrações oriundas do trabalho de campo (Tabela 1).

Devido à aleatoriedade na escolha da primeira estimativa dos pesos e bias, cada simulação realizada nesse trabalho foi processada em torno de 30 vezes a fim de encontrar os melhores resultados numéricos, tendo como referência os dados experimentais obtidos no trabalho de campo. Para efeito de validação do treinamento, a rede foi testada com um conjunto de dados que não fizeram parte do treinamento, dentro do intervalo $[0, 360]$ s, para os dois pontos de coleta.

A implementação da RNA foi realizada no programa Matlab®, assim como a construção dos gráficos referentes às simulações.

Resultados e discussão

Solução utilizando o modelo matemático

Foram realizados alguns testes com o objetivo de se determinar a melhor configuração de malha necessária à simulação envolvendo o modelo matemático, sendo adotados $\Delta t = 2$ s, $\Delta x = 0,7$ m e $\Delta t = 0,7$ m. Na Figura 3, são apresentados os resultados obtidos nas simulações.

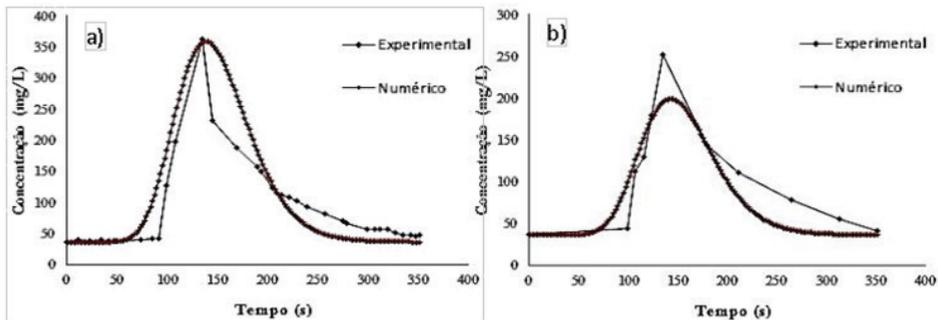


Figura 3: Concentrações numéricas e experimentais a 0,5 m da margem do rio (a) e a 3,0 m da margem do rio (b).

Como pode ser observado na Figura 3(b), não houve um bom ajuste entre o modelo matemático e os dados experimentais. Isso se deve ao fato da dificuldade de calibração dos parâmetros, como já mencionado anteriormente. Conseqüentemente, é realizada a substituição do modelo matemático por redes neurais artificiais.

Solução utilizando redes neurais

Foram realizadas simulações variando o número de camadas ocultas (de 1 a 5 camadas) da rede neural, bem como o número de neurônios (de 5 a 50 neurônios) presentes em cada camada, a fim de se obter o melhor ajuste entre os resultados numéricos e os dados experimentais.

Inicialmente, foi realizado o treinamento da rede neural utilizando apenas uma camada oculta e variando a sua quantidade de neurônios. No entanto, verificou-se que esse treinamento não conseguiu modelar satisfatoriamente o pico de concentração da pluma de contaminante.

Diante disso, foi realizado então o treinamento da rede neural utilizando duas camadas ocultas e variando o número de neurônios dessas camadas a fim de se obter o melhor conjunto de parâmetros que representasse numericamente os dados obtidos no trabalho de campo. Na Figura 4, são apresentados os resultados obtidos com o treinamento da rede com a melhor configuração, contendo 14 e 8 neurônios na primeira e na segunda camadas escondidas, respectivamente. As funções de ativação utilizadas foram a tangente hiperbólica e a linear, sendo a taxa de aprendizagem igual a 0,001, e o número máximo de épocas avaliado em 5000. Para a definição da taxa de aprendizagem e da época, vide²⁸.

Observa-se na Figura 4 um ajuste muito melhor entre o resultado numérico e os dados experimentais quando comparado ao desempenho do modelo matemático com adoção de valores pré-definidos para os parâmetros. Em particular, com a utilização das RNAs, obteve-se maior acurácia na reprodução do pico de concentração observado em campo, algo bastante relevante sob o ponto de vista ambiental.

