

ADAPTAÇÃO E APLICAÇÃO DE MÉTODOS DE INTELIGÊNCIA COMPUTACIONAL PARA A ESTIMAÇÃO DE UMA FONTE DE POLUENTES EM ESTUÁRIOS

Radael de Souza Parolin¹
Pedro Paulo Gomes Watts Rodrigues²
Antônio José da Silva Neto³

Resumo: A qualidade de um corpo hídrico pode ser avaliada através da análise de um conjunto de indicadores. Modelos matemáticos e computacionais podem ser construídos para simular o comportamento destes indicadores (variáveis observáveis), de forma que possam ser gerados diferentes cenários, apoiando as decisões relativas à gestão de recursos hídricos. Neste estudo, o transporte de um contaminante conservativo em um ambiente estuarino é simulado a fim de identificar a localização e intensidade de uma fonte de contaminantes. Para isso, foi formulado um problema inverso, o qual foi resolvido através de métodos de inteligência computacional. Esta abordagem exigiu adaptações destes métodos, que tiveram de ser modificados para relacionar a posição da fonte com os pontos de malha discretos do domínio. Neste contexto, foram desenvolvidas duas técnicas adaptativas. Em uma delas, os pontos estimados são projetados para pontos da malha, e na outra, os pontos são selecionados aleatoriamente nos espaços de busca iterativos dos métodos. Os resultados mostraram que a metodologia aqui desenvolvida possui um forte potencial na simulação e gestão de corpos hídricos.

Palavras-chave: Transporte de poluentes, estimação de fontes, inteligência computacional, problema inverso.

Abstract: The quality of a given water body can be assessed through the analysis of a number of indicators. Mathematical and computational models can be built to simulate the behavior of these indicators (observable variables), in such a way that different scenarios can be generated, supporting decisions regarding water resources management. In this study, the transport of a conservative contaminant in an estuarine environment is simulated in order to identify the position and intensity of the contaminant source. For this, it was formulated an inverse problem, which was solved through computational intelligence methods. This approach required adaptations to these methods, which had to be modified to relate the source position to the discrete mesh points of the domain. In this context, two adaptive techniques were developed. In one, the estimated points are projected to the grid points, and in the other, points are randomly selected in the iterative search spaces of the methods. The results showed that the methodology here developed has a strong potential in water bodies' management and simulation.

Keywords: Pollutants transport, estimation of sources, computational intelligence, inverse problem.

¹ Universidade Federal do Pampa – UNIPAMPA, Itaqui/RS. Email: radaelsp@gmail.com

² Departamento de Modelagem Computacional, Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro – IPRJ/UERJ, Nova Friburgo/RJ. E-mail: pwatts@iprj.uerj.br

³ Departamento de Engenharia Mecânica e Energia, Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro – IPRJ/UERJ, Nova Friburgo/RJ. E-mail: ajsneto@iprj.uerj.br

1. INTRODUÇÃO

Muitos problemas em Engenharia são resolvidos através de adaptações de métodos já existentes e consagrados, envolvendo, não raro, o inter-relacionamento de conhecimentos de diversas áreas da Ciência.

Nesse contexto, este artigo apresenta a adaptação de métodos de inteligência computacional para a estimação da localização de uma fonte de poluentes em um estuário.

O meio hídrico aqui considerado é o estuário do Rio Macaé, situado na costa norte do estado do Rio de Janeiro. O problema proposto consiste na identificação da procedência e magnitude de um hipotético lançamento de poluente que seja diluído nas águas desse estuário. Para tal, em uma primeira etapa é implementada a solução do problema direto, aqui modelado pela equação de transporte. Este modelo descreve o comportamento de um dado contaminante, envolvendo parâmetros hidrodinâmicos, de dispersão e um termo que representa fontes. Na segunda etapa o modelo é então acoplado a métodos de inteligência computacional para a estimação de parâmetros (problema inverso) que possam expressar a localização e intensidade da fonte do poluente considerado (Silva Neto e Becceneri, 2012). Dessa forma, tem-se por objetivo estimar fontes através de tais parâmetros.

Quanto à estimação da localização de fontes ou sumidouros em modelos de transporte de poluentes, não foram encontrados trabalhos desenvolvidos na literatura. Com isso, são necessárias adaptações de métodos já existentes na literatura para a estimação da fonte de poluentes.

Em trabalhos anteriores, iniciamos com estimativas de fontes de poluentes em um modelo simplificado do estuário em questão (Parolin et al., 2012), e posteriormente foi realizada uma análise de sensibilidade dos parâmetros da fonte para compreender o potencial e as dificuldades do processo de estimação (Parolin et al., 2014).

Neste trabalho realizamos a adaptação de dois métodos de inteligência computacional para estimar, principalmente, a localização de uma fonte de contaminantes. Com tal adaptação, foi possível realizar de forma eficiente a estimação da fonte (localização e intensidade). Complementar a estes estudos, realizamos a estimativa de fontes de poluentes com três métodos distintos, aplicando a melhor adaptação aqui encontrada e utilizando ruído nos dados experimentais (Parolin et al., 2014a).

2. TRANSPORTE DE POLUENTES

O transporte de poluentes pode ser descrito pela equação de advecção-difusão (Bird et al., 1960; Patankar, 1980; Anderson, 1995), que ao ser integrada verticalmente, implica que a variação da concentração é considerada desprezível na direção vertical. Dessa forma, a representação bidimensional do transporte de poluentes é expressa por

$$H \frac{\partial C}{\partial t} + H\vec{v}\vec{\nabla}C - \vec{\nabla}(HD\vec{\nabla}C) + HQ = 0 \quad (1)$$

onde:

$C(x, y, t)$ é a concentração do poluente (kg/m^3),

$H(x, y, t)$ é a profundidade total de água (m),

$\vec{v} = (u, v)$ é o vetor velocidade do fluido (m/s),

$Q(x, y, t)$ é o termo fonte do poluente (kg/m^3s),

D é o coeficiente de dispersão turbulenta (m^2/s), dado por $D = \begin{bmatrix} D_{xx} & D_{xy} \\ D_{yx} & D_{yy} \end{bmatrix}$,

x e y são as variáveis independentes horizontais (coordenadas espaciais) (m),

t é o tempo (s),

$\vec{\nabla} = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y} \right)$ é o operador gradiente ($1/m$).

