



Problemas Inversos no Transporte de Poluentes em Rios

(Inverse Problems in Transport of Pollutants in Rivers)

Ronaldo Barbosa Alvin

Resumo

Neste artigo são apresentados problemas inversos em transporte de poluentes em rios.

Foram estudados problemas em rios com área de seção molhada constante e área de seção variável, sendo no primeiro a velocidade do rio constante e no segundo a velocidade do rio variável, obtida através da solução numérica da Equação de Burgers e também pelo método de Diferenças Finitas.

Nos problemas inversos em transporte de poluentes com rio de velocidade constante e rio de velocidade variável, foi estudada a estimativa de um parâmetro, o coeficiente de difusão, utilizando um método de otimização local Levenberg- Marquardt.

Foi realizada uma análise de sensibilidade com intuito de identificar os dados experimentais a serem utilizados de acordo com a localização da fonte de injeção dos poluentes.

Palavras Chave: Problemas inversos, Equação de Burgers, Método de Levenberg-Marquardt, Diferenças Finitas.

Abstract

In the present work inverse problems in transport of pollutant in rivers are presented.

Problems were studied in rivers with constant and variable wet area sections, being in the first the speed of the river constant and in the second variable, obtained through the numeric solution of the Burgers equation, and also with the method of finite differences.

In the inverse problems in pollutant transport in rivers of constant and variable speeds studied estimates for the diffusion coefficient, were obtained using a local optimization method, the Levenberg –Marquardt method.

A sensitivity analysis was performed in order to identify the experimental data to be used in accordance with the location of the discharge of the pollutants.

Key-words: Inverse problems, Burgers equation, Levenberg-Marquardt method, Finite Differences.

Introdução

O crescimento populacional, principalmente nas zonas urbanas, criou um enorme impasse ecológico: como acomodar uma população cada vez maior sem provocar uma significativa agressão ao habitat natural?

¹ Estudante do Curso de Pós-Graduação *lato sensu* em Educação Ambiental- IFF- Campus Centro

² Estudante do Curso de Pós-Graduação *lato sensu* em Educação Ambiental- IFF- Campus Centro

³ Ms. Ciência Animal / Universidade Estadual do Norte Fluminense, Darcy Ribeiro, UENF, Brasil, Professor do Instituto Federal Fluminense



IV Seminário Regional Sobre Gestão de Recursos Hídricos

quantidade e qualidade das águas:
inovação tecnológica e recursos hídricos



V Fórum do Observatório Ambiental
Alberto Ribeiro Lamego

ISSN CD-ROM 2316-5049

Nas grandes cidades um dos problemas mais urgentes refere-se à poluição do ar e das águas e ao fornecimento de alimentos em quantidade e qualidade suficientes para atender à demanda.

O problema da poluição das águas torna-se mais premente quando as cidades localizam-se no litoral, pois neste caso a poluição afeta uma das fontes prováveis de alimentos. O planejamento urbano deve, portanto, levar em conta aquilo que ocorrerá ao meio-ambiente para decidir-se pela ocupação ou não de uma certa área costeira, uma vez que isso acarreta, sempre, alguma quantidade de lançamento de dejetos ao mar, ou aos rios, no caso de uma região interior.

Uma das motivações para este trabalho foi o desastre ecológico ocorrido em 29 de março de 2003, quando houve o rompimento de uma barragem com 1,2 bilhão de litros de água contaminada com produtos químicos tóxicos da Indústria Cataguazes de Papel, na cidade de mesmo nome, no Estado de Minas Gerais, que teve sérias consequências para a biodiversidade dos rios Pomba e Paraíba do Sul. A mancha negra percorreu 180 km nos dois rios antes de alcançar o mar na foz do Paraíba, em São João da Barra - RJ. O acidente, sem precedentes no Norte Fluminense, provocou a interrupção do abastecimento de água de oito cidades, prejudicando cerca de 600 mil habitantes.

Figura 1 – Mapa do caminho percorrido pela mancha até o mar (Paduaonline, 2003)



As informações abaixo sobre o acidente foram retiradas de veículos de imprensa on-line. As imagens são de um site do provedor local (Paduaonline,2003) de uma das cidades atingidas.

Segundo dados da Feema é preocupante a situação da região devido a haver mais de 300 empresas deste tipo, que aumentam seu passivo ambiental a cada chuva, já que o resíduo se mistura à água.

A caracterização do resíduo líquido (lixívia) foi realizada por meio de análises de laboratório, visando a determinação de contaminantes orgânicos, metais pesados, físico-químicos e testes de toxicidade.

Dos resultados obtidos nessas análises, e comparados às normas e padrões para efluentes líquidos do CONAMA nº. 20, art. 21, pode-se concluir que os seguintes padrões apresentaram concentrações acima dos valores preconizados pela legislação acima citada, ratificando, conseqüentemente, a inadequação para lançamento em corpos d'água (Paduaonline, 2003).

Tabela 1 – Parâmetros em mg/l referentes ao desastre da Cataguazes de Papel. (Paduaonline, 2003)

Total de fenóis	pH
NT-202 – 0,2 mg/l	NT 202 – 5 a 9 mg/l
Resolução CONAMA n. 20/86, art.21 - 0,5 mg/l	Resolução CONAMA n. 20/86 art.21 – 5 a 9 mg/l
Resíduo do dique acidentado – 1,10 mg/l	Resíduo do dique acidentado – 14 mg/l
Toxicidade / Utp	DQO
NT 213 R-4 – 8 mg/l	NT 205 R5 – 200 mg/l
Resíduo do dique acidentado – 32 mg/l	Resíduo do dique acidentado – 25.000 mg/l

Observação: Os valores de mercúrio (2 mg/l) não ultrapassam os valores preconizados pela NT (Norma Técnica) 202 e o artigo 21 do CONAMA nº 20 (10 mg/l). (Paduaonline, 2003)



IV Seminário Regional Sobre Gestão de Recursos Hídricos

quantidade e qualidade das águas:
inovação tecnológica e recursos hídricos



V Fórum do Observatório Ambiental
Alberto Ribeiro Lamego

ISSN CD-ROM 2316-5049

Dos demais metais analisados, somente o ferro (70 mg/l), o alumínio (60 mg/l) e o sódio (7100 mg/l) apresentaram altas concentrações, o que pode ter contribuído para a presença desses metais nas amostras de água coletadas. Cabe ainda, ressaltar que o ferro e o sódio não são um parâmetro de controle de efluentes e o ferro se encontra naturalmente distribuído em todo o Estado. (Paduaonline, 2003)

Quanto aos orgânicos analisados foram encontrados traços de antraquinona em concentrações muito baixas (0,93 mg/l).

Considerando o lançamento de 1,4 bilhões de litros deste efluente, a Feema concluiu que foi lançada a carga descrita na Tabela 2.

Tabela 2 – Carga total de dejetos lançada no leito do rio. (Paduaonline, 2003)

Fenóis – 1,54 Ton	DQO – 35.000 Ton	Mercurio – 2,8 kg
-------------------	------------------	-------------------

As fotos apresentadas na Fig. 2 mostram as dimensões desse reservatório antes e depois do vazamento.

Figura 2 – Fotos do local onde se encontrava o reservatório de poluentes que rompeu



Como citado anteriormente existem ainda outros reservatórios, que ameaçam provocar outros acidentes. Na Fig. 3 está representado um outro reservatório da mesma empresa responsável pelo desastre relatado e que se situa em local próximo.



IV Seminário Regional Sobre Gestão de Recursos Hídricos

quantidade e qualidade das águas:
inovação tecnológica e recursos hídricos



V Fórum do Observatório Ambiental
Alberto Ribeiro Lamego

ISSN CD-ROM 2316-5049

Figura 3 – Foto área do segundo reservatório de rejeitos que ainda se encontra cheia e sem tratamento



As imagens apresentadas na Fig. 4, ilustram o impacto da passagem da mancha por uma das cidades, onde além das consequências de longo prazo, o odor era insuportável a pequenas distâncias. A cidade é Santo Antônio de Pádua, no Noroeste Fluminense, na qual é coletada água para o abastecimento de 8 cidades vizinhas.