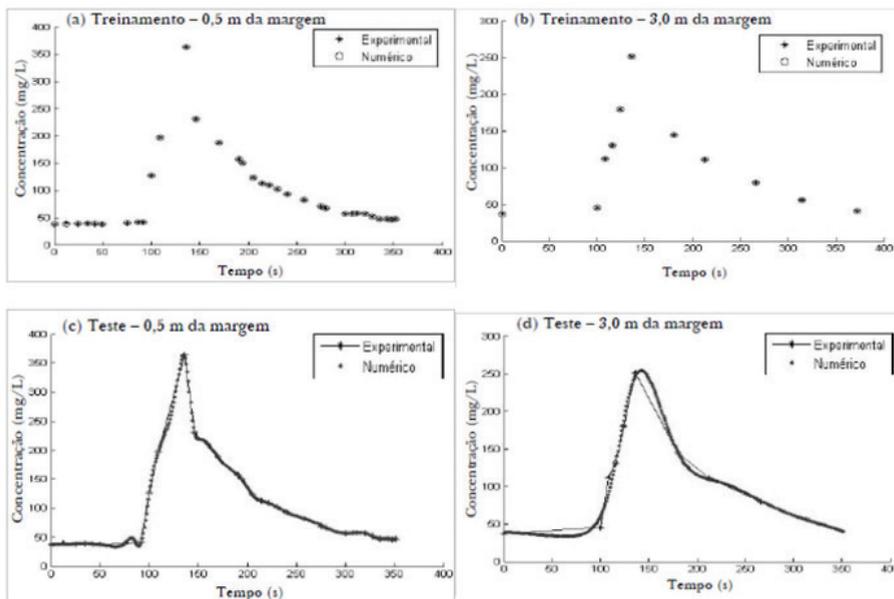


Figura 4: Concentrações nos pontos de coleta a 0,5 m da margem após o treinamento e teste da rede neural com 14 e 8 neurônios na primeira e segunda camada escondida, respectivamente, após 1280 épocas.

²⁸ HAYKIN. **Neural networks.**

Outros testes foram realizados com a rede contendo três, quatro e cinco camadas ocultas. No entanto, os resultados mostraram-se inferiores aos obtidos no treinamento com duas camadas ocultas.

Modelagem do transporte de contaminantes em região estuarina - estudo de caso baixo Macaé

A modelagem proposta nesta seção consiste em analisar o comportamento de contaminantes conservativos sem uma dada região estuarina, uma vez que tenham sido lançados a montante do limite superior da intrusão salina. Tratou-se como objetivo principal a aplicação de métodos de inteligência computacional para formular uma metodologia de identificação da procedência e magnitude de um hipotético lançamento de poluente nas águas do estuário do rio Macaé.

Modelo matemático

A Equação de Transporte 1(ET) de contaminantes que descreve o balanço entre advecção-difusão foi integrada verticalmente, assumindo que a variação da concentração é desprezível na direção vertical, tomando, assim, uma representação bidimensional do transporte.

Como solução da equação 1, foi realizada a aplicação do Método de Elementos Finitos (MEF) para a discretização no espaço²⁹ e do Método de Diferenças Finitas (MDF) para a discretização no tempo³⁰.

A aplicação do MEF transforma a equação 1 (ET), que é uma equação diferencial parcial, em um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDOs), e a aplicação do MDF transforma o sistema de EDOs em um sistema de equações lineares algébricas (SELA). Ao final, o SELA foi solucionado utilizando o Método de Gauss-Seidel (MGS)³¹.

Vale destacar na equação 1 (ET) o termo que se refere a fontes ou sumidouros, que aqui influencia diretamente no objetivo de identificação da origem do poluente. Tal fonte pode ser única ou múltipla; pontual ou distribuída; instantânea, contínua ou intermitente; interna ou externa ao domínio de interesse. Neste estudo, foi considerada uma fonte única, pontual no meio e constante ao longo do tempo.

Quanto às Equações do Movimento (EMs), foi considerada para o meio estuarino uma pequena amplitude de maré, que deve garantir eficiente homogeneização vertical da coluna d'água, de modo que o estuário pode ter sua hidrodinâmica modelada pela formulação bidimensional, assumindo, assim, pouca variação vertical das variáveis de escoamento.