Para as condições de contorno nas fronteiras fluvial e marinha foi considerado fluxo zero (condição de Neumann), e para a condição inicial foi

considerada concentração nula para todo o domínio,

$$\frac{\partial C(x_i, y_i, t)}{\partial \bar{n}} = 0 \quad (2)$$

$$C(x, y, 0) = 0 \quad (3)$$

onde (x_i, y_i) representam as coordenadas nas fronteiras e \bar{n} o vetor normal às mesmas.

Para a solução numérica do modelo de transporte foi realizada a aplicação do Método de Elementos Finitos (MEF) para a discretização no espaço (Zienkiewicz e Taylor, 1994, 2000; Domínguez e Hernández, 2007) e do Método de Diferenças Finitas (MDF) para a discretização no tempo (Smith, 2004). Por fim, obtém-se um sistema de equações lineares algébricas (SELA), sendo solucionado utilizando o Método de Gauss-Seidel (MGS) que é convergente, considerando que o sistema tem diagonal dominante (Cunha, 2000).

O domínio de estudo do estuário do Rio Macaé, que se situa no município de Macaé no Estado do Rio de Janeiro, foi definido através de fotos por satélite, desde a cabeceira até a costa. Os dados de batimetria da região da costa foram tomados a partir da carta náutica 1507, editado pela Marinha do Brasil em 1974, enquanto que da região superior foi obtida a partir de Amaral (2003).

Na Figura 1 é apresentada uma foto por satélite utilizada para a definição do domínio de estudo. Na Figura 2 é apresentada a geometria do estuário e os dados de batimetria (profundidade de acordo com o nível médio do mar) utilizados. A malha espacial é composta por 600 nós com 917 elementos finitos triangulares, definida após um estudo de consistência, estabilidade e convergência do método de discretização.

Os parâmetros de dispersão do modelo de transporte foram adotados como $D_{xx}=2m^2/s$, $D_{xy}=D_{yx}=0m^2/s$, $D_{yy}=2m^2/s$, valores esses estimados por Lima et al. (2013).

A hidrodinâmica do estuário foi modelada pela formulação bidimensional das “Equações de Águas Rasas (EAR)”

(Miranda et al., 2002), que resolvem as variáveis do escoamento assumindo que essas pouco variam na direção vertical (estuário homogêneo verticalmente), expressas por

$$\frac{\partial h_s}{\partial t} + \bar{\nabla}(H\bar{v}) = 0 \quad (4)$$

$$\frac{\partial(\rho Hu)}{\partial t} + \bar{\nabla}(\rho u H \bar{v}) - \rho f_c H v + \rho g H \frac{\partial h_s}{\partial x} + \frac{g E_s H^2}{2} \frac{\partial C_s}{\partial x} + \tau_{bx} - \tau_{wx} = 0 \quad (5)$$

$$\frac{\partial(\rho H v)}{\partial t} + \bar{\nabla}(\rho v H \bar{v}) - \rho f_c H u + \rho g H \frac{\partial h_s}{\partial y} + \frac{g E_s H^2}{2} \frac{\partial C_s}{\partial y} + \tau_{by} - \tau_{wy} = 0 \quad (6)$$

onde:

$h_s(x, y, t)$ representa a superfície do nível da água acima do nível médio do mar (m),

$H(x, y, t) = h_s(x, y, t) + Z_b(x, y)$ representa a profundidade total de água (m),

$Z_b(x, y)$ é a profundidade do fundo ou batimetria (m),

ρ é a massa específica do fluido (kg/m^3),

f_c é o coeficiente de Coriolis ($1/s$),

g é a constante de aceleração da gravidade ($9,81m/s^2$),

τ_{bx} e τ_{by} representam as tensões de cisalhamento devido ao atrito com o fundo nas direções x e y , respectivamente,

τ_{wx} e τ_{wy} representam as tensões de cisalhamento devido à força do vento na superfície da água nas direções x e y , respectivamente,

$C_s(x, y, t)$ é a concentração de sal (kg/m^3),

$E_s = 0,7142$ é um coeficiente constante adimensional (massa de fluido/massa de sal).

As componentes horizontais de velocidade foram obtidas da solução do modelo hidrodinâmico implementado por Lima (2012). Um detalhamento maior sobre o acoplamento desse modelo hidrodinâmico ao problema de transporte aqui discutido pode ser encontrado em Parolin (2013).



Figura 1 – Foto por satélite do estuário do Rio Macaé (Fonte: Google Maps, 2014)