Figura 4 – Imagens da passagem da mancha pelo Rio Pomba em Santo Antônio de Pádua (Paduaonline, 2003)



A gerência do Ibama em Minas Gerais entregou no fim de março de 2004, em Cataguazes, o relatório sobre a área atingida pelo vazamento dos rejeitos químicos da produção de celulose da barragem da Indústria Cataguazes de Papel. Apesar dos atrasos provocados pelas chuvas, a gerência



IV Seminário Regional Sobre Gestão de Recursos Hídricos

quantidade e qualidade das águas:
inovação tecnológica e recursos hídricos



V Fórum do Observatório Ambiental
Alberto Ribeiro Lamego

ISSN CD-ROM 2316-5049

do Ibama em Minas confirmou que a Indústria Cataguazes cumpriu o termo de ajustamento de conduta (TAC) firmado com o órgão em dezembro de 2003 (Paduaonline, 2003).

O relatório técnico do Ibama foi entregue à Secretaria de Estado de Meio Ambiente e Desenvolvimento Sustentável, à Fundação Estadual de Meio Ambiente (Feam), ambos do Estado de Minas Gerais, ao Ministério Público Estadual e Federal e à Prefeitura de Cataguazes.

O relatório entregue em 2004 pelo Ibama identifica as ações e procedimentos adotados nos dois reservatórios da empresa e relata a situação atual do Córrego do Cágado e dos rios Pomba e Paraíba do Sul. Na barragem 2, que não foi rompida, os técnicos constataram que o terreno ao redor da represa e o sistema de drenagem foram recuperados. Na barragem 1, que rompeu e causou a tragédia ecológica, as obras de engenharia na estrutura da represa foram prejudicadas pelas chuvas. Por causa disso, a transferência da lixívia para este reservatório ficou paralisada (Paduaonline, 2003).

A vistoria feita no Córrego do Cágado concluiu que houve uma diminuição no assoreamento do leito. Em relação à vegetação da margem, ainda existem porções de solo com concentração de pH que não propiciam ambiente adequado para que a vegetação renasça. Sobre os rios Pomba e Paraíba do Sul, a análise técnica revela que o curso d'água voltou às condições anteriores ao acidente, havendo, inclusive, atividades de pesca em alguns pontos.

A próxima etapa a ser cumprida pela empresa será o tratamento biológico da lixívia, para possibilitar a desativação dos dois reservatórios. A indústria Cataguazes de Papel apresentou o projeto de biorremediação do material.

Classificação de Problemas Inversos

Há vários tipos de classificação para os problemas inversos, sendo aqui citados alguns deles (Silva Neto e Soeiro, 2002). De acordo com os objetivos a serem tratados, os problemas inversos em transferência de massa podem ser divididos em

- Estimativa de propriedades;
- Estimativa de condição de contorno / termo fonte e
- Estimativa de condição inicial.

Pode-se também fazer uma classificação levando em consideração o tipo de formulação do problema inverso:

- Formulações explícitas ;
- Formulações implícitas.

No primeiro tipo de formulação as incógnitas aparecem explicitamente após a manipulação das equações que regem o problema, e em alguns casos não exige a solução do problema direto. No segundo tipo de formulação são usualmente resolvidos problemas de otimização, tanto de dimensão finita quanto de dimensão infinita, com o emprego de métodos iterativos, sendo estes divididos em dois tipos: os métodos determinísticos e os métodos estocásticos.

Há uma outra classificação para os problemas inversos apresentada por Beck (1988) que agrupou os problemas inversos em duas grandes classes:

- Estimativa de parâmetros e
- Estimativa de funções.



Estas classes referem-se, respectivamente, à estimativa de objetos matemáticos de dimensão finita e de dimensão infinita (Silva Neto e Soeiro, 2002).

Silva Neto e Moura Neto (1999) propuseram uma classificação levando em consideração não só a dimensão dos objetos matemáticos a serem estimados como também a dimensão do modelo matemático usado na formulação do problema direto.

Tem-se assim uma divisão dos modelos a serem considerados conforme estes sejam de dimensão finita, caso por exemplo de um sistema de N equações a M incógnitas, ou de dimensão infinita, caso de um problema modelado matematicamente por uma equação diferencial parcial ou uma equação integro-diferencial e também se o objeto a ser estimado é de dimensão finita, i.e. número finito de parâmetros ou constantes do modelo, ou de dimensão infinita, caso de uma função ou de um número infinito de parâmetros. Esta classificação está expressa na Tabela 1 na seguinte forma:

Tipo I: Estimativa de um número finito de parâmetros em um modelo de dimensão finita;

Tipo II: Estimativa de um número finito de parâmetros em um modelo de dimensão infinita;

Tipo III: Estimativa de um número infinito de parâmetros, ou de uma função, em um modelo de dimensão infinita.

Tabela 3 – Classificação de Problemas inversos

Estimativa de quantidade \rightarrow Dimensão do Modelo \downarrow	Finita	Infinita
Finita	Tipo I	Não se aplica
Infinita	Tipo II	Tipo III

De acordo com a classificação de Silva Neto e Moura Neto (1999) tem-se então nesta dissertação problemas inversos do Tipo II, onde o modelo matemático que descreve os fenômenos envolvidos é de dimensão infinita (equação diferencial) e os objetos matemáticos a serem estimados são de dimensão finita.

Formulação do Problema Inverso

Quando no problema são conhecidas a geometria, as propriedades físicas e químicas, a velocidade do escoamento, as taxas de produção e consumo do poluente, e as condições inicial e de contorno, tem-se então o problema direto, que ao ser resolvido fornece o valor de $C(x, t)$ em qualquer posição x do domínio de interesse, em qualquer instante de tempo t , lembrando que C representa a concentração de poluentes. Para a solução do problema direto é usado neste trabalho o método de diferenças finitas, fornecendo então $C_{calc}(x, t)$.

Quando algumas das grandezas listadas no parágrafo anterior são desconhecidas, mas dados experimentais da concentração em alguns pontos do meio, em alguns instantes de tempo, são conhecidas, i.e. $C_{exp}(x, t)$, $i = 1, 2, \dots, I$ e $j = 1, 2, \dots, J$, pode-se tentar obter estimativas para as grandezas desconhecidas.



Neste trabalho problemas inversos associados ao transporte de poluentes em rios são formulados implicitamente sendo resolvidos com o método de Levenberg-Marquardt (1963).

Busca-se, portanto a minimização do funcional de resíduos quadrados.

$$R = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J [C_{calc}(x_i, t_j) - C_{med}(x_i, t_j)]^2 \quad (1)$$

onde C_{calc} e C_{med} representam respectivamente os valores calculados e medidos experimentalmente da concentração do poluente.

Neste trabalho também é feita uma análise de sensibilidade com relação ao parâmetro do modelo que se deseja determinar.

Nesta seção consideraremos o problema inverso em que se busca uma estimativa para o vetor de incógnitas

$$\vec{Z} = \{Z_1, Z_2, Z_3, \dots, Z_K\}^T \quad (2 a)$$

onde K é o número total de incógnitas.

Aqui buscaremos estimar o coeficiente de difusão de forma isolada, isto é

$$\vec{Z} = \{D\} \quad (2 b)$$

Este problema inverso é aqui formulado como um problema de otimização de dimensão finita no qual se busca minimizar o funcional dos resíduos quadrados entre as concentrações de poluentes calculadas (com estimativas para as incógnitas) e as concentrações medidas experimentalmente. A Eq. (1) é escrita como

$$R(\vec{Z}) = \vec{F}^T \vec{F} \quad (3)$$

onde os elementos do vetor de resíduos é dado por

$$F_1(\vec{Z}) = C_{calc_i}(\vec{Z}) - C_{med_i}, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (4)$$

e N é o número de medidas experimentais disponíveis.

