

Identificação de Parâmetros Dispersivos e Simulação do Transporte Bidimensional de Contaminantes num Trecho do Rio Macaé via Transformação Integral e Inferência Bayesiana

Identification of Dispersive Parameters and Simulation of Two-Dimensional Contaminants Transport in Stretch of the Macaé River via Integral Transformation and Bayesian Inference

Ademilton Luiz Rodrigues de Souza¹, Diego Campos Knupp², Pedro Paulo Gomes Watts Rodrigues³, Antônio José da Silva Neto⁴

RESUMO

Neste trabalho foi desenvolvida uma solução híbrida analítico-numérica através da Técnica da Transformada Integral Generalizada (GITT) empregando-se recursos de programação simbólica através do Software Wolfram Mathematica 10 para solução de um problema bidimensional transiente de dispersão de contaminantes em corpos d'água. Para tal, foi realizada a simulação do comportamento do lançamento instantâneo de um contaminante conservativo (NaCl) em um trecho situado na parte inferior do rio Macaé, localizado no nordeste do Estado do Rio de Janeiro. Para melhor convergência da solução híbrida foram aplicados filtros analíticos para homogeneizar os contornos e, conseqüentemente, a equação transformada em um sistema acoplado de equações diferenciais parciais unidimensional, resolvido numericamente através de rotinas intrínsecas do Mathematica. Os resultados foram comparados com dados experimentais disponíveis, e indicaram a plausibilidade da solução deste problema através da GITT, o que levou a ganhos computacionais importantes para aplicação na identificação de parâmetros de dispersão, i.e., solução do problema inverso, onde foi utilizado o método de Monte Carlo via Cadeias de Markov, e que apresentou resultados satisfatórios.

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

ABSTRACT

In this work we developed an analytical-numerical hybrid solution through the Generalized Integral Transform technique (GITT) employing Wolfram Mathematica 10 for solving a two-dimensional transient problem of transport of contaminants in bodies of water. For this, the behavior of the instantaneous release of a conservative contaminant (NaCl) was simulated in a section located in the lower part of the Macaé river, located in the northeast of the State of Rio de Janeiro. For better convergence of the hybrid solution, analytical filters were applied to homogenize the contours, and consequently, the equation transformed into a coupled one-dimensional system of partial differential equations, solved numerically through intrinsic Mathematica routines. The results were compared with available experimental data, indicating the feasibility of the solution of this problem GITT, which led to important computational gains for application in the identification of dispersion parameters, we used Markov Chain Monte Carlo method, which showed results in agreement with the expected.

Keywords: Environmental Simulation. GITT. Transport of Contaminants. Inverse Problems. Macaé River.

¹ DSc. – Centro Federal de Educação Tecnológica Celso Suckow da Fonseca, CEFET/RJ.

E-mail: ademilton.souza@cefet-rj.br

² DSc. – Instituto Politécnico/Universidade do Estado do Rio de Janeiro.

³ PhD. – Instituto Politécnico/Universidade do Estado do Rio de Janeiro.

⁴ PhD. – Instituto Politécnico/Universidade do Estado do Rio de Janeiro.

1. INTRODUÇÃO

Vários problemas de natureza física, biológica e social podem ser modelados por equações diferenciais parciais. A utilização de modelos matemáticos para a representação do transporte de contaminantes é muito útil e de grande importância, principalmente nas áreas de engenharia ambiental e de recursos hídricos. Os modelos matemáticos permitem fazer simulações do comportamento de tal fenômeno que podem ser utilizadas para avaliar e fazer previsões sobre o processo representado, além de ser possível o aperfeiçoamento do modelo (SCHWAAB, 2007).

Em grande parte desses modelos a complexidade da geometria do meio e as condições de contorno podem inviabilizar a aplicação de técnicas de solução analíticas ou até mesmo de métodos puramente numéricos, uma vez que requerem elevado esforço computacional. Neste contexto, encontra-se na literatura diferentes metodologias que surgiram na tentativa de combinar a realidade dos métodos analíticos com a flexibilidade dos métodos numéricos. Dentre elas destaca-se a técnica da Transformada Integral Generalizada (GITT) que é um método híbrido, capaz de gerar soluções computacionais bastante eficientes para diversos problemas a priori não transformáveis ou não solucionáveis analiticamente (COTTA, 1993).

Muitas vezes, os modelos matemáticos que representam um certo fenômeno possuem alguns parâmetros que não podem ou não são facilmente medidos, como por exemplo, a constante de proporcionalidade entre duas variáveis e/ou o coeficiente dispersivo de determinada substância. Para contornar esse problema, os valores destes parâmetros podem ser inferidos a partir de observações experimentais de forma a se obter o melhor ajuste entre simulação e observação (SCHWAAB, 2007).