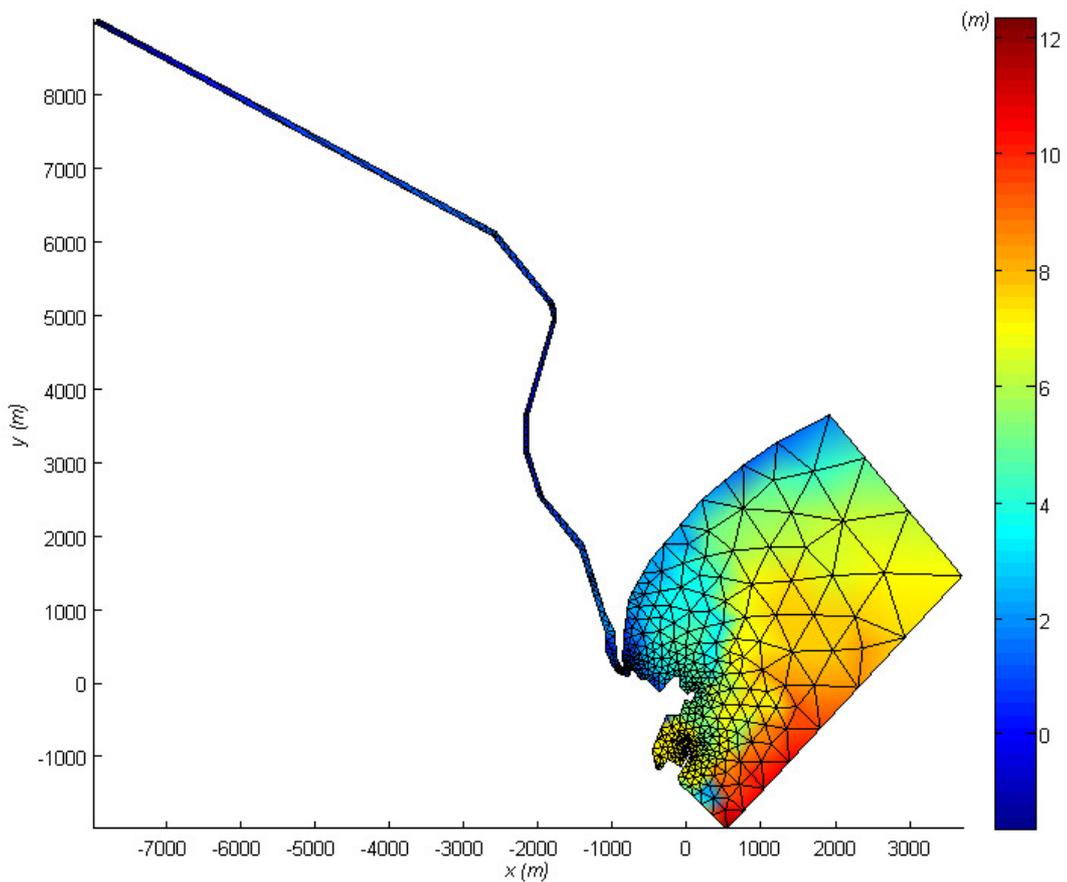


Figura 2 – Geometria e dados de batimetria (*m*) do estuário do Rio Macaé

De posse das variáveis hidrodinâmicas e já definida a geometria do estuário em estudo, o passo temporal utilizado foi definido de acordo com a aplicação combinada do MEF e do MDF na solução do problema de transporte apresentada. Zienkiewicz e Taylor (1994) recomendam fazer o número de *Courant* tão próximo da unidade quanto possível para o menor elemento do domínio. Nestas condições, o incremento temporal foi definido como $\Delta t = 1800s$.

3. ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS E ADAPTAÇÃO DE MÉTODOS

O problema de transporte de poluentes é definido aqui como o Problema Direto (PD), sendo representado pela equação de advecção-difusão, com as condições de contorno, variáveis hidrodinâmicas e parâmetros adotados (Parolin, 2013).

Já o Problema Inverso (PI), compreende o problema de estimação da fonte de contaminantes, onde assume-se conhecer medidas de concentração e pretende-se estimar a localização e a intensidade de uma fonte, representados por parâmetros do PD.

Nesta formulação, se procura minimizar a função objetivo, dada pelo somatório do quadrado dos resíduos entre os valores das concentrações calculadas e das concentrações experimentais,

$$SQR = \{ \vec{C}_{calc}(\vec{P}) - \vec{C}_{med} \}^T \{ \vec{C}_{calc}(\vec{P}) - \vec{C}_{med} \} = \vec{R}^T \vec{R} \quad (7)$$

onde \vec{C}_{med} é o vetor das concentrações disponíveis, medidas experimentalmente,

\vec{C}_{calc} é o vetor das concentrações calculadas,

\vec{P} é o vetor de incógnitas, correspondendo neste trabalho à localização e à intensidade da fonte,

\vec{R} é o vetor dos resíduos.

O objetivo principal deste estudo consiste em estimar a localização e a intensidade de uma fonte única, pontual e constante. Neste contexto, é importante

compreender que a localização da fonte é uma posição pontual (nó) no meio bidimensional discretizado do estuário, e não apenas um parâmetro do modelo de transporte. Além disso, o parâmetro de intensidade da fonte (kg/m^3s) pode ser sensível à dimensão dos elementos finitos que incluam a localização estimada para a fonte, sem contar o fato de que o nó dessa localização pode, ainda, pertencer a mais do que um elemento. Dessa forma, é necessário um tratamento diferenciado de qualquer outro parâmetro de análise.

Como a localização da fonte é definida por pontos da malha espacial (dados discretos e limitados), para estimar sua localização real é necessário o emprego de alguma técnica que estime apenas pontos da malha, mas que ao mesmo tempo possa avaliar esse posicionamento estimado em relação à localização real da fonte.

Diante disso, há duas perspectivas interessantes a serem consideradas. Em uma delas, o ponto da malha espacial é escolhido de acordo com a menor distância euclidiana entre os pontos da malha e o ponto gerado pelo método aplicado (será chamada de projeção). Na outra, é realizada a seleção dos pontos da malha pertencentes ao espaço de busca do método aplicado, e o método age então frente a esta seleção.

Se a estimação da localização da fonte considerar a projeção, é necessária a avaliação do ponto estimado pelo método utilizado com todos os pontos da malha. Embora haja certo custo computacional, o fator positivo é a relação geométrica do ponto estimado e o ponto escolhido de menor distância. Esse aspecto permite certa liberdade do método de atuar dentro dos limites iniciais do espaço de busca contínuo (que inclui o domínio físico). Em contrapartida, os limites geométricos iniciais, impostos juntamente com o cálculo da menor distância, podem levar à prevalência de alguns pontos da malha (Figura 3), não garantindo a mesma probabilidade de escolha para todos os pontos selecionados, objetivo da maioria dos métodos estocásticos. Os pontos que prevalecem são aqueles pertencentes às

