

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Transformação Integral e Problemas Inversos aplicados à Estimativa de Parâmetros em um Modelo 2D de Transporte de Sedimentos Não-Coesivos

Ademilton Luiz Rodrigues de Souza¹

Centro Federal de Educação Tecnológica Celso Suckow da Fonseca, CEFET/RJ

Diego Campos Knupp²

Pedro Paulo Gomes Watts Rodrigues³

Antônio José da Silva Neto⁴

Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto Politécnico - Nova Friburgo, RJ, Brasil

Resumo. Neste trabalho apresenta-se uma abordagem de solução híbrida analítico-numérica com a Técnica da Transformada Integral Generalizada (GITT) para solução de um problema bidimensional transiente do transporte de sedimentos não-coesivos. Foram aplicados filtros analíticos para homogeneizar os contornos e melhorar a convergência. A equação foi transformada em um sistema acoplado de equações diferenciais parciais unidimensional que foi resolvido numericamente empregando recursos do Software Wolfram Mathematica[®] 10. Os resultados obtidos pela GITT se mostraram coerentes e apresentaram ganhos computacionais, o que é desejável para a solução do problema inverso de identificação de parâmetros hidrodinâmicos e de transporte, utilizando o método de Monte Carlo via Cadeias de Markov.

Palavras-chave. Transporte de Sedimentos, GITT, Problemas Inversos, Inferência Bayesiana, Cadeias de Markov.

1 Introdução

No decorrer dos anos houve uma crescente preocupação com o aumento da concentração de poluentes em corpos d' água, que se originou principalmente pelo crescimento industrial e populacional desordenado. O movimento de sedimentos e de poluentes representa um dos problemas mais comuns enfrentados pela população mundial, e por isso o conhecimento e a caracterização do comportamento dos sedimentos em meio hídrico se tornam essenciais para a proteção do meio ambiente, manutenção dos canais de navegação, construção de obras hidráulicas, conservação do solo e dos recursos hídricos disponíveis [11].

Encontram-se na literatura vários trabalhos com propostas de solução para versões simplificadas da equação de advecção-dispersão que simula o transporte de sedimentos não-coesivos [10, 12]. Por outro lado, alguns autores [7] obtiveram uma solução numérica

¹alrsouza@iprj.uerj.br

²diegoknupp@iprj.uerj.br

³pwatts@iprj.uerj.br

⁴ajsneto@iprj.uerj.br

da versão 3D desse problema utilizando volumes finitos, mas com um custo computacional elevado, devido principalmente à complexidade das condições de contorno e do meio.

Dentre as diferentes metodologias que surgiram para combinar a flexibilidade dos métodos numéricos com a robustez dos métodos analíticos destaca-se a técnica da Transformada Integral Generalizada - GITT (Generalized Integral Transform Technique) que é um método híbrido, capaz de gerar soluções computacionais eficientes para diversos problemas *a priori* não transformáveis ou não solucionáveis numericamente [3, 12].

Neste trabalho é realizada a estimação de parâmetros hidrodinâmicos e de transporte utilizando inferência Bayesiana e uma solução híbrida do modelo 2D-vertical de transporte de sedimentos não-coesivos empregando a GITT e a plataforma Wolfram Mathematica®.

2 Problema Direto 2D de Transporte de Sedimentos Não-Coesivos

A concentração de sedimentos não-coesivos para cada classe granulométrica pode ser representada pela seguinte equação de advecção-dispersão [7], e respectivas condições de contorno e inicial [8]:

$$\frac{\partial C(x, z, t)}{\partial t} + U(z) \frac{\partial C(x, z, t)}{\partial x} + \frac{\partial (W - W_s) C(x, z, t)}{\partial z} = D_x \frac{\partial^2 C(x, z, t)}{\partial x^2} + D_z \frac{\partial^2 C(x, z, t)}{\partial z^2} \quad (1a)$$

$$C(0, z, t) = C_0, \quad 0 \leq z \leq L_z, \quad t > 0 \quad (1b)$$

$$\frac{\partial C(L_x, z, t)}{\partial x} = 0, \quad 0 \leq z \leq L_z, \quad t > 0 \quad (1c)$$

$$W_s C(x, L_z, t) + D_z \frac{\partial C(x, L_z, t)}{\partial z} = 0, \quad 0 \leq x \leq L_x, \quad t > 0 \quad (1d)$$

$$W_s C_a + D_z \frac{\partial C(x, 0, t)}{\partial z} = D - E, \quad 0 \leq x \leq L_x, \quad t > 0 \quad (1e)$$

