

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Identificação de Parâmetros Dispersivos e do Perfil de Velocidades no Modelo de Transporte 2D em um Trecho do Rio Macaé-RJ via GITT e Inferência Bayesiana

Ademilton Luiz Rodrigues de Souza¹

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

Pedro Paulo Gomes Watts Rodrigues²

Diego Campos Knupp³

Antônio José da Silva Neto⁴

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

Resumo. Neste trabalho é desenvolvida uma formulação híbrida através da Técnica da Transformada Integral Generalizada (GITT), para solução de um problema bidimensional transiente de dispersão de contaminantes em corpos hídricos. Para tal, é realizada a simulação do comportamento do lançamento instantâneo de um contaminante conservativo (NaCl) em um trecho do Rio Macaé no Estado do Rio de Janeiro. A equação, após aplicados filtros analíticos para homogeneizar os contornos e melhorar a convergência, é transformada em um sistema acoplado de equações diferenciais parciais unidimensionais, que é resolvido numericamente através de rotinas intrínsecas da plataforma Mathematica. Os resultados são comparados com dados experimentais disponíveis, e indicam a viabilidade da solução deste problema através da GITT, o que leva a ganhos computacionais importantes, permitindo sua aplicação no problema inverso da identificação de parâmetros de dispersão e do perfil de velocidades no modelo de transporte 2D, onde é utilizado o método de Monte Carlo via Cadeias de Markov, e que apresenta resultados satisfatórios.

Palavras-chave. Simulação Ambiental, Transporte de Contaminantes, GITT, Problemas Inversos, Rio Macaé.

1 Introdução

Nas últimas décadas houve uma crescente preocupação com o aumento da concentração de contaminantes em escoamentos naturais, decorrente principalmente do crescimento industrial e populacional desordenado. Na busca por soluções eficientes, modelos de transporte de poluentes estão sendo cada vez mais utilizados para previsão e estimativa do comportamento de plumas de contaminantes em corpos hídricos. Em grande parte desses modelos a complexidade da geometria do meio pode inviabilizar a aplicação de técnicas

¹ademilton.souza@cefet-rj.br

²pwatts@iprj.uerj.br

³diegoknupp@iprj.uerj.br

⁴ajsneto@iprj.uerj.br

de solução analíticas e/ou numéricas, uma vez que requerem elevado esforço computacional. Neste contexto, na tentativa de combinar a praticidade dos métodos analíticos com a flexibilidade dos métodos numéricos, destaca-se a técnica da Transformada Integral Generalizada (GITT), que é um método híbrido, capaz de gerar soluções computacionais eficientes para diversos problemas a priori não solucionáveis analiticamente [2].

Neste trabalho apresenta-se a estimação de parâmetros dispersivos e do perfil de velocidades via inferência Bayesiana e uma solução híbrida para o caso 2D do transporte transiente de contaminantes em um trecho do Rio Macaé, localizado no Estado do Rio de Janeiro. Para o desenvolvimento da solução da equação de advecção-difusão utilizou-se a GITT e a computação simbólica, através da plataforma Wolfram Mathematica[®] 10.

2 Descrição do Problema e Formulação Matemática

A região de estudo compreende um trecho de 25 km situado próximo à Usina Termoeletrica Mário Lago, localizada no município de Macaé, RJ. Nos últimos anos o Rio Macaé vem sendo deteriorado, tanto na qualidade da água quanto na destruição das matas ciliares. Como consequência destas intervenções destacam-se o assoreamento do rio e restrições ao uso da água para o consumo [1].

Para a simulação do transporte de contaminantes foi considerado o modelo bidimensional horizontal, uma vez que o trecho de estudo do Rio Macaé é classificado como verticalmente bem misturado. Dessa forma, a formulação matemática desse problema, e as condições de contorno e inicial podem ser representadas pelas seguintes expressões:

$$\frac{\partial C(x, y, t)}{\partial t} + U \frac{\partial C(x, y, t)}{\partial x} = E_L \frac{\partial^2 C(x, y, t)}{\partial x^2} + E_T \frac{\partial^2 C(x, y, t)}{\partial y^2} \quad (1a)$$

$$C(x, y, t) = C_0, \quad x = 0, \quad 0 \leq y \leq L_y, \quad t > 0 \quad (1b)$$