fronteiras, que estão mais próximos a qualquer área fora da geometria

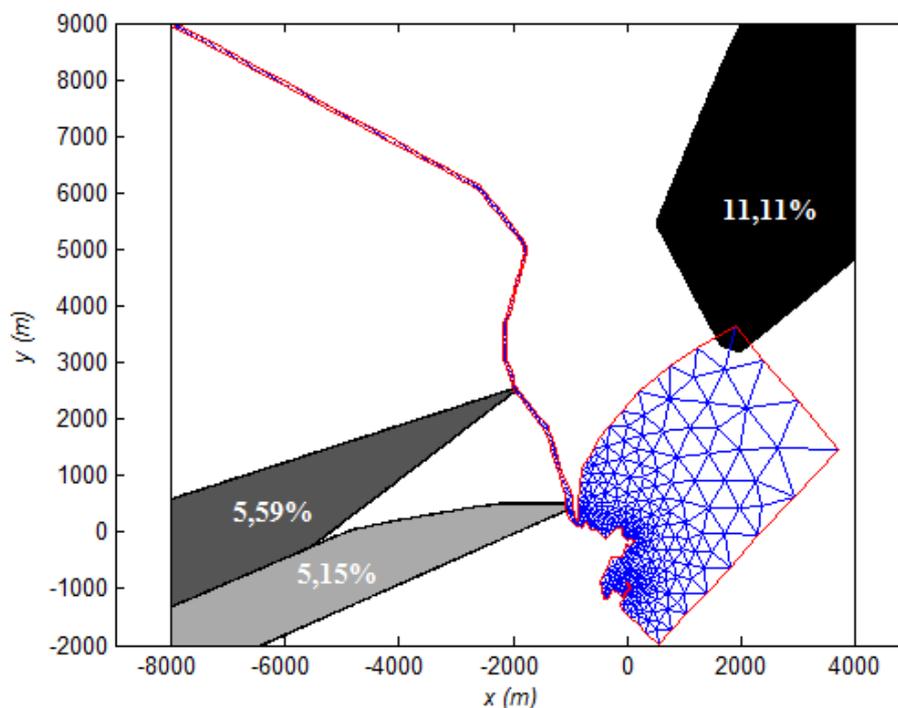


Figura 3 – Prevalência de três pontos da malha no Espaço de Projeção Nodal

considerada. Na Figura 3 é apresentada a prevalência de três pontos, considerando a estimativa de pontos por projeção, aqui denominado Espaço de Projeção Nodal (EPN). O EPN dos três pontos mais prevalentes representam 11,11%, 5,59% e 5,15% da área total considerada.

Se a estimativa da localização da fonte considerar a seleção dos pontos definidos dentro de limitantes (relação geométrica de vizinhança), é necessária a avaliação de todos os pontos da malha para identificar os pertencentes. Embora haja certo custo computacional, o fator positivo é que todos os pontos selecionados possuem a mesma probabilidade de serem escolhidos, não havendo, portanto, prevalência de pontos ou regiões. Em contrapartida, é necessário definir limites (espaço de busca) para a seleção dos pontos pertencentes, o que fica dependente do método aplicado, sendo necessária muitas vezes uma adaptação, ou até mesmo, tornando-se inviável o uso de tal técnica.

Neste trabalho, estas duas técnicas são adaptadas para a aplicação de métodos de inteligência computacional na estimativa da localização da fonte, tendo-

se também por objetivo a estimativa da intensidade da fonte.

Com a análise de sensibilidade dos parâmetros da fonte, percebeu-se correlação entre ambos (Parolin et al., 2014). E como um parâmetro de intensidade constante pode gerar fluxos de massa distintos em localizações diferentes, escolheu-se resolver o problema inverso em dois passos. Dessa forma, a cada localização estimada, o parâmetro de intensidade da fonte ajusta-se especificamente para tal localização, de acordo com os dados de concentração.

4. MÉTODOS DE INTELIGÊNCIA COMPUTACIONAL APLICADOS NA ESTIMAÇÃO DA FONTE

Os métodos aplicados para a estimativa da localização da fonte foram:

- Luus-Jaakola [LJ] (Luus e Jaakola, 1973);
- Algoritmo de Colisão de Partículas [PCA] (Sacco et al., 2006);

Para a estimativa da intensidade da fonte foi aplicado o método Seção Áurea [S_{au}] (Bazaraa et al., 2006).

O método LJ tem uma característica puramente geométrica, com

a redução da região de busca com o passar das iterações (tendência de busca global à

```

Definir o número de iterações externas  $n_{out}$ 
e de iterações internas  $n_{int}$ , a região de busca  $r^{(0)}$ 
e o fator de contração  $\varepsilon > 0$ 

Gerar a solução inicial  $XN$ 
 $f = \text{Aptidão}(XN) \rightarrow$  função objetivo
 $X = XN$ 
 $X^* = XN$  é a melhor solução

Para  $j = 1$  a  $n_{out}$  iterações
|  $X = X^*$ 
| Para  $i = 1$  a  $n_{int}$  iterações
| | Para  $k = 1$  a dimensão do problema
| | |  $XN_k^i = X_k + \text{aleatório}(-0.5, 0.5) * r_k^{(j-1)}$ 
| | | Fim
| | | Se  $\text{Aptidão}(XN^i) < f$ 
| | | |  $f = \text{Aptidão}(XN^i)$ 
| | | |  $X^* = XN^i$ 
| | | Fim
| | Fim
| Para  $k = 1$  a dimensão do problema
| |  $r_k^{(j)} = (1 - \varepsilon) * r_k^{(j-1)}$ 
| Fim
Fim

```

Figura 4 – Pseudocódigo para Luus-Jaakola

busca local) – vide Figura 4. Já o método PCA tem uma característica que avalia quando realizar uma busca global, local, ou totalmente aleatória (Figuras 5, 6 e 7). Para a estimação do parâmetro de intensidade, o método Seção Áurea tem uma característica de reduzir um intervalo de busca unidimensional (Figura 8).

No processo de estimação da localização da fonte, caso o ponto já tenha sido escolhido anteriormente, passa-se para uma nova iteração dos métodos aplicados, utilizando suas informações armazenadas, se necessário. Estimado um novo ponto, é então utilizado o método S_{au} para estimar a intensidade da fonte neste ponto.

5. ESTIMAÇÃO DA FONTE DE POLUENTES

Os dados de amostragem aqui considerados são dados sintéticos, gerados a partir da solução do problema de transporte (PD), utilizando-se parâmetros conhecidos para a fonte, em um período de 24h.

