Proceeding Series of the Brazilian Society of Applied and Computational Mathematics, Vol. 5, N. 1, 2017.

Trabalho apresentado no CNMAC, Gramado - RS, 2016.

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Análise Teórico-Experimental de Dispersão de um Contaminante com Transformações Integrais e Inferência Bayesiana

Bruno Carlos Lugão[1]
Diego C. Knupp[2]
Pedro Paulo Gomes Watts Rodrigues[3]
Antônio J. Silva Neto[4]
Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, IPRJ/UERJ, Nova Friburgo, RJ

Neste trabalho é realizada a análise da dispersão de um contaminante conservativo lançado de maneira instantânea em um rio, através da comparação entre os resultados obtidos em um experimento de campo [3] e aqueles calculados pela equação da advecção-dispersão unidimensional em regime transiente, como segue:

$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} + u\frac{\partial c(x,t)}{\partial x} = E_L \frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2} \qquad 0 < x < L \;\text{ e }\; t > 0 \tag{1a}$$

$$c(0,t) = c_0, \quad \left.\frac{\partial c}{\partial x}\right|_{x=L} = 0 \tag{1b}$$

$$c(x,0) = f(x) = \frac{M}{A}\delta(x - x_1) + c_0 \tag{1c}$$

onde u é a velocidade média na seção transversal, E_L é o coeficiente de dispersão longitudinal, A é a área da seção transversal, M é a massa do poluente, x_1 é o local de lançamento, $\delta(x - x_1)$ é a função Delta de Dirac e c_0 é o valor da concentração existente no rio.

A solução da Eq. (1a), chamada de problema direto, é obtida por meio do método híbrido analítico-numérico conhecido como Técnica da Transformada Integral Generalizada (GITT) [1]. Já o problema inverso para estimativa dos parâmetros do modelo (u e E_L) é formulado por meio de Inferência Bayesiana [2].

Na solução do problema inverso foram consideradas informações *a priori* disponíveis para os parâmetros u e E_L [3], modeladas como distribuições normais com $\mu_u = 0.59$ m/s, $\sigma_u = 0.3$ m/s, $\mu_{E_L} = 1.75$ m^2/s e $\sigma_{E_L} = 0.8$ m^2/s. A Cadeia de Markov foi definida com 20.000 estados e um aquecimento de 6.000 estados. Utilizou-se estados iniciais diferentes

[1]blugao@iprj.uerj.br
[2]diegoknupp@iprj.uerj.br
[3]pwatts@iprj.uerj.br
[4]ajsneto@iprj.uerj.br

das médias a priori, com o objetivo de testar a implementação, verificando a convergência das cadeias e os histogramas das distribuições *a posteriori*.

Na figura 1 é possível observar uma comparação entre as concentrações calculadas com uma ordem de truncamento de 100 termos e os dados experimentais, além da média, desvio padrão e os intervalos de confiança de 95% estimados para cada uma das distribuições *a posteriori* amostradas pelo MCMC.

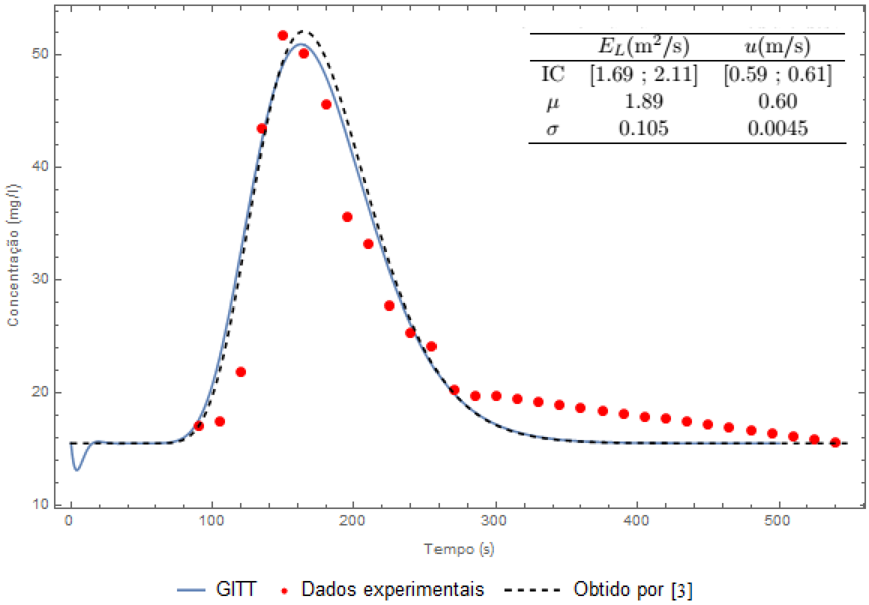

Figura 1: Resultados

A metodologia empregada neste trabalho, combinando transformações integrais e inferência Bayesiana, foi demonstrada eficaz para a estimativa dos parâmetros do modelo. Os resultados obtidos apresentaram uma ligeira melhora em relação aos encontrados por [3]. Além disso, ressalta-se o fato da solução do problema inverso na abordagem Bayesiana ser densidades de probabilidade para os parâmetros buscados, trazendo maior nível de informação quanto às incertezas das estimativas.

Referências

[1] R. M. Cotta. *Integral transforms in computational heat and fluid flows*. CRC Press, Florida, 1993.

[2] J. Kaipio, E. Sommersalo, *Statistical and Computational Inverse Problems*, Springer-Verlag, 2004.

[3] E. P. Sousa, Avaliação de mecanismos dispersivos em rios através de problemas inversos. Dissertação de Mestrado em Matemática Aplicada e Computação Científica, IPRJ/UERJ, (2009).