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

$$\frac{\partial C(x, y, t)}{\partial y} = \frac{\partial C(x, y, t)}{\partial y} = 0, \quad y = 0 \quad \text{ou} \quad y = L_y, \quad 0 \leq x \leq L_x, \quad t > 0 \quad (1d)$$

$$C(x, y, t) = C_0 + G\delta_{xy}(x - x_0)(y - y_0), \quad 0 \leq x \leq L_x, \quad 0 \leq y \leq L_y, \quad t = 0, \quad (1e)$$

onde $0 \leq x \leq L_x$, $0 \leq y \leq L_y$, para $t \geq 0$, U é a velocidade do escoamento na direção x e uniforme na direção transversal, E_L e E_T são os coeficientes de dispersão longitudinal e transversal, respectivamente, C_0 é a concentração normal de NaCl nas águas do Rio Macaé, δ_{xy} é função delta de Dirac, sendo G a quantidade de massa de poluente por unidade de altura do domínio emitida na posição (x_0, y_0) .

Para acelerar e otimizar a convergência da técnica de transformação integral, GITT, o problema foi simplificado com a aplicação da função filtro $C_f(x) = C_0$, utilizada para homogeneizar as condições de contorno em y pela expressão $C(x, y, t) = C_f(x) + C^*(x, y, t)$, onde $C^*(x, y, t)$ é a solução do problema homogêneo obtida através da GITT.

2.1 Técnica de transformada integral generalizada

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

$$E_T \frac{d^2\psi_i(y)}{dy^2} + \beta_i^2 \psi_i(y) = 0 \tag{2a}$$

$$\frac{d\psi_i(0)}{dy} = \frac{d\psi_i(L_y)}{dy} = 0 \tag{2b}$$

As autofunções e os autovalores são dados, respectivamente, pelas expressões $\psi_i(y) = \cos \frac{x\beta_i}{\sqrt{E_T}}$ e $\beta_i = \frac{\pi i \sqrt{E_T}}{L_y}$. O problema de autovalor apresentado permite definir o seguinte par de transformação integral, onde $\tilde{\psi}_i(y)$ representa as autofunções normalizadas:

$$\bar{C}_i(x, t) = \int_0^{L_y} \tilde{\psi}_i(y) C(x, y, t) dy \tag{3a}$$

$$C(x, y, t) = \sum_{i=1}^{\infty} \tilde{\psi}_i(y) \bar{C}_i(x, t) \tag{3b}$$

A Equação (1) pode então ser transformada através do operador $\int_0^{L_y} \tilde{\psi}(y)(.)dy$ que é aplicado em ambos os lados da equação para obter o seguinte problema transformado:

$$\frac{\partial \bar{C}_i(x, t)}{\partial t} + \beta_i^2 \bar{C}_i(x, t) - E_L \frac{\partial^2 \bar{C}_i(x, t)}{\partial x^2} = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{d\bar{C}_j(x, t)}{dx} \int_0^{L_y} \tilde{\psi}_i(y) \tilde{\psi}_j(y) U(y) dy \tag{4}$$

com as condições inicial e de contorno, Equações (1b)-(1e), transformadas dadas por:

$$\bar{C}_i(x, 0) = \int_0^{L_y} \tilde{\psi}_i(y) (C_0 + G\delta_{xy}(x - x_0)(y - y_0)) dy \tag{5a}$$

$$\bar{C}_i(0, t) = \frac{\partial \bar{C}_i(L_x, t)}{\partial x} = 0 \tag{5b}$$

O sistema dado pelas Equações (4)-(5), após truncamento em uma ordem N , é resolvido numericamente através da rotina *NDSolve* do Mathematica 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 original, $C(x, y, t)$.

3 Problema Inverso

O objetivo deste trabalho é estimar os parâmetros E_L , E_T e a função U do perfil de velocidades 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 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.