²⁹ ZIENKIEWICZ, O. C.; TAYLOR, R.L.; ZHU, J. Z. **The Finite Element Method: Its Basis and Fundamentals**. 7. ed. Amsterdam: Butterworth-Heinemann, 2013.

³⁰ SMITH, G. D. **Numerical Solution of Partial Differential Equations: Finite Difference Methods**. 3 ed. Oxford: Oxfordshire; New York: Clarendon Press, 1986.

³¹ CUNHA, M.C.C. Métodos Numéricos. Campinas, SP: UNICAMP, [2009?].

As componentes horizontais de velocidade foram obtidas da solução do modelo hidrodinâmico implementado por Lima em 2012³², utilizando a plataforma MOHID³³. Esse modelo hidrodinâmico gerou a variação temporal dos campos de velocidades e o nível da superfície livre, os quais foram tratados como dados de entrada para o problema aqui resolvido.

O poluente considerado foi do tipo conservativo, o qual não possui reações que interfiram na sua concentração, sendo dispensado, portanto, o emprego das Equações de Reação (ERs).

Domínio de estudo do estuário do rio Macaé

Situado no município de Macaé, o domínio de estudo que envolve o estuário do rio Macaé foi definido através de fotografias via satélite, considerando-se uma extensão de quase 20km da cabeceira até a costa. Na Figura 5, é apresentada uma fotografia via satélite utilizada na definição do domínio de estudo.

Os dados de batimetria da região costeira foram tomados da carta náutica 1507, editada pela Marinha do Brasil em 1974, os quais se referenciaram com a batimetria existente mais próxima dos pontos da malha. Da região superior, foi utilizada a batimetria empregada por Amaral³⁴, utilizando-se de dados interpolados linearmente em função da existência de poucos dados disponíveis.



Figura 5 - Fotografia via satélite do estuário do rio Macaé

Fonte: Google Maps (2012)

³² LIMA. **Problemas inversos aplicados à identificação de parâmetros hidrodinâmicos de um modelo do estuário do rio Macaé.**

³³ MOHID. Disponível em: <http://mohid.com/>. Acesso em: 26 mar. 2017.

³⁴ AMARAL. **Estuário do Rio Macaé: Modelagem Computacional como Ferramenta para o Gerenciamento Integrado de Recursos Hídricos**, op. cit.

A vinculação entre os dados do modelo hidrodinâmico e do modelo de transporte foi realizada por meio da aproximação das malhas espacial e temporal. O modelo proposto contém elementos de diferentes tamanhos, utilizando-se assim dos dados hidrodinâmicos mais próximos na geometria do modelo de referência. O mesmo ocorreu com a discretização temporal, ao optar-se por adotar um passo maior e múltiplo do modelo hidrodinâmico.

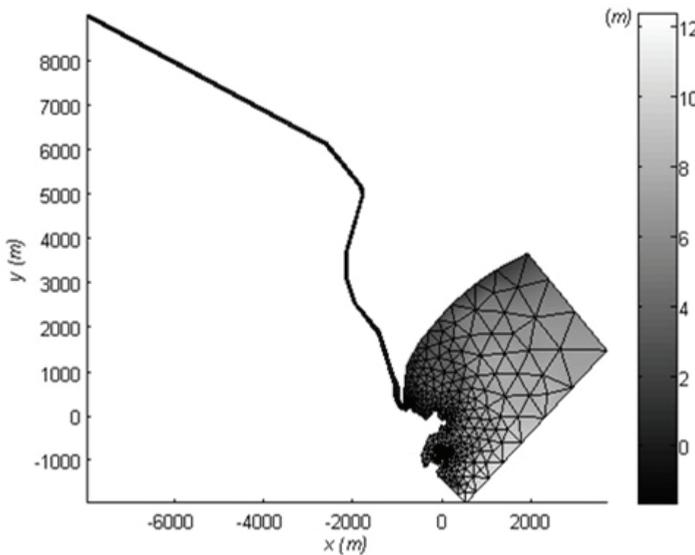


Figura 6 - Geometria e dados de batimetria do estuário do rio Macaé

Fonte: Parolin *et al.* (2015)³⁵

A geometria do estuário e os dados de batimetria são apresentados na Figura 6. É importante destacar que a proposição da malha espacial, composta por elementos finitos triangulares, foi definida após um estudo de consistência, estabilidade e convergência do método de discretização^{36,37}.