Solução do Problema Inverso pelo Método de Levenberg-Marquardt

Para facilitar a notação, vamos considerar o duplo somatório da seguinte forma

$$R = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J [C_{calc}(x_i, t_j) - C_{med}(x_i, t_j)]^2 = \sum_{i=1}^N [C_{calc}(x_i, t_j) - C_{med}(x_i, t_j)]^2 \quad (5)$$



IV Seminário Regional Sobre Gestão de Recursos Hídricos

quantidade e qualidade das águas:
inovação tecnológica e recursos hídricos



V Fórum do Observatório Ambiental
Alberto Ribeiro Lamego

ISSN CD-ROM 2316-5049

No ponto de mínimo tem-se

$$\frac{\partial R}{\partial Z} = 0 \quad (6)$$

ou seja

$$\frac{\partial R}{\partial D} = 0 \quad (7)$$

Das Eqs. (6) e (8) obtém-se

$$2 \sum_{i=1}^N [C_{calci}(\vec{Z}) - C_{medi}] \frac{\partial C_{calci}}{\partial D} = 0 \quad (8)$$

ou então

$$\sum_{i=1}^N F_i(\vec{Z}) \frac{\partial C_{calci}}{\partial D} = 0 \quad (9)$$

que desenvolvendo o somatório resulta

$$\begin{aligned} [C_{calc_1}(\vec{Z}) - C_{med_1}] \frac{\partial C_{calc_1}}{\partial D} + [C_{calc_2}(\vec{Z}) - C_{med_2}] \frac{\partial C_{calc_2}}{\partial D} + \dots + \\ + [C_{calc_N}(\vec{Z}) - C_{med_N}] \frac{\partial C_{calc_N}}{\partial D} = 0 \end{aligned} \quad (10)$$

Usando a definição de matriz Jacobiana cujos elementos são dados por

$$J_{ij} = \frac{\partial C_{calci}}{\partial Z_j}, \quad i = 1, 2, \dots, K \text{ (aqui } K = 1) \quad (11)$$

é montada assim

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial C_{calc_1}}{\partial D} \\ \frac{\partial C_{calc_2}}{\partial D} \\ \vdots \\ \frac{\partial C_{calc_N}}{\partial D} \end{bmatrix} \quad (12)$$



IV Seminário Regional Sobre Gestão de Recursos Hídricos

quantidade e qualidade das águas:
inovação tecnológica e recursos hídricos



V Fórum do Observatório Ambiental
Alberto Ribeiro Lamego

ISSN CD-ROM 2316-5049

A matriz Jacobiana transposta é obtida a partir da Eq. (12)

$$J^T = \left[\begin{array}{cccc} \frac{\partial C_{calc_1}}{\partial D} & \frac{\partial C_{calc_2}}{\partial D} & \dots & \frac{\partial C_{calc_N}}{\partial D} \end{array} \right] \quad (13)$$

Como o vetor \vec{F} é dado por

$$\vec{F} = \left\{ \begin{array}{c} C_{calc_1} - C_{med_1} \\ C_{calc_2} - C_{med_2} \\ \vdots \\ C_{calc_N} - C_{med_N} \end{array} \right\} \quad (14)$$

a Eq.(10) pode ser escrita de forma compacta como

$$J^T(\vec{Z})\vec{F}(\vec{Z}) = 0 \quad (15)$$

Fazendo uma expansão de Taylor e mantendo apenas os termos até a primeira ordem,

$$\vec{F}(\vec{Z}^{k+1}) = \vec{F}(\vec{Z}^k) + J(\vec{Z}^{k+1} - \vec{Z}^k) \quad (16)$$

obtem-se das Eqs. (15) e (16), onde k será o contador de iterações no procedimento iterativo a ser construído,

$$J^T(\vec{Z}^k) \left[\vec{F}(\vec{Z}^k) + J(\vec{Z}^{k+1} - \vec{Z}^k) \right] = 0 \quad (17)$$

ou então

$$J^T \vec{F}(\vec{Z}^k) + J^T J(\vec{Z}^{k+1} - \vec{Z}^k) = 0 \quad (18)$$

Da Eq.(4.18) escreve-se então

$$\Delta \vec{Z}^k = \vec{Z}^{k+1} - \vec{Z}^k = -[J^T J]^{-1} J^T \vec{F}(\vec{Z}^k) \quad (19)$$



IV Seminário Regional Sobre Gestão de Recursos Hídricos

quantidade e qualidade das águas:
inovação tecnológica e recursos hídricos



V Fórum do Observatório Ambiental
Alberto Ribeiro Lamego

ISSN CD-ROM 2316-5049

A partir de uma estimativa inicial \vec{Z}^0 um procedimento iterativo é construído onde novas estimativas são obtidas com

$$\vec{Z}^{k+1} = \vec{Z}^k + \Delta\vec{Z}^k \quad (20)$$

onde as correções $\Delta\vec{Z}^k$ são obtidas a partir da Eq (19). Em alguns casos de interesse prático pode não ser interessante calcular a inversa da matriz $J^T J$. Ao invés de se obter correções $\Delta\vec{Z}^k$ a partir da Eq (19) opta-se então pela solução do sistema de equações algébricas lineares

$$J^T(\vec{Z}^k) \vec{J}(\vec{Z}^k) \Delta\vec{Z}^k = -J^T(\vec{Z}^k) \vec{F}(\vec{Z}^k) \quad (21)$$

Visando melhorar a convergência do método Marquardt propôs em 1963 adicionar um termo à diagonal da matriz $J^T J$. Um dos revisores do trabalho de Marquardt comentou que Levenberg havia feito uma proposta semelhante em 1944. O método que passou a ser conhecido como método de Levenberg-Marquardt consiste portanto em substituir a Eq. (21) por

$$\left[J^T(\vec{Z}^k) \vec{J}(\vec{Z}^k) + \lambda^k I \right] \Delta\vec{Z}^k = -J^T(\vec{Z}^k) \vec{F}(\vec{Z}^k) \quad (22)$$

onde λ^k é um fator de amortecimento que é alterado ao longo do procedimento iterativo de acordo com a proposta de Marquardt (1963).

Marquardt (1963) (apud Silva Neto e Soeiro, 2002) propôs um procedimento para a alteração do fator de amortecimento ao longo do procedimento iterativo. Inicia-se com um valor relativamente alto λ^0 , e este é reduzido

$$\lambda^{k+1} = \frac{\lambda^k}{2} \quad (23)$$

se

$$R(\vec{Z}^{k+1}) \leq \frac{R(\vec{Z}^k)}{2} \quad (24)$$

Caso a condição (25) não se verifique o valor de λ é aumentado,

$$\lambda^{k+1} = 2\lambda^k \quad (25)$$



e o procedimento iterativo é reiniciado usando \vec{Z}^k .

Silva Neto e Moura Neto (1999) mostraram que o método de Levenberg-Marquardt é semelhante ao método de regularização de Tikhonov com um termo de regularização quadrático. O fator de amortecimento λ^k atua então de forma semelhante ao parâmetro de regularização de Tikhonov, causando então um deslocamento espectral.

Nos capítulos anteriores, foi abordada a modelagem matemática de problemas diretos em transporte de poluentes, com o método de diferenças finitas utilizado na obtenção de aproximações para as soluções dos mesmos. Neste artigo, são tratados problemas inversos relativos aos problemas diretos formulados e solucionados neste mesmo artigo.

Quando formulações implícitas baseadas em problemas de otimização são empregadas na solução de problemas inversos, onde o problema direto é resolvido várias vezes ao longo do procedimento iterativo, faz-se necessário o uso de um algoritmo para a solução do problema direto que tenha ao mesmo tempo um bom desempenho computacional e forneça resultados com boa precisão, i.e. pelo menos da mesma ordem de precisão dos dados experimentais.

Neste artigo é resolvido um problema inverso de transporte de poluentes para a estimativa da coeficiente de Difusão "D", usando o método de Levenberg-Marquardt (Marquardt, 1963) (apud Silva Neto e Soeiro, 2002).

Na próxima seção é feita uma análise de sensibilidade com relação ao coeficiente de difusão, D, e no final são apresentados resultados de algumas simulações para a solução do problema inverso utilizando dados experimentais sintéticos gerados adicionando ruído pseudo-randômico aos valores calculados para a concentração do poluente.

Análise dos Coeficientes de Sensibilidade

Os elementos da matriz Jacobiana

$$\left(\vec{X}_{z_j}\right)_i = J_j = \frac{\partial C_{calc_i}}{\partial Z_j}, \quad \begin{cases} i = 1, 2, \dots, N \\ j = 1, 2, \dots, K \end{cases} \quad (26)$$

são também conhecidos como coeficientes de sensibilidade.

Ao longo do procedimento iterativo descrito na seção anterior é necessária a solução do problema direto usando estimativas para as incógnitas \vec{Z}^k . Quanto maior a sensibilidade das concentrações à variação das incógnitas, maiores são as chances de se obter uma boa estimativa para as incógnitas.