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:

$$P_{post}(\beta|\mathbf{Z}_e) = P(\mathbf{Z}_e|\beta)P_{pr}(\beta)/P(\mathbf{Z}_e) \quad (6)$$

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 (7) 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 [5]:

$$P(\mathbf{Z}_e|\beta) = \frac{1}{\sqrt{\det\mathbf{V}(2\pi)^{n_e}}} \exp \left[-\frac{1}{2}(\mathbf{Z}_e - \mathbf{Z}^m)^T \mathbf{V}^{-1}(\mathbf{Z}_e - \mathbf{Z}^m) \right] \quad (7)$$

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 [3]. Dentre essas técnicas de amostragem destaca-se o método de Monte Carlo via Cadeias de Markov (MCMC), onde a ideia essencial é simular uma sequência aleatória de distribuições *a posteriori* convergente para uma distribuição estacionária.

4 Resultados

Neste estudo serão utilizados dados experimentais reais obtidos em experimentos realizados em um trecho retificado do Rio Macaé, onde foi simulada uma descarga de poluente, utilizando como traçador 2.000 g de NaCl diluídos em um recipiente contendo 10 litros de água, gerando um volume de 11 litros de solução salina. Esse procedimento foi repetido por 10 vezes, até completar 110 litros da mistura. Através de um condutivímetro foi medida a concentração de NaCl nos recipientes, que foi de 172 mg/l, e ao longo do trecho do Rio Macaé que, em condições naturais, foi de 37 mg/l. Para a simulação computacional considerou-se um domínio contendo 2.200 m de comprimento por 40 m de largura. No instante inicial, i.e. $t = 0$, foi feito o lançamento da mistura de NaCl na posição $x = 1050\text{m}$ e $y = 0,5\text{m}$, e as amostras de concentração foram selecionadas 50 m a jusante [7].

Para a simulação do perfil de concentração, os autores na Ref. [7] consideraram os valores $E_L = 0,4m^2/s$ e $E_T = 0,003m^2/s$, enquanto que na Ref. [6] foram considerados os valores $E_L = 0,25m^2/s$ e $E_T = 0,006m^2/s$ obtidos experimentalmente. A Tabela 1 mostra o comportamento da convergência da solução à medida em que se aumenta a ordem de truncamento (N) da solução em série, Equação (3b), de modo a atender o nível de precisão da solução e manter o mínimo esforço computacional. Observa-se que os resultados apresentados convergiram para pelo menos dois dígitos significativos.

Tabela 1: Análise de convergência da solução para concentração (mg/l) em relação à ordem de truncamento, a 50m a jusante do ponto de lançamento do traçador e a 0,5m da borda.

x (m)	N=20	N=40	N=60	N=80	N=100
$t = 100$ s					
1100	301,9660	284,2570	287,3910	290,2100	291,8950
1125	38,4748	38,2170	38,2734	38,3217	38,3158
1150	37,0004	37,0004	37,0005	37,0004	37,0003
1175	37,0000	37,0000	37,0000	37,0000	37,0000
1200	37,0000	37,0000	37,0000	37,0000	37,0000
$t = 150$ s					
1100	187,8720	215,2270	213,1320	210,9450	209,9220
1125	201,7760	183,6540	186,0490	187,8350	188,9530
1150	38,2851	38,1835	38,2289	38,2671	38,2556
1175	37,0008	37,0010	37,0009	37,0010	37,0010
1200	37,0000	37,0000	37,0000	36,9999	37,0000

Os resultados obtidos pelo método de Monte Carlo com as cadeias de Markov estão apresentados nas Figuras 1a-c. Observa-se a convergência das cadeias de Markov dos coeficientes de dispersão para os valores $E_L = 0,362m^2/s$ e $E_T = 0,0145m^2/s$. A convergência do método ocorreu de forma rápida já nos estados iniciais da cadeia em um total de 30 000 estados. Para o perfil de velocidade, os parâmetros estimados são os pontos U_i referentes a uma discretização de U nas posições $y = 2; 5; 10; 20; 30; 35; 38$ m. Uma vez estimadas as velocidades nesses pontos é realizada uma interpolação linear para se obter $U(y)$.

Na Tabela 2 apresenta-se as propriedades estatísticas amostrais obtidas das distribuições *a posteriori* para os parâmetros E_L , E_T e U_4 em $y = 20$ m.