A localização da fonte considerada real é a localização L (Figura 9) com um fluxo de massa de 0,1kg/s. Os dados de amostragem são dados de concentração nas localizações S_1, S_2, S_3, S_4 e S_5 (Figura 9) para cada hora (1, 2, ..., 24 [h]).

Para os métodos aplicados na estimação da localização da fonte, os critérios de parada utilizados foram: êxito com a função objetivo para o ponto estimado (menor que uma tolerância), e um número máximo de estimação de

diferentes pontos (considerado 60, que representa 10% do número total de nós da malha espacial). Quanto à estimação da intensidade da fonte, o critério de parada

foi um intervalo de valores menor do que o previamente definido (tolerância). Além disso, cada método armazena e atualiza o

```

Gerar a solução inicial Velha_Config
Melhor Aptidão = Aptidão(Velha_Config) → função objetivo

Para  $n = 1$  a  $N_{max}$  iterações
| Perturbação ()
| Se Aptidão(Nova_Config) < Aptidão(Velha_Config)
| | Se Aptidão(Nova_Config) < Melhor Aptidão
| | | Melhor Aptidão = Aptidão(Nova_Config)
| | Fim
| | Velha_Config = Nova_Config
| | Exploração ()
| Senão
| | Espalhamento ()
| Fim
Fim

Exploração ()
Para  $n = 1$  a  $ne$  iterações
| Pequena_Perturbação ()
| Se Aptidão(Nova_Config) < Aptidão(Velha_Config)
| | Velha_Config = Nova_Config
| Fim
Fim

Retorna

Espalhamento ()

$$p_{espalha} = 1 - \frac{Melhor\ Aptid\tilde{a}o}{Aptid\tilde{a}o(Nova\_Config)}$$

Se  $p_{espalha} > \text{aleat\acute{o}rio}(0, 1)$ 
| Velha_Config = solução aleatória
Senão
| Exploração ()
Fim

Retorna

```

Fonte: Adaptado de Sacco et al., 2006.

Figura 5 – Pseudocódigo para PCA

```

Perturbação ()
Para  $i = 1$  a dimensão do problema
| Sup = Limite Superior [ $i$ ]
| Inf = Limite Inferior [ $i$ ]
| Rand = aleatório(0, 1)
| Nova_Config = (Velha_Config[ $i$ ] + Inf + (Sup - Inf)*Rand)/2
Fim
Fim

```

Fonte: Adaptado de Sacco et al., 2006.

Figura 6 – Função “Perturbação”

```

Pequena_Perturbação ()
Para  $i = 1$  a dimensão do problema
     $Rand = \text{aleatório}(0, 1)$ 
     $Sup = Velha\_Config[i] + 0.2 * Rand * (\text{Lim Sup } [i] - \text{Lim Inf } [i])$ 
    Se ( $Sup > \text{Limite Superior } [i]$ )
        |  $Sup = \text{Limite Superior } [i]$ 
    Fim
     $Inf = Velha\_Config[i] - 0.2 * Rand * (\text{Lim Sup } [i] - \text{Lim Inf } [i])$ 
    Se ( $Inf < \text{Limite Inferior } [i]$ )
        |  $Inf = \text{Limite Inferior } [i]$ 
    Fim
     $Rand = \text{aleatório}(0, 1)$ 
     $Nova\_Config = Velha\_Config[i] + ((Sup - Velha\_Config[i]) * Rand) -$ 
         $((Velha\_Config[i] - Inf) * (1 - Rand))$ 
Fim
Fim

```

Fonte: Adaptado de Sacco et al., 2006.

Figura 7 – Função “Pequena_Perturbação”

```

Definir o intervalo inicial  $[a_1, b_1]$ , escolher um
tamanho final de incerteza  $l_f > 0$  e definir  $\alpha_s = 0,618$ 

 $\lambda_1 = a_1 + (1 - \alpha_s)(b_1 - a_1)$ 
 $\mu_1 = a_1 + \alpha_s(b_1 - a_1)$ 
Avaliar  $\lambda_1 \rightarrow$  função objetivo
Avaliar  $\mu_1 \rightarrow$  função objetivo
 $k = 1$ 
Enquanto  $(b_k - a_k) \geq l_f$ 
    Se Aptidão ( $\lambda_k$ ) > Aptidão ( $\mu_k$ )
        |  $a_{k+1} = \lambda_k, b_{k+1} = b_k, \lambda_{k+1} = \mu_k$ 
        |  $\mu_{k+1} = a_{k+1} + \alpha_s(b_{k+1} - a_{k+1})$ 
        | Avaliar  $\mu_{k+1}$ 
    Senão
        |  $a_{k+1} = a_k, b_{k+1} = \mu_k, \mu_{k+1} = \lambda_k$ 
        |  $\lambda_{k+1} = a_{k+1} + (1 - \alpha_s)(b_{k+1} - a_{k+1})$ 
        | Avaliar  $\lambda_{k+1}$ 
    Fim
     $k = k + 1$ 
Fim