Voltando ao nosso problema inverso descrito neste capítulo, buscamos obter uma estimativa para o coeficiente de difusão D. Os coeficientes de sensibilidade são portanto

$$\bar{X}_{D_i} = \frac{\partial C_{calc_i}}{\partial D}, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (27)$$



Ao invés de se usar os coeficientes de sensibilidade dados pelas Eqs. (27) podem ser usados os coeficientes de sensibilidade modificados

$$\left(\bar{X}_{z_j}\right)_i = Z_j \frac{\partial C_{calc_i}}{\partial Z_j}, \quad \begin{cases} i = 1, 2, \dots, N \\ j = 1, 2, \dots, K \end{cases} \quad (28)$$

Para o nosso problema tem-se portanto,

$$\bar{X}_{D_i} = D \frac{\partial C_{calc_i}}{\partial D}, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (29)$$

Segue abaixo a análise de sensibilidade do coeficiente de difusão para três sensores localizados no ponto mais alto do rio, no ponto intermediário do rio e no ponto mais baixo do rio. As posições exatas dos sensores são 1500 m para o primeiro sensor, 2500 m para o segundo sensor, e 4000 m para o terceiro sensor. O primeiro caso que se analisa aqui seria o lançamento de poluentes no ponto mais alto do rio, exatamente na posição 200 m, com 100 pontos na malha espacial e 360 pontos na malha temporal, utilizando como valor para o coeficiente de difusão $D=20$ m²/s e velocidade de 1 m/s neste e para todos os outros casos, num tempo total de uma hora de observação.

Figura 5 – Esquema mostrando a posição dos três sensores e os pontos de lançamento

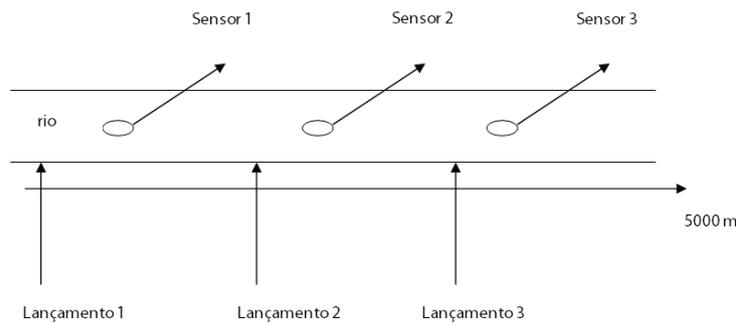
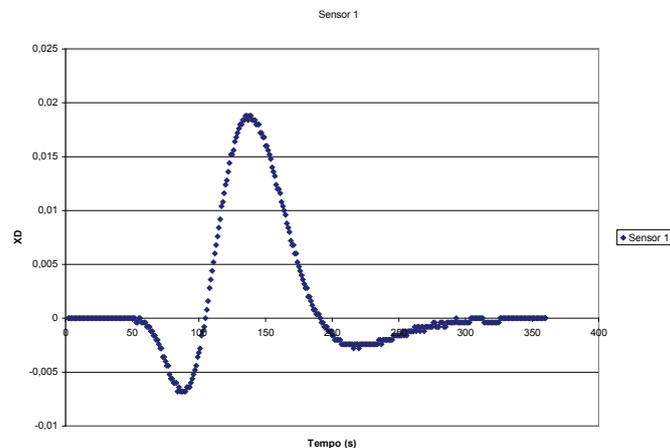


Figura 6 – Sensibilidade do sensor 1 com lançamento de poluentes no ponto mais alto do rio





IV Seminário Regional Sobre Gestão de Recursos Hídricos

quantidade e qualidade das águas: inovação tecnológica e recursos hídricos



V Fórum do Observatório Ambiental
Alberto Ribeiro Lamego

ISSN CD-ROM 2316-5049

Figura 7 – Sensibilidade do sensor 2 com lançamento de poluentes no ponto mais alto do rio

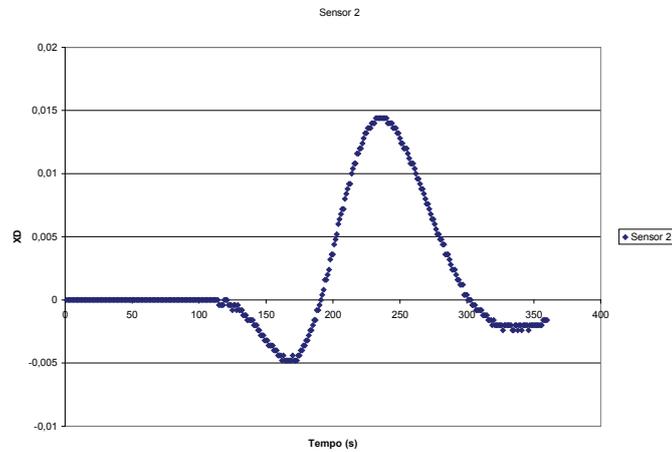


Figura 8 – Sensibilidade do sensor 3 com lançamento de poluentes no ponto mais alto do rio

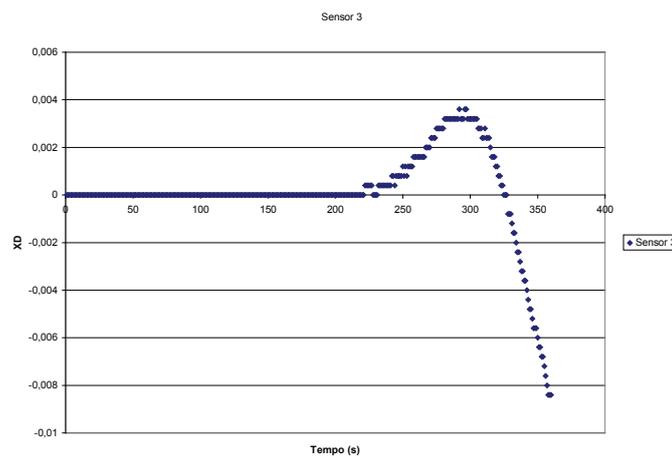
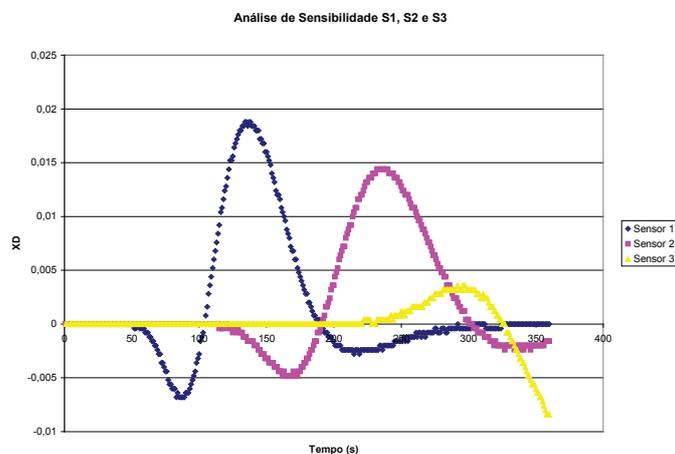


Figura 9 – Gráfico comparativo da sensibilidade dos três sensores com lançamento de poluentes no ponto mais alto do rio





O que se apresenta agora, é a análise de sensibilidade quando a mancha é injetada na posição 2300 m, mantendo-se as mesmas posições para os três sensores, e também mantendo o mesmo valor para o coeficiente de difusão e velocidade, e para o número de pontos tanto da malha temporal, como da malha espacial.