Em geral, as técnicas de inversão requerem um processo iterativo, sendo extremamente necessário que a metodologia empregada para a formulação e solução do problema direto permita uma solução suficientemente precisa e rápida. Diante disso, para a maioria dos métodos utilizados na identificação de parâmetros é desejável que se tenha uma solução analítica para o problema direto. Quando uma solução analítica não é possível, que é o que acontece na grande maioria dos modelos matemáticos que envolvem equações diferenciais parciais, torna-se fundamental que a solução do problema direto não tenha um elevado tempo de simulação para que o problema inverso seja viável computacionalmente. Pesquisas mais recentes têm sido realizadas com a finalidade de desenvolver técnicas de inversão capazes de processar os dados experimentais

disponíveis e obter estimativas de parâmetros. Uma das metodologias de solução do problema inverso é a abordagem bayesiana que, ao contrário dos métodos determinísticos, baseia-se a uma descrição puramente probabilística e utiliza toda informação disponível para reduzir as incertezas do modelo. As novas informações obtidas são combinadas com as informações previamente disponíveis dando origem as probabilidades posteriores, que formam a base dos processos estatísticos ou de tomada de decisão (KAPIO, 2005). Esta metodologia tem sido utilizada amplamente e com sucesso em vários trabalhos encontrados na comunidade científica (NAVEIRA-COTTA et al., 2010; SILVA, 2013; SOUZA, 2015).

O objetivo deste trabalho é estimar os principais parâmetros que controlam a dinâmica do transporte e dispersão de poluentes em meio hídrico utilizando inferência Bayesiana e uma solução analítico-numérica para o caso bidimensional do transporte de contaminantes em regime transiente 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.

Na seção seguinte apresenta-se a descrição do problema considerado, a metodologia de solução do problema direto por transformação integral, e do problema inverso utilizando o método de Monte Carlo via cadeias Markov (MCMC), que é uma das técnicas mais eficazes para aproximar as probabilidades posteriores, extraíndo amostras da densidade de probabilidade *posteriori*. Na sequência, são apresentados os principais resultados do problema direto e inverso de identificação de parâmetros dispersivos. Apresentam-se as principais conclusões encontradas, a análise dos dados e discussão dos resultados.

2. METODOLOGIA

2.1. Descrição do Problema

A bacia do Rio Macaé é uma das principais bacias hidrográficas do estado do Rio de Janeiro, com área de drenagem de 1.765 km². O Rio Macaé nasce a 1.560 metros de altitude, próximo ao Pico do Tinguá em Nova Friburgo, no nordeste do estado do Rio de Janeiro. Seu curso percorre cerca de 136 km de extensão até chegar na cidade de Macaé, que deu origem ao seu nome e onde desemboca no Oceano Atlântico (AMARAL, 2003).

A região de estudo ilustrada na Figura 1, a seguir, compreende um trecho de 25 km situado próximo a Usina Termoeletrica Mário Lago localizada no município de Macaé, estado do Rio de Janeiro.

