Universidade do Estado do Rio de Janeiro

Centro de Tecnologia e Ciências

Instituto Politécnico

Edgar Barbosa Lima

Problemas inversos aplicados à identificação de parâmetros hidrodinâmicos de um modelo do estuário do rio Macaé

Nova Friburgo

2012

Edgar Barbosa Lima

Problemas inversos aplicados à identificação de parâmetros hidrodinâmicos de um modelo do estuário do rio Macaé

Tese apresentada como requisito parcial para obtenção do título de Doutor, ao Programa de Pós-graduação em Modelagem Computacional, da Universidade do Estado do Rio de Janeiro.

Orientadores: Prof. Dr. Antônio José da Silva Neto
Prof. Dr. Pedro Paulo Gomes Watts Rodrigues

Nova Friburgo

2012

CATALOGAÇÃO NA FONTE
UERJ/REDE SIRIUS/BIBLIOTECA CTC/E

L732 Lima, Edgar Barbosa.
Problemas inversos aplicados à identificação de parâmetros hidrodinâmicos de um modelo do estuário do rio Macaé / Edgar Barbosa Lima. - 2012.
103 f. : il.

Orientadores: Antônio José da Silva Neto e Pedro Paulo Gomes Watts Rodrigues.
Tese (Doutorado) - Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto Politécnico.

1. Hidrodinâmica – Modelos matemáticos – Teses. 2. Hidrodinâmica – Simulação – Modelos matemáticos – Teses. 3. Problemas inversos (Equações diferenciais) – Teses. 4. Estuários – Hidrodinâmica – Teses. 5. Rio Macaé (RJ) – Estuários – Teses. I. Silva Neto, Antônio José da. II. Rodrigues, Pedro Paulo Gomes Watts. III. Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Instituto Politécnico. IV. Título.

CDU 556.546:519.6

Autorizo, apenas para fins acadêmicos e científicos, a reprodução total ou parcial desta tese, desde que citada a fonte.

_____ _____
Assinatura Data

Edgar Barbosa Lima

Problemas Inversos Aplicados à Identificação de Parâmetros Hidrodinâmicos de um Modelo do Estuário do Rio Macaé

Tese submetida ao corpo docente do Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional do Instituto Politécnico, Campus Regional da UERJ em Nova Friburgo, como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Doutor em Modelagem Computacional. Linha de Pesquisa: Matemática Aplicada e Computação Científica.

Orientadores: Prof. Antônio José da Silva Neto, Ph. D.

Prof. Pedro Paulo Gomes Watts Rodrigues, Ph. D.

Aprovado em 27 de fevereiro de 2012

Banca Examinadora:

Prof. Antônio José da Silva Neto, Ph. D.
IPRJ/UERJ

Prof. Pedro Paulo Gomes Watts Rodrigues, Ph.D.
IPRJ/UERJ

Prof. Augusto César Noronha Rodrigues Galeão, D. Sc.
LNCC

Prof.ª Maria Inês Paes Ferreira, D.Sc.
IFF

Prof. Jader Lugon Junior, D.Sc.
IFF

Prof. Francisco Duarte Moura Neto, Ph. D.
IPRJ/UERJ

DEDICATÓRIA

Dedico esta tese aos meus pais, que sempre me apoiaram incondicionalmente, em todas as minhas escolhas, me dando forças para concluir essa jornada.

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos meus orientadores (Antônio José da Silva Neto e Pedro Paulo Gomes Watts Rodrigues) por toda dedicação, profissionalismo e amizade.

Ao professor Jader Lugon Junior, que me apoiou tecnicamente mais do que se espera até mesmo de um orientador.

Gostaria de agradecer ainda aos professores de Cuba, que tanto me ajudaram, de varias e diversas formas, a fundamentar minha pesquisa (Mirtha, Orestes, Joel, Davi e etc..).

Aos meus grandes amigos, cuja amizade se mantem desde a graduação, apesar dos diferentes caminhos seguidos (Arnaldo, Diego, Ebert, Fernando, Leonardo e Marcio).

Agradeço também aos amigos que conviveram comigo diretamente no IPRJ e, em especial, aos colegas de alojamento, Sandro (que se tornou um dos meus melhores amigos), Kennedy (meu grande companheiro de mestrado que me incentivou a entrar no IPRJ) e Augusto (praticamente um irmão que ganhei no primeiro dia da graduação).

Meus familiares pelo amor e zelo que sempre demonstraram.

Aos meus pais que nunca deixaram de acreditar e de me estimular (até mesmo obrigando) a concluir esse sonho.

À FAPERJ pela bolsa de doutorado fornecida.

Quem conduz e arrasta o mundo não são as máquinas, mas as ideias.

Victor Hugo

RESUMO

LIMA, Edgar Barbosa. Problemas inversos aplicados à identificação de parâmetros hidrodinâmicos de um modelo do estuário do rio Macaé. 2012. 103 f. Tese (Doutorado em Modelagem Computacional) - Instituto Politécnico do Rio de Janeiro, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2012.

Esta tese tem por objetivo propor uma estratégia de obtenção automática de parâmetros hidrodinâmicos e de transporte através da solução de problemas inversos. A obtenção dos parâmetros de um modelo físico representa um dos principais problemas em sua calibração, e isso se deve em grande parte à dificuldade na medição em campo desses parâmetros. Em particular na modelagem de rios e estuários, a altura da rugosidade e o coeficiente de difusão turbulenta representam dois dos parâmetros com maior dificuldade de medição. Nesta tese é apresentada uma técnica automatizada de estimação desses parâmetros através deum problema inverso aplicado a um modelo do estuário do rio Macaé, localizado no norte do Rio de Janeiro. Para este estudo foi utilizada a plataforma MOHID, desenvolvida na Universidade Técnica de Lisboa, e que tem tido ampla aplicação na simulação de corpos hídricos. Foi realizada uma análise de sensibilidade das respostas do modelo com relação aos parâmetros de interesse. Verificou-se que a salinidade é uma variável sensível a ambos parâmetros. O problema inverso foi então resolvido utilizando vários métodos de otimização através do acoplamento da plataforma MOHID a códigos de otimização implementados em Fortran. O acoplamento foi realizado de forma a não alterar o código fonte do MOHID, possibilitando a utilização da ferramenta computacional aqui desenvolvida em qualquer versão dessa plataforma, bem como a sua alteração para o uso com outros simuladores. Os testes realizados confirmam a eficiência da técnica e apontam as melhores abordagens para uma rápida e precisa estimação dos parâmetros.

Palavras-chave: Modelo hidrodinâmico. Problemas inversos Métodos de otimização. Estimação de parâmetros. Estuários. MOHID.

ABSTRACT

This thesis presents a strategy for automatically obtaining hydrodynamic and transport parameters by means of the solution of inverse problems. Obtaining the parameters of a physical model represents a major problem in its calibration, and this is largely due to the difficulty associated to the field measurements of these parameters. In particular by modeling rivers and estuaries, the roughness height and the turbulent diffusion coefficient represent two of the most difficult parameters to measure or estimate. Here, an automated technique for estimation of these parameters through an inverse problem is applied to a model of the Macaé estuary, located in northern Rio de Janeiro. For this investigation, hydrodynamic and transport models were built in the MOHID platform, developed in the Technical University of Lisbon, which has had wide application in simulation of water bodies. A sensitivity analysis was performed regarding the model responses with respect to the parameters of interest. It was verified that salinity is a sensitive variable for both parameters. The inverse problem was then solved using various optimization methods by coupling the MOHID platform to optimization codes implemented in Fortran. The coupling was carried in a way to not change the MOHID source code, allowing the use of the computational tool here developed in any version of this platform, as well as its modification for use with other simulators. The tests confirm the efficiency of the technique and suggest the best approaches for a fast and accurate estimation of the parameters.

Keywords: Hydrodynamic model. Inverse problems. Optimization methods. Parameter estimation. Estuaries. MOHID.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Informação do fluxo entre sub-modelos. 33
Figura 2 - Informação do fluxo entre o módulo batimetria e outros módulos. 35
Figura 3 - Fluxo de informação entre o módulo geometria e outros módulos. 35
Figura 4 - Elemento de volume adotado no MOHID. 37
Figura 5 - Informação do fluxo entre o Módulo Hidrodinâmico e os demais módulos. 38
Figura 6 - Construção da batimetria. 46
Figura 7 - Batimetria gerada. 47
Figura 8 - Interface MOHID GUI. 48
Figura 9 - Interface de execução da simulação. 49
Figura 10 - Interface GUI mostrando os arquivos de saída. 49
Figura 11 - Interface de pós-processamento do MOHID. 50
Figura 12 - Interface de visualização do resultado. 51
Figura 13 - Localização do estuário e detalhes da região simulada neste estudo. 52
Figura 14 - Batimetria do domínio simulado. 53
Figura 15 - Estações virtuais de monitoramento. 55
Figura 16 - Resultados hidrodinâmicos na estação de monitoramento 1. 56
Figura 17 - Resultados hidrodinâmicos na estação de monitoramento 2. 56
Figura 18 - Resultados obtidos, com diferentes parâmetros, para o nível da água e a salinidade. 58
Figura 19 - Coeficiente de Sensibilidade do nível d'água em relação aos parâmetros rugosidade e coeficiente de difusão. 58
Figura 20 - Coeficiente de Sensibilidade dos parâmetros em relação à salinidade... 59
Figura 21 - Neurônio Biológico. 69
Figura 22 - Neurônio Artificial. 70
Figura 23 - Fluxograma Problema inverso. 71
Figura 24 - Erro do resultado em 1 hora com parâmetros estimados com 1 hora de simulação. 75
Figura 25 - Erro do resultado em 12 horas com parâmetros estimados com 1 hora de simulação. 75
Figura 26 - Comparação da salinidade com e sem ruído em 1 hora. 76
Figura 27 - Comparação da salinidade com e sem ruído em 2 horas. 77
Figura 28 - Erro do resultado em 12 horas com parâmetros estimados com 2 horas de simulação, usando um sinal com 4% de ruído. 77
Figura 29 - Erro de estimação dos parâmetros usando PCA com 5 loops no exploration e sem ruído no sinal. 78
Figura 30 - Erro de estimação dos parâmetros usando PCA com 7 loops no exploration e sem ruído no sinal. 79
Figura 31 - Erro de estimação dos parâmetros usando PCA com 10 loops no exploration e sem ruído no sinal. 80
Figura 32 - Erro de estimação dos parâmetros usando PCA com 5 loops no exploration e com ruído de 4% no sinal. 81
Figura 33 - Erro de estimação dos parâmetros usando PCA com 7 loops no

exploration e com ruído de 4% no sinal. 81
Figura 34 - Erro de estimação dos parâmetros usando PCA com 10 loops no exploration e com ruído de 4% no sinal. 82
Figura 35 - Erro de estimação dos parâmetros usando LJ com sinal sem ruído. 83
Figura 36 - Erro de estimação dos parâmetros usando LJ com ruído de 4% no sinal. 83
Figura 37 - Erro de estimação dos parâmetros usando PSO com sinal sem ruído. .. 84
Figura 38 - Erro de estimação dos parâmetros usando PSO com ruído de 4% no sinal. 85
Figura 39 - Representação esquemática da Rede Neural. 86
Figura 40 - Fluxograma do problema inverso em dois passos aplicado à estimação de R e D. 89
Figura 41 - Erro de estimação dos parâmetros usando LJ em dois passos com sinal sem ruído. 90
Figura 42 - Erro de estimação dos parâmetros usando LJ em dois passos com ruído de 4% no sinal 91
Figura 43 - Erro de estimação dos parâmetros usando LJ com uso da segunda metade dos dados com sinal sem ruído. 92
Figura 44 - Erro de estimação dos parâmetros usando LJ com uso da segunda metade dos dados com ruído de 4% no sinal 93

LISTA DE SÍMBOLOS

u	*velocidade referente ao eixo* x
v	*velocidade referente ao eixo* y
w	*velocidade referente ao eixo* z
f_0	*parâmetro de Coriolis*
P	*pressão*
ρ	*densidade do fluido*
g	*força gravitacional*
τ	*tensões de Reynolds*
A	*coeficiente de viscosidade turbulenta*
K	*coeficiente de viscosidade turbulenta dividido pela densidade*
$-H_0$	leito do estuário
η	superfície livre
τ_W	tensão de cisalhamento do vento
τ_B	*atrito do fundo*
$\hat{U}$	velocidade escalar horizontal
κ	*constante de von Karman*
h	*altura da coluna d'agua*
R	*altura da rugosidade*
P_{atm}	*pressão atmosférica*
ρ_o	referência constante de densidade
ρ'	desvio da referência constante de densidade
c	*concentração de soluto ou constituintes em suspensão*
D	*coeficiente de difusão turbulenta*
R	*reações internas e aportes externos de soluto*
σ	*número de turbulência de Prandtl*
U	*um número escalar*
Q	*fonte*
Ω	*volume de controle*
F	*fluxo escalar*
S	*Superfície do volume de controle*
$\vec{n}$	*vetor normal a superfície do volume*
u_i	*velocidade na direção* x *na célula* i
v_i	*velocidade na direção* y *na célula* i
w_i	*velocidade na direção* z *na célula* i
w^*	*velocidade vertical provisória*
$A_{\eta ij}$	*área projetada no plano horizontal*
$\overline{V}^t_{ijk}$	*valor promediado no tempo da componente* v *para célula* ijk
Δt	*passo no tempo*

$uflux_{u_i}$	*fluxo de* u_i *através da sua célula de cálculo*
$\vec{v}_H$	*velocidade horizontal*
Y	*variável dependente dos parâmetros*
$\hat{Y}$	*variável calculada a partir dos parâmetros estimados*
SSE	*soma dos quadrados dos erros*
θ	*parâmetros a serem estimados em um problema inverso*
N_T	*número de dados experimentais*
$P(t)$	*população da geração* t
$P_{scattering}$	probabilidade de dispersão (espalhamento)
$Rand$	valor aleatório
Old_Config	*configuração anterior*
$Fit(\theta)$	*avalição da configuração de parâmetros* θ
Best_Fit	*melhor avaliação*
New_Config	*nova configuração*
X^*	*melhor solução*
n_{out}	*número de iterações externas*
n_{in}	*número de iterações internas*
X_j	*nova solução*
r	*vetor do tamanho do espaço de busca em cada direção*
Rd_j	*matriz diagonal de números aleatórios no intervalo* $[-0{,}5;0{,}5]$
ε	*coeficiente de contração do espaço de busca*
vel_part	*velocidade da partícula*
Pos_Part	*posição da partícula*
$best_Part_Pos$	*melhor posição da partícula*
$best_Pos$	*melhor posição entre todas as partículas*
c	*constante de inércia*
n_part	*número de partículas*
$n_\dim$	*dimensão do espaço de busca*
d_i	*sinal de entrada no neurônio*
$\overline{w}_i$	*peso sináptico*
out	*saída do neurônio*
σ	*critério de parada*
E	*erro na estimação*
Sl	*salinidade experimental*
$\overline{Sl}$	*salinidade calculada*
$\hat{R}$	*altura da rugosidade estimada*
$\hat{D}$	*coeficiente de difusão turbulenta estimado*
Se	*coeficiente de sensibilidade*

SUMÁRIO

INTRODUÇÃO *13*
Contextualização do problema *13*
Objetivos *19*
Estrutura da Tese *20*
1 ***FORMULAÇÃO DO PROBLEMA DIRETO MODELOS HIDRODINÂMICO E DE TRANSPORTE*** *21*
2 ***SOLUÇÃO NUMÉRICA DO PROBLEMA DIRETO*** *29*
2.1 ***MOHID*** *29*
2.1.1 *Histórico* *29*
2.1.2 *Aplicações* *32*
2.1.3 *Módulos do MOHID* *33*
2.1.3.1 *Módulo Principal* *33*
2.1.3.2 *Módulo Batimetria* *34*
2.1.3.3 *Módulo Geometria* *35*
2.1.3.4 *Módulo Hidrodinâmico* *37*
2.1.4 *Interface Gráfica* *45*
2.2 ***Estudo de caso: Estuário do Rio Macaé*** *51*
2.3 ***Modelagem do problema direto*** *52*
2.4 ***Resultados da Modelagem do Problema Direto*** *54*
2.5 ***Análise de Sensibilidade*** *56*
3 ***PROBLEMA INVERSO*** *60*
3.1 ***Métodos de Otimização*** *61*
3.1.1 *Algoritmos Genéticos (GA)* *61*
3.1.2 *Algoritmo de Colisão de Partículas (PCA)* *63*
3.1.3 *Luus-Jaakola* *66*
3.1.4 *Particle Swarm Optimization(PSO)* *67*
3.2 ***Redes Neurais Artificiais (RNA)*** *69*
3.3 ***Implementação do Problema Inverso*** *71*
4 ***RESULTADOS*** *73*
4.1 ***Casos Teste*** *73*
4.2 ***Algoritmos Genéticos*** *74*
4.3 ***Algoritmo de Colisão de Partículas(PCA)*** *77*
4.4 ***Algoritmo Luus-Jaakola*** *82*
4.5 ***Particle Swarm Optimization (PSO)*** *83*
4.6 ***Redes Neurais Artificiais*** *85*
4.7 ***Problema Inverso em Dois Passos*** *88*
4.8 ***Problema Inverso Utilizando a Parte mais Sensível dos Dados.*** *91*
5 ***CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS*** *94*
5.1 ***Conclusões*** *94*
5.2 ***Trabalhos Futuros*** *96*
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS *97*

INTRODUÇÃO

Contextualização do problema

Uma das questões mais relevantes que se apresentam para a sociedade contemporânea é a conservação dos recursos hídricos existentes. O correto manejo desses recursos a cada dia torna-se mais crítico, uma vez que sua escassez e deterioração já afetam parcela significativa da população mundial. Pode-se dizer que virtualmente todo e qualquer corpo de água do planeta está submetido a alguma alteração de suas condições naturais (BEQUETTE, 1998).