Figura 10 – Sensibilidade do sensor 1 com lançamento de poluentes no ponto intermediário do rio

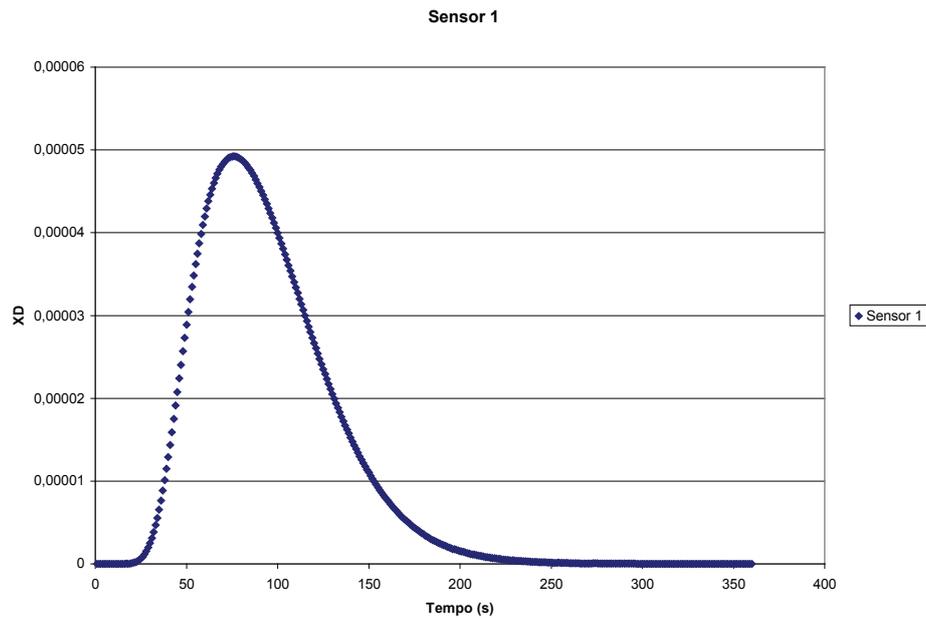


Figura 11 – Sensibilidade do sensor 2 com lançamento de poluentes no ponto intermediário do rio

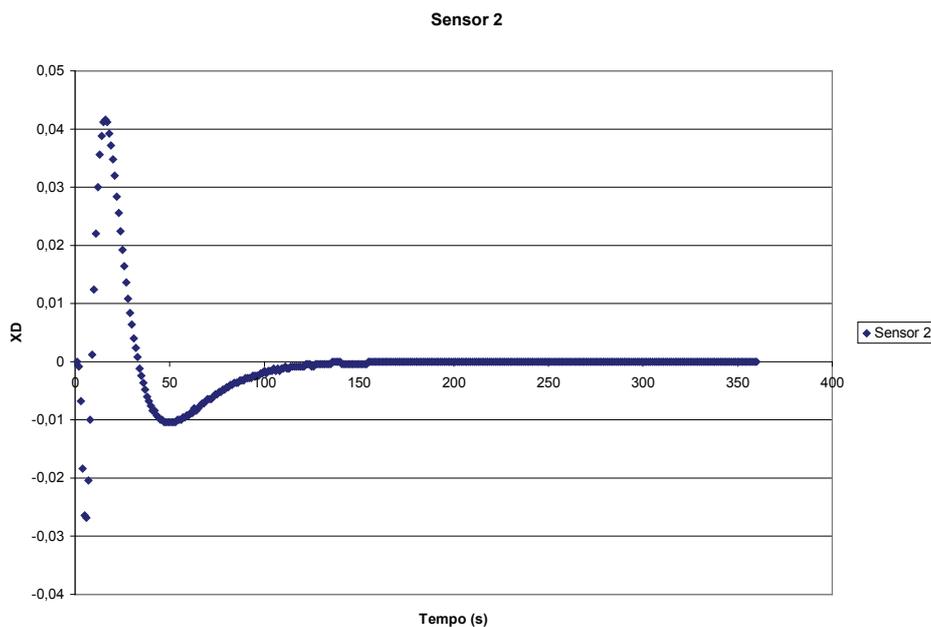




Figura 12 – Sensibilidade do sensor 3 com lançamento de poluentes no ponto intermediário do rio

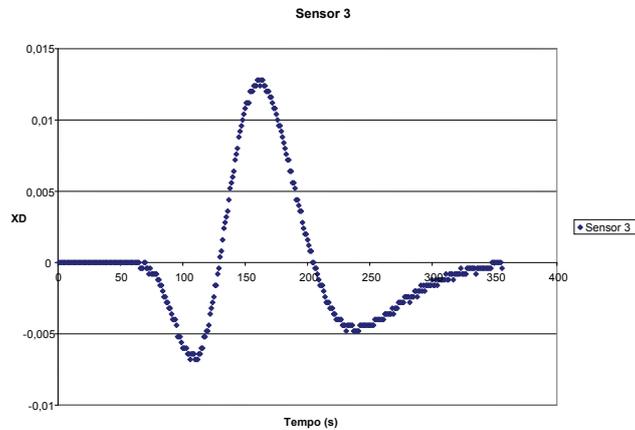
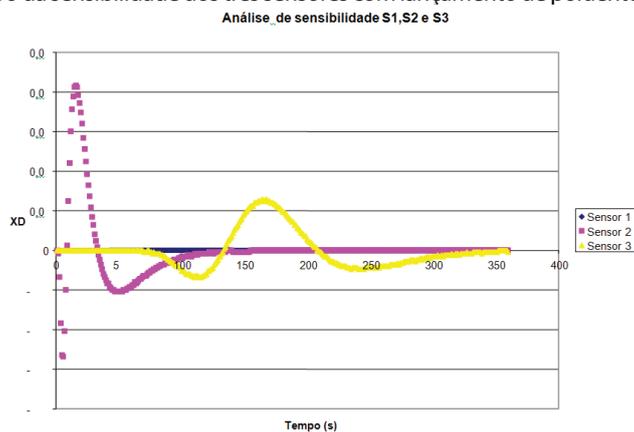


Figura 13 – Gráfico comparativo da sensibilidade dos três sensores com lançamento de poluentes no ponto intermediário do rio



Seguindo a mesma metodologia o lançamento ocorrerá num trecho mais baixo do rio, exatamente a 3400 m, mantendo novamente as posições dos três sensores, o valor do coeficiente de difusão e o número de pontos tanto da malha temporal, como espacial.

Figura 14 – Sensibilidade do sensor 1 com lançamento de poluentes no ponto mais baixo do rio

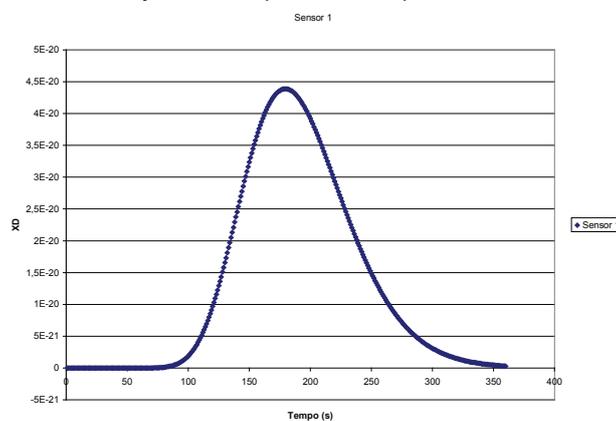




Figura 15 – Sensibilidade do sensor 2 com lançamento de poluentes no ponto mais baixo do rio

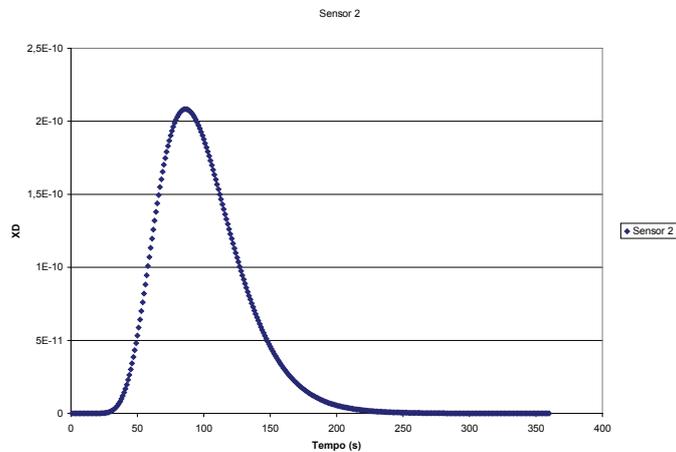


Figura 16 – Sensibilidade do sensor 3 com lançamento de poluentes no ponto mais baixo do rio