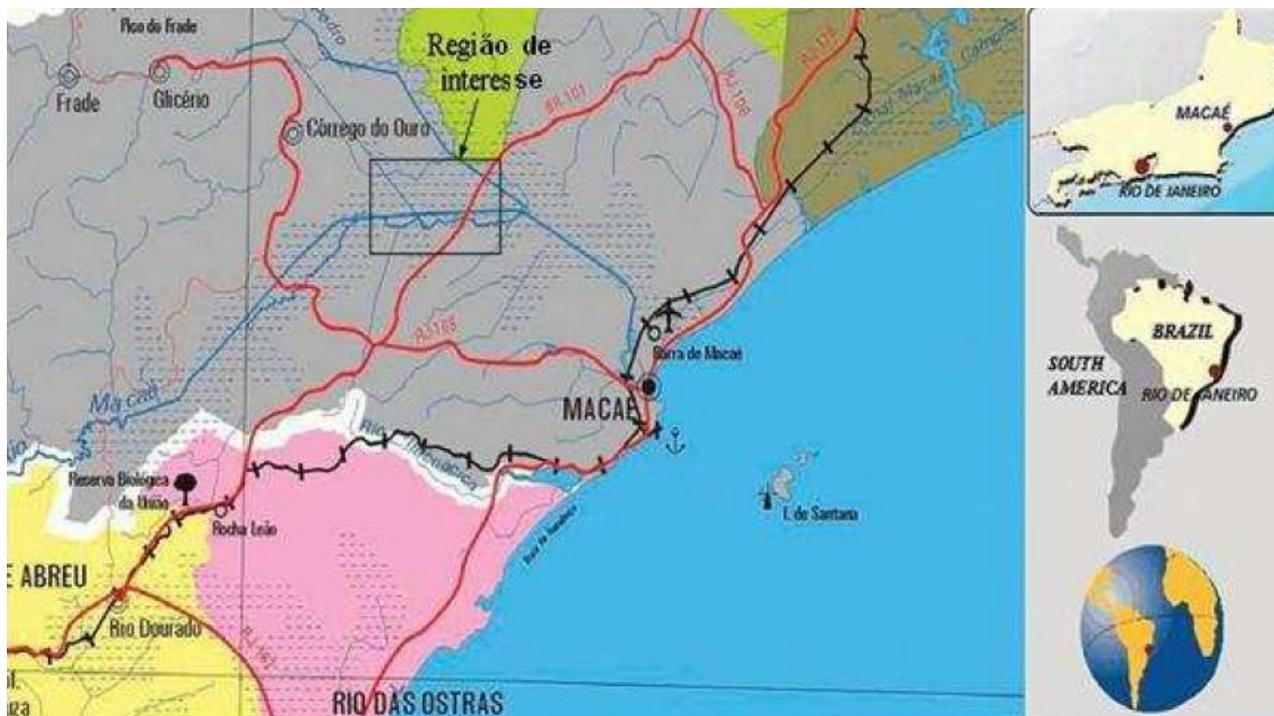


Figura 1. Trecho do Rio Macaé onde está localizada a região de interesse (LUGON et al., 2008).

Nos últimos anos o rio Macaé vem sendo deteriorado, seja na qualidade da água ou na destruição das matas ciliares, principalmente na região baixa do rio, área de interesse neste estudo. Como consequência destas intervenções destacam-se o assoreamento do rio e restrições ao uso da água para o consumo (COSTA, 1999).

Para a simulação de uma descarga de poluente no rio Macaé foi utilizado como traçador uma solução de cloreto de sódio (NaCl). Foram utilizados 2.000 g de NaCl diluídos em um recipiente contendo 10 litros de água, gerando um volume de aproximadamente 11 litros de solução salina. Esse procedimento foi repetido por 10 vezes, até completar dois recipientes, contendo 55 litros da mistura em cada um. Através de um condutivímetro foi determinada 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 (TELLES et al., 2009).

Foi traçado um perfil logarítmico de velocidade do rio que, no trecho de estudo, apresentava profundidade média de 1m e largura média de 42m. Para tal, foi utilizado um molinete fluviométrico obtendo os valores de velocidade de 0,5 m/s e 0,6 m/s a 1 m e a 2 m da margem, respectivamente. Nas margens a velocidade foi considerada nula. Os dados

coletados das concentrações de NaCl das amostras estão disponíveis em TELLES et al. (2009), e serão apresentados aqui apenas na forma gráfica, na apresentação dos resultados, na Seção 3.

2.2. Problema Direto

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, ou seja, apresenta homogeneidade ao longo da coluna d'água (AMARAL, 2003). Dessa forma, a formulação matemática desse problema pode ser representada da seguinte forma:

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

onde $0 < x < L_x$, $0 < y < L_y$, para $t > 0$; U é a velocidade do escoamento na direção x e uniforme na transversal, e E_L e E_T são os coeficientes de dispersão da concentração longitudinal e transversal, respectivamente.

As condições de contorno e inicial são dadas de acordo com as seguintes equações:

$$C(0, y, t) = C_0, \quad 0 \leq y \leq L_y, \quad t > 0 \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial C(L_x, y, t)}{\partial x} = 0, \quad 0 \leq y \leq L_y, \quad t > 0 \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial C(x, 0, t)}{\partial y} = \frac{\partial C(x, L_y, t)}{\partial y}, \quad 0 \leq x \leq L_x, \quad t > 0 \quad (2.3)$$

$$C(x, y, 0) = C_0 + f(x, y), \quad 0 \leq x \leq L_x, \quad 0 \leq y \leq L_y \quad (2.4)$$

onde L_x e L_y são, respectivamente, os comprimentos longitudinal e transversal do trecho em estudo, C_0 é a concentração normal de NaCl nas águas do rio Macaé, e

$$f(x, y) = G\delta_x(x - x_0)\delta_y(y - y_0) \quad (3)$$

representa a emissão pontual e instantânea de um poluente na posição (x_0, y_0) , sendo G a quantidade de massa de poluente emitido.

A solução híbrida analítico-numérica da distribuição de concentração ao longo do trecho, solução das Equações (1) e (2.1-2.4), pode ser obtida utilizando a técnica de transformada integral generalizada (GITT) que será descrita na próxima seção.

2.3. Técnica da Transforma Integral Generalizada

A maioria das técnicas analíticas clássicas são aplicadas para solução de problemas de equações diferenciais relativamente simples. Para problemas mais complexos são utilizados métodos híbridos que envolvem técnicas de soluções analítico-numéricos, como a Técnica da Transformada Integral Generalizada ("Generalized Integral Transform Technique", GITT) (COTTA, 1993; COTTA, 1997). Esta técnica consiste na transformação de equações diferenciais parciais em um sistema acoplado e infinito de equações diferenciais ordinárias. O sistema resultante é então numericamente resolvido, após o truncamento em uma ordem N , suficientemente grande para atender aos requisitos de precisão da solução. Na sequência, uma fórmula de inversão é usada para obter-se a solução híbrida do problema original.