De acordo com Krause e Rodrigues (1998), a concentração da população em determinadas regiões, cidades e áreas metropolitanas é um dos principais aspectos a ser considerado na gestão integrada de recursos hídricos, uma vez que implica em demanda tanto por disponibilidade de água para o abastecimento público quanto para dissolução de cargas poluidoras urbanas. Os danos ambientais tais como aumento do transporte de sedimento e a contaminação orgânica e química das águas, vêm se agravando devido ao aumento das cargas poluidoras urbanas e industriais, uso inadequado do solo, erosão, desmatamento, uso inadequado de insumos agrícolas, mineração e geração termoelétrica. A adoção de política de gestão integrada de recursos hídricos é indispensável dado tantos conflitos de interesses com relação ao uso da água representados pelo setor hidrelétrico, pelos complexos industriais, pelas necessidades de abastecimento urbano, irrigação e adensamento urbano e industrial.

Nesse contexto, foi elaborada e promulgada a Lei 9433/97, que veio disciplinar os usos das águas no país, instituindo a Política Nacional de Recursos Hídricos e criando o Sistema Nacional de Gerenciamento de Recursos Hídricos. Essa lei veio estabelecer alguns fundamentos, dentre os quais a água é tida como um recurso finito, de domínio público e valor econômico definido, devendo a sua gestão ter a participação de toda a sociedade. A Lei 9433/97 define, ainda, que a aplicação do quadro normativo hídrico terá como unidade territorial a "bacia hidrográfica". De fato, o planejamento e gerenciamento de recursos hídricos na escala de bacias se justificam porque há uma "conexão hidráulica" entre os seus usuários (KELMAN, 1999).

O diagnóstico da qualidade de um corpo hídrico convencionalmente se baseia na análise de alguns parâmetros. No Brasil, as Resoluções CONAMA 01/1986 e 357/2005 estabeleceram níveis de concentração de acordo com os usos aos quais se destina a água, (BRASIL, 1986; BRASIL, 2005). A Lei nº 9.433, de 8 de janeiro de 1997, (BRASIL, 1997), veio estabelecer alguns fundamentos, dentre os quais, a água é tida como um recurso finito, de domínio público e valor econômico definido, devendo a sua gestão ter a participação de toda a sociedade (KELMAN, 1999). A gestão de recursos hídricos não envolve, entretanto, somente diagnóstico, mas também monitoramento e previsão de cenários futuros. Historicamente, a avaliação do comportamento de constituintes dissolvidos e em suspensão em rios, canais e estuários iniciou-se pelo desenvolvimento de modelos chamados do tipo "caixa-preta", em que a remoção ou produção do constituinte era avaliada pelo balanço de massa existente entre sua entrada e sua saída em um dado trecho de rio ou em um estuário. Tal abordagem baseia-se em monitoramento intensivo, com óbvias limitações logísticas e econômicas. Alternativamente, o comportamento de substâncias nesses corpos d'água pode ser estimado através de modelos matemáticos (ABBOT; BASCO, 1989; BATES et al., 2005).

Tais modelos possibilitam descrever a hidrodinâmica e o transporte de solutos ou suspensões dentro do sistema. Idealmente, apresentam-se como as ferramentas mais adequadas de diagnóstico e prognóstico de ambientes aquáticos, pois, uma vez calibrados, diversos cenários podem ser gerados, bastando que para isso sejam modificadas algumas das entradas do modelo. Os modelos obedecem a uma sequência hierárquica de construção e calibração. Inicialmente deve ser construído um modelo hidrodinâmico (MH), que resolva a distribuição espaço-temporal de velocidades e elevação de nível d'água. A esse modelo é sobreposto um modelo de transporte de substância conservativa (MTSC) (por exemplo, salinidade), sobre o qual é desenvolvido um modelo de transporte do constituinte, substância não conservativa, (MTSNC) em estudo, no qual são prescritas fontes e sorvedouros. O grau de empiricismo de tais modelos cresce obedecendo à mesma sequência. Sendo assim, os MH fundamentam-se em equações bem estabelecidas pela mecânica dos fluidos, a partir das quais algumas simplificações são assumidas. Os MTSC são expressos por uma equação em que a principal incerteza está na definição dos coeficientes de dispersão, enquanto que nos MTSNC, muita incerteza envolve a dependência funcional das reações que representam remoção ou produção da substância

em meio aquático. O conjunto de equações que compõem esse modelo, por assim dizer determinístico, via de regra é resolvido numericamente, gerando o que se chama de simulação numérica. A ideia básica da simulação numérica é o processo de discretização, que reduz o problema físico, contínuo e com um infinito número de variáveis, para um problema discreto, com um número finito de variáveis, de modo que possa ser computacionalmente resolvido (WROBEL et al., 1989). A construção, implementação e validação desses modelos exige um conjunto de entradas, como condições de contorno, aportes externos, reações internas e a forma do corpo hídrico a ser representado no modelo. Ainda, a formulação matemática empregada faz uso de parâmetros que devem igualmente ser prescritos ou estimados. Assim, embora sejam sempre abstrações da realidade, se convenientemente calibrados e validados, esses modelos reduzem tempo, custo e risco de análises de impactos que estejam sendo avaliados sobre corpos hídricos.

São inúmeras as aplicações da simulação numérica em problemas de qualidade de água de rios, canais e estuários, como, por exemplo, o transporte de material em suspensão (MS), o comportamento de plumas de efluentes industriais em rios e estuários, e ainda as perdas de carga por infiltração e contaminação em canais.

No que toca à previsão do comportamento de plumas de efluentes, tem-se que a resolução CONAMA 357/2005, (BRASIL, 2005), em vigor atualmente, que veio atualizar os critérios de classificação dos corpos d'água no território nacional, estabeleceu que o melhor entendimento do comportamento e extensão da zona de mistura de efluentes é uma das premissas básicas para a definição dos limites aceitáveis de poluentes em corpos hídricos. Em seu texto a resolução destaca, ainda, que o critério de diluição de efluentes deve se basear em pesquisas específicas que definam a zona de mistura.

Nas equações que formulam o transporte de substâncias em meio hídrico há uma gama de parâmetros que nem sempre são calculados diretamente. Por outro lado, sua estimativa muitas vezes é de importância crucial para a precisão da simulação. A definição dos melhores valores para esses parâmetros pode ser conduzida através da busca, por tentativas e erros, o que pode consumir considerável esforço e, pior, gerar valores que, embora viabilizem a simulação para uma situação específica, não permitem estendê-la para situações distintas, quando é dito que o modelo pode ser calibrado, mas não validado, (KIM; KALUARACHCHI, 2008; MUNAVALLI;

KUMAR, 2005; SHEN, 2006; SHEN et al., 2006). Ainda, tal estratégia comumente pode gerar a multiplicidade de soluções igualmente aceitáveis, das quais é difícil distinguir a melhor. Alternativamente, esse ajuste pode ser conduzido por algoritmos, dentre os quais se destaca a técnica de análise de problemas inversos. Na solução de um determinado problema, alguma condição pode eventualmente não ser conhecida, tal como a geometria, condições de contorno, condição inicial, parâmetros de processo e propriedades físico-químicas. Porém, assumindo que estejam disponíveis medidas experimentais transientes, pode-se tentar então estimar as grandezas desconhecidas. O problema a ser resolvido colocado da forma aqui descrita é então denominado problema inverso e é normalmente resolvido com o uso de métodos de otimização (a solução dos problemas inversos em pauta nesta tese será obtida com uso de técnicas estocásticas).

Genericamente define-se otimização como o ato de obter o melhor resultado em dadas circunstâncias. No projeto, construção e manutenção de qualquer sistema de engenharia, por exemplo, tem-se que tomar muitas decisões tecnológicas e gerenciais em várias fases. O objetivo final de todas essas decisões é minimizar os esforços necessários ou maximizar os benefícios desejados. Desde que o esforço necessário ou o benefício pretendido em qualquer situação prática possa ser expresso como uma função de variáveis de decisão certa, a otimização pode ser definida como o processo de encontrar as condições que lhe dão o valor máximo ou mínimo de uma função.

Assim, sem perda de generalidade, a otimização pode ser entendida no sentido de minimização uma vez que o máximo de uma função pode ser encontrado buscando o mínimo da negativa da mesma função. Uma série de métodos têm sido desenvolvidos para solucionar diferentes tipos de problemas dessa natureza (RAO, 1996).

Os métodos de busca do ótimo também são conhecidos como técnicas de programação matemática e geralmente são estudados como parte da pesquisa operacional. A pesquisa operacional é um ramo da matemática preocupado com a aplicação de métodos científicos e técnicas para a tomada de decisões e problemas com o estabelecimento de melhores soluções ou ótimo. Técnicas de programação matemática são úteis em encontrar o mínimo de uma função de diversas variáveis no âmbito de um conjunto determinado de restrições. Essas técnicas podem ser divididas em dois conjuntos de métodos de otimização, definidos como determinísticos e

estocásticos (HILLIER; LIEBERMAN, 2010).

Os métodos determinísticos geram uma sequência determinística de possíveis soluções, usando normalmente o valor da derivada da função objetivo para determinar qual a próxima configuração a ser adotada, requerendo que a função objetivo deva ser contínua e diferenciável em todo o espaço de busca.

O principal problema desse tipo de método é o fato de serem extremamente dependentes de seu valor inicial. A teoria desses métodos garante obtenção de um ótimo, que pode não ser o ótimo global da função e sim o ótimo local mais próximo da solução inicial. Por esse motivo não possuem bom desempenho ao otimizar funções multimodais, isto é, funções que possuem vários ótimos locais.

No caso dos métodos estocásticos, somente o valor da função objetivo é requerido. Nesses métodos, cada solução é gerada aleatoriamente utilizando somente a avaliação das soluções geradas anteriormente. Por não utilizarem a derivada da função objetivo, são considerados métodos de ordem zero. Os métodos estocásticos possuem as seguintes características em relação aos algoritmos determinísticos:

- *não requerem que a função objetivo seja contínua ou diferenciável;*
- *funcionam adequadamente, tanto com parâmetros contínuos quanto com discretos, ou ainda com uma combinação deles;*
- *não necessitam de formulações complexas ou reformulações para o problema;*
- *não há restrição alguma quanto ao ponto de partida dentro do espaço de busca da solução;*
- *na maioria das vezes realizam buscas simultâneas no espaço de possíveis soluções através de uma população de indivíduos;*
- *otimizam um grande número de variáveis, desde que a avaliação da função objetivo não tenha um alto custo computacional.*

A maior desvantagem em relação aos métodos determinísticos é o número de avaliações da função objetivo, o que geralmente leva a um elevado custo computacional (HILLIER; LIEBERMAN, 2010).

Como visto anteriormente, uma melhor estimativa para parâmetros presentes

em modelos hidrodinâmicos e de transporte é um dos principais obstáculos em sua implementação. Além disso, a escolha desses coeficientes é normalmente feita por um processo exaustivo, que pode demandar, inclusive, dispendiosos estudos de campo. Assim, faz-se necessário o desenvolvimento de técnicas para uma melhor obtenção dos parâmetros hidrodinâmicos e de transporte, aumentando a precisão dos modelos e agilizando sua implementação, algo que pode, inclusive, remover os custos de ferramentas aplicáveis no manejo de recursos hídricos.

Com isso diversas técnicas de solução de problemas inversos têm sido desenvolvidas e aplicadas em engenharia e em outros ramos da ciência. Em simulações aplicáveis em recursos hídricos, entretanto, alguns poucos exemplos são encontrados na literatura. Por exemplo, Shen et al. (2006), utilizaram uma modificação do método de Newton para estimar fontes não pontuais de coliformes fecais, com o objetivo de estabelecer a carga máxima admissível para o Rio Wye, nos Estados Unidos. Shen (2006) adotou a mesma metodologia para estimar os parâmetros de um modelo de eutrofização estuarina, desenvolvido para a gestão do estuário do rio Rappahannock, EUA.

Por outro lado, em vez de parâmetros, as condições de contorno de salinidade são estimadas por Yang e Hamrick (2005), para um modelo hidrodinâmico tridimensional de marés e um modelo de transporte de salinidade. De maneira semelhante, (STRUB et al., 2009) propuseram um novo algoritmo para a estimativa das condições de contorno aberto em rios de maré forçando sistemas onde está presente.

No trabalho de Hu et al. (2009) coeficientes de viscosidade e difusão foram obtidos para o modelo HLES (Horizontal Large eddy Simulation). Já Chau (2006) utiliza técnicas de inteligência computacional na solução de problemas costeiros e faz uma pequena revisão de modelos costeiros. Por outro lado, em (GANJU; SCHOELLHAMER, 2009) a calibração dos parâmetros é feita manualmente utilizando 2 cenários (1997-2004) para calibração e um cenário (2003) para validação. Para calibrar um modelo de transporte reativo Brauwere et al.(2009) otimizam o posicionamento e a data das coletas afim de maximizar seus impactos nos modelos. Essa otimização é feita através da matriz de informação de Fisher. Ainda, Hsu et al. (1999) fazem uso dos coeficientes de atrito e difusão turbulenta para calibrar um modelo bidimensional integrado na lateral, utilizando o fluxo barotrópico para ajustar o coeficiente de atrito e a distribuição de sal para ajustar o coeficiente de difusão. O

processo adotado utiliza uma série de dados e é composto de uma fase de estimação, uma de refinação e uma de verificação, tornando extremamente trabalhoso.

A concepção de modelos para resolver problemas cada vez mais complexos constitui uma motivação no desenvolvimento algorítmico. Grandes sucessos foram alcançados através da modelagem da inteligência biológica e natural. Esses algoritmos inteligentes incluem redes neurais artificiais, algoritmos genéticos entre outros (ENGELBRECHT, 2007).

Objetivos

O objetivo desta tese é propor uma estratégia de obtenção automática de parâmetros hidrodinâmicos, através da solução de problemas inversos, para um modelo numérico que simule o transporte de substância conservativa em estuários (como parte dessa investigação, faz-se aqui uma aplicação ao estuário do rio Macaé, litoral norte do Rio de Janeiro). O modelo aqui apresentado foi desenvolvido na plataforma MOHID (Water Modeling System, Instituto Superior Técnico - Universidade de Lisboa).

O estudo foi dividido nas seguintes etapas:

- *Modelar computacionalmente o estuário do rio Macaé, utilizando a plataforma MOHID (Water Modeling System, Instituto Superior Técnico - Universidade de Lisboa);*

- *Realizar uma análise de sensibilidade dos modelos em relação aos parâmetros de interesse;*

- *Propor uma abordagem para o problema inverso, visando encontrar a melhor aproximação dos parâmetros com o menor custo computacional possível;*

- *Resolver o problema inverso com uso de métodos de inteligência computacional, comparando seus resultados com o objetivo de escolher o mais apropriado para o problema;*

Tendo em vista que a maioria dos modelos não conta com uma ferramenta de

calibração, entre os quais o próprio MOHID, este trabalho busca dar uma contribuição ao preenchimento dessa lacuna, fazendo uso de diversos métodos clássicos de otimização, bem como do recém-desenvolvido Particle Colision Algorithm (SACCO, et al., 2006) que ainda possui poucas aplicações encontradas na literatura.

Estrutura da Tese

Este trabalho foi estruturado da seguinte maneira: no Capítulo 1 faz-se uma breve revisão da formulação das equações de águas rasas. O pacote computacional MOHID, utilizado na modelagem do estuário e em sua simulação computacional, é apresentado no Capítulo 2. Neste capitulo apresentam-se as principais equações, assim como os métodos numéricos utilizados para resolvê-las, e um guia simplificado das principais funcionalidades e telas do programa, esse capítulo é concluído com a apresentação e a modelagem do estuário do rio Macaé utilizando o pacote MOHID e alguns de seus resultados obtidos, juntamente com sua análise de sensibilidade.

No Capítulo 3 é feita uma apresentação dos métodos de otimização utilizados nesse estudo, e é discutida a estratégia de solução do problema inverso baseada nos resultados obtidos na análise de sensibilidade feita no capítulo anterior. Por fim apresentam-se os resultados obtidos com o problema inverso para diferentes métodos de otimização, seus desempenhos são comparados e discutidos, Capítulo 4.

1 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA DIRETO MODELOS HIDRODINÂMICO E DE TRANSPORTE

Os métodos computacionais para dinâmica de fluidos (DFC) tiveram seu desenvolvimento motivado pela busca de soluções de problemas de transporte de calor e massa nas áreas de aeronáutica, aerodinâmica de veículos, engenharia química, engenharia nuclear e projetos industriais. Enquanto as equações fundamentais de dinâmica de fluidos formaram as bases desses códigos e eram bem conhecidos desde o século 19, a solução para problemas com geometria complexa e condições de contorno necessitavam do desenvolvimento de eficientes técnicas de solução numéricas e possibilidade de implementá-las em um computador. O desenvolvimento tecnológico ocorrido nas décadas de 50 e 60 do século passado tornou tal desenvolvimento possível, gerando assim um forte impulso na área de DFC (BATES et al., 2005).