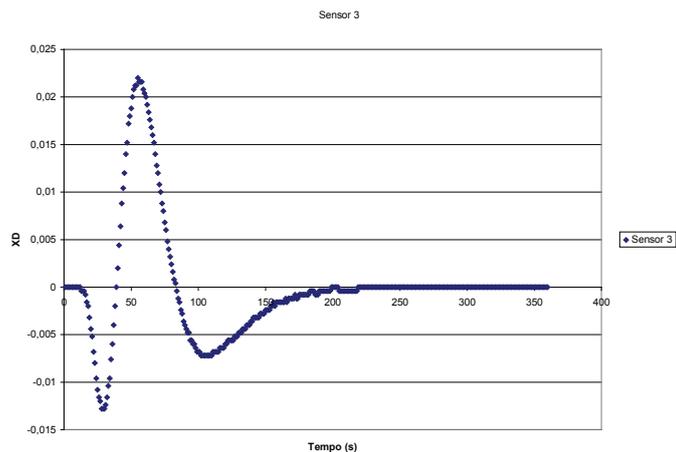
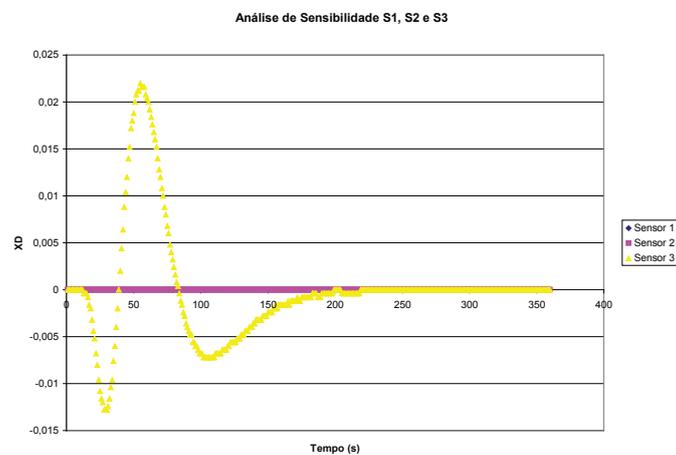


Figura 17 – Gráfico comparativo da sensibilidade dos três sensores com lançamento de poluentes no ponto mais baixo do rio





Dos resultados apresentados observa-se que conforme esperado a maior sensibilidade ocorre para os sensores localizados próximos ao ponto de injeção.

Este aspecto será levado em consideração na solução dos problemas inversos apresentados na próxima seção do artigo.

Resultados do Problema Inverso

Rio de Velocidade Constante

Como não estavam disponíveis dados experimentais reais, foram usados o que se chama de dados experimentais sintéticos, obtidos adicionando ruídos randômicos aos valores das concentrações de poluentes gerados pelo problema direto

$$Y_i = C_i + \rho e_i$$

onde C_i é concentração de poluentes calculada, ρ é o desvio padrão do erro experimental e e_i é um número pseudo-randômico, gerado por uma rotina computacional.

Vários casos teste foram efetuados com o intuito de verificar a eficácia do procedimento descrito nesta dissertação para a estimativa do coeficiente de difusão D .

Os resultados do problema inverso são apresentados como uma certa relação com os casos para o problema direto, ou seja, serão apresentadas simulações para trechos diferentes do rio, especificamente, no trecho mais alto do rio, no trecho intermediário e no trecho mais baixo do rio, com três diferentes velocidades e três diferentes coeficientes de difusão, apresentadas em duas tabelas, a primeira com $\rho=0,002$ e a segunda com $\rho=0,01$. Os demais valores destes lançamentos estarão dispostos na parte superior de cada tabela de resultados.

Nestas tabelas estão apresentadas as estimativas para o coeficiente de difusão, D , onde em cada caso é usado um conjunto novo de números randômicos, fazendo assim simulação de experimentos independentes.

Nos casos apresentados a seguir foram obtidas estimativas para três diferentes valores exatos do coeficiente de difusão: 100 m²/s, 150 m²/s e 200 m²/s. Usando sempre como estimativa inicial o valor 1000 m²/s, isto é, significamente diferente dos valores exatos, com número máximo de 20 iterações para o procedimento iterativo.

O tempo computacional para a obtenção dos resultados do problema inverso com velocidade constante, é em média de 60s.

Tabela 4 – Estimativas para o coeficiente de difusão para lançamentos no ponto mais alto do rio com $\rho=0,002$

DADOS: $\rho=0,002$ $\gamma=0,5$ $x_o=100\text{ m}$ $x_f=150\text{ m}$ $L=5000\text{ m}$ $\Delta t=10\text{ s}$			
Velocidade (m/s)	0,5	1	1,5
D (m ² /s)			
100	100,07 erro=0,07 %	100,38 erro=0,38 %	100,11 erro=0,11 %
150	150,28 erro=0,19 %	150,48 erro=0,32 %	150,27 erro=0,18 %
200	200,02 erro=0,01 %	200,12 erro=0,06 %	200,80 erro=0,4 %



IV Seminário Regional Sobre Gestão de Recursos Hídricos

quantidade e qualidade das águas:
inovação tecnológica e recursos hídricos



V Fórum do Observatório Ambiental
Alberto Ribeiro Lamego

ISSN CD-ROM 2316-5049

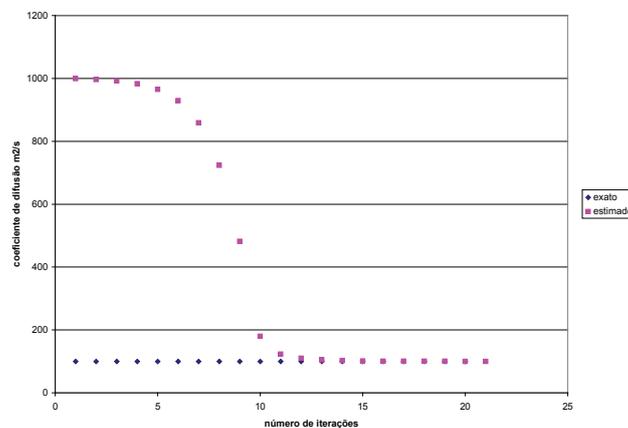
Seja x_0 e x_f , as posições inicial e final de injeção da mancha de poluentes.

Os erros apresentados logo abaixo do valor estimado do coeficiente de difusão representam o erro relativo ao valor exato, e o ruído de 0,002 corresponde a um erro na faixa de 0,001% a 1,1% nos dados experimentais.

Observamos na tabela acima erros um pouco maiores para velocidade de 1 m/s, para as demais combinações de coeficiente de difusão e velocidade, os erros relativos se apresentaram numa faixa consideravelmente baixa.

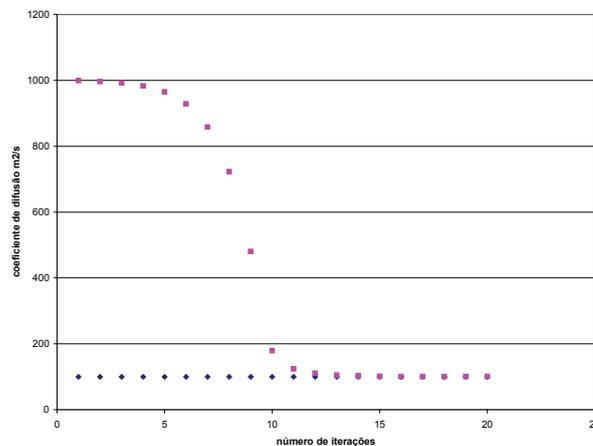
Na Tabela 5 mantemos todos os parâmetros, aumentando um pouco o ruído de 0,002 para 0,01. Porém, antes da apresentação da tabela observa-se um caso com as condições da tabela anterior mas com ruído nulo. Na Fig. 18 vemos que em torno da décima iteração se obtém a convergência.

Figura 18 - Estimativa do coeficiente de difusão em função do número de iterações com lançamento de poluentes no ponto mais alto do rio com ruído nulo



O gráfico na Fig. 19 embora muito similar ao anterior apresenta os resultados para o caso no qual foi utilizado um ruído de 0,002, mantendo os demais fatores constantes. Mesmo com um número pequeno de iterações e acrescido de ruído a solução se aproxima muito do valor exato do coeficiente de difusão.

Figura 19 - Estimativa do coeficiente de difusão em função do número de iterações com lançamento de poluentes no ponto mais alto do rio com ruído de $\rho=0,002$





É importante ressaltar que o valor utilizado para λ^o na Eq. (23), é de 0,001 em todos os casos apresentados para o problema inverso.

No último gráfico percebemos que com um número pequeno de iterações já se consegue aproximar muito do valor exato, convergindo em torno da décima segunda iteração.

Tabela 5 – Estimativas para o coeficiente de difusão para lançamentos no ponto mais alto do rio com $\rho = 0,01$.