Uma das vantagens da GITT é, portanto, a ausência de necessidade de geração de malha espacial, permitindo controle direto do erro global, através da escolha da ordem de truncamento de expansão, N . Em geral, para acelerar e otimizar a convergência da técnica GITT, o problema original pode ser simplificado através da proposição de filtros analíticos, de modo a reduzir a importância dos termos-fonte do contorno e equação, se possível tornando-os homogêneos, da seguinte forma:

$$C(x, y, t) = C_f(x) + C^*(x, y, t) \quad (4)$$

onde $C^*(x, y, t)$ é a solução do problema homogêneo obtida através da técnica GITT, como uma expansão em autofunções, e $C_f(x)$ é a solução filtro proposta para homogeneizar as condições de contorno do problema (1).

A função $C_f(x)$ é encontrada através do seguinte problema de filtragem homogêneo de segunda ordem, obtido substituindo a Equação (4) no problema original:

$$U \frac{\partial C_f(x)}{\partial x} = E_L \frac{\partial^2 C_f(x)}{\partial x^2} \quad (5.1)$$

$$C_f(0) = C_0 \quad (5.2)$$

$$\frac{\partial C_f(L_x)}{\partial x} = 0 \quad (5.3)$$

O Sistema (5.1-5.3) é resolvido analiticamente apresentando solução constante $C_f(x) = C_0$.

2.4. Problema de Autovalor e Problema Transformado

A solução do problema original pode também ser encontrada 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 unidimensional.

Seguindo o procedimento para transformada integral, o seguinte problema de autovalor do tipo Sturm-Liouville é proposto:

$$E_T \frac{d^2 \psi_i(y)}{dy^2} + \beta_i^2 \psi_i(y) = 0 \quad (6.1)$$

$$\frac{d\psi_i(0)}{dy} = 0 = \frac{d\psi_i(L_y)}{dy} \quad (6.2)$$

A solução do sistema tem suas autofunções e autovalores dados, respectivamente, pelas expressões:

$$\psi_i(y) = \cos \frac{x\beta_i}{\sqrt{E_T}} \quad (7.1)$$

$$\beta_i = \frac{\pi i \sqrt{E_T}}{L_y} \quad (7.2)$$

O problema de autovalor apresentado permite definir o seguinte par de transformação integral, sendo $\tilde{\psi}_i(y)$ as autofunções normalizadas:

$$\bar{C}_i(x, t) = \int_0^{L_y} \tilde{\psi}(y) C(x, y, t) dy \quad (8.1)$$

$$C(x, y, t) = \sum_{i=1}^{\infty} \tilde{\psi}_i(y) \bar{C}_i(x, t) \quad (8.2)$$

Deve ser ressaltado que neste trabalho optou-se por uma metodologia de transformação parcial, onde somente uma das coordenadas espaciais é transformada, resultando num sistema de equações diferenciais parciais unidimensional a ser resolvido numericamente (COTTA e GERK, 1994).

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

$$\frac{\partial \bar{C}_i(x, t)}{\partial t} + \beta_i^2 \bar{C}_i(x, t) - E_L \frac{\partial^2 \bar{C}_i(x, t)}{\partial x^2} = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{d\bar{C}_j(x, t)}{dx} \int_0^{L_y} \tilde{\psi}_i(y) \tilde{\psi}_j(y) U(y) dy \quad (9.1)$$

com condições inicial e de contorno transformadas dadas por:

$$\bar{C}_i(x, 0) = \int_0^{L_y} \tilde{\psi}_i(y) f(x, y) dy \quad (9.2)$$

$$\bar{C}_i(0, t) = 0 = \frac{\partial \bar{C}_i(L_x, t)}{\partial x} \quad (9.3)$$

O sistema (9.1-9.3) 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 (8.2), pode ser empregada para obtenção da solução para o potencial original, $C_i(x, y, t)$.

2.5. Problema Inverso

Nesta seção apresenta-se a metodologia de problemas inversos empregada para estimação dos parâmetros E_L e E_T , coeficientes de dispersão presentes na equação do problema original.

A estimação de parâmetros através da técnica de problemas inversos consiste na minimização de uma função objetivo que compara a resposta obtida pela solução do problema direto com a resposta observada pelos dados experimentais. Para isso, a partir de uma dada métrica, formula-se o problema de tal maneira que se possa estimar um conjunto de parâmetros que melhor se ajustam ao conjunto de valores medidos de entrada e saída (SILVA NETO e BECCENERI, 2012).