A formulação matemática utilizada na simulação do transporte de substâncias em estuários e rios normalmente contempla a variação temporal. No que tange ao espaço, tal formulação pode ser tri, bi ou unidimensional, em função das características físicas e morfológicas do sistema. O escoamento estuarino é essencialmente tridimensional, em função da estratificação que eventualmente se forma na coluna d'água, com a água doce (menos densa) escoando sobre a água salina (mais densa). Para modelar matematicamente um estuário deve-se partir das equações de Navier-Stokes, generalizada para um fluido geofísico (MIRANDA et al., 2002).

$$\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial uu}{\partial x}+\frac{\partial uv}{\partial y}+\frac{\partial uw}{\partial z}-f_0 v=-\frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial P}{\partial x}+\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x}+\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y}+\frac{\partial \tau_{xz}}{\partial z}\right) \quad (1)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t}+\frac{\partial vu}{\partial x}+\frac{\partial vv}{\partial y}+\frac{\partial vw}{\partial z}+f_0 u=-\frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial P}{\partial y}+\frac{\partial \tau_{yx}}{\partial x}+\frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y}+\frac{\partial \tau_{yz}}{\partial z}\right) \quad (2)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t}+\frac{\partial wu}{\partial x}+\frac{\partial wv}{\partial y}+\frac{\partial ww}{\partial z}+g=-\frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial P}{\partial y}+\frac{\partial \tau_{zx}}{\partial x}+\frac{\partial \tau_{zy}}{\partial y}+\frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z}\right) \quad (3)$$

onde u, v *e* w *são as componentes das velocidades referentes aos eixos* x, y *e* z,

f_0 *é o parâmetro de Coriolis,* P *a pressão,* ρ *a densidade do fluido e* g *a aceleração gravitacional.*

Além disso, temos as tensões de Reynolds que são resultado das flutuações turbulentas de velocidade que foram parametrizadas, semi-empiricamente, pelos coeficientes turbulentos de viscosidade.

$$\tau_{xx} = -\rho\langle u'u'\rangle = -A_{xx}\frac{\partial u}{\partial x}\ ,\ \tau_{yx} = -\rho\langle v'u'\rangle = -A_{yx}\frac{\partial v}{\partial x} \tag{4}$$

$$\tau_{xy} = -\rho\langle u'v'\rangle = -A_{xy}\frac{\partial u}{\partial y}\ ,\ \tau_{yy} = -\rho\langle v'v'\rangle = -A_{yy}\frac{\partial v}{\partial y} \tag{5}$$

$$\tau_{xz} = -\rho\langle u'w'\rangle = -A_{xz}\frac{\partial u}{\partial z}\ ,\ \tau_{yz} = -\rho\langle v'w'\rangle = -A_{yz}\frac{\partial v}{\partial z} \tag{6}$$

onde $A_{xx}, A_{yx}, A_{xy}, A_{yy}, A_{xz}$ *e* A_{yz} *são os coeficientes de viscosidade turbulenta, que na prática podem ser aproximados por*

$$A_{xx} = A_{xy} = A_x,\ A_{yx} = A_{yy} = A_y\ e\ A_{xz} = A_{yz} = A_z \tag{7}$$

Assim as Equações (1) e (2) podem ser reescritas como

$$\begin{gathered}\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial uu}{\partial x}+\frac{\partial uv}{\partial y}+\frac{\partial uw}{\partial z}-f_0 v = \\ -\frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial x}+\frac{1}{\rho}\left[\frac{\partial}{\partial x}\left(A_x\frac{\partial u}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(A_y\frac{\partial u}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(A_z\frac{\partial u}{\partial z}\right)\right]\end{gathered} \tag{8}$$

$$\begin{gathered}\frac{\partial v}{\partial t}+\frac{\partial vu}{\partial x}+\frac{\partial vv}{\partial y}+\frac{\partial vw}{\partial z}+f_0 u = \\ -\frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial y}+\frac{1}{\rho}\left[\frac{\partial}{\partial x}\left(A_x\frac{\partial v}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(A_y\frac{\partial v}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(A_z\frac{\partial v}{\partial z}\right)\right]\end{gathered} \tag{9}$$

Assumindo que viscosidade não depende da posição do espaço e fazendo

$K_x = A_x/\rho$, $K_y = A_y/\rho$ e $K_z = A_z/\rho$, os coeficientes de difusão turbulenta, respectivamente nas direções x, y e z, temos que as Equações (8) e (9) ficam

$$\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial uu}{\partial x}+\frac{\partial uv}{\partial y}+\frac{\partial uw}{\partial z}-f_0u=-\frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial x}+K_x\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+K_y\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}+K_z\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \qquad (10)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t}+\frac{\partial vu}{\partial x}+\frac{\partial vv}{\partial y}+\frac{\partial vw}{\partial z}+f_0u=-\frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial y}+K_x\frac{\partial^2 v}{\partial x^2}+K_y\frac{\partial^2 v}{\partial y^2}+K_z\frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \qquad (11)$$

Por outro lado tem-se que estuários submetidos a uma amplitude de maré suficientemente grande (mais do que 4 metros) e com vazão do principal aporte fluvial suficientemente pequena, podem ter sua hidrodinâmica convenientemente simulada pelo sistema de equações que se denomina "Equações de Águas Rasas (EAR)" (DYER, 1997; MIRANDA et al., 2002; ROSMAN, 1989), que, em síntese, considera o estuário homogêneo verticalmente. Considerando que as trocas verticais de quantidade de movimento são desprezíveis, a integração das Equações (10) e (11) entre os limites $z=-H_0(x,y)$, leito do estuário, e $z=\eta(x,y)$, superfície livre, é dada por

$$\begin{aligned}&\int_{-H_0}^{\eta}\frac{\partial u}{\partial t}dz+\int_{-H_0}^{\eta}\frac{\partial uu}{\partial x}dz+\int_{-H_0}^{\eta}\frac{\partial uv}{\partial y}dz+\int_{-H_0}^{\eta}\frac{\partial uw}{\partial z}dz-\int_{-H_0}^{\eta}f_0v\,dz=\\&\int_{-H_0}^{\eta}-\frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial x}dz+\int_{-H_0}^{\eta}\left(K_x\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+K_y\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)dz+\int_{-H_0}^{\eta}K_z\frac{\partial^2 u}{\partial z^2}dz\end{aligned} \qquad (12)$$

$$\begin{aligned}&\int_{-H_0}^{\eta}\frac{\partial v}{\partial t}dz+\int_{-H_0}^{\eta}\frac{\partial vu}{\partial x}dz+\int_{-H_0}^{\eta}\frac{\partial vv}{\partial y}dz+\int_{-H_0}^{\eta}\frac{\partial vw}{\partial z}dz+\int_{-H_0}^{\eta}f_0u\,dz=\\&\int_{-H_0}^{\eta}-\frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial y}dz+\int_{-H_0}^{\eta}\left(K_x\frac{\partial^2 v}{\partial x^2}+K_y\frac{\partial^2 v}{\partial y^2}\right)dz+\int_{-H_0}^{\eta}K_z\frac{\partial^2 v}{\partial z^2}dz\end{aligned} \qquad (13)$$

Usando a regra de Leibniz para a derivada de uma integral no lado esquerdo da Equação (12) tem-se

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_{-H_0}^{\eta} u dz + \frac{\partial}{\partial x}\int_{-H_0}^{\eta} uu dz + \frac{\partial}{\partial y}\int_{-H_0}^{\eta} uv dz - u\big|_{\eta}\frac{\partial \eta}{\partial t}$$
$$+ u\big|_{-H_0}\frac{\partial -H_0}{\partial t} - uu\big|_{\eta}\frac{\partial \eta}{\partial x} + uu\big|_{-H_0}\frac{\partial -H_0}{\partial x} - uv\big|_{\eta}\frac{\partial \eta}{\partial y}$$
$$+ uv\big|_{-H_0}\frac{\partial -H_0}{\partial y} + uw\big|_{\eta} - uw\big|_{-H_0} - \int_{-H_0}^{\eta} f_0 v dz = \tag{14}$$
$$\int_{-H_0}^{\eta} -\frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial x} dz + \int_{-H_0}^{\eta} K_x \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + K_y \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} dz + \int_{-H_0}^{\eta} K_z \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} dz$$

fatorando a parcela do lado direito tem-se

$$u\big|_{-H_0}\left[\frac{\partial -H_0}{\partial t} + u\big|_{-H_0}\frac{\partial -H_0}{\partial x} + v\big|_{-H_0}\frac{\partial -H_0}{\partial y} + w\big|_{-H_0}\right] = 0 \tag{15}$$

e

$$u\big|_{\eta}\left[\frac{\partial \eta}{\partial t} + u\big|_{\eta}\frac{\partial \eta}{\partial x} + v\big|_{\eta}\frac{\partial \eta}{\partial y} + w\big|_{\eta}\right] = 0 \tag{16}$$

Além disso, considerando que o estuário é verticalmente homogêneo e assumindo que as componentes de velocidade (u e v) são médias entre as velocidades na coluna d´água, temos que a Equação (12) fica pode ser reescrita como

$$\frac{\partial uh}{\partial t} + \frac{\partial uuh}{\partial x} + \frac{\partial uvh}{\partial y} - \int_{-H_0}^{\eta} f_0 v dz =$$
$$-\frac{h}{\rho}\frac{\partial P}{\partial x} + \int_{-H_0}^{\eta}\left(K_x \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + K_y \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right) dz + \int_{-H_0}^{\eta} K_z \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} dz \tag{17}$$

Aplicando Leibnitz no segundo termo do lado direito da Equação (17) tem-se

$$\int_{-H_0}^{\eta}\left(K_x\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+K_y\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)dz=\frac{\partial}{\partial x}\int_{-H_0}^{\eta}K_x\frac{\partial u}{\partial x}dz-K_x\frac{\partial u}{\partial x}\bigg|_{\eta}\frac{\partial \eta}{\partial x}+$$
$$K_x\frac{\partial u}{\partial x}\bigg|_{-H_0}\frac{\partial(-H_0)}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial y}\int_{-H_0}^{\eta}K_y\frac{\partial u}{\partial y}dz-K_y\frac{\partial u}{\partial y}\bigg|_{\eta}\frac{\partial \eta}{\partial y}+K_y\frac{\partial u}{\partial y}\bigg|_{-H_0}\frac{\partial(-H_0)}{\partial y} \quad (18)$$

Levando em consideração que não existe fluxo difusivo de quantidade de movimento no leito e na superfície então

$$K_x\frac{\partial u}{\partial x}\bigg|_{-H_0,\eta}=K_y\frac{\partial u}{\partial y}\bigg|_{-H_0,\eta}=K_z\frac{\partial u}{\partial z}\bigg|_{-H_0,\eta}=0 \quad (19)$$

logo a Equação (18) fica

$$\int_{-H_0}^{\eta}\left(K_x\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+K_y\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)dz=\frac{\partial}{\partial x}\left(K_x h\frac{\partial u}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(K_y h\frac{\partial u}{\partial y}\right) \quad (20)$$

Além disso, a integral de atrito viscoso (última parcela da Equação (17)) pode ser interpretada como a diferença entre os componentes segundo o eixo x *das tensões de cisalhamento do vento* (τ_{Wx}) *e atrito do fundo* (τ_{Bx})*, ou seja,*

$$\int_{-H_0}^{\eta}K_z\frac{\partial^2 u}{\partial z^2}dz=\frac{1}{\rho}(\tau_{Wx}-\tau_{Bx}) \quad (21)$$

Substituindo as Equações (20) e (21) na Equação (17) resulta

$$\frac{\partial uh}{\partial t}+\frac{\partial uuh}{\partial x}+\frac{\partial uvh}{\partial y}-hf_0 v=$$
$$-\frac{h}{\rho}\frac{\partial P}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial x}\left(K_x h\frac{\partial u}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(K_y h\frac{\partial u}{\partial y}\right)+\frac{1}{\rho}(\tau_{Wx}-\tau_{Bx}) \quad (22)$$

τ_{Bx} *pode ser calculado assumindo um perfil de velocidade logarítmico*

$$\tau_{Bx} = \hat{U}\left(\frac{\kappa}{\log\left(\frac{h+R}{R}\right)}\right)^2 \tag{23}$$

onde $\hat{U}$ é a velocidade escalar horizontal, κ é a constante de von Karman e R é a altura da rugosidade.

Usando a equação da continuidade

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial uh}{\partial x} + \frac{\partial vh}{\partial y} = 0 \tag{24}$$

na Equação. (22) tem-se

$$\begin{gathered}\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} + v\frac{\partial u}{\partial y} - f_0 v = \\ -\frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{1}{h}\left[\frac{\partial}{\partial x}\left(K_x h\frac{\partial u}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(K_y h\frac{\partial u}{\partial y}\right)\right] + \frac{1}{\rho h}(\tau_{Wx} - \tau_{Bx})\end{gathered} \tag{25}$$

Aplicando um processo semelhante à Equação (13) tem-se

$$\begin{gathered}\frac{\partial v}{\partial t} + u\frac{\partial v}{\partial x} + v\frac{\partial v}{\partial y} + f_0 u = \\ -\frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial y} + \frac{1}{h}\left[\frac{\partial}{\partial x}\left(K_x h\frac{\partial v}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(K_y h\frac{\partial v}{\partial y}\right)\right] + \frac{1}{\rho h}(\tau_{Wy} - \tau_{By})\end{gathered} \tag{26}$$

Considerando que a velocidade na vertical é nula podemos simplificar a Equação (3) por

$$\frac{\partial P}{\partial z} + g\rho = 0 \tag{27}$$

Se a pressão atmosférica (P_{atm}) é subtraída de P, e a densidade ρ é dividida por uma referência constante de densidade ρ_o e um desvio ρ' proveniente da referência constante da densidade, após integração a partir da superfície livre para a profundidade z, onde a pressão é calculada, chegamos a:

$$P(z) = P_{atm} + g\rho_o(h - z) + g\int_z h\rho' \, dz \tag{28}$$

A Equação (28) relaciona pressão a qualquer profundidade, a pressão atmosférica na superfície do mar, o nível do mar e a pressão anômala integrada entre esse nível e o da superfície. Ao utilizar esta expressão e a aproximação hidrostática, o gradiente de pressão horizontal na direção x_i *pode ser dividido em três contribuições:*

$$\frac{\partial P(z)}{\partial x_i} = \frac{\partial P_{atm}}{\partial x_i} - g\rho_o \frac{\partial \eta}{\partial x_i} - g\int_z \eta \frac{\partial \rho'}{\partial x_i} dz \tag{29}$$

O gradiente de pressão total é a soma dos gradientes de pressão atmosférica, de elevação da superfície do mar (gradiente de pressão barotrópico) e da distribuição da densidade (gradiente de pressão baroclínico). Essa decomposição do gradiente de pressão é substituída nas Equações (25) e (26).

Já o transporte de soluto e constituintes em suspensão pode ser descrito pela versão 2D-horizontal da equação de advecção-difusão, expressa por

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u\frac{\partial c}{\partial x} + v\frac{\partial c}{\partial y} = \frac{1}{h}\left[\frac{\partial}{\partial x}\left(D_x h \frac{\partial c}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(D_y h \frac{\partial c}{\partial y}\right)\right] + R \tag{30}$$

onde c *é a concentração de soluto ou constituintes em suspensão,* D_x *e* D_y *são os coeficientes de difusão turbulenta nas direções* x *e* y*, respectivamente, e* R *reúne todas as reações internas e aportes externos que possam alterar a concentração do constituinte que é simulado. Diversas soluções numéricas têm sido propostas para resolver esse conjunto de 4 equações e 4 incógnitas* $(h, u, v$ *e* $c)$*.*

De acordo com (WROBEL et al., 1989) K *e* D *têm a seguinte correlação*

$$D = \frac{K}{\sigma} \tag{31}$$

onde σ *é o número de turbulência de Prandtl para o transporte de calor, ou o número de turbulência de Schmidt para o transporte de massa, e normalmente tem o valor*

muito próximo a 1(um). Assim, nesse trabalho esses dois coeficientes, K *e* D*, serão simplesmente representados por* D*.*

2 ***SOLUÇÃO NUMÉRICA DO PROBLEMA DIRETO***

Nesse capítulo será abordada a solução do problema direto, iniciando com uma descrição da estrutura do software MOHID WATER, suas principais equações e seus módulos de operação. Em seguida é abordado o estudo de caso do estuário do Macaé, onde se discute a utilização dos parâmetros adotados no modelo, e os resultados obtidos com essa modelagem são mostrados.

2.1 ***MOHID***

O sistema MOHID está estruturado em módulos, incluindo o hidrodinâmico baroclínico para a coluna d'água e uma versão 3D para os sedimentos e os correspondentes módulos de transporte, tanto eulereanos quanto Lagrangeano. Parâmetros e processos envolvendo constituintes não-conservativos são objeto de módulos específicos (p/ex módulo turbulência, qualidade da água, ecologia e transformação de óleos). O módulo turbulência faz uso do conhecido modelo GOTM para turbulência.

Os modelos que compreendem o MOHID foram desenvolvidos por uma grande equipe de técnicos pertencentes ao Instituto Superior Técnico de Lisboa, em cooperação próxima com a empresa Hidromod Ltda, e inclui contribuições de uma equipe permanente de pesquisadores, de alunos de doutorado dos Programas de Engenharia Ambiental e Mecânica, bem como de alunos do Curso de Mestrado em Modelagem de Ambientes Marinhos daquele instituto. Contribuições de outros grupos de pesquisa têm igualmente sido relevantes para o desenvolvimento do MOHID (www.mohid.com).

2.1.1 Histórico

O desenvolvimento do MOHID iniciou-se em 1985, sendo desde então submetido a um contínuo melhoramento e atualização, devido à sua aplicação em muitas pesquisas e projetos de engenharia. Inicialmente o MOHID consistia em um modelo bi-dimensional forçado pela maré (NEVES, 1985). Esse modelo era utilizado no estudo de estuários e zonas costeiras, sendo resolvido através do clássico método de Diferenças Finitas. Em anos subsequentes, os módulos de transporte euleriano e lagrangiano foram incluídos no modelo, bem como um modelo não-hidrostático de Boussinesq para ondas de gravidade. O primeiro modelo tridimensional foi introduzido por (SANTOS, 1995), o qual utilizava coordenadas Sigma dupla (MOHID 3D). As limitações das coordenadas Sigma dupla revelaram a necessidade de se desenvolver um modelo que fosse capaz de utilizar um sistema genérico de coordenadas verticais, permitindo que o usuário fizesse a sua escolha, dependendo dos processos abordados na área de estudo. Diante dessa necessidade, foi introduzido o conceito de volumes finitos, com a versão Mesh 3D, por (MARTINS, 1999). Nessa nova versão do MOHID foram incluídos modelos 3D com abordagens euleriana e lagrangeana (LEITÃO, 1996), bem como um modelo adimensional de qualidade da água (MIRANDA, 1999). Essa versão mostrou que a utilização de um modelo integrado, baseado em um sistema genérico de coordenadas, torna-se uma poderosa ferramenta. Entretanto, foram verificadas limitações para a sua manutenção e desenvolvimento, oriundas da linguagem FORTRAN 77 de programação. Dessa forma, decidiu-se por reorganizar o modelo fazendo-se uso do FORTRAN 95 conjugado com uma estratégia orientada a objeto.