Tabela 2: Propriedades estatísticas para os parâmetros E_L , E_T e U_4

Parâmetro	E_L (m^2/s)	E_T (m^2/s)	U_4 (m/s)
μ	0,362697	0,014565	3,140823
σ	0,036077	0,000537	0,857616
σ/μ (%)	9,947	3,688	27,305
I.C. (95%)	[0,295048;0,436826]	[0,013540;0,0157057]	[1,36299; 4,90436]

Na Figura 2 tem-se a evolução transiente do perfil de concentração na direção longitudinal, na posição em $y=0,5$ m, localizado a 50 m a jusante do ponto de lançamento do poluente em $x=1050$ m. Para a solução apresentada na Figura 2a são considerados os

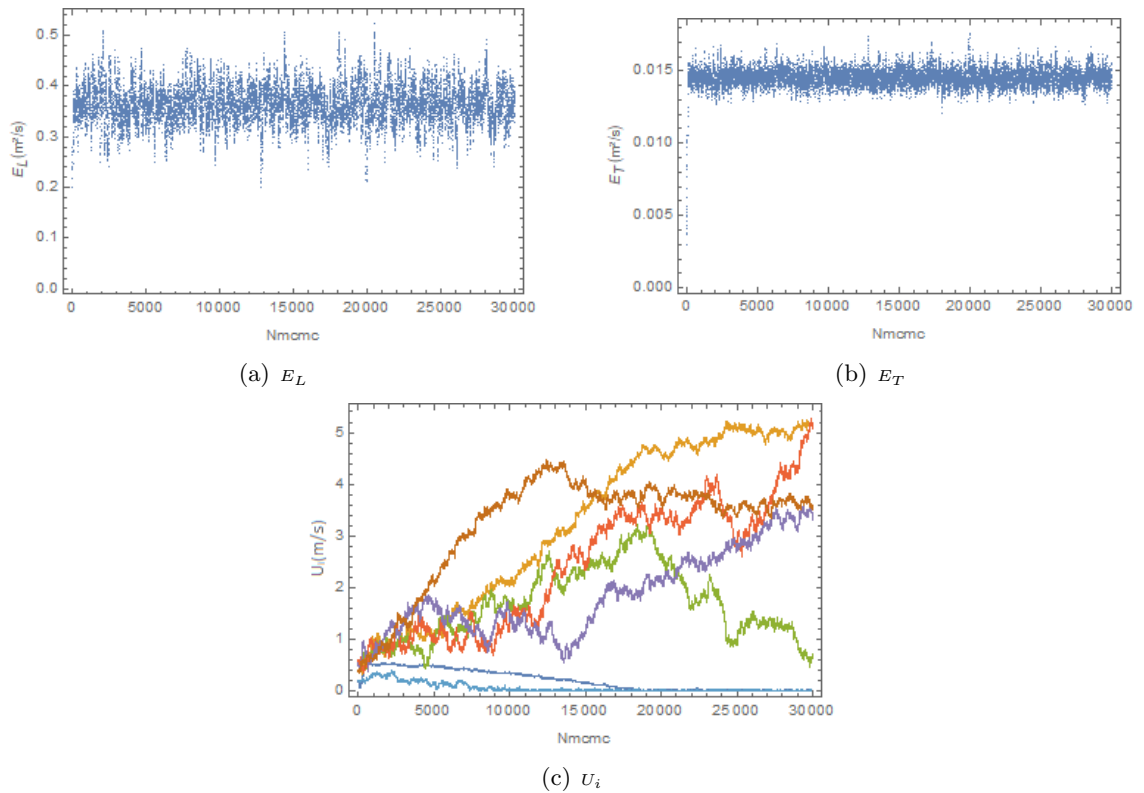
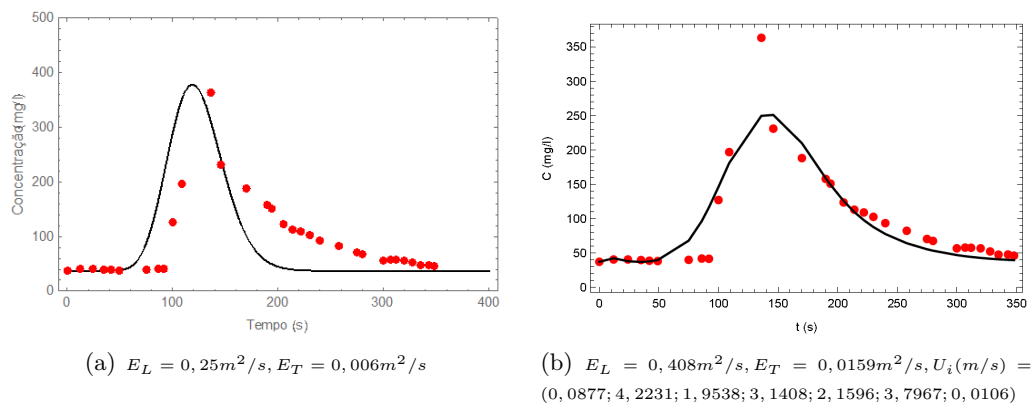