Geralmente, problemas inversos têm sido resolvidos através de técnicas de otimização determinísticas. Por outro lado, devido a sua simplicidade, muitos trabalhos propõem a utilização de técnicas de otimização estocásticas que podem ser acopladas ou não aos métodos determinísticos (SILVA NETO e SOEIRO, 2002).

Na análise de problemas inversos existem diferentes fatores que contribuem para as incertezas na identificação de parâmetros e que podem ser considerados e contornados ao se empregar a abordagem Bayesiana. Nesta metodologia os parâmetros são analisados como variáveis aleatórias, e as vantagens desta abordagem estão na 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 (COSTA, 2004).

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

$$P_{post}(\boldsymbol{\beta} | Z_e) = P(Z_e | \boldsymbol{\beta}) P_{pr}(\boldsymbol{\beta}) / P(Z_e) \quad (10)$$

onde $P_{pr}(\boldsymbol{\beta})$ é a probabilidade *a priori*, $P(Z_e)$ é a função de densidade de probabilidade marginal e $P(Z_e | \boldsymbol{\beta})$ é a verossimilhança obtida pela Equação (11) que descreve a probabilidade de se encontrar os dados experimentais Z_e , sabendo a resposta real e desconhecida do problema físico ($Z(\boldsymbol{\beta})$) e a variância (\mathbf{V}) dos dados experimentais (SCHWAAB, 2007):

$$P(\mathbf{Z}_e|\beta) = \frac{1}{\sqrt{\det \mathbf{V} (2\pi)^{n_e}}} \exp \left[-\frac{1}{2} (\mathbf{Z}_e - \mathbf{Z}^m)^T \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{Z}_e - \mathbf{Z}^m) \right] \quad (11)$$

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 (KAPIO, 2005). 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.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste trabalho foi considerado um domínio contendo 2.200 m de comprimento por 40 m de largura. A concentração de NaCl determinada no contorno em $x=0$ e ao longo do trecho foi de 37 mg/l. No instante inicial foi simulado o lançamento de 20 kg de NaCl (G) para previsão do comportamento do perfil de concentração com o tempo ao longo da seção transversal na posição $y=0,5$ m localizado a 50 m a jusante do ponto de lançamento do poluente em $x=1050$ m.

Em geral, os coeficientes de dispersão E_L e E_T apresentam grande dificuldade de medição. Para a simulação do perfil de concentração nesse trecho do Rio Macaé, TELLES et al. (2009) consideraram os valores $E_L = 0,4 \text{ m}^2/\text{s}$ e $E_T = 0,003 \text{ m}^2/\text{s}$, enquanto que SOUZA et al. (2015) consideraram os valores $E_L = 0,25 \text{ m}^2/\text{s}$ e $E_T = 0,006 \text{ m}^2/\text{s}$ obtidos pelas fórmulas empíricas $E_L = 5,93du_*$ e $E_T = 0,15du_*$ estabelecidas, respectivamente, por ELDER (1959) e FISCHER et al. (1979), sendo d a profundidade média e $u_* = (gdS_0)^{0,5}$ a velocidade de atrito do escoamento descrita por MARTIN (1998), onde g é a aceleração da gravidade e S_0 a declividade do rio.

As Tabelas 1 e 2 mostram o comportamento da convergência da solução a medida em que se aumenta a ordem de truncamento (N) da solução em série, de modo a atender o nível de precisão da solução e manter o mínimo esforço computacional. Observa-se que os resultados apresentados aparentemente convergiram para pelo menos dois dígitos significativos.

Tabela 1. Análise de convergência da solução para concentração (mg/l) em relação a ordem de truncamento na posição $y=0,5$ m a jusante do ponto de lançamento do poluente.

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

Tabela 2. Análise de convergência da solução para concentração (mg/l) em relação a ordem de truncamento na posição $x=1100$ m a jusante do ponto de lançamento do poluente.

y (m)	N=20	N=40	N=60	N=80	N=100
t=100 s					
0	315,9860	291,5500	287,9680	287,7090	287,9700
10	48,9798	46,0267	45,6098	45,7170	45,6580
20	31,5606	34,0889	33,8933	33,8515	33,8477
30	37,7054	35,8337	35,5116	35,6077	35,5668
40	39,8533	40,0130	39,6983	39,6716	39,6769
t=150 s					
0	197,5740	237,8600	240,0200	239,8610	239,7390
10	39,1082	36,9651	37,2180	37,1492	37,1817
20	35,7793	36,8251	36,9606	36,9859	36,9953
30	38,1247	36,7420	36,9564	36,8935	36,9212
40	35,4889	38,5820	38,7755	38,7914	38,7910

De acordo com MARTIN (1998) as equações empíricas definidas por ELDER (1959) e FISCHER et al. (1979) apresentam uma margem de erro relativamente alta, na ordem de

mais ou menos 50%, o que justifica uma análise do problema inverso de identificação desses parâmetros.