Com a crescente complexidade, tornou-se necessário introduzir uma nova forma de organização da informação do modelo MOHID. Em 1998, o seu código como um todo foi submetido a um completo rearranjo, fazendo-se uso de novas técnicas de linguagem de programação, bem como da crescente capacidade de se reprogramar todo o modelo. O objetivo principal desse rearranjo foi tornar o modelo mais robusto e confiável, além de protegê-lo de eventuais erros de programação, garantindo-se, dessa forma, que futuros desenvolvimentos fossem obtidos de forma sustentável. Para atingir-se esse objetivo, a programação objeto orientada em FORTRAN foi introduzida no MOHID, como descrito por Decyk et al., (1997).

A filosofia do novo modelo MOHID (MIRANDA et al., 2000), doravante designado apenas como MOHID, permite a utilização do modelo em suas abordagens uni,

bi e tridimensional. Todo o modelo está programado em ANSI FORTRAN 95, fazendo uso da filosofia orientada a objeto. A subdivisão do programa em módulos, assim como fluxo de informações entre esses módulos, foi objeto de estudo por parte dos autores do MOHID. Na realidade, o MOHID é composto por mais de 40 módulos, os quais somam mais de cento e cinquenta mil linhas de programação. Cada módulo é responsável por gerenciar certo tipo de informação. Os principais módulos são listados na Tabela 1.

Tabela 1 - Principais módulos do MOHID.

Módulo	*Descrição*
Principal	*Gerencia o fluxo de informações entre o modulo hidrodinâmico e os dois módulos de transporte, bem com a comunicação entre sub-modelos*
Hidrodinâmico	*Modelo tridimensional baroclínico com superfície livre. Calcula fluxo de água, velocidades e descargas (water fluxes)*
Propriedade da Água (Transporte Euleriano)	*Modelo de transporte com abordagem euleriana, sendo capaz de similar a evolução de propriedades da água, como temperatura, salinidade, oxigênio etc.*
Lagrangiano	*Capaz de simular a evolução das mesmas propriedades, utilizando a abordagem lagrangiana. Também pode ser utilizado para simular a dispersão de óleo*
Qualidade de Água	*Modelo adimensional de qualidade de água. Simula o ciclo do oxigênio, espécies de nitrogênio e fósforo. Está acoplado aos modelos de transporte, tanto na abordagem euleriana quanto lagrangeana. Baseado em modelo inicialmente desenvolvido pela EPA (Bowie, et al., 1985).*
Dispersão de Óleo	*Módulo de dispersão de óleo. Simula o espalhamento de óleo devido a gradientes de concentração e reações internas, como evaporação, emulsificação, dispersão, dissolução e sedimentação.*
Turbulência	*Modelo unidimensional de turbulência. Faz uso da formulação adotada no modelo GOTM*
Superfície	*Condição de contorno no topo da coluna d´água*
Fundo	*Condição de contorno no limite inferior da coluna d´água*
Fronteira Aberta	*Condição de contorno na fronteira marinha*
Descarga	*Rios ou descargas antropogênicas*
Arquivos Hidrodinâmicos	*Módulo auxiliar utilizado para armazenar a solução do modelo hidrodinâmico, de forma que possa posteriormente ser utilizado.*

Fonte: MOHID description (www.mohid.com).

Outra importante característica do MOHID é a possibilidade de se rodar sub-modelos. Essa característica permite ao usuário estudar áreas restritas da região estudada, utilizando as condições de contorno do modelo "pai". O número de sub-modelos implementados depende unicamente da capacidade do computador que se

esteja utilizando.

2.1.2 Aplicações

O modelo MOHID tem sido aplicado em diversas regiões costeiras e estuarinas, se mostrando capaz de simular complexas características presentes em escoamentos observados nessas regiões. O modelo tem sido aplicado tanto como ferramenta de pesquisa, como em projetos de consultoria. Ao longo da costa portuguesa, diferentes ambientes têm sido estudados com o seu auxílio, incluindo os principais estuários (Minho, Lima, Douro, Mondego, Tejo, Sado, Mira, Arade e Guadiana) e lagoas costeiras (Ria de Aveiro e Ria Formosa), (INAG, 2001); (MARTINS et al., 2001). O modelo foi igualmente implementado na maioria das lagoas da Galícia como Ría de Vigo - (TABOADA et al., 1998), (MONTERO, 1999) e (MONTERO et al., 1999) - Ría de Pontevedra - (TOBOADA et al., 2000), (VILLARREAL et al., 2002), além de outras lagoas - (PÉREZ-VILLAR, 1999).

Além das regiões costeiras da Península Ibérica, alguns estuários têm sido modelados, como o Western Scheldt (Holanda) e Gironde (França), através de modelos desenvolvidos por Cancino e Neves (1999) e o estuário de Carlingford (Irlanda), através de modelo desenvolvido por (LEITÃO, 1996), assim como alguns estuários localizados na costa brasileira, como nas cidades de Santos e Fortaleza.

Com relação à modelagem de mar aberto, o modelo MOHID já foi aplicado na região do Atlântico Nordeste, onde alguns processos foram estudados, incluindo a corrente costeira de Portugal (COELHO et al., 1994), o comportamento de correntes ao longo do limite da Plataforma Continental no Atlântico Europeu e a geração interna de ondas de maré (NEVES et al., 1998). Além disso, o modelo também foi aplicado no Mar Mediterrâneo, com o objetivo de se simular ciclos sazonais (TABOADA, 1999), e nos estudo da circulação do mar de Alboran (SANTOS, 1995). Mais recentemente, o MOHID foi aplicado em diversos reservatórios portugueses, como Monte Novo, Roxo e Alqueva, (BRAUNSCHWEIG, 2001), com o objetivo de se estudar o escoamento e a qualidade da água desses sistemas.

Como dito acima, o MOHID está estruturado em módulos, dos quais os mais relevantes para o desenvolvimento deste trabalho são apresentados no que segue.

2.1.3 Módulos do MOHID

Nessa seção apresentam-se os principais módulos programados no MOHID bem como as equações e discretizações relacionadas a cada um deles.

2.1.3.1 Módulo Principal

O módulo principal representa, hierarquicamente falando, o mais alto nível dentro do MOHID, tendo duas principais atribuições, a coordenação da execução do módulo hidrodinâmico e de transporte, bem como a coordenação da comunicação pai-filho entre sub-modelos. A Figura 1 mostra essa coordenação

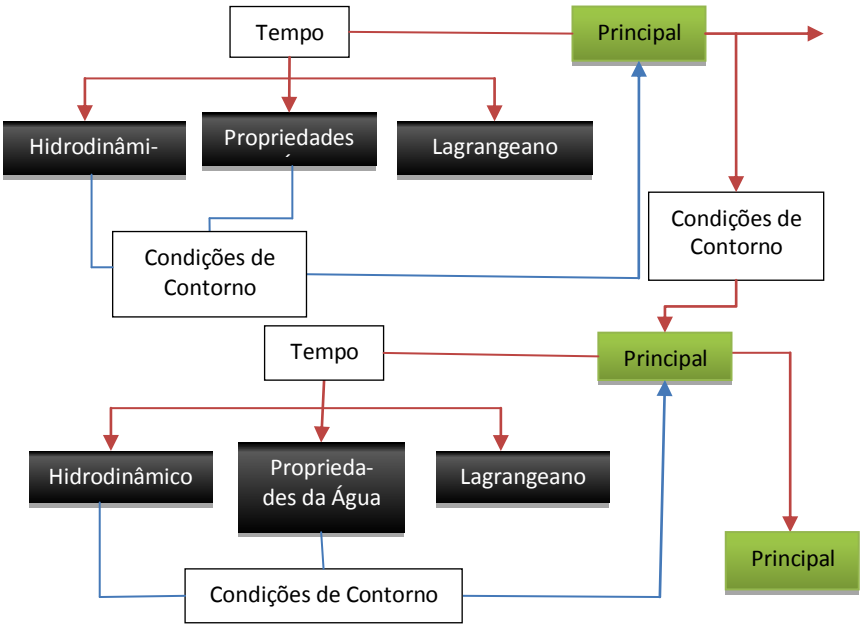


Figura 1 - Informação do fluxo entre sub-modelos.

Fonte: MOHID description (www.mohid.com).

Coordenação de execução de um modelo

A coordenação de execução de um modelo consiste na atualização dos módulos hidrodinâmicos e de transporte dentro de um dado modelo. O módulo transporte pode rodar com passos de tempo distintos dos adotados no módulo hidrodinâmico, uma vez que seus passos de tempo são múltiplos dos passos de tempo desse módulo.

Coordenação da comunicação entre modelos pai e filho

A coordenação do fluxo de informação entre sub-modelos inclui a sincronização entre esses diferentes modelos, uma vez que cada um deles pode rodar adotando-se distintos passos de tempo. A coordenação de sub-modelos é realizada de forma hieraquizada. Todo modelo pode ter um ou mais modelos-filho, os quais, por sua vez e recursivamente podem ter um ou mais modelos-filho. Toda a comunicação é feita em um único sentido, a partir das condições de fronteira fornecidas pelo modelo-pai aos modelos-filho.

2.1.3.2 Módulo Batimetria

O módulo batimetria, hierarquicamente falando, está em um dos mais baixos níveis dentro do sistema MOHID. Ele basicamente lê os dados de um arquivo ASCII e os disponibiliza para os módulos que utilizam esses dados (Figura 2).

Os dados batimétricos podem ser armazenados em qualquer grade regular, com diferentes espaçamentos nas direções X *e* Y*. Cada ponto do grid deve ter suas coordenadas estabelecidas, sendo que as coordenadas horizontais informadas ao modelo podem ser de diversos tipos, as mais usuais sendo as geográficas e métricas.*

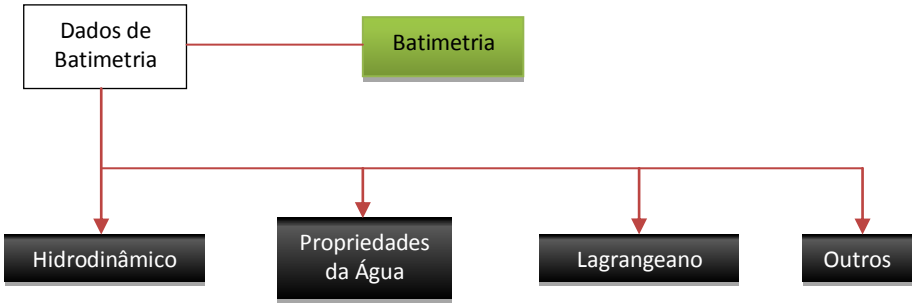


Figura 2 - Informação do fluxo entre o módulo batimetria e outros módulos.
Fonte: MOHID description (www.mohid.com).

2.1.3.3 Módulo Geometria

O módulo geometria computa as áreas laterais e volumes dos volumes finitos que são gerados na discretização adotada, baseando-se na elevação da superfície livre e nos dados batimétricos que são informados ao modelo. Essa informação é sempre atualizada, sendo disponibilizada para outros módulos do MOHID. A Figura 3 representa o fluxo de informação entre o módulo geometria e outros módulos.

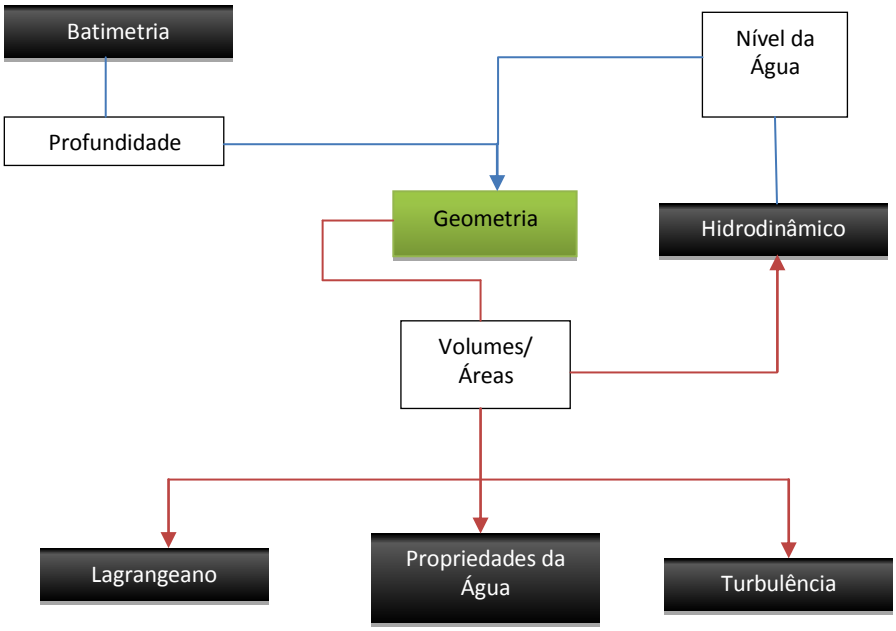


Figura 3 - Fluxo de informação entre o módulo geometria e outros módulos.
Fonte: MOHID description (www.mohid.com).

Volumes Finitos

O MOHID faz uso do Método dos Volumes Finitos (CHIPPADA et al., 1998; MARTINS, 1999; MARTINS et al., 2001) na discretização das equações. Nesse método, a forma discreta das equações é aplicada macroscopicamente em um volume de controle. A Lei de Conservação para um dado escalar U*, considerando-se fontes* Q *em um volume de controle* Ω*, é escrita como*

$$\partial_t \int_{\Omega} U d\Omega + \oint_{S} \vec{F} d\vec{S} = \int_{\Omega} Q d\Omega \qquad (32)$$

onde F *representa os fluxos do escalar através da superfície* S *do volume de controle. Após discretizada, essa expressão para um dado volume de controle* Ω_j*, onde* U_j *é definida, resulta em*

$$\partial_t \left(U_j \Omega_j \right) + \sum_{faces} \vec{F}.\vec{S} = Q_j \Omega_j \qquad (33)$$

Dessa forma, o procedimento para a resolução das equações independe da geometria de cada célula. Na realidade, cada célula pode ter qualquer forma, tendo apenas poucas restrições (veja (MONTERO, 1999) ou (MARTINS et al., 2001)), uma vez que somente precisa-se conhecer o fluxo entre células. Assim, consegue-se uma completa separação entre as variáveis físicas e a geometria (HIRSCH, 1988). Como os volumes podem variar no curso dos cálculos, a geometria é atualizada a cada passo de tempo em que as variáveis físicas são computadas. Além disso, as coordenadas espaciais são igualmente independentes, e qualquer geometria pode ser escolhida para cada uma das dimensões. Coordenadas cartesianas e curvilíneas podem ser utilizadas no plano horizontal, enquanto que uma coordenada vertical genérica com diferentes sub-domínios, pode ser utilizada no plano vertical. Essa coordenada vertical permite a minimização de erros que estão presentes em muitas coordenadas verticais clássicas (Cartesiana, Sigma, Isopicnal), conforme mostrado por (MARTINS et al., 2001).

O elemento de volume utilizado no MOHID é mostrado na Figura 4.

Apenas um grau de liberdade é permitido e o grid é ortogonal Cartesiano no

plano horizontal, sendo deslocado (ARAKAWA; LAMB, 1977), de modo que as velocidades horizontais são resolvidas no centro das faces oeste (componente u da velocidade) e sul (componente v da velocidade), enquanto que a elevação da superfície livre, parâmetros de turbulência e concentração de traçadores são resolvidos no centro do volume. Ele também é deslocado na direção vertical, com a componente w da velocidade, concentração de traçadores e parâmetros de turbulência posicionados nas faces de fundo e topo, enquanto as componentes horizontais de velocidade e elevação da superfície livre posicionam-se no centro do volume, pela perspectiva vertical.

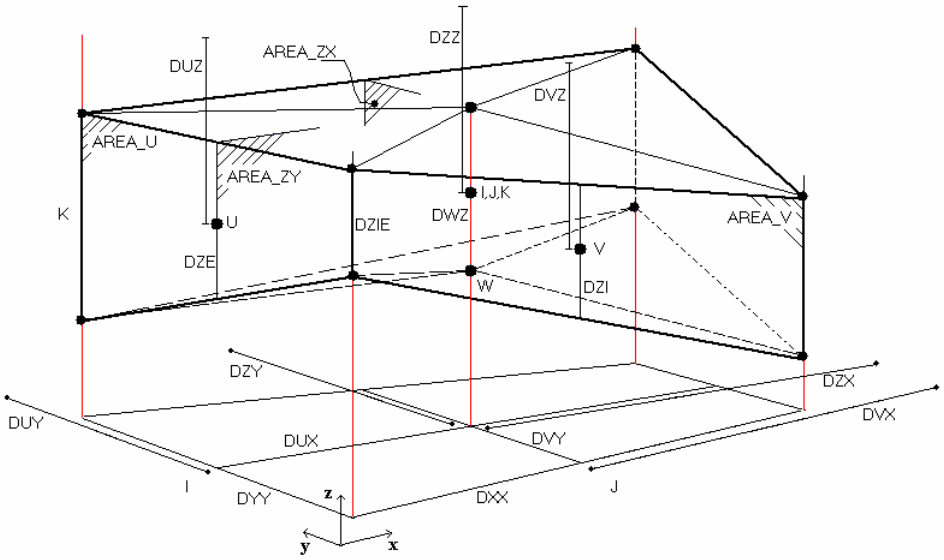


Figura 4 - Elemento de volume adotado no MOHID.