Modelagem computacional de estimação da fonte de poluentes

O transporte de constituintes, representado pela equação 1 (ET), vinculado às variáveis hidrodinâmicas das EMs, com as condições de contorno e os parâmetros adotados, compreendem o Problema Direto (PD).

³⁵ PAROLIN, R.S. *et al.* Análise de sensibilidade e estimação de uma fonte de contaminantes no estuário do Rio Macaé. RBRH, **Revista Brasileira de Recursos Hídricos**, v. 20, n. 1, p. 24–33, 2015.

³⁶ PAROLIN, R. S. **Determinação de uma fonte de contaminantes no estuário do Rio Macaé através da técnica de problemas inversos**. Tese (Doutorado em Modelagem Computacional) - Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, Brasil, 2013.

³⁷ PAROLIN, R.S. *et al.* Estimation of a contaminant source in an estuary with an inverse problem approach. **Applied Mathematics and Computation**, v. 260, p. 331–341, 2015.

O problema de estimação da fonte de poluentes foi formulado como um Problema Inverso (PI), no qual se considera conhecer medidas experimentais de concentração com o intuito de estimar a localização e a intensidade da fonte, ambas representadas por parâmetros no PD.

Nesse processo, tratado como um problema de otimização, procura-se minimizar a função objetivo, que é o somatório do quadrado dos resíduos entre os valores calculados e os valores experimentais de concentração.

Como um processo computacional iterativo, o PI de estimação da fonte de poluentes proposto é representado na Figura 7.

Para uma avaliação da possibilidade de identificação dos parâmetros da fonte de poluentes frente ao modelo de transporte, foi realizada uma análise de sensibilidade³⁸.

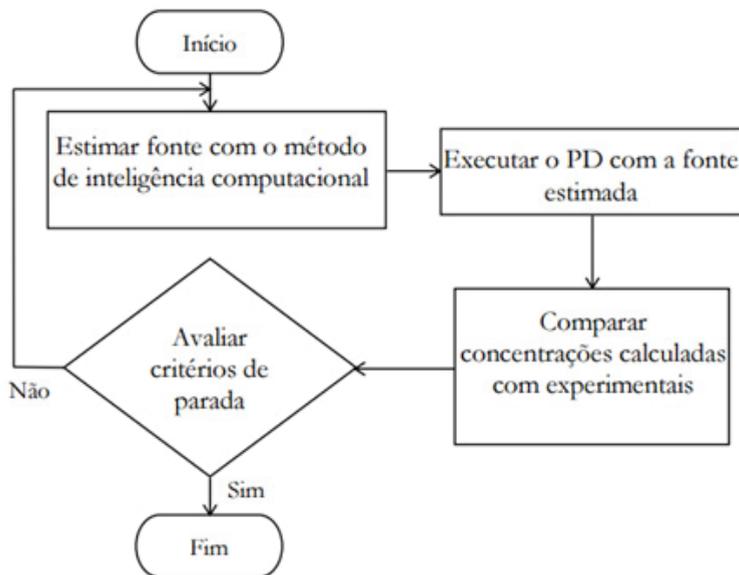


Figura 7 - Fluxograma com processo iterativo do Problema Inverso

Fonte: Parolin et al. (2015)³⁹

Assim, foram escolhidas aleatoriamente na região fluvial três possíveis posições de fontes para serem analisadas separadamente, com um mesmo fluxo de massa, considerando cinco possíveis sensores de coleta dos dados de concentração⁴⁰, como pode ser visto na Figura 8.

Como resultado dessa análise, percebeu-se que alguns sensores apresentam sensibilidade em localizações distintas da fonte, característica esta importante de uma boa localização para captura de dados de concentração, evidenciando diferenças na comparação de distintas localizações de fontes.

³⁸ BECK, J. V.; BLACKWELL, B.; JR, C. R. S. C. **Inverse Heat Conduction: Ill-Posed Problems**. [S.L.]: James Beck, 1985.