DADOS: $\rho = 0,01$ $\gamma = 0,5$ $x_o = 100$ m $x_f = 150$ m $L = 5000$ m $\Delta t = 10$ s					
Velocidade (m/s) D (m ² /s)	0,5	1	1,5		
100	98,62 erro=1,38 %	100,68 erro=0,68%	101,45 erro=1,46 %		
150	142,30 erro=5,13 %	145,68 erro=2,88 %	148,12 erro=1,25 %		
200	185,23 erro=7,38 %	187,41 erro=6,29 %	189,49 erro=5,25 %		

Tentando fazer uma análise deste último caso apresentado, o que se percebe é que a combinação de velocidade baixa com coeficiente de difusão alto produziu os piores resultados, mas mesmo assim, embora nenhum dos resultados tenha ficado fora de uma faixa aceitável. O ruído de 0,01 produziu um erro na faixa de 0,005% a 6% nos dados experimentais.

São apresentadas a seguir estimativas para pontos intermediários do rio, mantendo os outros valores do caso.

Tabela 6 – Estimativas para o coeficiente de difusão para lançamentos no ponto intermediário do rio $\rho = 0,002$

DADOS: $\rho = 0,002$ $\gamma = 0,5$ $x_o = 2500$ m $x_f = 2550$ m $L = 5000$ m $\Delta t = 10$ s					
Velocidade (m/s) D (m ² /s)	0,5	1	1,5		
100	99,90 erro=0,09 %	100,35 erro=0,36 %	100,30 erro=0,30 %		
150	149,39 erro=0,40 %	150,66 erro=0,44 %	151,09 erro=0,73 %		
200	200,29 erro=0,15 %	200,56 erro=0,28 %	200,42 erro=0,21 %		

Os resultados apresentados na tabela 6, indicam que para o caso com o menor coeficiente de difusão se encontra o menor erro relativo. O ruído de 0,002 produziu um erro na faixa de 0,04% a 0,8% nos dados experimentais

Tabela 7 – Estimativas para o coeficiente de difusão para lançamentos no ponto intermediário do rio $\rho = 0,01$.

DADOS: $\rho = 0,01$ $\gamma = 0,5$ $x_o = 2500$ m $x_f = 2550$ m $L = 5000$ m $\Delta t = 10$ s					
Velocidade (m/s) D (m ² /s)	0,5	1	1,5		
100	102,92 erro=2,92 %	105,12 erro=5,13 %	105,87 erro= 5,87 %		
150	152,53 erro=1,69 %	158,45 erro=5,64 %	160,13 erro=6,76 %		
200	201,17 erro= 0,59 %	208,40 erro=4,20 %	210,43 erro=5,21 %		



O ruído de 0,01 produziu um erro na faixa de 0,2% a 4,5% nos dados experimentais.

Tabela 8 – Estimativas para o coeficiente de difusão para lançamentos no ponto mais baixo do rio $\rho = 0,002$

DADOS: $\rho = 0,002$ $\gamma = 0,5$ $x_o = 4000$ m $x_f = 4050$ m $L = 5000$ m $\Delta t = 10$ s				
Velocidade (m/s)	0,5	1	1,5	
D (m ² /s)				
100	100,10 erro=0,10 %	100,30 erro=0,31 %	100,02 erro=0,03 %	
150	150,03 erro=0,02 %	149,90 erro=0,06 %	149,97 erro=0,012 %	
200	199,55 erro=0,22 %	199,95 erro=0,02 %	199,13 erro=0,50 %	

Agora para finalizar, são apresentadas as estimativas para pontos mais baixos do rio. Onde em média pode-se dizer encontra-se os melhores resultados para a situação do rio com velocidade constante.

O ruído de 0,002 produziu um erro na faixa de 0,05% a 0,7% nos dados experimentais.

Tabela 9 – Estimativas para o coeficiente de difusão para lançamentos no ponto mais baixo do rio $\rho = 0,01$.

DADOS: $\rho = 0,01$ $\gamma = 0,5$ $x_o = 4000$ m $x_f = 4050$ m $L = 5000$ m $\Delta t = 10$ s				
Velocidade (m/s)	0,5	1	1,5	
D (m ² /s)				
100	100,20 erro=0,20 %	101,81 erro=1,81 %	103,05 erro=3,06 %	
150	148,49 erro=1,0 %	154,57 erro=3,05 %	155,38 erro=3,59 %	
200	193,89 erro=3,05 %	201,69 erro=0,85 %	207,05 erro=3,53 %	

Rio de Velocidade Variável

O procedimento para a apresentação das estimativas do problema inverso do rio com velocidade variável é muito similar àquela empregada na seção anterior, exceto pelo fato de ter um problema em que a velocidade varia com o espaço e o tempo, impossibilitando a apresentação numa tabela de dados. Sendo assim, o que se faz é apresentar como antes, as estimativas para a parte mais alta do rio, a região intermediária e a região mais baixa do rio, para três diferentes coeficientes de difusão, distribuídos em duas tabelas onde na primeira tem-se $\rho = 0,002$ e na segunda $\rho = 0,01$.

O interessante é ao observar os resultados onde o rio é considerado com velocidade variável, encontramos resultados diversos, mas nenhum que se distanciasse consideravelmente dos demais, diferente do que foi observado quando o rio era considerado com velocidade constante. O ruído de 0,02 produziu um erro na faixa de 0,01% a 0,8% nos dados experimentais.

Tabela 10 – Estimativas para o coeficiente de difusão de um rio de velocidade variável com $\rho = 0,002$.

DADOS: $\rho = 0,002$ $\gamma = 0,5$ $L = 5000$ m $\Delta t = 10$ s			
Posição (m)	$x_o = 100$, $x_f = 150$	$x_o = 2500$, $x_f = 2550$	$x_o = 4000$, $x_f = 4050$
D (m ² /s)			
100	100,32 erro=0,32 %	100,12 erro=0,12 %	100,02 erro=0,02 %
150	150,70 erro=0,46 %	150,03 erro=0,02 %	149,59 erro=0,26 %
200	200,22 erro=0,11 %	200,07 erro=0,04 %	199,86 erro=0,07 %

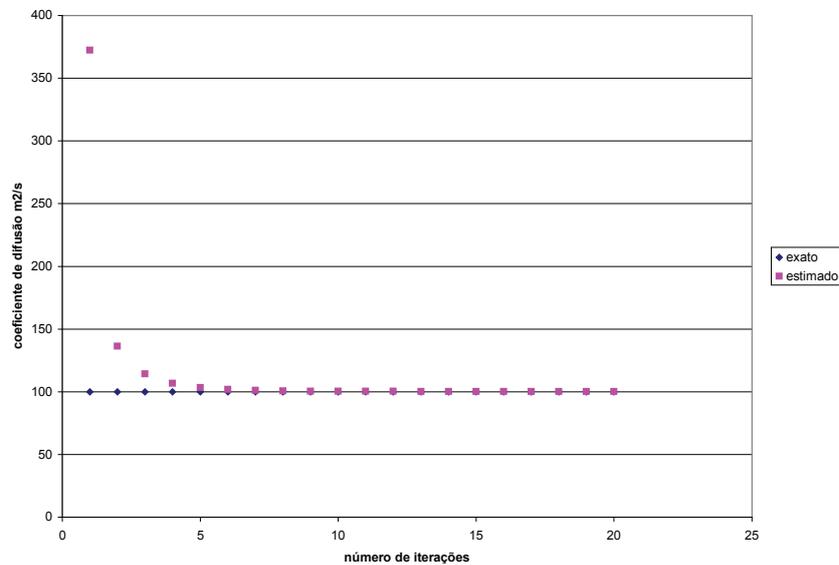


Tabela 11 – Estimativas para o coeficiente de difusão de um rio de velocidade variável com $\rho = 0,01$.

DADOS: $\rho = 0,01$		$\gamma = 0,5$	$L = 5000$ m	$\Delta t = 10$ s
D (m ² /s)	Posição (m)	$x_o = 100, x_f = 150$	$x_o = 2500, x_f = 2550$	$x_o = 4000, x_f = 4050$
100		98,69 erro=1,30 %	103,74 erro=3,74 %	99,77 erro=0,22 %
150		142,12 erro=5,25 %	153,44 erro=2,30 %	147,30 erro=1,80 %
200		186,87 erro=6,56 %	205,17 erro=2,58 %	195,15 erro=2,42 %

Vale lembrar que aqui com os resultados do problema do rio com velocidade variável utilizou-se a metodologia de se trabalhar com 20 iterações, atribuindo-se como valor inicial o valor distante de $D_o = 1000$ m²/s. Analisando a tabela encontramos situações em que se consegue nas estimativas valores exatos, ou seja, com erro relativo nulo, como apresentado na Tabela 11, quando utilizado o menor coeficiente de difusão, ou seja, $D = 100$ m²/s. O ruído de 0,01 produziu um erro na faixa de 0,5% a 4,5% nos dados experimentais.