```

Figura 8 – Pseudocódigo para S_{au}

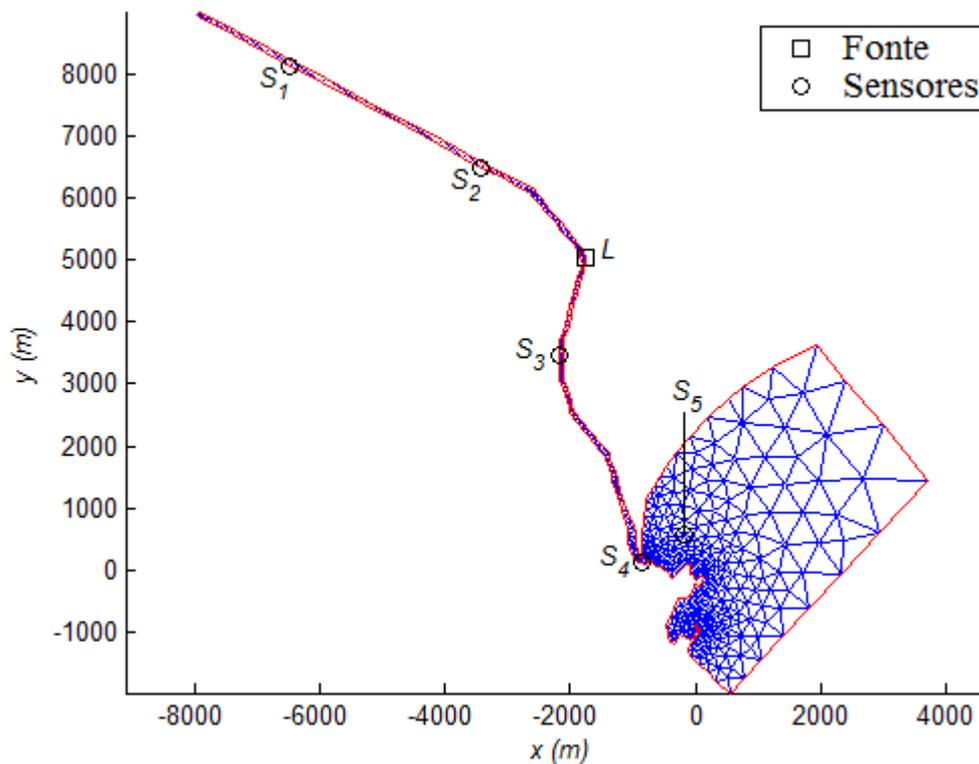


Figura 9 – Localização da fonte (L) e dos sensores de coleta de dados (S_1, S_2, S_3, S_4 e S_5)

Tabela 1 – Valores médios das soluções obtidas com o problema inverso

Métodos	Êxito (%)	Distância da Fonte (m)	Diferença da Fonte (kg/s)	NP	Tempo de CPU (s)
LJ-S _{au} (P)	95	3,14	$6,75 \cdot 10^{-4}$	32,4	1658,05
LJ-S _{au} (S)	75	160,59	-0,0116	38,2	2221,45
PCA-S _{au} (P)	95	3,14	$6,75 \cdot 10^{-4}$	29,8	1585,15
PCA-S _{au} (S)	50	439,06	0,0093	42,95	2513,65

Nota: P = projeção, S = Seleção, NP = número de estimação de diferentes pontos.

melhor resultado durante suas iterações.

Os operadores dos métodos foram definidos empiricamente através de testes. Para o método LJ os operadores foram definidos como $n_{out}=20$, $n_{int}=5$ e $\varepsilon=0,3$, com uma região de busca inicial quadrada de lado igual a $10000m$. Os operadores do método PCA foram definidos como $N_{max}=50$ e $ne=10$, e a solução aleatória da função “Espalhamento” foi anulada, definindo $p_{espalha} = 0$. Para o uso do método S_{au} foi utilizado o intervalo inicial de $[0; 7,7078 \cdot 10^{-5}]$ com o critério de parada $l_f=10^{-5}$ (Parolin, 2013).

Foram realizadas 20 execuções de cada método, utilizando as técnicas de projeção ou seleção na localização da fonte. Na Tabela 1 são apresentados os valores médios das aplicações dos métodos.

Comparando as duas técnicas adaptadas para a solução do problema inverso de interesse, o uso da projeção dos pontos apresentou melhores resultados para ambos os métodos LJ-S_{au} e PCA-S_{au}, em vez da seleção dos pontos pertencentes a espaços de busca, ficando evidenciada uma diferença de 45% para o método PCA-S_{au}. Com o uso da projeção, ambos os métodos apresentaram-se eficientes, com 95% de execuções precisas da localização e intensidade da fonte. O número de diferentes pontos estimados para a localização (NP) e o custo computacional (tempo) é aproximado para os dois métodos (computador com processador Intel Core i5, 2,67 GHz, 4 GB de memória RAM, utilizando o sistema operacional Windows 7 Professional).

Para uma melhor compreensão visual das duas técnicas adaptadas, são apresentados nas Figuras 10 e 11 os pontos estimados durante o processo iterativo do método LJ, juntamente com o espaço de busca nas iterações externas.

Nos dois métodos aplicados, a partir da região de busca atuante, definida por r (LJ – Figura 4) ou $[Inf, Sup]$ (PCA – Figuras 6 e 7) utilizaram-se as técnicas para a escolha de um ponto da malha: projeção, com a estimação de um ponto XN (LJ) ou $Nova_Config$ (PCA) dentro da região de busca e depois escolha de um ponto da malha através da menor distância euclidiana com este; seleção, com a escolha aleatória de um ponto da malha dentre os pontos que pertencem à região de busca.

Para uma comparação mais precisa da eficiência dos métodos (com o uso da projeção por apresentarem os melhores resultados), foi utilizado um teste não-paramétrico, o teste de ranque de sinal de Wilcoxon (García et al., 2009; Derrac et al., 2011), considerando um nível de confiança de 95%. Os critérios comparados foram: função objetivo (SQR), número de diferentes pontos estimados para a localização (NP) e custo computacional (tempo). Através deste teste, os métodos LJ- S_{au} e PCA- S_{au} não apresentam diferença significativa, ou seja, são igualmente eficientes para a resolução do problema inverso proposto.