³⁹ *Ibid.*

⁴⁰ PAROLIN et al. Análise de sensibilidade e estimação de uma fonte de contaminantes no estuário do Rio Macaé, *op. cit.*

Em análise posterior, percebeu-se uma correlação linear forte entre os parâmetros de estimação: localização e intensidade da fonte. Como consequência, escolheu-se realizar primeiramente a estimação da localização da fonte, e então estimar a intensidade para essa localização específica.

Compreendidas as particularidades de estimação da fonte no problema, foram escolhidos como métodos de inteligência computacional para a solução do Problema Inverso: Luus-Jaakola (LJ)⁴¹, Algoritmo de Colisão de Partículas (ACP)⁴² e Otimização por Colônia de Formigas (OCF)^{43,44}, para a estimação da localização da fonte, e o Método Seção Áurea (SA)⁴⁵, para a estimação da intensidade da fonte.

Para a aplicação do Problema Inverso, foram utilizados dados experimentais sintéticos, que foram gerados a partir da solução do Problema Direto, conhecendo-se os parâmetros da fonte em um período total de 24h.

Considerou-se como fonte a localizada em L2 (vide Figura 8), com um fluxo de massa de 0,1kg/s. Os dados de concentração amostrais são aqueles das localizações S1, S2, S3, S4, S5 para cada hora em um período de 24 horas (Figura 8). A fim de reproduzir uma situação mais realista, também foram introduzidos artificialmente nos dados experimentais um erro da ordem de $\pm 5\%$.

A programação dos Problemas Direto e Inverso foi desenvolvida em linguagem C++, bem como a maioria das análises numéricas realizadas. Já a malha e os gráficos foram desenvolvidos com o programa MATLAB^{R46}.

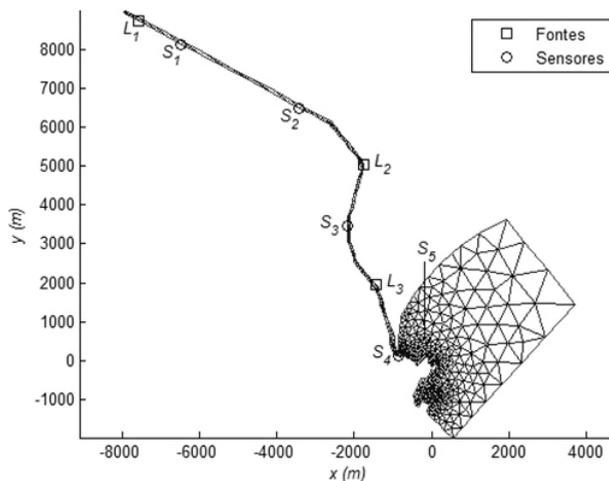


Figura 8 - Localização das fontes e dos sensores de coleta de dados

Fonte: Parolin et al. (2015)⁴⁷

⁴¹ 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, 1973.

⁴² SACCO, W. F.; OLIVEIRA, C. R. E.; PEREIRA, C. M. N. A., Two stochastic optimization algorithms applied to nuclear reactor core design. *Progress in Nuclear Energy*, v. 48, n. 6, p. 525-539, 2006.

⁴³ DORIGO, M.; MANIEZZO, V.; COLORNI, A. Ant system: optimization by a colony of cooperating agents. *IEEE transactions on systems, man, and cybernetics. Part B, Cybernetics: a publication of the IEEE Systems, Man, and Cybernetics Society*, v. 26, n. 1, p. 29-41, 1996.

⁴⁴ SILVA NETO, A. J.; BECCENERI, J. C.; CAMPOS VELHO, H. F. *Inteligência Computacional Aplicada a Problemas Inversos em Transferência Radiativa*. Rio de Janeiro, Brazil: EdUERJ, 2016.

⁴⁵ BAZARAA, M. S.; SHERALI, H.D.; SHETTY, C. M. *Nonlinear programming: theory and algorithms*, 3. ed. Hoboken, N.J.: Wiley-Interscience, 2006.

⁴⁶ MATHWORKS Makers of MATLAB and Simulink. Disponível em: <http://www.mathworks.com/>. Acesso em: 26 mar. 2017.