Fonte: MOHID description (www.mohid.com).

2.1.3.4 Módulo Hidrodinâmico

O módulo hidrodinâmico do MOHID é descrito nesta seção. O fluxo de informação desse módulo em relação aos demais módulos é mostrado na Figura 5.

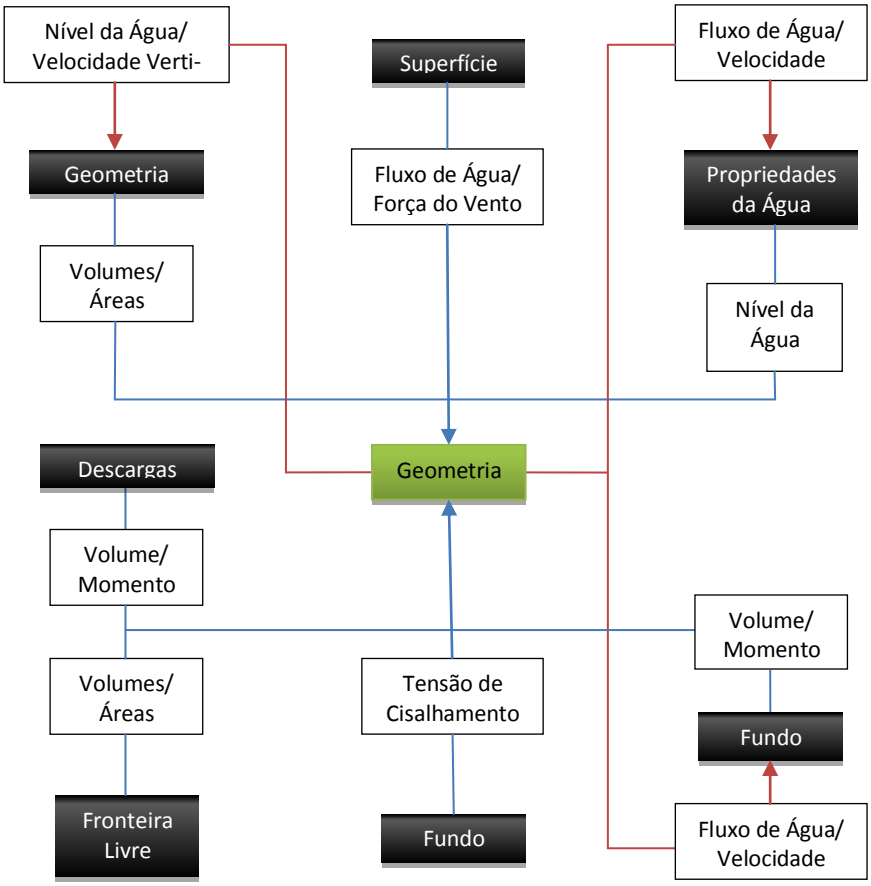


Figura 5 - Informação do fluxo entre o Módulo Hidrodinâmico e os demais módulos.
Fonte: MOHID description (www.mohid.com).

Equações

O MOHID resolve as equações primitivas que formulam o escoamento tridimensional incompressível. Equilíbrio hidrostático e as aproximações de Boussinesq e Reynolds são assumidas. Assim, as equações de momento utilizadas no MOHID são aquelas apresentadas no Capítulo 1 (Equações (25), (26) e (27)).

Discretização

Descreve-se resumidamente, a seguir, os procedimentos empregados para a discretição temporal.

A discretização espacial foi discutida anteriormente. Já a discretização temporal é implementada através do algoritmo semi-implícito ADI (Alternate Direction Im-

plicit), introduzido por Peaceman e Rackford em 1955 (FLETCHER, 1991). Esse algoritmo computa de forma alternada uma componente horizontal de velocidade na forma implícita, enquanto computa a outra componente na forma explícita. Resulta desse procedimento um sistema de equações tridiagonal que pode ser resolvido, por exemplo, pelo algoritmo de Thomas, de forma rápida e eficiente. Isso permite preservar as vantagens da estabilidade, garantidas pelos métodos implícitos, sem a desvantagem de elevados custos computacionais e erros associados. Dessa forma, passos de tempo relativamente grandes podem ser adotados. Duas diferentes discretizações são codificadas no modelo: uma que envolve 4 equações com dois distintos passos de tempo por iteração, o esquema S21 (Equação. (34)) de (ABBOTT, et al., 1973); e outra, que envolve 6 equações, obtida pelo algoritmo de (LEENDERTSEE, 1967), mais conveniente quando zonas intertidais têm que ser modeladas, uma vez que nessa situação as velocidades têm que ser atualizadas a cada meio passo de tempo.

$$
\begin{aligned}
&\eta^{1+1/2}\left(u^{t+1},u^{t},v^{t+1/2},v^{t-1/2}\right)\rightarrow u^{t+1}\\
&\rightarrow w^{*t+1/2}\xrightarrow{Atualização\,Geométria} w^{t+1/2}\rightarrow S^{t+1/2},T^{t+1/2}\\
&\rightarrow \eta^{1+1}\left(u^{t},u^{t+1},v^{t+3/2},v^{t+1/2}\right)\rightarrow u^{t+3/2}\\
&\rightarrow w^{*t+1}\xrightarrow{Atualização\,Geométria} w^{t+1}\rightarrow S^{T+1},T^{T+1}
\end{aligned}
\tag{34}
$$

Cada iteração é dividida em 2 metades de passo. No primeiro, a superfície livre η e uma das componentes horizontais de velocidade, u por exemplo, são computadas de forma implícita. O valor requerido para a outra componente é tomado do passo de tempo anterior. Uma velocidade vertical (provisória) w^{*} é computada pela Equação da Continuidade. A geometria é, então, atualizada e a velocidade vertical w corrigida. O mesmo procedimento é adotado no próximo meio passo de tempo, mas para a outra componente horizontal de velocidade. Nesse diagrama, salinidade e temperatura são computadas a cada meio passo de tempo. Como os modos internos são muito mais lentos do que os externos, S e T podem ser atualizadas em espaços de tempo maiores, sem perda de precisão e estabilidade.

Discretização de diferentes processos

Uma breve descrição será dada no que segue. A descrição completa pode ser

obtida em (MARTINS et al., 2001) e (MONTERO, 1999).

- ***Equação da Superfície Livre (Equação (24))***

A elevação da superfície livre é obtida através da integração da Equação da Continuidade realizada em toda coluna d'água. Na abordagem utilizada no Método de Volumes Finitos, essa integração é feita através da soma dos fluxos que atravessam todos os volumes discretos que compõem a coluna d'água. Para o esquema S21, em um meio passo de tempo, tem-se

$$\frac{\eta_{ij}^{t+1/2}-\eta_{ij}^{t}}{\Delta t/2}= \frac{1}{A_{\eta ij}}\left[\frac{1}{2}\left(\sum_{kbot}^{k\max}u_{ijk}^{t+1}A_{u_{ijk}}^{t}+\sum_{kbot}^{k\max}u_{ijk}^{t}A_{u_{ijk}}^{t}\right)-\frac{1}{2}\left(\sum_{kbot}^{k\max}u_{ij+1k}^{t+1}A_{u_{ij+1k}}^{t}+\sum_{kbot}^{k\max}u_{ij+1k}^{t}A_{u_{ij+1k}}^{t}\right)\right]+ \frac{1}{A_{\eta ij}}\left[\frac{1}{2}\left(\sum_{kbot}^{k\max}v_{ijk}^{t+1/2}A_{v_{ijk}}^{t}+\sum_{kbot}^{k\max}u_{ijk}^{t}A_{v_{ijk}}^{t}\right)-\frac{1}{2}\left(\sum_{kbot}^{k\max}v_{i+1jk}^{t+1/2}A_{u_{i+1jk}}^{t}+\sum_{kbot}^{k\max}u_{ij+1k}^{t}A_{u_{i+1jk}}^{t}\right)\right] \quad (35)$$

onde $A_{\eta ij}=DUX_{ij}DVY_{ij}$ *é a área projetada no plano horizontal. Os fluxos são promediados no tempo, de modo que o cálculo é feito para* $t+1/2$*. Uma discretização análoga é conduzida para o próximo meio passo de tempo. Os fluxos* $u\cdot Au$ *e* $v\ Av$ *são obtidos da equação de momentum. A discretização dos diferentes termos envolvidos será discutida no que segue.*

- ***Equação da velocidade***

Se a Equação (25) é discretizada fazendo-se uso da Equação (32) e do esquema S21, chega-se a seguinte expressão (podendo ser obtida uma equação equivalente para a componente v*, Equação (26) para cada célula* u_{ijk} *do grid:*

$$\frac{\Omega_{u_{ijk}}^{t}\left(u_{ijk}^{t+1}-u_{ijk}^{t}\right)}{\Delta t}+\sum_{m=1}^{Nfaces}\vec{F}\vec{n}A_m=f_{u_{ijk}}\Omega_{u_{ijk}}^{t}\overline{V}_{ijk}^{t} \quad (36)$$

onde $\Omega_{U_{ijk}}^{t}$ *é o volume da célula onde será computada* u_{ijk}*, e* $f_{u_{ijk}}$ *é o valor do parâ-*

metro de Coriolis para essa célula. O valor de $\overline{V}_{ijk}^{t}$ *representa o valor promediado no tempo da componente* v *da velocidade nessa mesma célula. O segundo termo no lado esquerdo da equação representa o fluxo de forças* F_m *através da superfície* A_m *da célula* m*. A força de Coriolis é o termo no lado direito da equação, sendo que os demais termos estão incluídos na soma apresentada no lado esquerdo dessa equação.*

O termo de Coriolis é discretizado explicitamente, como pode ser visto no lado direito da Equação (36), ainda que isso represente uma restrição em relação à dimensão do passo de tempo Δt *(*$\Delta t \leq 2 / f_0$*). Essa limitação não é crítica para aplicações em regiões costeiras – para latitudes de 43º isso implica em* $\Delta t \leq 2000s \approx$ *5h 30min, ou seja, intervalo de tempo muito maior do que o passo de tempo normalmente utilizado nessas aplicações. Os outros termos adotados nessa formulação são expressos como fluxos através das superfícies dos volumes de controle, e fazem parte, dessa forma, do segundo termo do lado esquerdo da equação*

Com o objetivo de se garantir a conservação de momentum, o divergente dos fluxos dentro de cada elemento de volume deve ser nulo. Isso é obtido aplicando-se no fluxo advectivo o mesmo procedimento adotado no cômputo da elevação da superfície livre e da velocidade vertical. Os fluxos advectivos em cada célula são computados por

$$-\sum_{m=1}^{Nfaces} \vec{F}_m \cdot \vec{n} A_m = \left[(u \cdot uflux_u)_{i+1\,j}^{t} - (u \cdot uflux_u)_{ij}^{t} \right] + \left[(u \cdot uflux_v)_{ij+1}^{t} - (u \cdot uflux_v)_{ij}^{t} \right] \qquad (37)$$

com $uflux_{u_i}$ *denotando o fluxo de* u_i *através da sua célula de cálculo. Um esquema misto de diferenças centradas é utilizado para computar* $uflux_{u_i}$ *(JAMES, 1987; SANTOS, 1995). Os fluxos advectivos horizontais são discretizados explicitamente, uma vez que as restrições impostas por ondas superficiais na estabilidade são pequenas para a faixa característica de velocidades que normalmente se obtém nessa simulações. O termo advectivo vertical pode ocasionar problemas se a espessura da camada de água for pequena, como pode acontecer em regiões rasas ao se utilizar grids do tipo sigma. Duas alternativas foram introduzidas no modelo com o objetivo de contornar-se esse problema: o uso de uma discretização implícita ou simplesmente desconsiderar esse termo nessas regiões.*

Já a restrição imposta à estabilidade pelas ondas superficiais motivou a implementação de um algoritmo semi-implícito. Dessa forma, o termo barotrópico de gradiente de pressão limita a estabilidade, sendo, portanto, discretizado de forma implícita. Para a célula u_{ijk} *e considerando-se o primeiro meio passo de tempo tem-se :*

$$-\sum_{m=1}^{Nfaces}\vec{F}_m \cdot \vec{n}A_m = \frac{1}{\rho_0}\left[\left(P_{atm_{ij-1}}^{t+1/2} - P_{atm_{ij}}^{t-1/2}\right) + \left[\rho_0 g\left(\eta_{ij-1}^{t+1/2} - \eta_{ij}^{t-1/2}\right)\right]A_{u_{ijk}}^{t}\right. \tag{38}$$

Essa expressão, quando substituída na equação da superfície livre, resulta em um sistema tridiagonal, que é resolvido por eliminação de Gauss. Nas equações de velocidade, os valores de η *já são conhecidos, o que permite uma discretização explícita desse termo quando introduzido nas equações de momentum.*

Os fluxos difusivos horizontais são computados em cada face vertical das células de controle, sendo esses fluxos normais às faces

$$\left(F_{i-1/2\,jk}^{t}\frac{Av_{ijk}^{t} + Av_{ij-1k}^{t}}{2} - F_{i+1/2\,jk}^{t}\frac{Av_{+1ijk}^{t} + Av_{i+1\,j-1k}^{t}}{2}\right) \tag{39}$$

Os fluxos na direção x *são dados por :*

$$F_{ij-1/2k}^{t} = K_{H_{ij-1k}}^{t}\frac{u_{ijk}^{t} - u_{ij-1k}^{t}}{DUX_{ij-1}} \tag{40}$$

e na direção y *são dados por :*

$$F_{i-1/2\,jk}^{t} = K_{H_{i-1/2\,j-1/2k}}^{t}\frac{v_{ijk}^{t} - v_{ij-1k}^{t}}{\left(DYY_{ij-1} + DYY_{i-1\,j}\right)/2} \tag{41}$$

onde o coeficiente de viscosidade horizontal ($K_H^t = K_x = K_y$*) é interpolado para o ponto adequado.*

Condições de contorno

- ***Superfície livre***

Todos os fluxos advectivos através da superficie livre são desconsiderados. Essa condição é imposta, assumindo-se que o fluxo de W *na superfície é nulo.*

$$Wflux\big|_{\eta} = 0 \tag{42}$$

O fluxo difusivo de momentum é imposto de forma implícita através da tensão do vento na superfície

$$v\frac{\partial \vec{v}_H}{\partial z}\bigg|_{\eta} = \tau_w \tag{43}$$

$\vec{v}_H$ é a velocidade horizontal.

A tensão do vento é calculada através de uma função quadrática da forma

$$\tau_w = C_D \rho_a \vec{W}\left|\vec{W}\right| \tag{44}$$

onde C_D *é o coeficiente de arrasto, que é função da velocidade,* ρ_a *é a densidade do ar e* W *é a velocidade do vento a uma altura de* $10\mathrm{m}$ *acima da superfície do mar. No presente trabalho não foi considerado vento (*$W = 0$*).*

- ***Condição de fronteira no fundo***

Da mesma forma, os fluxos advectivos são assumidos nulos no fundo, sendo o fluxo difusivo de momentum estimado através da tensão de fundo, que é calculada adotando-se um método de não escorregamento, com uma dependência quadrática em relação à velocidade próxima ao fundo. Assim, o fluxo difusivo é formulado como

$$v\frac{\partial \vec{v}_H}{\partial z}\bigg|_{-H_0} = C_D \vec{v}_H\left|\vec{v}_H\right| \tag{45}$$

onde C_D *é o coeficiente de arrasto no fundo, que é calculado através da expressão:*

$$C_D = \left(\frac{\kappa}{\log\left(\frac{h+R}{R} \right)} \right)^2 \qquad (46)$$

A dependência quadrática é derivada da relação logarítmica assumida em camadas- limite próximas a fronteiras sólidas, uma vez que as velocidades de fundo estão localizadas a meia altura das células contíguas ao mesmo. Por razões de estabilidade numérica, esse termo é calculado de forma semi-implícita seguindo procedimento descrito por (BACKHAUS, 1985).

Nenhum fluxo de salinidade ou temperatura é considerado no fundo.

- ***Fronteiras sólidas laterais***

Nessas fronteiras o domínio simulado é limitado por terra. Na escala de resolução aqui adotada, essa camada é resolvida de modo que uma condição de impermeabilidade e não-escorregamento pode ser assumida.

$$\frac{\partial \vec{v}_H}{\partial \eta} = 0 \qquad (47)$$

$$\vec{v}.\vec{n} = 0 \qquad (48)$$

No formalismo adotado no método dos Volumes Finitos, essas condições podem ser implementadas de forma direta, assumindo-se como nulos tanto o fluxo normal quanto o difusivo de água através das células que estejam em contato com a terra.

- ***Fronteiras abertas***

Fronteiras abertas emergem da necessidade de se confinar o domínio à uma dada região de interesse. Os valores das variáveis simuladas têm que ser prescritos

nessas fronteiras, de modo a garantir-se que a informação a respeito do que ocorre na região externa ao domínio seja transferida para o interior desse, sem que a solução desejada seja corrompida. Ainda, ondas geradas no interior do domínio têm que ser permitidas a sair do mesmo. Não há condição de fronteira aberta que se possa dizer perfeita, e a mais adequada irá depender do domínio e do fenômeno que se esteja modelando. Alguns tipos de fronteiras já foram introduzidas no MOHID 3D (MONTERO, 1999; SANTOS, 1995) e outras, como o FRS (Flow Relaxation Scheme), estão em desenvolvimento.