$$C(x, z, 0) = C_1, \quad 0 \leq x \leq L_x, \quad 0 \leq z \leq L_z \quad (1f)$$

onde $U(z)$ e W representam, respectivamente, a velocidade do escoamento nas direções x e z , W_s é a velocidade de queda da partícula de sedimento, D_x e D_z são os coeficientes de dispersão da concentração longitudinal e vertical, respectivamente, L_x e L_z são os comprimentos longitudinal e vertical do domínio de interesse, C_0 representa a emissão contínua de um poluente na fronteira, na posição $x = 0$, C_1 é a concentração inicial de sedimentos ao longo de todo o domínio, C_a é uma concentração de referência no leito do escoamento em condições de equilíbrio e D e E são os fluxos de deposição e erosão de sedimentos, respectivamente.

Para acelerar e otimizar a convergência da técnica GITT, o problema pode ser simplificado com a aplicação da função filtro $C_f(z) = \text{Exp}[-\frac{W_s}{D_z}z]/W_s$ (considerando $W = 0$), obtida analiticamente e utilizada para homogeneizar as condições de contorno em z pela expressão $C(x, z, t) = C_f(z) + C^*(x, z, t)$, onde $C^*(x, z, t)$ é a solução do problema filtrado obtida através da técnica GITT, como uma expansão em autofunções.

2.1 Problema de Autovalor e Problema Transformado

A solução do problema filtrado é obtida por um esquema de transformação parcial, apenas na direção transversal, resultando em um problema transformado formado por um sistema de equações diferenciais parciais unidimensional. Em consequência, o seguinte problema de autovalor do tipo Sturm-Liouville associado é proposto:

$$D_z \frac{d^2 \psi_i(z)}{dz^2} + \beta_i^2 \psi_i(z) = 0 \tag{2a}$$

$$W_s C_a + D_z \frac{d\psi_i(0)}{dz} = 0 = W_s \psi_i(L_z) + D_z \frac{d\psi_i(L_z)}{dz} \tag{2b}$$

O problema apresentado permite definir o seguinte par de transformação integral:

$$\bar{C}_i(x, t) = \int_0^{L_z} \tilde{\psi}_i(z) C^*(x, z, t) dz \quad (\text{transformada}) \tag{3a}$$

$$C^*(x, z, t) = \sum_{i=1}^{\infty} \tilde{\psi}_i(z) \bar{C}_i(x, t) \quad (\text{inversa}) \tag{3b}$$

onde $\tilde{\psi}_i(z) = \frac{\psi_i(z)}{\sqrt{N_i}}$ são as autofunções normalizadas com $N_i = \int_0^{L_z} \tilde{\psi}_i(z)^2 dz$.

O problema filtrado pode então ser transformado através do operador $\int_0^{L_z} \tilde{\psi}_i(z) (\cdot) dz$ para obter o seguinte problema transformado com respectivas condições inicial e de contorno:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{C}_i(x, t)}{\partial t} + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{d\bar{C}_j(x, t)}{dx} \int_0^{L_z} \tilde{\psi}_i(z) \tilde{\psi}_j(z) U(z) dz + (W - W_s) \sum_{j=1}^{\infty} \bar{C}_j(x, t) \int_0^{L_z} \tilde{\psi}_i(z) \frac{d\tilde{\psi}_j(z)}{dz} dz = \\ = D_x \frac{\partial^2 \bar{C}_i(x, t)}{\partial x^2} - \beta_i^2 \bar{C}_i(x, t) \end{aligned} \tag{4a}$$

$$\bar{C}_i(x, 0) = \int_0^{L_z} \tilde{\psi}_i(z) (C_1 - C_f(z)) dz \tag{4b}$$

$$\bar{C}_i(0, t) = \int_0^{L_z} \tilde{\psi}_i(z) (C_0 - C_f(z)) dz \tag{4c}$$

$$\frac{\partial \bar{C}_i(L_x, t)}{\partial x} = 0 \tag{4d}$$

O sistema formado pelas Equações (4a-d) é resolvido numericamente para os potenciais transformados $\bar{C}_i(x, t)$, de modo que a fórmula de inversão, Equação (3b), pode ser empregada para obtenção da solução para o potencial filtrado, $C^*(x, z, t)$.

3 Problema Inverso

Neste trabalho tem-se por objetivo obter estimativas para os parâmetros D_x , D_z , \bar{U} e W_s presentes nas Equações (1a-e) com uma abordagem de problemas inversos.

