Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics, v. 10, n. 1, 2023.

Trabalho apresentado no XLII CNMAC, Universidade Federal de Mato Grosso do Sul - Bonito - MS, 2023

Estimativa de parâmetros para a equação de difusão-advecção a partir de amostras de dados

André Krindges[1]
UFMT, Cuiabá, MT
Gabriela S. S. de Oliveira[2] João Frederico C. A. Meyer[3]
IMECC/Unicamp, Campinas, SP

Os efeitos da poluição ambiental são diversos e podem ser imediatos ou a longo prazo. Entre eles, estão problemas respiratórios, cardiovasculares, câncer, mutações genéticas, desequilíbrios ecológicos, extinção de espécies e mudanças climáticas.

Para combater a poluição ambiental, é necessário adotar medidas preventivas e corretivas, como a implementação de tecnologias limpas, a regulamentação de atividades poluentes, a reciclagem e a educação ambiental. Além disso, é importante que a população se conscientize sobre a importância da preservação ambiental e adote práticas sustentáveis em seu dia a dia.

Neste sentido, a matemática aplicada desempenha um papel importante na compreensão e no combate à poluição. Por exemplo, através de modelos matemáticos é possível simular a dispersão de poluentes no ambiente e prever seus efeitos em diferentes cenários.

A equação de difusão-advecção, é um exemplo de ferramenta matemática utilizada para analisar a dispersão de poluentes. Ela permite calcular como uma substância se espalha ao longo do tempo e do espaço, levando em consideração fatores como a velocidade do vento e da água, a topografia da região, a densidade do poluente e outros parâmetros importantes.

Sendo assim, a equação de difusão-advecção é uma equação diferencial parcial (EDP) utilizada em modelos matemáticos de dinâmica de fluidos. De acordo [1], [2] e [3] a modelagem clássica do problema é da seguinte forma:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial C}{\partial t} = \alpha \Delta C - \nabla \cdot \vec{\mathbb{V}} C - \sigma C + f, \forall (x,y) \in \Omega, \\ se \quad \dfrac{\partial C}{\partial t} = 0 \quad \textit{(estado estácionário)}; \\ \nabla \cdot \vec{\mathbb{V}} = 0 \quad \textit{(fluido incompresível)}; \\ -\alpha \dfrac{\partial C}{\partial \eta}\Big|_{\Gamma_1} = \theta(x,y); \\ -\alpha \dfrac{\partial C}{\partial \eta}\Big|_{\Gamma_2} = k_2 C; \\ -\alpha \dfrac{\partial C}{\partial \eta}\Big|_{\Gamma_3} = k_3 C; \\ -\alpha \dfrac{\partial C}{\partial \eta}\Big|_{\Gamma_4} = k_4 C. \end{cases} \tag{1}$$

Em que: α representa a taxa de difusibilidade do poluente, σ está relacionado com a taxa de decaimento, $\vec{\mathbb{V}}$ é o campo de velocidades e f indica a fonte de poluição, mas neste caso vamos considerar f igual a zero.

[1]andre.krindges@ufmt.br
[2]gscavazini@ime.unicamp.br
[3]jmeyer@unicamp.br

Utilizando o método de elementos finitos (MEF), vamos em busca de determinar a solução numérica deste problema, mas com um perspectiva diferente. A ideia básica do método de elementos finitos (MEF) é encontrar uma solução aproximada para a equação de difusão-advecção que satisfaça as condições de contorno e minimize o erro em relação à solução real [4].

O problema reverso associado à equação de difusão-advecção é o problema de identificação de parâmetros, que consiste em determinar os valores desconhecidos dos parâmetros do modelo a partir de dados experimentais.

Para resolver esse problema, é necessário formular uma função objetivo que quantifique a diferença entre os dados experimentais e os dados simulados pelo modelo com os parâmetros a serem identificados. Em seguida, utiliza-se um algoritmo de otimização para minimizar a função objetivo e encontrar os valores ótimos dos parâmetros.

Pensando nesta situação considere o seguinte cenário: dado um determinado local onde sabemos a concentração de poluente ali existente, a partir de um chute inicial e através de um método de minimização, vamos aproximar a solução real da equação de difusão-advecção e então determinar os valores dos parâmetros. Os dados coletados são nas entradas 5000 e 10000 com os respectivos valores de poluição sendo 0.5 e 0.7.

A partir das simulações realizadas, podemos dizer que a situação que mais se aproxima dos dados coletados é a norma cujo o resultado é $3.6989e - 05$, com os seguintes parâmetros encontrados: $\alpha = 0.15371$, $\sigma = 0.043358$, $\theta = -0.18118$, $k_2 = 0.31989$, $k_3 = 0.096624$, $k_4 = 0.0045565$, $v_1 = 0.034128$ e $v_2 = 0.0036604$.

Deste modo, ao observar os trabalhos estudados de [5] e [6] é possível perceber que os parâmetros utilizados são apenas levantamentos das bibliografias encontradas e que ainda assim há uma falta de material real, feito a partir de dados coletados. Então esperamos que com este trabalho seja factível aplicar em situações reais, e assim fazer um estudo sobre os parâmetros que são utilizados, obtendo uma maior precisão nos resultados numéricos computacionais.

Agradecimentos

Gostaríamos de agradecer à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

Referências

[1] L. Edelstein-Keshet. **Mathematical models in biology**. N. York: Random-House, 1988.

[2] G. I. Marchuk. **Mathematical models in environmental problems: studies in mathematics and its applications**. Netherlands: North-Holland, 1986.

[3] A. Okubo. **Diffusion and Ecological Problems: Mathematical Models**. N. York: Springer, 1980.

[4] J. T. Oden, E. B. Backer e G. F. Carey. “Finite Elements an Introduction”. Em: **Finite Element Method**. Vol. 1. N. Jersey: Prentice-Hall, 1981.

[5] A. Krindges. “Modelagem e Simulação Computacional de um Problema Tridimensional de Difusão-Advecção com Uso de Navier-Stokes”. Tese de doutorado. Campinas/SP: IMECC-Unicamp, 2011.

[6] G. S. Silva. “Modelagem, Aproximação Numérica e Simulação Computacional de Impacto Ambiental em Meio Fluvial: o Rio Tocantins no Município de Imperatriz (MA)”. Tese de doutorado. Campinas/SP: IMECC-Unicamp, 2022.