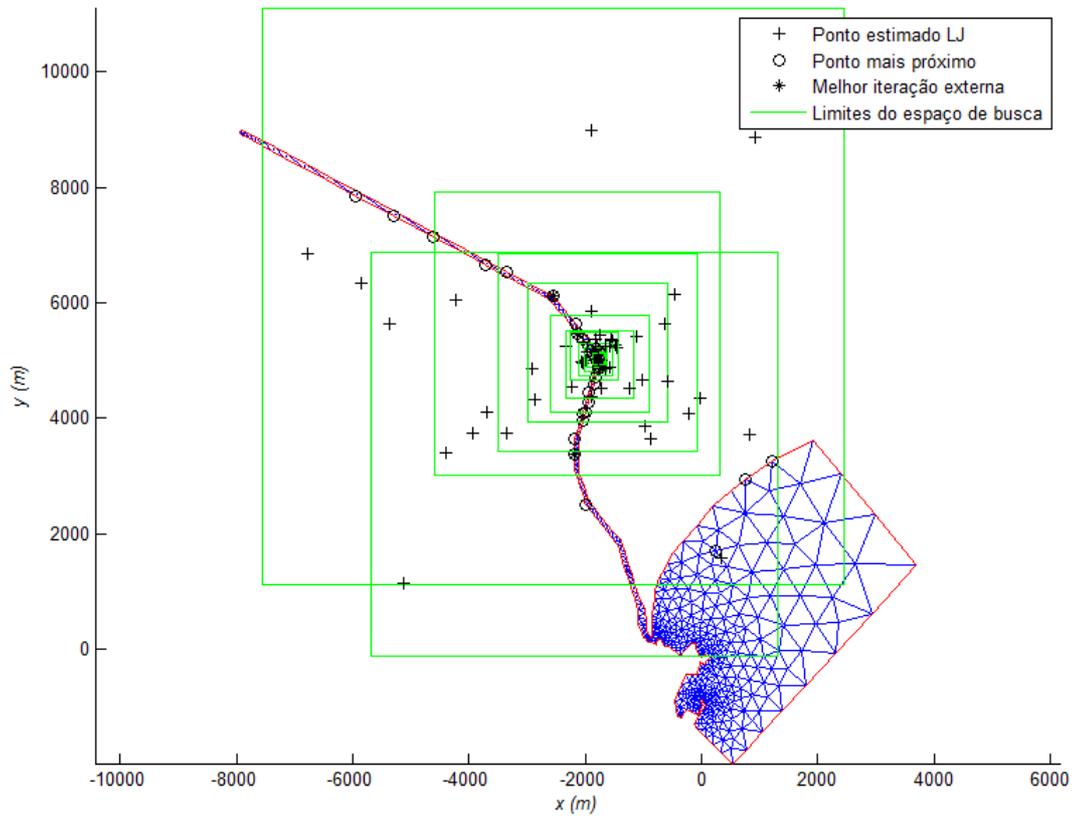


Figura 10 – Pontos estimados, projeção e espaços de busca da aplicação do método LJ-S_{au}

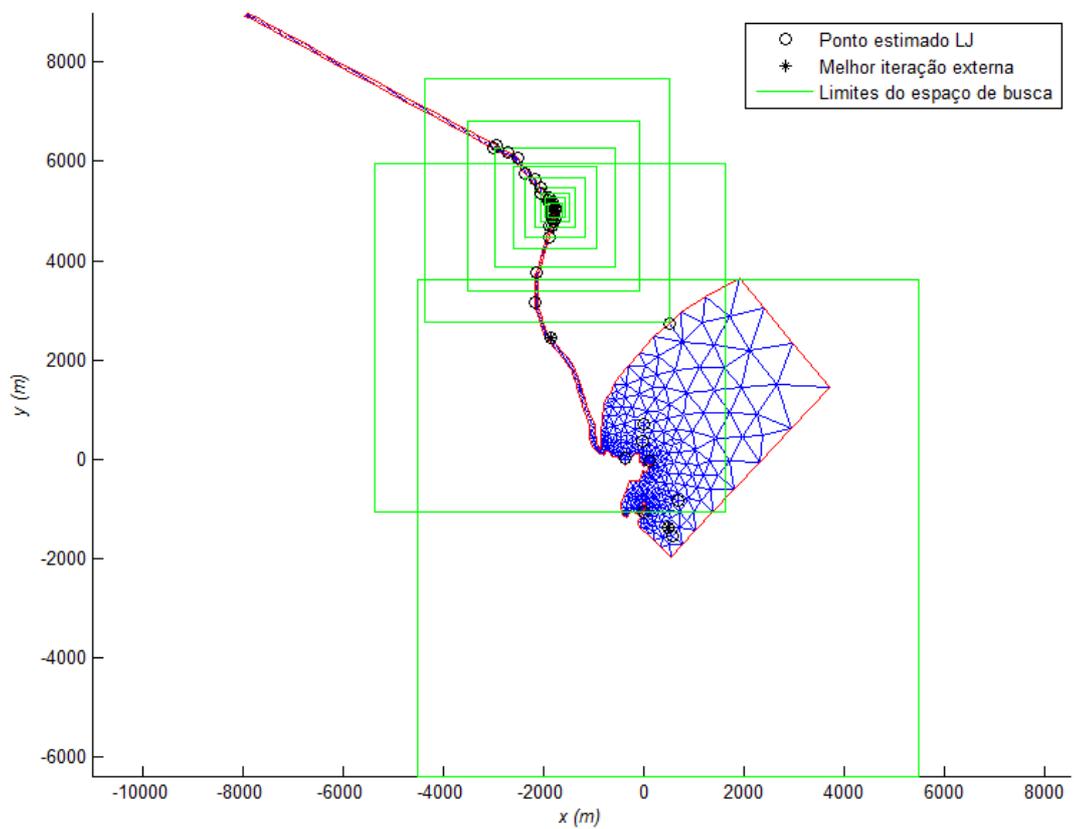


Figura 11 – Pontos estimados (seleção) e espaços de busca da aplicação do método LJ-S_{au}

6. CONCLUSÃO

A localização da fonte está referenciada com os nós da geometria discretizada do estuário do Rio Macaé, de tal forma que sua estimação necessita de adaptações nos métodos de inteligência computacional utilizados para a determinação de parâmetros.

Com isso, foram propostas duas técnicas de adaptações, para possibilitar a estimação da localização da fonte de poluentes. Tais adaptações, chamadas de projeção e seleção, foram utilizadas nos métodos de estimação LJ e PCA. Considerando as vantagens e desvantagens de cada técnica frente à geometria e o uso dos métodos de solução do problema inverso, a técnica de projeção mostrou-se mais eficiente para estimar a localização da fonte.

Na comparação dos métodos LJ- S_{au} e PCA- S_{au} com a adaptação da técnica de projeção, os dois mostraram-se igualmente eficientes em três critérios avaliados, estimando precisamente a fonte em 95% das execuções.