Figura 1: Evolução das Cadeias de Markov.

valores $E_L = 0,25m^2/s$ e $E_T = 0,006m^2/s$ obtidos experimentalmente [6]. Na Figura 2b observa-se o comportamento com a solução obtida pelo MCMC apresentado neste trabalho, que se mostra coerente com os dados reais do experimento realizado no Rio Macaé. Apesar disso, o método não foi capaz de descrever o pico de concentração, indicando uma possível discrepância quanto à medição desse dado durante a realização do experimento.



(a) $E_L = 0,25m^2/s, E_T = 0,006m^2/s$

(b) $E_L = 0,408m^2/s, E_T = 0,0159m^2/s, U_i (m/s) = (0,0877; 4,2231; 1,9538; 3,1408; 2,1596; 3,7967; 0,0106)$

Figura 2: Perfil de concentração de NaCl.

5 Conclusões

A análise dos resultados permite observar o comportamento da concentração de contaminantes ao longo de um corpo hídrico, demonstrando que os procedimentos apresentados possibilitam a reprodução de comportamentos físicos esperados. É demonstrada a viabilidade de utilização da técnica GITT na solução deste problema bem como a solução do problema inverso obtida pelo MCMC.

Recomenda-se, para trabalhos futuros, a realização de novas simulações numéricas utilizando problemas inversos para se definir funções suaves que descrevam o campo de velocidades (termo advectivo), e a reprodução dos experimentos visando a eliminação de possíveis *outliers* a fim de melhorar os resultados encontrados.

Agradecimentos

Os autores agradecem à CAPES, ao CNPq e à FAPERJ pelo apoio financeiro, bem como à Termomacaé Ltda pelas informações fornecidas.

Referências

- [1] H. Costa. *Subsídios para Gestão dos Recursos Hídricos das Bacias Hidrográficas dos Rios Macacu, São João, Macaé e Macabu*. Secretaria de Estado de Meio Ambiente e Desenvolvimento Sustentável (SEMADS), Rio de Janeiro, 1999.
- [2] R. M. Cotta. *Integral Transforms in Computational Heat and Fluid Flow*. CRC Press, pp. 180-188, 1993.
- [3] J. Kaipio, E. Somersalo. *Statistical and Computational Inverse Problems*. Springer, New York, 2005.
- [4] B. Pimpunchat, W. L. Sweatman, G. C. Wake, W. Triampo e A. Parshotam. A mathematical model for pollution in a river and its remediation by aeration *Applied Mathematics Letters*, v. 22, n. 3, pp. 304-308, Elsevier, 2009.
- [5] M. Schwaab e J. C. Pinto. *Análise de Dados Experimentais. I. Fundamentos de Estatística e Estimação de Parâmetros*. E-papers, Rio de Janeiro, Brasil, 2007.
- [6] A. L. R. Souza, D. C. Knupp, P. P. G. W. Rodrigues e A. J. Silva Neto. Simulação computacional do transporte horizontal 2D de contaminantes no Rio Macaé através da técnica GITT. In *Anais do Congresso de Matemática Aplicada e Computacional Sudeste (III CMAC-SE)*, Vitória, Espírito Santo, Brasil, 2015.
- [7] W. R. Telles, P. P. W. Rodrigues, A. J. Silva Neto, J. J. Lugon e M. I. P. Ferreira. Uso de modelagem computacional bidimensional horizontal com velocidade variável na direção transversal na simulação do transporte de contaminantes no Rio Macaé. In *Anais do Congresso Ibero Latino Americano de Métodos Computacionais em Engenharia (XXX CILAMCE)*, Armação dos Búzios, Rio de Janeiro, Brasil, 2009.