- ***Fronteiras Móveis***

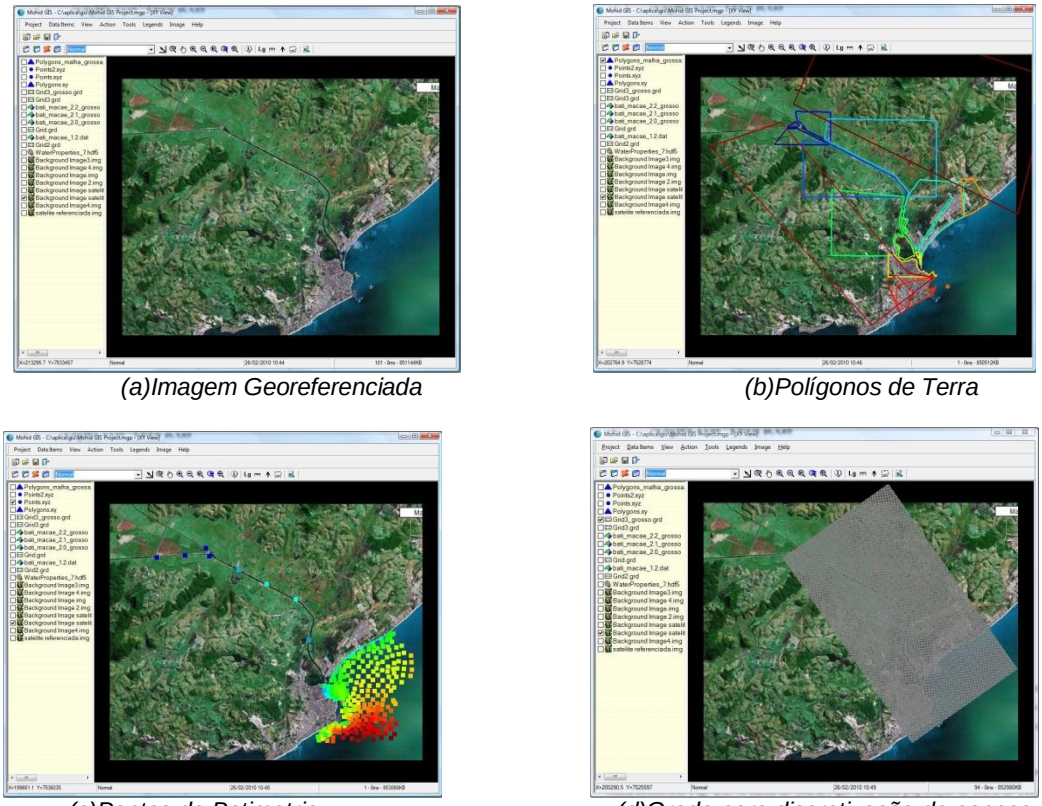
Fronteiras móveis são aquelas que, além de fechadas, mudam de posição com o tempo. Se, por exemplo, há zonas intertidais no interior do domínio simulado, alguns pontos podem, dependendo do estágio da maré, ser cobertos ou não por água. Dessa forma, um algoritmo estável torna-se necessário para se modelar tais zonas e seus efeitos sobre a hidrodinâmica estuarina. Uma exposição detalhada dos algoritmos utilizados no MOHID podem ser encontrada em (MARTINS, 1999; MARTINS et al., 2001).

2.1.4 Interface Gráfica

O simulador MOHID dispõe de um conjunto de ferramentas gráficas que auxiliam o usuário na construção e manipulação dos modelos. Essas interfaces foram desenvolvidas em .net e estão disponíveis para o usuário desde a construção do modelo (MOHID GIS) passando pela manipulação de arquivos de entrada, execução e saída (MOHID GUI) até a visualização gráfica dos resultados (MOHID PosProcessor). Nessa seção descrevem-se essas ferramentas juntamente com o processo de construção do modelo.

MOHID GIS

O MOHID GIS é uma ferramenta gráfica que tem como objetivo transformar informações geográficas em dados discretos do modelo. Por exemplo, gerando o arquivo contendo os dados de informação de batimetria, representada na grade computacional a ser utilizada (Figura 6). A seguir é descrito esse procedimento.



(a)Imagem Georeferenciada *(b)Polígonos de Terra*

(c)Pontos de Batimetria *(d)Grade para discretização do espaço*

Figura 6 - Construção da batimetria.
Fonte: O autor, 2012.

A partir de uma foto georeferenciada (Figura 6(a)) marcam-se os polígonos que delimitam as regiões de terra (Figura 6(b)) e os pontos em que se dispõem da batimetria do local (Figura 6(c)). Assim, a partir da discretização desejada, definida pela grade mostrada na Figura 6(d), o programa gera todos os pontos de batimetria do domínio.

A batimetria gerada por esses pontos pode ser vista na Figura 7. Os dados são salvos em um arquivo que será utilizado pelo módulo GUI para gerar o modelo.

O MOHID GIS pode ainda ser utilizado para determinar as coordenadas computacionais de pontos de interesse no estuário, como estações de medições ou pontos de descarga.

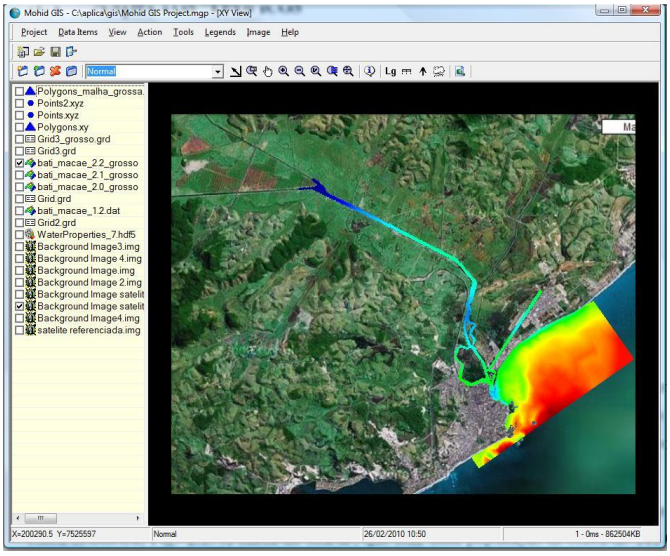


Figura 7 - Batimetria gerada.

Fonte: O autor, 2012.

MOHID GUI

Para organizar a grande quantidade de arquivos utilizada pelos módulos do MOHID foi criado o MOHID GUI. Esta é uma ferramenta gráfica que organiza todos os arquivos e ainda cria automaticamente pastas para guardar os resultados de diferentes configurações de simulação. Na Figura 8 apresenta-se a interface MOHID GUI, na parte ① ficam os arquivos "simulations" e "runs". Cada "simulations" é criada associada a um arquivo de batimetria, criado no MOHID GIS, e um arquivo de maré, que contém as componentes de maré para aquela região. Os "runs" são associadas às "simulations" e têm arquivos de entrada definidos, exibidos na parte ②. Esses arquivos contem as informações adicionais para executar a simulação desejada. A parte ③ é reservada para comentários sobre a "run" selecionada.

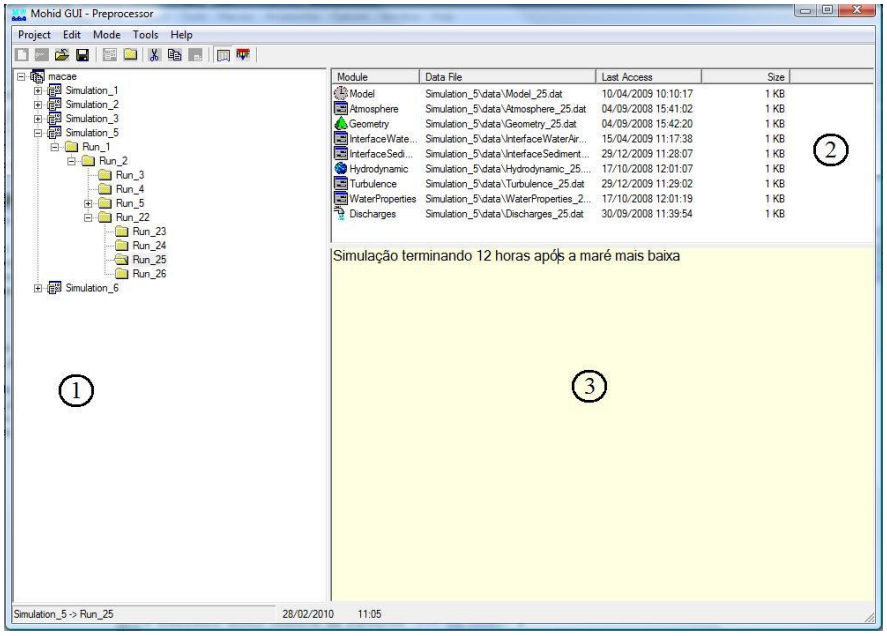


Figura 8 - Interface MOHID GUI.

Fonte: O autor, 2012.

Na guia tool → Launch Mohid abre-se a janela mostrada na Figura 9. Nessa janela pode-se escolher quais as "runs" serão executadas.

Após execução da run pode-se visualizar os arquivos de resultado clicando no botão com as letras MDF no MOHID GUI, Figura 10. Podem ser visualizados resultados dos módulos hidrodinâmicos, qualidade de água e séries de resultados em alguns postos de observação definidos.

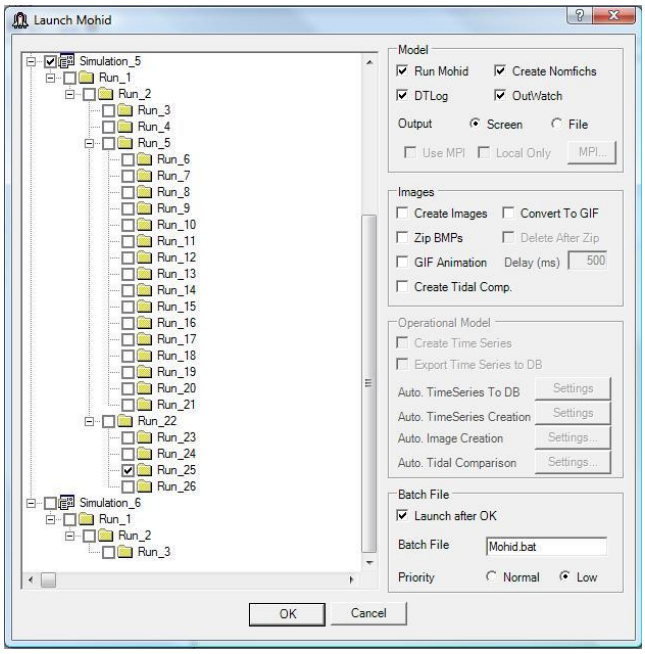


Figura 9 - Interface de execução da simulação.

Fonte: O autor, 2012.

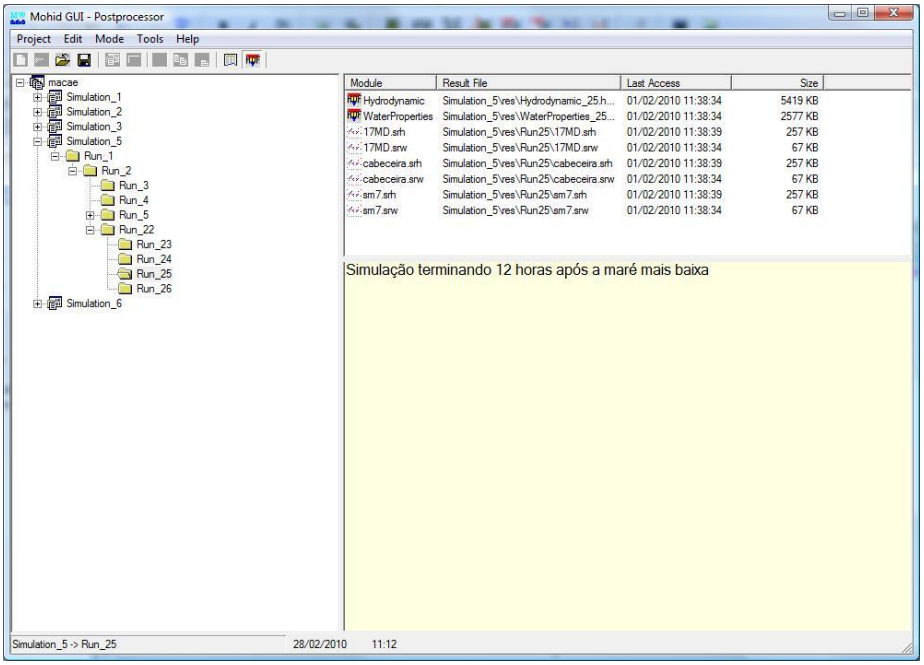


Figura 10 - Interface GUI mostrando os arquivos de saída.

Fonte: O autor, 2012.

Dando um duplo clique em um desses dois módulos abre-se a interface Postprocessor.

MOHID Postprocessor

Para visualização dos resultados graficamente foi criada a interface MOHID Postprocessor, que mostra resultados gerados pelo MOHID através de uma programação em OpenGL.

Na Figura 11 pode-se ver que a resposta do módulo de qualidade de água foi aberta, podendo-se consultar todos os dados referentes a esse módulo. Nesse janela pode-se ainda definir quais os resultados do módulo serão exibidos.

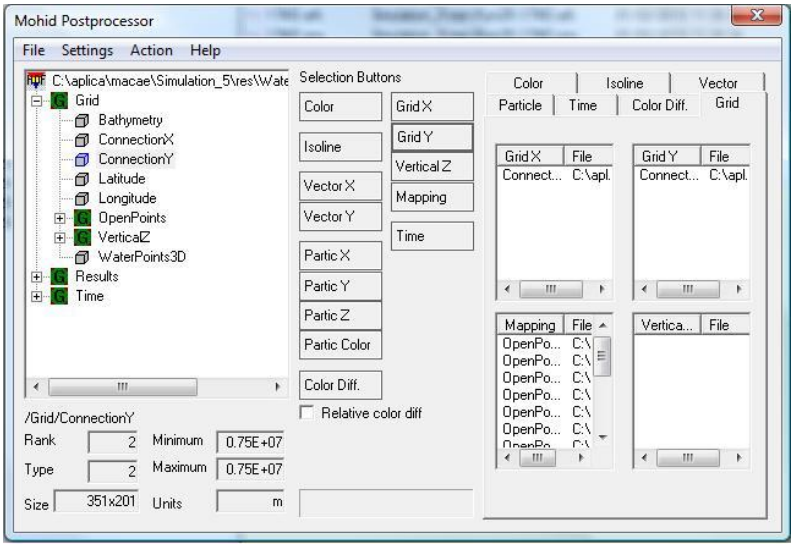


Figura 11 - Interface de pós-processamento do MOHID.

Fonte: O autor, 2012.

A janela de visualização, Figura 12, é aberta em action → run OpenGL. Nessa janela são mostrados os resultados, para cada instante de tempo, exibidos na forma de uma animação. Dessa maneira, é possível identificar pequenas incoerências dos dados.

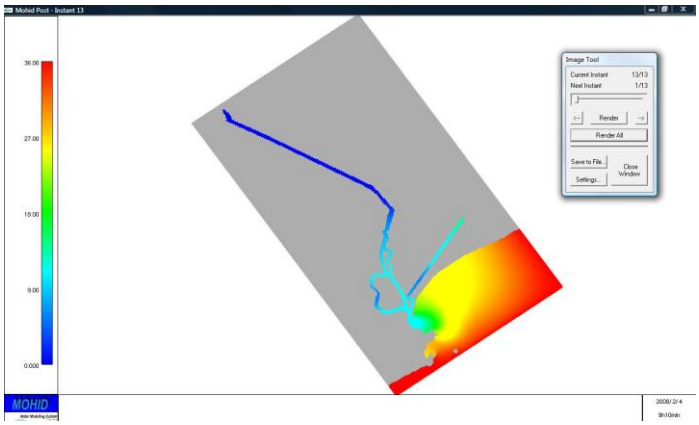


Figura 12 - Interface de visualização do resultado.

Fonte: O autor, 2012.

2.2 ***Estudo de caso: Estuário do Rio Macaé***

Este estudo envolve o desenvolvimento de modelos hidrodinâmicos e de transporte aplicáveis ao estuário do rio Macaé, Modelos estes construídos na plataforma MOHID. A Figura 13 situa este estuário.

Diversas atividades afetam a qualidade da água dos rios da bacia do Macaé, a saber: extração de petróleo e gás, expansão urbana desordenada, agropecuária e agroindústria, além do turismo sem planejamento. Na região superior da bacia os principais impactos sobre a qualidade da água estão relacionados à apropriação indevida de terras públicas ao longo das margens dos rios e consequente erosão devido à destruição ilegal das matas ciliares; à retirada de areia de vários cursos de água; às edificações erguidas nas margens dos rios, principalmente; à poluição por esgotos, lançados principalmente nas vilas de Lumiar e São Pedro da Serra; à precariedade dos sistemas de coleta e tratamento de esgotos; à intensificação de processos erosivos provocados por atividades agropecuárias, obras urbanas e às estradas de terra com taludes e sistemas de drenagem inadequados, acarretando perdas de solo e assoreamento dos corpos hídricos.