Os resultados do problema inverso obtidos pelo método de Monte Carlo com as cadeias de Markov estão apresentados nas Figuras 2a e 2b. É possível observar a convergência das cadeias de Markov para os valores $E_L = 0,362 \text{ m}^2/\text{s}$ e $E_T = 0,0145 \text{ m}^2/\text{s}$, utilizando uma cadeia de 50.000 estados. A convergência do método ocorreu de forma rápida, mostrando que não seria necessário um aquecimento tão expressivo quanto o utilizado.

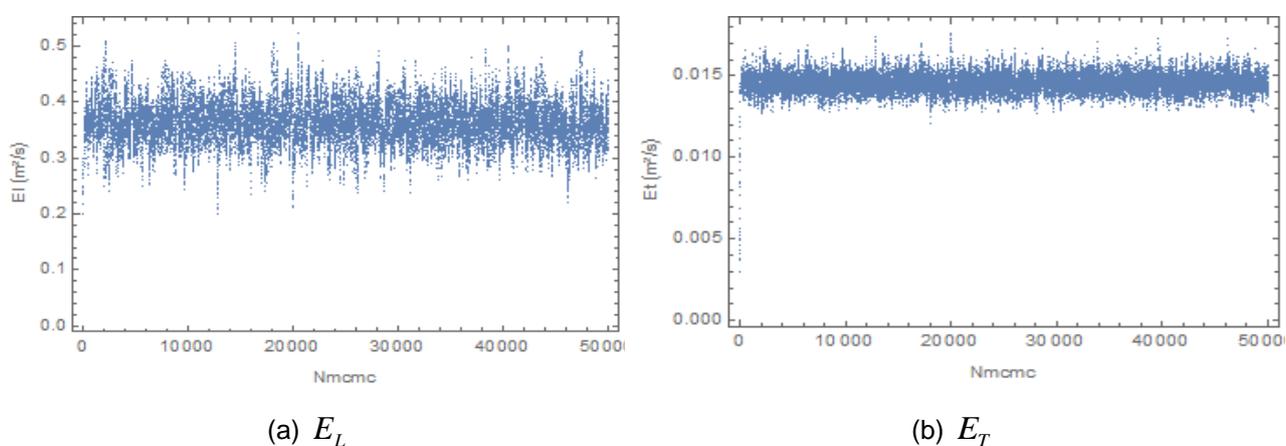


Figura 2. Evolução das Cadeias de Markov.

Em sequência, na Figura 3, são apresentados os histogramas das cadeias obtidas correspondentes às amostragens das distribuições *a posteriori*, com a finalidade de ressaltar o desvio padrão associado a cada parâmetro estimado.

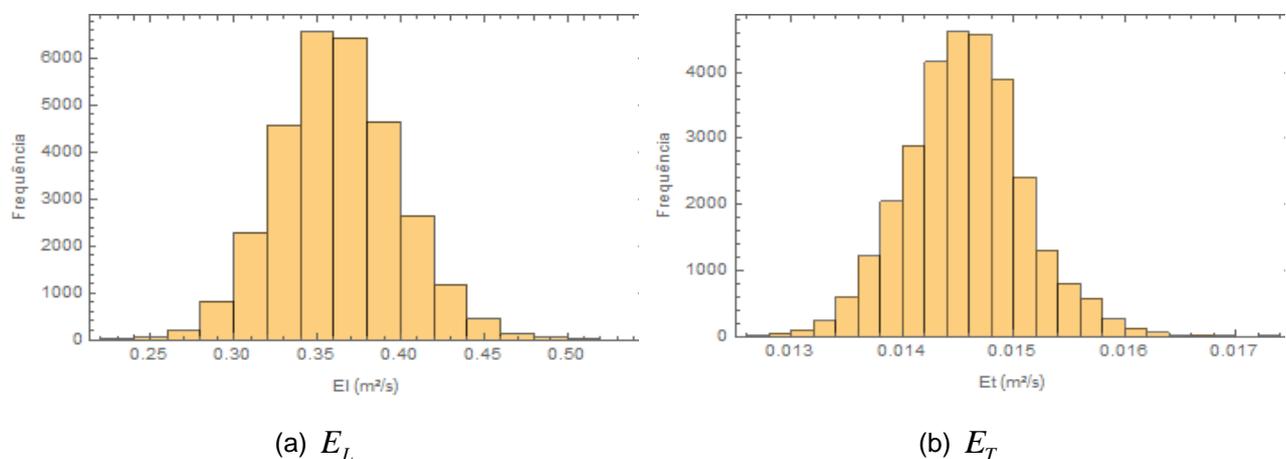


Figura 3. Histogramas para os parâmetros estimados.

Na Tabela 3 são apresentadas as principais propriedades estatísticas amostrais obtidas das distribuições a posteriori para cada parâmetro desconhecido, incluindo os intervalos com 95% de confiança.