No tratamento de problemas inversos surgem diferentes fatores que contribuem para as incertezas na identificação de parâmetros que podem ser consideradas e contornadas ao se empregar a abordagem Bayesiana, onde os parâmetros são analisados como variáveis aleatórias. As vantagens desta abordagem são a possibilidade de incluir informações *a priori* e incorporá-las em um contexto formal de decisão, bem como o tratamento explícito das incertezas e a habilidade de assimilar novas informações em contextos adaptativos [2].

A solução do problema inverso pela abordagem Bayesiana consiste em se obter a probabilidade *a posteriori* ($P_{post}(\beta|\mathbf{Z}_e)$), com o emprego do teorema de Bayes, tal que:

$$P_{post}(\beta|\mathbf{Z}_e) = P(\mathbf{Z}_e|\beta)P_{pr}(\beta)/P(\mathbf{Z}_e) \quad (5)$$

onde $P_{pr}(\beta)$ é a probabilidade *a priori*, $P(\mathbf{Z}_e)$ é a função de densidade de probabilidade marginal e $P(\mathbf{Z}_e|\beta)$ é a verossimilhança obtida pela Equação (6) que descreve a probabilidade de se encontrar os dados experimentais \mathbf{Z}_e , sabendo a resposta real e desconhecida do problema físico ($\mathbf{Z}(\beta)$) e a variância (\mathbf{V}) dos dados experimentais [9]:

$$P(\mathbf{Z}_e|\beta) = \frac{1}{\sqrt{\det\mathbf{V}(2\pi)^{n_e}}} \exp \left[-\frac{1}{2}(\mathbf{Z}_e - \mathbf{Z}^m)^T \mathbf{V}^{-1}(\mathbf{Z}_e - \mathbf{Z}^m) \right] \quad (6)$$

onde n_e representa o número de dados experimentais considerados no problema.

Em problemas mais complexos a informação *a priori* nem sempre pode ser representada por uma distribuição normal ou mesmo uniforme, o que torna muito complicado a obtenção de uma distribuição de probabilidade *a posteriori*. Nesses casos é necessário o emprego de técnicas de amostragem para simular as amostras de distribuição *a posteriori* e inferir medidas de tendência central e de dispersão desta distribuição [6]. Dentre essas técnicas de amostragem destaca-se o método de Monte Carlo via Cadeias de Markov (MCMC). A ideia essencial do MCMC é simular uma sequência aleatória de distribuições *a posteriori* convergente para uma distribuição estacionária e de interesse do problema inverso.

4 Resultados

Para a análise e comprovação da efetividade dos métodos de solução do problema direto e inverso foram considerados os seguintes valores $C_0 = 50\text{mg/l}$, $C_1 = 50\text{mg/l}$, $C_a = 100\text{mg/l}$, $D - E = 0, 1\text{kg/m}^2\text{s}$ e $W = 0$. Para a velocidade longitudinal ($U(z)$) foi traçado um perfil logarítmico em função de z e da velocidade média do escoamento (\bar{U}).

Para a solução do problema direto foram considerados os valores $W_s = 0,013\text{m/s}$, $\bar{U} = 1\text{m/s}$, e coeficientes de dispersão $D_x = 0,25\text{m}^2/\text{s}$ e $D_z = 0,006\text{m}^2/\text{s}$ obtidos pelas fórmulas empíricas estabelecidas, respectivamente, por [5] e [4].

Na Tabela 1 é apresentado o comportamento da convergência da solução à medida que se aumenta a ordem de truncamento (N) da série na Equação (3b), de modo a atender o nível de precisão da solução e manter o mínimo esforço computacional. Observa-se que

os resultados convergiram para pelo menos dois dígitos significativos, demonstrando que apenas 5 termos da série já é suficiente para obter uma boa convergência do modelo.

Tabela 1: Análise de convergência da solução em relação à ordem de truncamento ($z = 0,5\text{ m}$).

X	N=2	N=5	N=10	N=20	N=50	N=100
$t = 100\text{ s}$						
0	47.93984	49.55828	49.90111	50.02409	49.99622	50.00093
40	42.85569	42.81924	42.84078	42.84237	42.85687	42.86311
80	37.08368	36.99077	37.00014	37.00086	37.00966	37.01231
120	34.82856	34.71409	34.72044	34.72027	34.71984	34.71854
160	34.83832	34.72336	34.73027	34.73046	34.73033	34.73026
200	34.83837	34.72358	34.73027	34.73045	34.73047	34.73048

Visando a solução do problema inverso de identificação dos parâmetros D_x , D_z , W_s e \bar{U} , a primeira etapa consistiu em realizar uma análise de sensibilidade para estudar o efeito que a variação destes parâmetros pode ocasionar nos resultados. Esta análise contribui significativamente na formulação e solução de problemas inversos pois permite, entre outras coisas, a escolha de dados experimentais que resultem em melhores estimativas para os parâmetros de interesse [1].