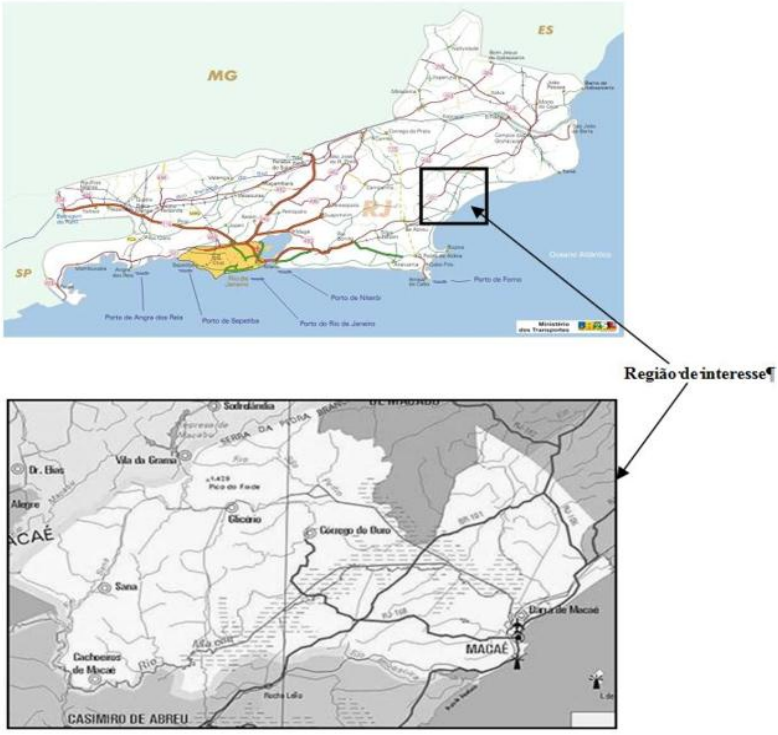


Figura 13 - Localização do estuário e detalhes da região simulada neste estudo.
Fonte: Ministério dos Transportes "http://www.transportes.gov.br/".

Já em seu baixo curso, o rio e seu estuário sofrem remotamente com as interferências oriundas da parte alta da bacia (assoreamento e qualidade de água) e localmente com os impactos causados por uma urbanização desordenada, com efeitos como inundações e perda de qualidade de água. Dessa maneira, são extremamente relevantes estudos ambientais que de maneira conjugada possam contribuir para o presente diagnóstico do baixo Macaé e para previsão de futuros cenários, sendo que modelos matemáticos e computacionais devem ser entendidos como uma dessas ferramentas de avaliação.

2.3 ***Modelagem do problema direto***

Neste trabalho, um modelo do estuário foi construído na plataforma MOHID. O domínio modelado neste estudo compreende todo o estuário do rio Macaé, estendendo-se por 20 km desde a cabeceira até a região externa do estuário, na costa.

Foi adotada uma discretização espacial de 20 m, com base em células quadráticas. Os dados de batimetria da região da costa foram tomados a partir da carta náutica 1507, editado pela Marinha do Brasil em 1974, enquanto a batimetria da região superior foi obtida a partir de (AMARAL, 2003). A Figura 9 mostra o domínio discretizado e a batimetria utilizada.

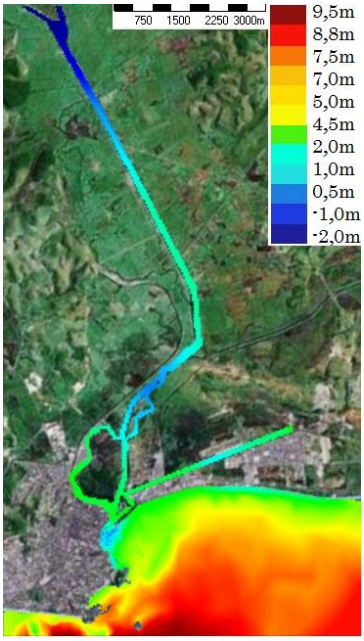


Figura 14 - Batimetria do domínio simulado.
Fonte: O autor, 2012.

Duas condições de contorno foram prescritas para o modelo hidrodinâmico: (i) na fronteira fluvial, na cabeceira do rio, foi definida uma vazão do rio de 7,8 m^3s^{-1}, típica da estação seca para o rio Macaé próximo à região estuarina (AMARAL, 2003); (ii) na fronteira marítima foi simulada uma maré astronômica, com 17 componentes (FEMAR-FUNDAÇÃO ESTUDOS DO MAR, 1974), sendo que a amplitude e fase são apresentadas na Tabela 2.

Tabela 2 - Período e amplitude das componentes adotadas no modelo de simulação de marés.

Componente	Período (s)	Amplitude (m)	Componente	Período (s)	Amplitude (m)
M2	44714,16	0,369	MN4	22569,03	0,012
S2	43200	0,191	MS4	21972,02	0,011
O1	92949,63	0,100	2N2	46459,35	0,010
K1	86164,09	0,059	M1	89399,69	0,009
K2	43082,05	0,054	M3	29809,44	0,004
N2	45570,05	0,046	MO3	30190,69	0,003
Q1	96726,08	0,026	MK3	29437,7	0,002
M4	22357,08	0,024	SN4	22176,69	0,002
P1	86637,21	0,021			

Fonte: O autor, 2012.

O valor adotado para a salinidade na região fluvial foi de $0{,}037\,psu$ *(unidade de salinidade), e na região marinha* $36\,psu$*. Como condição inicial uma salinidade de* $20\,psu$ *foi definida para todo o domínio com uma configuração de velocidades inicialmente nulo, no modelo hidrodinâmico. Sendo assim os testes realizados neste modelo foram obtidos a partir da estabilização da distribuição salina, com resultados apresentados em (LIMA et al., 2008) e (RODRIGUES et al., 2009).*

2.4 ***Resultados da Modelagem do Problema Direto***

A solução das Equações (25) à (27), que compõem o modelo hidrodinâmico descreve a variação temporal do campo de velocidade (u *e* v*) e do nível da superfície livre (*h*). O conhecimento da distribuição destas variáveis é importante por muitos aspectos, como as zonas de erosão e deposição, bem como as possíveis áreas de alagamento. Por outro lado, o transporte advectivo de qualquer substância é regido pelo campo de velocidades e, por último, o próprio volume do estuário pode ser calculado de forma dinâmica, com implicações óbvias sobre a diluição de substâncias que cheguem ao corpo d'água. O modelo hidrodinâmico é geralmente calibrado e validado a partir de dados de superfície livre, não disponíveis até o momento para*

o estuário do Macaé.

A fim de avaliar o comportamento sinótico das variáveis hidrodinâmicas, duas estações de monitoramento virtual foram posicionadas no estuário, afim de, a influência no rio da variação da maré nos extremos do estuário, aqui referidas como estações 1 e 2, localizadas, respectivamente, a $0{,}5$ *e* $9{,}51\ km$ *da cabeceira do estuário, como mostrado na Figura 15.*

Figura 15 - Estações virtuais de monitoramento.

Fonte: O autor, 2012.

As Figuras 16 e 17 mostram a variação sinótica do nível da superfície livre, bem como as componentes longitudinal e transversal da velocidade, calculadas pelo modelo para as estações 1 e 2, respectivamente.

O período de simulação foi de 28 horas, incluindo uma maré de sizígia, que representa a maior amplitude de maré em um determinado período de 28 dias. O limite dinâmico de influência da oscilação do nível do mar está próximo da estação 1, localizada a 0,5 km da cabeceira do estuário. Nesse local não é observada inversão no sinal da componente longitudinal da velocidade , contrastando com os resultados calculados para a estação 2.

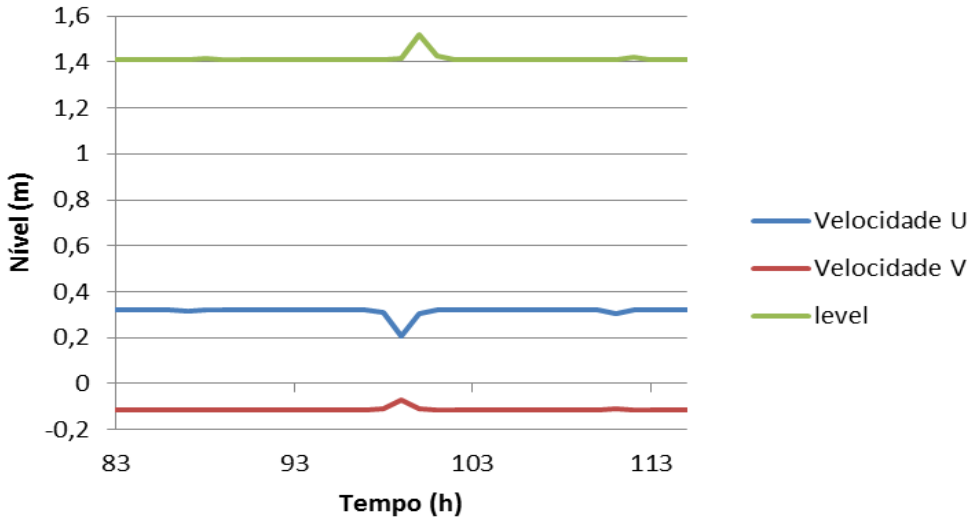


Figura 16 - Resultados hidrodinâmicos na estação de monitoramento 1.

Fonte: O autor, 2012.

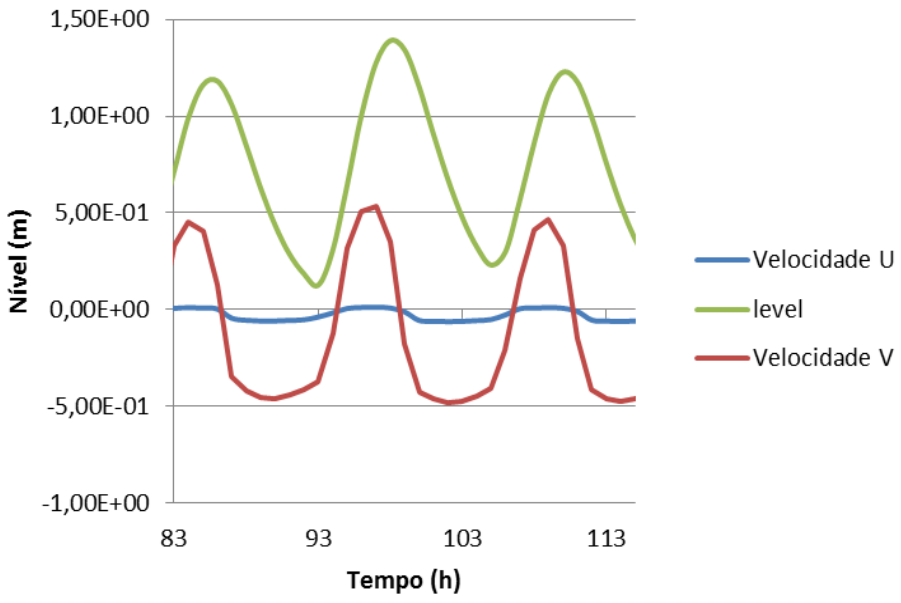


Figura 17 - Resultados hidrodinâmicos na estação de monitoramento 2.

Fonte: O autor. 2012.

2.5 ***Análise de Sensibilidade***

Uma melhor simulação é obtida através do ajuste de parâmetros nas equações que modelam o fenômeno estudado. Aqui há que se distinguir o modelo de transporte, Equação. (30) do modelo hidrodinâmico, esse composto pelas Equações de (25) à (27), do qual o principal termo de ajuste é o termo fonte/sumidouro, aqui representado pela equação de cisalhamento do fundo (Equação (23)). Na expressão que parametriza essa tensão, há muita incerteza com relação ao coeficiente que expressa a altura da rugosidade (R).

Já no modelo de transporte, o ajuste pode ser feito tanto nos coeficientes de difusão (longitudinal e transversal) quanto nas fontes/sumidouros internos (reações) e externos (aportes) (VALLINO; HOPKINSON, 1997). Para substâncias conservativas, no entanto, fontes/sumidouros não são especificadas, e tal é o caso da salinidade.

Como o ajuste dos modelos passa por confrontações com dados reais, a escolha das variáveis a serem utilizadas é uma etapa crítica. No caso do modelo hidrodinâmico, pode-se optar pelas componentes da velocidade ou pela altura da superfície livre, essa muito mais fácil de ser obtida em campo, podendo-se fazê-lo, inclusive, remotamente. Já no modelo de transporte, a variável adotada é sempre a concentração da substância que se deseja simular (HSU et al., 1999; ETEMAD-SHAHIDI; IMBERGER, 2004; ESTRADA et al., 2009). Nesse aspecto surge a necessidade de se fazer uma análise de sensibilidade desses resultados aos parâmetros que se deseja estimar. Esse estudo busca indicar se é possível e qual o melhor dado para estimar certo parâmetro, melhorando assim a resposta dos métodos de otimização, através da variação dos resultados gerados pela variação dos parâmetros dentro do espaço de busca dos mesmos.

De acordo com a classificação apresentada por (ABBOT; BASCO, 1989) a rugosidade do leito de rios e estuários sujeitos a intenso regime deposicional, caso do Macaé, pode variar entre $0{,}007m$ *e* $0{,}05m$*. Por outro lado, o ruído em função da discretização (espaço/tempo) adotada e a estabilidade das soluções implementadas no MOHID impôs uma faixa entre* $0{,}01m^2s^{-1}$ *e* $5{,}0m^2s^{-1}$ *para o coeficiente de difusão turbulenta, sendo bastante ampla, portanto. Os resultados foram simulados considerando-se um período de uma hora de simulação, após o ponto mais baixo da maré.*

A Figura 18 sintetiza o estudo da sensibilidade, e mostra que o nível da água não é sensível aos valores adotados para o coeficiente de difusão. Pode-se obser-

var, ainda, que a salinidade calculada foi influenciada tanto pelos coeficientes de difusão quanto pela rugosidade.

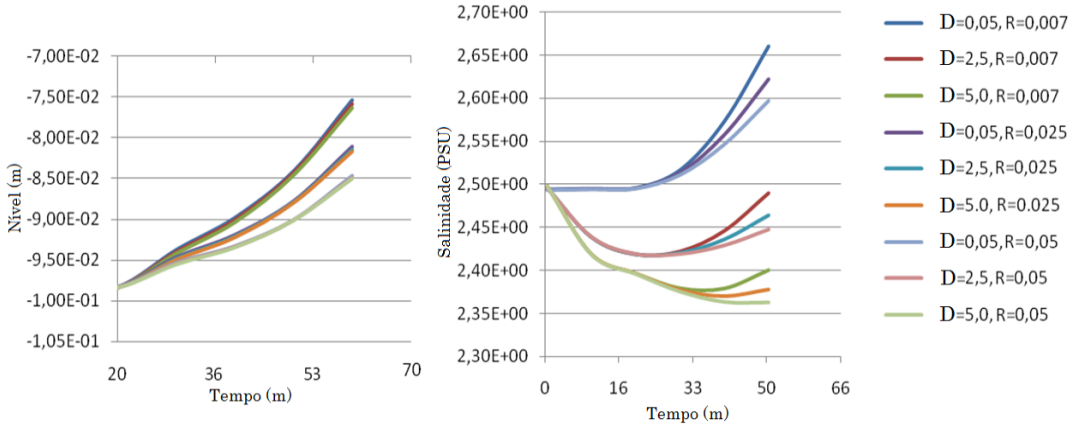


Figura 18 - Resultados obtidos, com diferentes parâmetros, para o nível da água e a salinidade.
Fonte: O autor, 2012.

Esse fato pode ser observado com maior clareza na Figura 19, onde o coeficiente de sensibilidade para o nível da água em relação aos dois parâmetros é comparado. O coeficiente de sensibilidade pode ser calculado pela seguinte equação:

$$X_P^{Y_i}(t_i) = \theta \frac{\partial Y_i(x,y,t_i)}{\partial \theta}, \qquad i = 1,2,\ldots M \tag{49}$$

onde Y_i é a variável observada (nível e salinidade), M é o número de medições e θ é o parâmetro que desejamos observar.

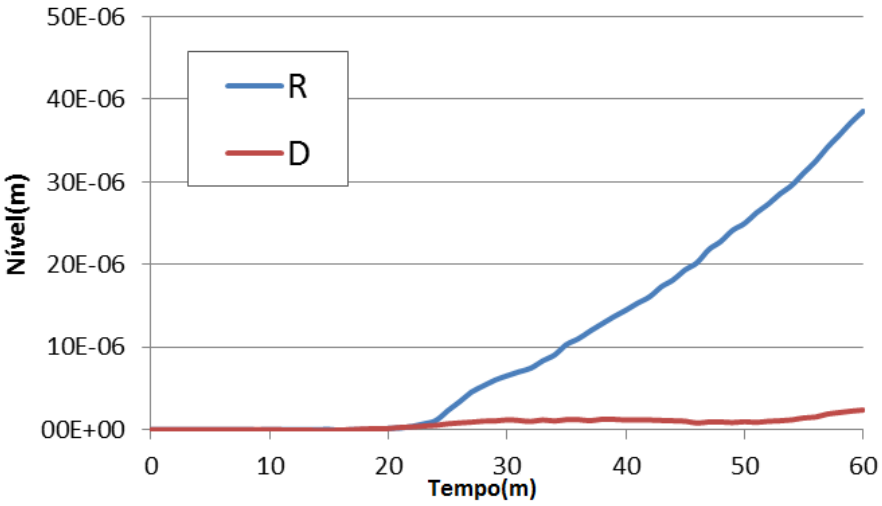


Figura 19 - Coeficiente de Sensibilidade do nível d'água em relação aos parâmetros rugosidade e coeficiente de difusão.
Fonte: O autor, 2012.

Geralmente a sensibilidade da variável observável no que diz respeito aos pa-

râmetros que queremos estimar deve ser suficientemente elevada, a fim de permitir que a estimativa de tais incógnitas dentro de limites razoáveis de confiança. Além disso, quando dois ou mais parâmetros desconhecidos são estimada simultaneamente devem-se garantir que estes não sejam correlacionados, e tal comportamento pode ser deduzido a partir da observação dos coeficientes de sensibilidade, (DOWDING; BLACKWELL, 1999).

Na Figura 20, que mostra o coeficiente de sensibilidade da salinidade em relação aos parâmetros, pode-se observar que a salinidade é sensível tanto à variação do coeficiente de difusão quanto à rugosidade. Nesse gráfico pode-se concluir, ainda, que a salinidade é mais sensível ao coeficiente de difusão turbulenta do que à altura da rugosidade.