Tabela 3. Propriedades Estatísticas para os parâmetros E_L e E_T .

Parâmetros	E_L	E_T
μ	0,362697	0,014565
σ	0,036077	0,000537
σ/μ (%)	9,947	3,688
I.C. (95%)	[0,295048;0,436826]	[0,013540;0,0157057]

Na Figura 4 abaixo tem-se a evolução do perfil de concentração com o tempo na direção transversal, na posição em $y=0,5$ m, localizado a 50 m a jusante do ponto de lançamento do poluente em $x=1050$ m. Na solução apresentada pela Figura 4a foram considerados os valores $E_L = 0,25$ m²/s e $E_T = 0,006$ m²/s obtidos empiricamente (SOUZA et al., 2015). Na Figura 4b observa-se o comportamento com a solução obtida pelo problema inverso, que se mostrou 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 a medição desse dado durante a realização do experimento. Desprezando essa informação experimental e repetindo a simulação do problema inverso, a Figura 4c apresenta resultados mais ajustados aos dados experimentais. Observa-se ainda que ambas as soluções apresentam um comportamento aproximado a uma gaussiana e a defasagem apresentada pode ser atribuída à imprecisão do método de coleta de dados.

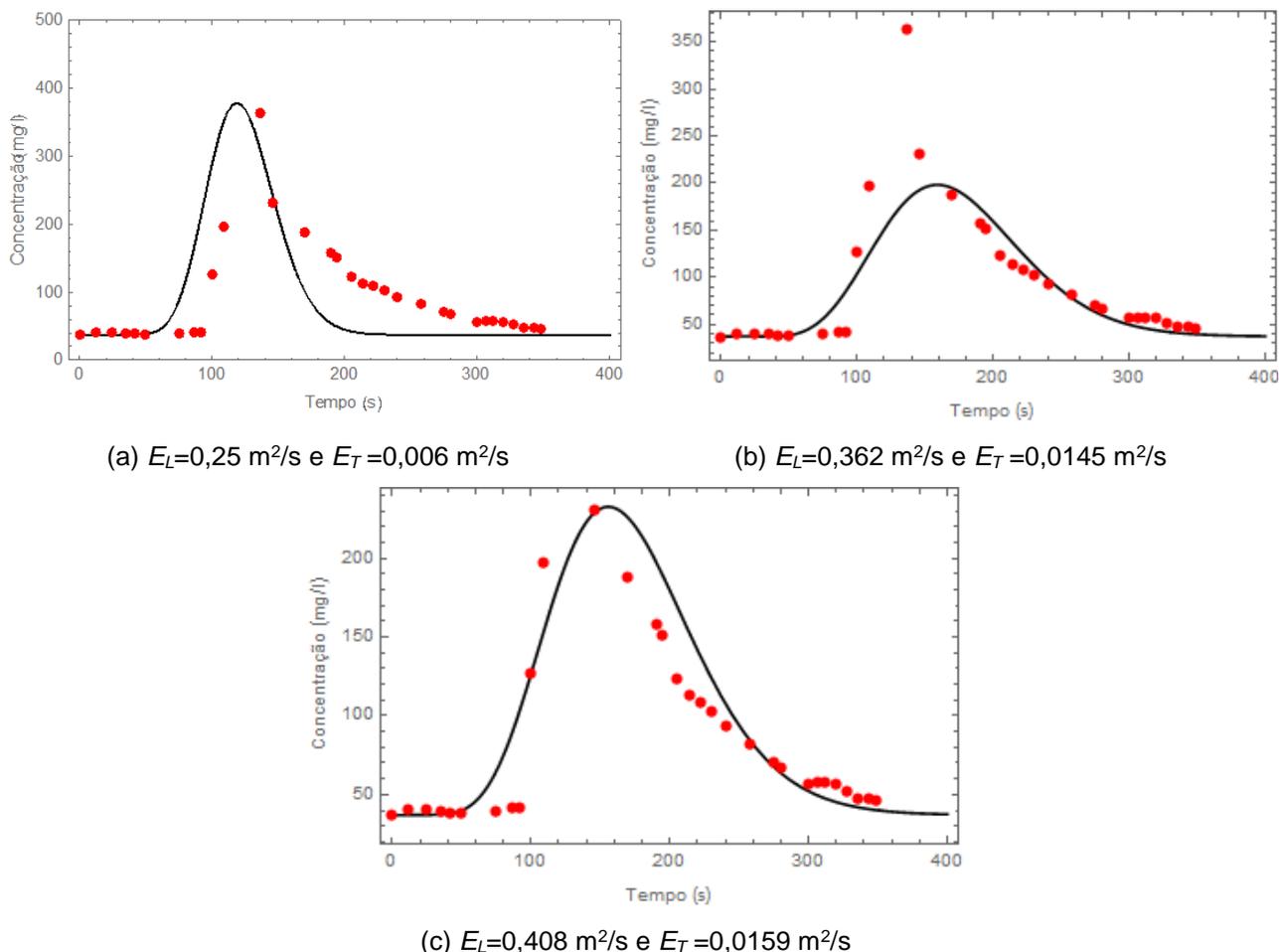


Figura 4. Perfil de concentração de NaCl.