Na Figura 1 são apresentadas as curvas para cada coeficiente de sensibilidade obtidas numericamente através de uma aproximação por diferenças finitas centradas, considerando a expressão $X_j \cong (C(\beta_j + \epsilon_j) - C(\beta_j - \epsilon_j))/2\epsilon_j$ com uma pequena variação ϵ_j para cada parâmetro desconhecido j . Observou-se que as maiores variações para cada coeficiente de sensibilidade foram encontrados nos primeiros 150 segundos. Diante disso, para a análise do problema inverso, foram gerados dados experimentais sintéticos até 150 segundos com intervalo de 2 segundos, considerando-se erros aditivos de uma distribuição normal com média zero e desvio padrão de 5% da concentração inicial. Observa-se também que os valores de sensibilidade para D_x e \bar{U} se mostraram relativamente pequenos em comparação com os demais valores, o que pode causar uma impossibilidade de estimação desses parâmetros. Para contornar esse problema, foi considerada uma *priori* informativa para os parâmetros D_x e \bar{U} segundo uma distribuição normal com médias $0,25\text{ m}^2/\text{s}$ e $1,0\text{ m/s}$, respectivamente, e desvio padrão de 10% de cada média.

Os resultados do MCMC estão apresentados na Figura 2, onde observa-se os histogramas e a convergência das cadeias de Markov para os valores médios $D_x = 0,2509\text{m}^2/\text{s}$, $D_z = 0,00622\text{m}^2/\text{s}$, $\bar{U} = 0,9661\text{m/s}$ e $W_s = 0,0134\text{m/s}$. Para alcançar a convergência foram considerados uma cadeia de 100 000 estados e aquecimento de 50 000 estados.

5 Conclusões

A metodologia utilizada permitiu, através do problema inverso, estimar parâmetros hidrodinâmicos e de transporte, em geral, de difícil medição, consequentemente possibilitando a observação de comportamentos esperados para a concentração de sedimentos não-coesivos em corpos d'água naturais. Os resultados obtidos mostraram a evolução do

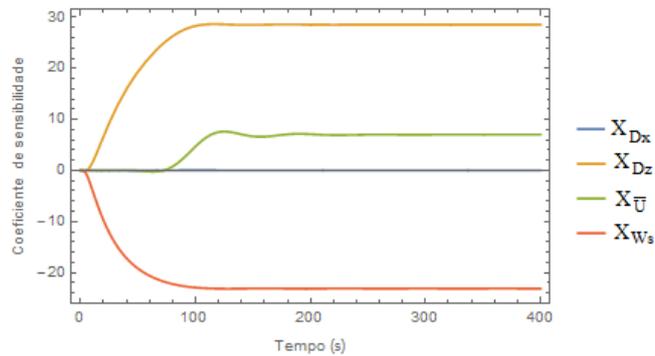


Figura 1: Coeficientes de sensibilidade para os parâmetros D_x , D_z , \bar{U} e W_s .