⁴⁷ *Ibid.*

Resultados de estimação da fonte de poluentes

Para cada método de inteligência computacional, foram realizadas 20 execuções na solução do PI, utilizando tanto os dados amostrais sem ruído quanto os com ruído. Os resultados das médias dessas aplicações são apresentados na Tabela 2.

Como podemos verificar, utilizando-se dados sem ruído, obteve-se um êxito de pelo menos 95% na estimação da localização e da intensidade da fonte de poluentes. Ao se utilizarem dados com ruído, o êxito obtido foi de 80%, igualmente nos três métodos aplicados.

De maneira a comparar mais precisamente a eficiência dos métodos, foi utilizado um teste não paramétrico, o teste de ranque de sinal de Wilcoxon⁴⁸, considerando um nível de confiança de 95%. Os critérios comparados foram: função objetivo (somatório do quadrado dos resíduos entre os valores calculados e os valores experimentais de concentração), número de diferentes pontos estimados para a localização (NP); custo computacional (tempo).

Nessa comparação, utilizando-se de dados amostrais sem ruído, os métodos não apresentaram diferença significativa, sendo igualmente eficientes na resolução do PI. Já se utilizando de dados com ruído, o método LJ-SA mostrou-se superior quanto aos critérios de número de diferentes pontos estimados e ao custo computacional⁴⁹.

Tabela 2 - Médias das aplicações do Problema Inverso

Métodos	Êxito (%)	Distância da Fonte (m)	Diferença da Fonte (kg/s)	NP	Tempo (s)
LJ-AS	95	3,14	$6,75 \cdot 10^{-4}$	32,4	1658,05
ACP-AS	95	3,14	$6,75 \cdot 10^{-4}$	29,8	1585,15
OCF-AS	100	0	0	33,55	1926
LJ-SA (r)	80	805,34	0,0096	31,65	1653,6
ACP-SA (r)	80	12,52	0,0187	44,2	2322,75
OCF-SA (r)	80	201,71	0,0065	40,05	2299,2

Nota: (r) significa que foram utilizados dados de amostragem com ruído, NP significa o número de diferentes pontos estimados para a localização.

Considerações Finais

Neste capítulo, foram apresentadas duas aplicações de modelos e técnicas computacionais na simulação do lançamento e transporte de poluentes em meio fluvial e estuarino. No primeiro cenário estudado, buscou-se simular o comportamento de uma pluma de poluente que poderia se desenvolver a partir do lançamento pontual e instantâneo de uma substância conservativa, não passível de reação, em meio hídrico. Para tanto, realizou-se um experimento de campo que posteriormente foi reproduzido por meio de duas abordagens, sendo que a que envolveu a aplicação de RNAs pôde com maior acurácia gerar o perfil de concentrações observado no próprio experimento. Já no segundo estudo, tentou-se identificar a localização e intensidade de uma fonte de poluente conservativo hipoteticamente lançado na região estuarina do rio Macaé. Aqui, também, a estratégia computacional obteve sucesso.

⁴⁸ DERRAC, J. et al. A practical tutorial on the use of nonparametric statistical tests as a methodology for comparing evolutionary and swarm intelligence algorithms. *Swarm and Evolutionary Computation*, v. 1, n. 1, p. 3-18, 2011.

⁴⁹ PAROLIN. **Determinação de uma fonte de contaminantes no estuário do Rio Macaé através da técnica de problemas inversos**, op. cit.

Os resultados aqui discutidos, portanto, destacam a importância e o alcance que modelos computacionais podem ter enquanto ferramentas na gestão de recursos hídricos. Futuros desdobramentos dessas pesquisas devem envolver o aprimoramento e desenvolvimento de soluções numéricas e analíticas dos modelos matemáticos utilizados na simulação de transporte de poluentes em meio hídrico. Além disso, há demanda pela construção de algoritmos que agilizem o processo de calibração automática de tais modelos. Por fim, para que simulação e monitoramento se complementem, pesquisas devem se intensificar no desenvolvimento de sensores remotos e automáticos capazes de gerar, armazenar e transmitir dados com frequência e precisão suficientes.

Agradecimentos

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