4. CONCLUSÕES

A análise dos resultados permitiu 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, como o decaimento do campo de concentração de contaminantes. Foi demonstrada a plausibilidade 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 novos experimentos numéricos utilizando o método dos problemas inversos para se definir de maneira mais precisa o campo de velocidades (termo advectivo) a fim de reduzir a defasagem encontrada nos resultados.

AGRADECIMENTOS

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

REFERÊNCIAS

AMARAL, K. J. **Estuário do Rio Macaé: Modelagem Computacional como Ferramenta para o Gerenciamento Integrado de Recursos Hídricos**. Dissertação (mestrado), Universidade Federal do Rio de Janeiro: COPPE, Rio de Janeiro, Brazil, 2003.

COSTA, H. **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-RJ, 1999.

COSTA, W. U. **Técnicas Bayesianas para Engenharia Elétrica**. UFMG, Minas Gerais, 2004.

COTTA, R. M. **Integral Transforms in Computational Heat and Fluid Flow**. CRC Press, pp. 180-188, 1993.

COTTA, R. M.; GERK, J. E. V. **Mixed Finite-Difference/Integral Transform Approach for Parabolic-Hyperbolic Problems in Transient Forced Convection**. Numerical Heat Transfer, Part B Fundamentals, Taylor & Francis, v. 25, n. 4, p. 433–448, 1994.

COTTA, R. M. e MIKHAILOV, M. D. **Heat Conduction: Lumped Analysis, Integral Transforms, Symbolic Computation**. Wiley-Interscience, Chichester, UK, 1997.

ELDER, J. W. **The Dispersion of Marked Fluid in Turbulent Shear Flow**. Journal of Fluid Mechanics, Vol.5, pp. 544-560, 1959.

FISCHER, H. B., IMBERGER, J., LIST, E. J., KOH, R. C. Y. e BROOKS, N. H. **Mixing in Inland and Coastal Waters**. Elsevier, Academic Press, New York, 1979.

KAPIO, J., SOMERSALO, E. **Statistical and Computational Inverse Problems**. Springer, New York, 2005.

LUGON, J. Jr., RODRIGUES, P. P. G. W. e SILVA NETO, A. J. **Assessment of Dispersion Mechanisms in Rivers by Means of an Inverse Problem Approach**. Inverse Problems in Science and Engineering, Vol.16, No.8, pp. 967-979, 2008.

MARTIN, J. L. e MCCUTCHEON, S. C. **Hydrodynamics and Transport for Water Quality Modeling**, Lewis, New York, 1998.

NAVEIRA-COTTA, C. P., ORLANDE, H. R. B. e COTTA, R. M. **Integral transforms and Bayesian inference in the identification of variable thermal conductivity in two-phase dispersed systems**, Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals, vol. 57, No. 3, pp.173-202, Taylor & Francis, 2010.

SCHWAAB, M. e PINTO, J. C. **Análise de Dados Experimentais**. I. Fundamentos de Estatística e Estimação de Parâmetros. E-papers, Rio de Janeiro, Brasil, 2007.

SILVA NETO, A. J.; SOEIRO, F. J. C. P. **Estimation of phase function of anisotropic scattering with a combination of gradient based and stochastic global optimization methods**. In: 5th World Congress on Computational Mechanics, 2002.

SILVA, L. G. **Problemas Inversos em Processos Difusivos com Retenção**. Dissertação (Mestrado). Nova Friburgo: UERJ/IPRJ, 2013.

SILVA NETO, A. J.; BECCENERI, J. C. **Técnicas de inteligência computacional inspiradas na natureza, aplicação em problemas inversos de transferência radiativa, notas em matemática aplicada**. Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional, São Carlos, SP, v. 41, 2012.

SOUZA, A. L. R., KNUPP, D. C., RODRIGUES, P. P. G. W. e SILVA NETO, A. J. **Simulação Computacional do Transporte Horizontal Bidimensional de Contaminantes no Rio Macaé Através da Técnica da Transformada Integral Generalizada**. Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics, v. 3, n. 2, 2015.

TELLES, W. R., RODRIGUES, P. P. W., SILVA NETO, A. J., LUGON, J.J. e FERREIRA, M. I. P. **Uso de Modelagem Computacional Bidimensional Horizontal com Velocidade Variável na Direção Transversal na Simulação do Transporte de Contaminantes no Rio Macaé**. In: XXX CILAMCE - Congresso Ibero Latino Americano de Métodos Computacionais em Engenharia, Armação dos Búzios, Brasil, 2009.