A formulação de problemas inversos, com adaptações de métodos na estimação da localização e intensidade de uma fonte, representando o lançamento pontual e contínuo de um dado contaminante em meio estuarino, apresenta potencial de aplicação na gestão de recursos hídricos, tanto para a tomada de decisões, quanto para a identificação de possíveis responsáveis por passivos ambientais.

AGRADECIMENTOS

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

REFERÊNCIAS

AMARAL, K. 2003. *Estuário do Rio Macaé: Modelagem Computacional como Ferramenta para o Gerenciamento Integrado de Recursos Hídricos*. 160f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil) – Instituto Alberto Luiz Coimbra de Pós-Graduação e Pesquisa de Engenharia, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.

ANDERSON JR., J. D. 1995. *Computational Fluid Dynamics: The Basics with Applications*, Singapore, McGraw-Hill.

BAZARAA, M.; SHERALI, H. D.; SKETTY, C. M. 2006. *Nonlinear Programming: Theory and Algorithms*, 3rd ed., New Jersey, Wiley Interscience.

BIRD, R. B.; STEWART, W. E.; LIGHTFOOT, E. N. 1960. *Transport Phenomena*, New York, Wiley.

CUNHA, M. C. C. 2000. *Métodos Numéricos*, Campinas, Editora da UNICAMP.

DERRAC, J.; GARCÍA, S.; MOLINA, D.; HERRERA, F. 2011. A Practical Tutorial on the Use of Nonparametric Statistical Tests As a Methodology for Comparing Evolutionary and Swarm Intelligence Algorithms. *Swarm and Evolutionary Computation*, v. 1, n. 1, p. 3-18.

DOMÍNGUEZ, D. E. M.; HERNÁNDEZ, O. R. 2007. Un Modelo Numérico del Transporte de Contaminantes en Canales Aplicando el Método de los Elementos Finitos. *Ingeniería Hidráulica y Ambiental*, v. 28, n. 3.

GARCÍA, S.; MOLINA, D.; LOZANO, M.; HERRERA, F. 2009. A Study on the Use of Non-Parametric Tests for Analyzing the Evolutionary Algorithms' Behaviour: A Case Study on the CEC'2005 Special Session on Real

- Parameter Optimization. *Journal of Heuristics*, v. 15, n. 6, p. 617-644.
- GOOGLE MAPS. Dados Cartográficos [homepage na Internet]. Google, c2014. Acesso em: 10 jan. 2014. Disponível em: <<http://maps.google.com.br>>.
- LIMA, E. B. 2012. Problemas Inversos Aplicados à Identificação de Parâmetros Hidrodinâmicos de um Modelo do Estuário do Rio Macaé. 103f. Tese (Doutorado em Modelagem Computacional) – Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo.
- LIMA, E. B.; RODRIGUES, P. P. G. W.; SILVA NETO, A. J.; LUGON JUNIOR, J.; MESA, M. I.; SANTIAGO, O. L. 2013. Ocean modelling for coastal management – Case studies with MOHID. In: *Coupling MOHID with optimization algorithms: perspectives on the development of automatic calibration tools*, 1st ed., v. 1, p. 117-130. Lisboa: IST Press.
- LUUS, R.; JAAKOLA, T. H. I. 1973. Optimization by Direct Search and Systematic Reduction of the Size of Search Region. *AIChE Journal*, v. 19, n.4, p. 760-766.
- MIRANDA, L. B.; CASTRO, B. M.; KJERFVE, B. 2002. *Princípios de Oceanografia Física de Estuários*, São Paulo, Editora da Universidade de São Paulo.
- PAROLIN, R. S. 2013. Determinação de uma Fonte de Contaminantes no Estuário do Rio Macaé através da Técnica de Problemas Inversos. 108f. Tese (Doutorado em Modelagem Computacional) – Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2013.
- PAROLIN, R. S.; RODRIGUES, P. P. G. W.; SILVA NETO, A. J.; DOMÍNGUEZ, D. E. M. 2014. Análise de Sensibilidade e Estimação de uma Fonte de Contaminantes no Estuário do Rio Macaé. *Revista Brasileira de Recursos Hídricos*. No prelo.
- PAROLIN, R. S.; RODRIGUES, P. P. G. W.; SILVA NETO, A. J.; DOMÍNGUEZ, D. E. M. Aplicação de Técnicas de Problema Inverso para a Determinação de Fontes de Contaminantes em um Estuário. XXXIV Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional, 2012, Águas de Lindóia/SP. 1227-1228.
- PAROLIN, R. S.; SILVA NETO, A. J.; RODRIGUES, P. P. G. W.; SANTIAGO, O. L. 2014a. Estimation of a Contaminant Source in an Estuary with an Inverse Problem Approach. *Applied Mathematics and Computation*. Submetido.
- PATANKAR, S. V. 1980. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, USA, Taylor & Francis.
- SACCO, W. F.; OLIVEIRA, C. R. E.; PEREIRA, C. M. N. A. 2006. Two Stochastic Optimization Algorithms Applied to Nuclear Reactor Core Design. *Progress in Nuclear Energy*, v. 48, p. 525-539.
- SILVA NETO, A. J.; BECCENERI, J. C. (Eds.) 2012. *Técnicas de Inteligência Computacional Inspiradas na Natureza – Aplicação em Problemas Inversos em Transferência Radiativa*, v. 41, 2a ed., Notas em Matemática Aplicada, SBMAC, São Carlos, 2012.
- SMITH, G. F. 2004. *Numerical Solution of Partial Differential Equations: Finite Difference Methods*, 3rd ed., New York, Oxford University Press.
- ZIENKIEWICZ, O. C.; TAYLOR, R. L. 1994. *El Método de los Elementos Finitos: Mecánica de Sólidos y Fluidos. Dinámica y No Linealidad*, v. 2, 4a ed., Barcelona, CIMNE.
- ZIENKIEWICZ, O. C.; TAYLOR, R. L. 2000. *The Finite Element Method. Volume 3: Fluid Dynamics*, 5th ed., Oxford: Butterworth-Heinemann.