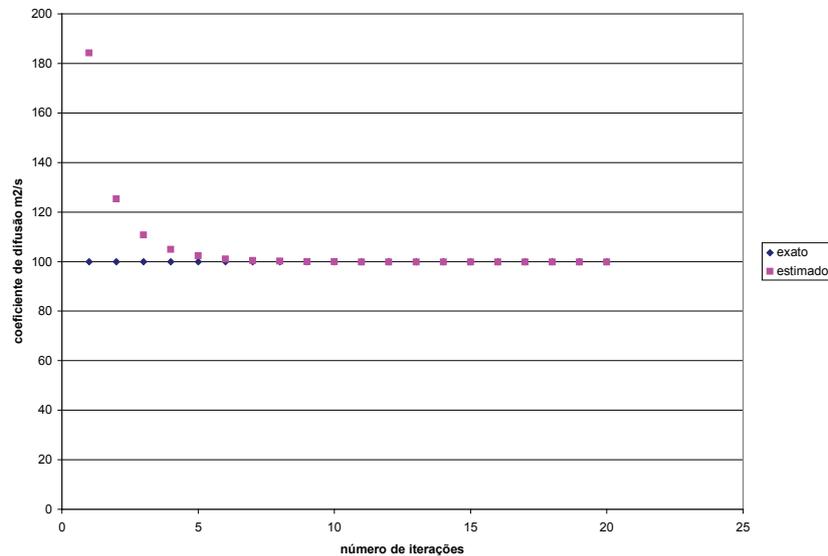
Figura 20 - Estimativa do coeficiente de difusão em função do número de iterações com lançamento de poluentes no ponto mais alto do rio de velocidade variável com ruído $\rho = 0,002$



O tempo computacional para a obtenção dos resultados do problema direto com velocidade variável, é em média de 180s.



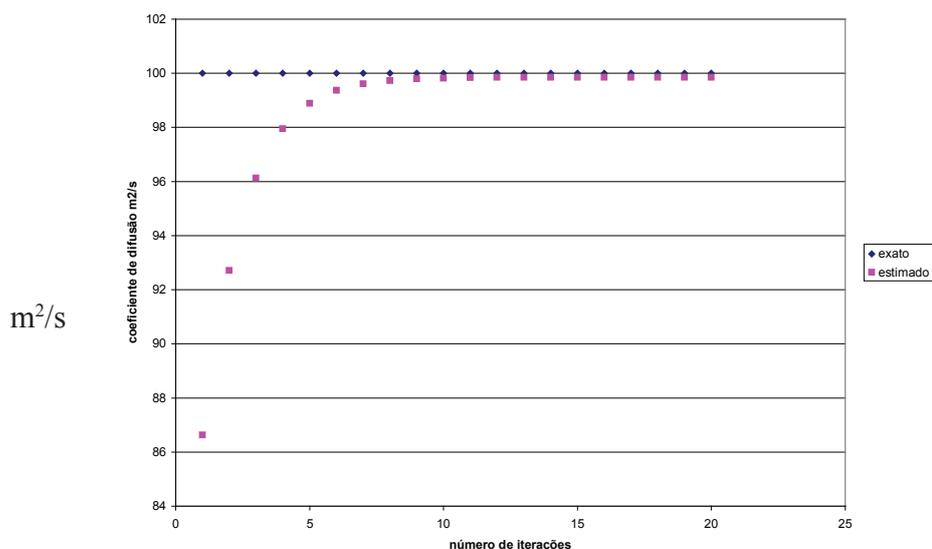
Figura 21 - Estimativa do coeficiente de difusão em função do número de iterações com lançamento de poluentes no ponto intermediário do rio de velocidade variável com ruído $\rho = 0,002$



Os gráficos confirmam que além de um erro relativo baixo, temos uma convergência rápida, como visto, em torno da terceira ou quinta iteração.

Estas três últimas figuras apresentam o resultado com o coeficiente de difusão exato 100 m²/s, em três pontos de lançamento do rio, ou seja, uma num trecho mais alto, a segunda na região intermediária, e a outra no trecho mais baixo do rio.

Figura 22 - Estimativa do coeficiente de difusão em função do número de iterações com lançamento de poluentes no ponto mais baixo do rio de velocidade variável com ruído $\rho = 0,002$





IV Seminário Regional Sobre Gestão de Recursos Hídricos

quantidade e qualidade das águas:
inovação tecnológica e recursos hídricos



V Fórum do Observatório Ambiental
Alberto Ribeiro Lamego

ISSN CD-ROM 2316-5049

Referências

ANDERSON, D.A, e TANNEHILL, J.C., PLETCHER, R.H., Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer, Hemisphere Publishing Corporation, 1984.

AMES, W.F., Numerical Methods for Partial Differential Equations, Academic Press, 1992.

BECK, J.V., Combined Parameter and Function Estimation in Heat Transfer with Application to Contact Conductance. Journal of Heat Transfer, vol. 110, pp. 1046-1058, 1988.

CHAPRA, S. C. , Surface Water-Quality Modeling, McGraw-Hill, New York, 1997.

CONAMA, Conselho Nacional do Meio Ambiente, instituído pela Lei 6.938/81 e regulamentado pelo Decreto nº 2.120.

COTTA, R. M., Integral Transforms in Computational Heat and Fluid Flow. CRC Press, Boca Raton, Florida , EUA, 1993.

FERREIRA, F.F., Nitrificação e Denitrificação em Estuários do Reino Unido, Dissertação de Mestrado em Modelagem Computacional, UERJ, Instituto Politécnico, Nova Friburgo, Brasil, 2002.

JAMES, A. A. J, Perfis de Vento Gerados Pelos Modelos OML e RAMS Aplicados a um Modelo de Poluição do Ar. Dissertação de Mestrado, UFPEL, 2004.

MARQUARDT, D. W., 1963, An algorithm for Least-Squares Estimation of Nonlinear Parameters, J. Soc. Indust. Appl. Math., vol 11, p 431-441.

NACHBIN, A. e TABAK, E., Equações Diferenciais em Modelagem Matemática Computacional, 21º Colóquio Brasileiro de Matemática, 1997.

NUNES,A.B., Comparação entre Coeficientes de Difusão Turbulentos para uma Camada Limite Planetária Gerada pelos Fatores Térmicos e Mecânicos. Dissertação de Mestrado, UFPEL, 2003.

PADUAONLINE. Desastre Ecológico Cataguases. [online] Disponível na Internet via WWW. URL: <http://paduaonline.com.br>. Arquivo lido em 10 de Agosto de 2003.

PEREZ, J.O., Simulação Numérica de Descargas Térmicas em Corpos d'Água Rasos de Geometria e Profundidade Variáveis. Dissertação de Mestrado em Engenharia Mecânica, UFSC, 1987.

SILVA NETO, A.J e SOEIRO, F.J.C.P., " Otimização e Problemas Inversos com Aplicações em Transferência de Calor e Massa", Notas de Aula da Disciplina de Problemas Inversos em Engenharia, UERJ, Nova Friburgo, 2002.

SILVA NETO, A.J. e MOURA NETO, F.D., Escolha de Modelos – Problemas Inversos em Engenharia, Notas de Aula do Minicurso Técnico MC05, XVII Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional, Santos, Brasil, 1999.



IV Seminário Regional Sobre Gestão de Recursos Hídricos

quantidade e qualidade das águas:
inovação tecnológica e recursos hídricos



V Fórum do Observatório Ambiental
Alberto Ribeiro Lamego

ISSN CD-ROM 2316-5049

STRELKOFF, T e KATOPODES, N.D., Border Irrigation Hydraulics with Zero-Inertia. J. Irrig. and Drain Div., ASCE, 103(3)325-342. 1978.

VILELA, C. P.X., Investigação do Efeito do Vento na Circulação da Baía de Guanabara-RJ, Dissertação de Mestrado em Engenharia Oceânica, UFRJ, Rio de Janeiro, Brasil, 1992.