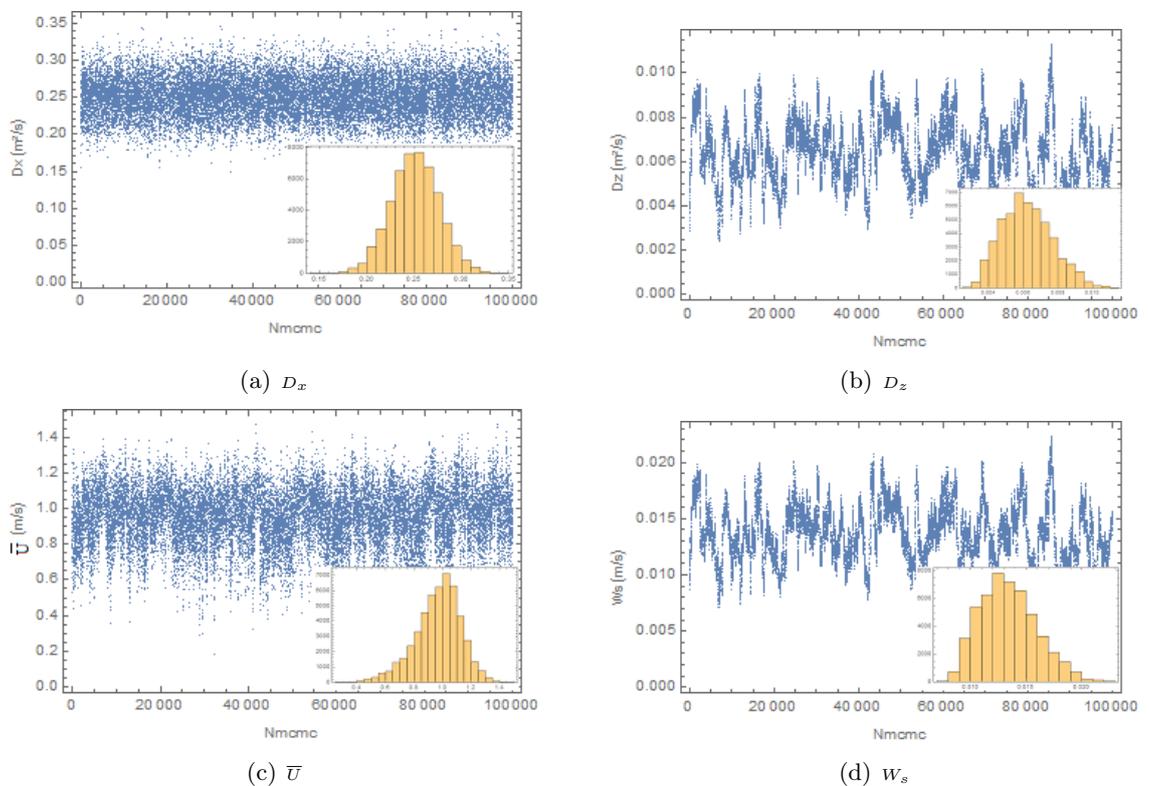


Figura 2: Evolução das Cadeias de Markov.

perfil de concentração de sedimentos em suspensão, e o decaimento do campo de concentração nos casos de baixa disponibilidade de sedimentos. A utilização da técnica GITT na solução do problema proposto se mostrou plausível e rápida, como era desejável para a viabilidade da solução do problema inverso obtida pelo MCMC.

Para trabalhos futuros, recomenda-se aplicar outros métodos de estimação de parâmetros a fim de comparar com os resultados aqui obtidos pelo MCMC.

Agradecimentos

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

Referências

- [1] J. V. Beck, B. Blackwell, C. R. St. Clair Jr., *Inverse Heat Conduction : III-Posed Problems*. Nova York : Jhon Wiley & Sons, 1985.
- [2] W. U. Costa. *Técnicas Bayesianas para Engenharia Elétrica*. UFMG, Minas Gerais, 2004.
- [3] R. M. Cotta. *Integral Transforms in Computational Heat and Fluid Flow*. CRC Press, pp. 180-188, 1993.
- [4] J. W. Elder. *The dispersion of marked fluid in turbulent shear flow*. Journal of Fluid Mechanics, Vol.5, pp. 544-560, 1959.
- [5] H. B. Fischer, J. Imberger, E. J. List, R. C. Y. Koh, e N. H. Brooks. *Mixing in inland and coastal waters*. Elsevier, Academic Press, New York, 1979.
- [6] J. Kaipio, E. Somersalo. *Statistical and Computational Inverse Problems*. Springer, New York, 2005.
- [7] L. Pinto, A. B. Fortunato, Y. Zhang, A. Oliveira e F. E. P. Sancho. *Development and validation of a three-dimensional morphodynamic modelling system for non-cohesive sediments*. Ocean Modelling, vol.57, Elsevier, 2012.
- [8] L. C. V. Rijn. *Mathematical modeling of suspended sediment in nonuniform flows*, Journal of Hydraulic Engineering, American Society of Civil Engineers, 1986.
- [9] M. Schwaab e J. C. Pinto. *Análise de Dados Experimentais. I. Fundamentos de Estatística e Estimção de Parâmetros*. E-papers, Rio de Janeiro, Brasil, 2007.
- [10] E. P. Sousa. *Avaliação de Mecanismos dispersivos em rios através de problemas inversos*, Dissertação de Mestrado, UERJ/IPRJ, 2009.
- [11] A. L. R. Souza. *Estudo do Movimento Incipiente de Sedimentos Não-Coesivos em Escoamentos com Superfície Livre*, Dissertação de Mestrado, UFRJ/COPPE, 2010.
- [12] A. L. R. Souza, D. C. Knupp, P. P. G. W. Rodrigues e A. J. Silva Neto. *Estimativa de Parâmetros Hidrodinâmicos e Simulação do Transporte Bidimensional de Sedimentos Através da Técnica da Transformada Integral Generalizada e Inferência Bayesiana*. XIX Encontro Nacional de Modelagem Computacional, João Pessoa, Paraíba, 2016.