Assim, considerando os resultados observados, conclui-se que a salinidade é a variável mais indicada para a obtenção de ambos os parâmetros.

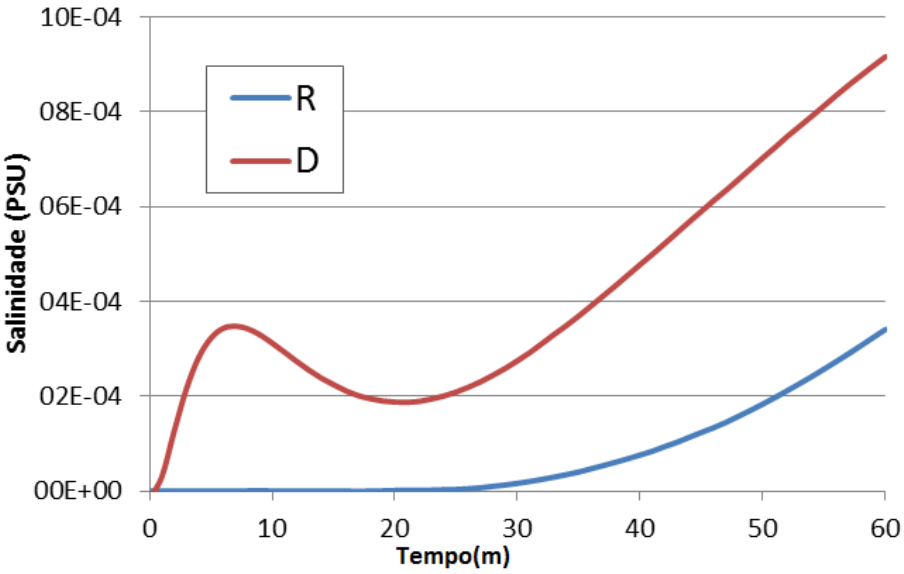


Figura 20 - Coeficiente de Sensibilidade dos parâmetros em relação à salinidade.
Fonte: O autor, 2012.

3 PROBLEMA INVERSO

Na maioria das ciências, particularmente nas áreas de engenharia, existem problemas caracterizados por equações diferenciais associadas com condições iniciais e de fronteira. Quando esses problemas são resolvidos de uma maneira direta, o resultado é geralmente uma relação funcional ou um sistema de equações, que podem ser utilizados para calcular os valores da variável dependente. A solução inversa de um sistema de equações diferenciais parciais constitui um problema complexo, em que não existem métodos universalmente aceitos. Dada uma solução direta, aplicável a um sistema de equações diferenciais parciais, é possível propor um problema inverso como um problema de otimização. Um algoritmo que possa solucioná-lo é sintetizado em (KARR et al., 2000):

- *Suponha uma solução para o problema inverso. Isto pode incluir a suposição de uma condição inicial ou de fronteira, ou um parâmetro típico para um dado problema;*
- *Utilize a suposta condição para a solução direta da equação diferencial parcial, calculando dessa forma valores para a variável dependente Y. Aqui, o resultado da solução direta é um vetor de valores correspondentes aos tempos em que os valores de Y são medidos. Este vetor de soluções será obtido conforme calculado e será representado por $\hat{Y}$;*
- *Compare os valores calculados $\hat{Y}$ com os valores da variável dependente Y medido em tempos consistentes com aqueles para os quais $\hat{Y}$ foi calculado.*

O sucesso dessa abordagem está no mecanismo de atualização da suposta condição que é melhorada na chamada seguinte do primeiro passo. A otimização é o procedimento para atualizar essas suposições sobre as condições.

O procedimento mais aplicado para a medida do erro de predição é a soma dos quadrados dos erros (SSE),

$$SSE(\hat{Y},\hat{\theta}) = \sum_{t_i=1}^{N_T} (Y(t_i) - \hat{Y}(t_i,\hat{\theta}))^2 \qquad (50)$$

onde θ representa o parâmetro a ser estimado e N_T a quantidade de dados experi-

mentais.

O problema inverso aqui formulado implicitamente consiste, portanto, na minimização da função objetivo dada pela Equação (50).

3.1 ***Métodos de Otimização***

Conforme mencionado anteriormente, o problema inverso é aqui formulado como um problema de otimização no qual busca-se minimizar a função objetivo dada pela soma dos resíduos quadrados, entre os valores experimentais e os valores calculados para a variável observável, conforme descrito pela Equação (50).

A seguir são mostrados sucintamente os métodos de otimização empregados neste estudo.

3.1.1 Algoritmos Genéticos (GA)

Os algoritmos genéticos foram desenvolvidos com base nas leis de evolução natural das espécies (HOLLAND, 1975). Esses algoritmos têm sua base filosófica na teoria de Darwin da sobrevivência dos mais adaptados ao meio ambiente, e se baseiam em três operações básicas: seleção, recombinação (ou cruzamento) e mutação:

Seleção*: é a operação responsável por escolher os cromossomos mais aptos, que serão utilizados na próxima geração.*

Recombinação (ou cruzamento)*: nessa operação escolhe-se aleatoriamente um local e troca-se subsequências antes e depois desse local, escolhido entre dois cromossomos da população, para criar dois filhos. Por exemplo, os cromossomos 10000100 e 11111111 podem ser cruzados após a terceira posição em cada um, para produzir a prole 10011111 e 11100100. O operador de recombinação imita, aproximadamente, a recombinação biológica entre dois*

cromossomos;

***Mutação**: é responsável por inserir uma alteração aleatória nos membros da população. Por exemplo, a sequência 00000100 pode ser transformada em 01000100, sofrendo uma mutação na segunda posição. A mutação pode ocorrer em cada posição da sequência de bits com certa probabilidade, geralmente muito pequena (por exemplo, 0,001) (MELANIE, 1999).*

Estes algoritmos devem trabalhar em um intervalo amplo de seus parâmetros, mas com diferenças na eficiência, o que indica a importância da abordagem do programador. Outro aspecto a considerar em um GA é a função objetivo, que oferece informações sobre a qualidade das soluções possíveis para um problema (MELANIE, 1999).

Seleção, recombinação e mutação atuam na formação de uma nova geração na execução de um GA, e são executados até que uma solução satisfatória ou um determinado número de gerações é atingido.

Esses processos podem ser representados no pseudocódigo 1 apresentado a seguir.

Pseudocódigo 1 - ***Algoritmos Genéticos****:*

$t = 0$;

Crie a População Inicial $P(t)$;

Enquanto** o critério de parada não for satisfeito **faça

Avalie a população $P(t)$;

Selecione os indivíduos reprodutores de $P(t)$;

Gere uma nova população $P(t+1)$;

$t = t + 1$;

Fim Enquanto

A criação da população inicial é feita de forma aleatória, obedecendo os limites dos parâmetros a serem estimados. O critério de parada adotado é o número máximo de gerações. No passo de avaliação da população cada individuo é avaliado segundo a função objetivo (Equação (50)) e no passo seguinte os indivíduos com menores valores têm maior probabilidade de serem escolhidos como reprodutores, a

fim de gerar a nova população.

3.1.2 Algoritmo de Colisão de Partículas (PCA)

O PCA em sua estrutura se assemelha ao Simulated Annealing: uma primeira configuração inicial é escolhida e faz-se então uma modificação da configuração antiga para uma nova (KIRKPARTRICK et al., 1983). As duas configurações são comparadas (SACCO et al., 2006). Quanto ao valor da função objetivo, para cada estrutura do vetor d *de incógnitas. Como se tem aqui um problema de minimização, quanto menor o valor da função objetivo, melhor a configuração.*

Se a nova configuração é "aceitável", ela serve como a configuração antiga para a próxima etapa. Caso contrário, o algoritmo continua com uma nova mudança da configuração, a partir da antiga. O PCA também pode ser considerado um algoritmo de Metropolis, porque uma solução de teste pode ser aceita com certa probabilidade, mesmo que esta seja pior que a anterior. Essa aceitação pode evitar a convergência para ótimos locais.

As "perturbações estocásticas" no início do loop são variações aleatórias nos valores de cada variável dentro de suas escalas. Esta se assemelha à perturbação utilizada no Simulated Annealing (AARTS; KORST, 1989).

Se a qualidade ou adequação da nova configuração é melhor do que a adequação da configuração antiga, então a "partícula" é "absorvida", e é realizada então uma pesquisa local à procura de uma solução ainda melhor. A função "Exploration" realiza essa pesquisa local, gerando uma pequena perturbação estocástica da solução dentro de um loop. Caso contrário, se a qualidade da nova configuração é pior do que a configuração antiga, a "partícula" é "espalhada". Por espalhamento entende-se dizer que a nova configuração recebe valores aleatórios entre os limites superior e inferior de cada variável de projeto. A probabilidade de dispersão ($P_{scattering}$*) é inversamente proporcional à sua qualidade, ou seja, uma partícula, com uma estrutura que leve a um valor mais elevado da função objetivo terá uma chance maior de espalhamento.*

Um pseudocódigo do PCA é apresentado a seguir.

Pseudocódigo 2 - ***Particle Collision Algorithms*** *:*

```
Gere uma solução inicial Old_Config;
Best_Fit ← Fit(Old_Config);
Para n = 0 até o número de iterações faça
    Perturbation;
    Se Fit(New_Config) < Fit(Old_Config) então
        Se Fit(New_Config) < Best_Fit então
            Best_Fit ← Fit(New_Config);
            Best_Config ← New_Config;
        Fim Se
        Old_Config ← New_Config;
        Exploration;
    Senão
        Scattering;
    Fim Se
Fim Para
```

Pseudocódigo 2 - Particle Collision Algorithms (Continuação):

Função ***Exploration****:*

```
Para n = 0 até o número de iterações faça
    Small_Perturbation;
    Se Fit(New_Config) < Fit(Old_Config) então
        Se Fit(New_Config) < Best_Fit então
            Best_Fit ← Fit(New_Config);
            Best_Config ← New_Config;
        Fim Se
        Old_Config ← New_Config;
    Fim Se
Fim Para
```

Pseudocódigo 2 - Particle Collision Algorithms (Continuação):
*Função **Scattering**:*

$P_{scattering} \leftarrow 1 - \frac{Best_Fit}{Fit(New_Config)}$;

Se *$P_{scattering}$ < Random(0:1)* ***então***

Old_Config ← Solução aleatória;

Senão

Exploration;

Fim Se

Pseudocódigo 2 - Particle Collision Algorithms (Continuação):
*Função **Perturbation**:*

Para *$i = 0$ até (dimensão do problema -1)* ***faça***

Upper ← Limite_Superior[i];

Lower ← Limite_Inferior[i];

Rnd ← Random(0:1);

New_config[i] ← (3.old_config[i] + (Lower + (Upper-Lower)Rnd))/4;

Se *New_Config[i] > Upper* ***então***

New_Config[i] ← Limite_Superior[i];

Senão

Se *New_Config[i] < Lower* ***então***

New_Config[i] ← Limite_Inferior[i];

Fim Se

Fim Se

Fim Para

Pseudocódigo 2 - Particle Collision Algorithms (Continuação):
*Função **Small_Perturbation**:*

```
Para i = 0 até (dimensão do problema −1) faça
    Upper ← Random(1,0:1,2)*Old_Config[i];
    Se Upper > Limite_Superior[i] então
        Upper ← Limite_Superior[i];
    Fim Se
    Lower ← Random(0,8:1,0)*Old_Config[i];
    Se Lower < Limite_Inferior[i] então
        Lower ← Limite_Inferior[i];
    Fim Se
    Rnd ← Random(0:10);
    New_config[i] ← old_config[i]+((Upper-old_config[i]).Rnd);
    New_config[i] ← New_config[i] - ((old_config[i]-lower).(1-Rnd));
Fim Para
```

3.1.3 Luus-Jaakola

Este método foi apresentado em (LUUS; JAAKOLA, 1973) e sua idéia central consiste em: considerar uma região ampla que englobe os possíveis valores das variáveis (valores factíveis) e gerar soluções aleatórias enquanto a região de busca torna-se menor ao longo das iterações. Esse esquema pode ser visto no Pseucódigo abaixo.

Pseudocódigo 3 - LJ:
Algoritmo ***Luus-Jaakola****:*

Escolha um espaço inicial de busca r^0

Gere uma solução inicial X^*

Para i *de 1* ***até*** n_{out} ***faça***

  Para j *de 1* ***até*** n_{in} ***faça***

    $X_j \leftarrow X^* + Rd_j r_{i-1}$

    Se $Fit(X_j) < Fit(X^*)$ ***Então***

      $X^* \leftarrow X_j$

    Fim Se

  Fim Para

  $r_i = (1-\varepsilon) r_{i-1}$

Fim Para

Onde n_{out} *e* n_{in} *são os números de iterações externas e internas, respectivamente, escolhidas previamente,* Rd_j *é uma matriz diagonal de números aleatórios no intervalo* $[-0{,}5;0{,}5]$ *e* ε *é o coeficiente de contração do espaço de busca.*

3.1.4 Particle Swarm Optimization (PSO)

No artigo (KENNEDY; EBERHART, 1995) foi proposto um método de otimização que faz alusão à busca de comida por um enxame. A ideia desse algoritmo é utilizar a experiência absorvida por cada partícula do enxame a fim de determinar suas direções e velocidades, através da seguinte equação:

$$\begin{aligned} vel_part_{ij} &= c_1 * Rand * vel_part_{ij} + \\ & c_2 * Rand * (best_Part_Pos_{ij} - Pos_Part_{ij}) + \\ & c_3 * Rand * (best_Pos_j - Pos_Part_{ij}) \end{aligned} \qquad (51)$$

onde vel_part_{ij} *é a velocidade,* Pos_part_{ij} *a posição e* $best_Part_Pos_{ij}$ *a melhor posição da partícula* i *na dimensão* j *.* $Rand$ *é um número aleatório entre zero e um,* $best_Pos_j$ *é a melhor posição na dimensão* j *entre todas as partículas e* c_1, c_2 *e* c_3 *são constantes previamente definidas, chamadas constantes de inércia.*

Pseudocódigo 4 - PSO:
***Particle Swarm Optimization**:*

Inicie posição das partículas
Inicie velocidade das partículas
Para k *de 1* ***até*** n_{out} ***faça***
  Para i *de 1* ***até*** n_part ***faça***
    Para j *de 1* ***até*** $n_\dim$ ***faça***
      Atualize as velocidades (Eq (51))
      $Pos_Part_{ij} \leftarrow Pos_Part_{ij} + Vel_Part_{ij}$
      Trate colisão com limites
      Se $Fit(part_i) < Fit(best_part_i)$ ***Então***
        $best_part_i \leftarrow part_i$
        Se $Fit(part_i) < Fit(best)$ ***Então***
          $best \leftarrow part_i$
        Fim Se
      Fim Se
    Fim Para
  Fim Para
Fim Para

Como as velocidades e posições são iniciadas aleatoriamente, busca-se obter uma boa amostra de todo o espaço de busca e fazer com que pelo menos umas das partículas encontre o ótimo, de forma eficiente.

No Pseudocódigo 4 n_{out} *é o número de iterações para se obter o resultado,* n_part *é o número de partículas consideradas e* $n_\dim$ *a dimensão do espaço de busca. Pode-se ver que a posição da partícula é atualizada através da velocidade calculada pela Equação (51). Se o valor da função objetivo nessa nova posição*

($Fit(part_i)$) for melhor que o melhor valor encontrado por esta partícula ($Fit(best_part_i)$), seus dados atuais são salvos em $best_part_i$. Caso este valor seja melhor que todos os valores já encontrados ($Fit(best)$) seus dados serão salvos em $best$.

3.2 ***Redes Neurais Artificiais (RNA)***

Redes Neurais Artificiais são modelos matemáticos, de inteligência computacional, que têm sua estrutura baseada nas redes neurais biológicas, tentando assim, extrair a capacidade que estas têm de aprender e generalizar. Isso é feito através das estruturas básicas das redes neurais, os neurônios (Figura 21).

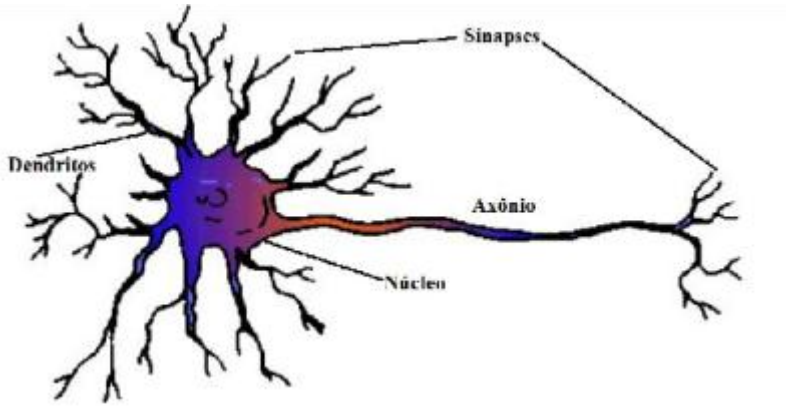


Figura 21 - Neurônio Biológico.
Fonte: Universidade Católica de Pelotas
"http://paginas.ucpel.tche.br/~mflessa/bi10.html"

Assim, os neurônios artificiais podem ser esquematizados como visto na Figura 22, onde d_i, com i de 1 até n, são os sinais de entrada do neurônio. A esses sinais são multiplicados pesos, representando as sinapses, e são somados. O sinal de saída é passado por uma função, chamada de função de ativação.

Matematicamente a saída de um neurônio pode ser definida como

$$out = f\left(\sum_{i=1}^{n} \overline{w}_i d_i\right) \tag{52}$$

onde $\overline{w}_i$ *representam os pesos sinápticos.*

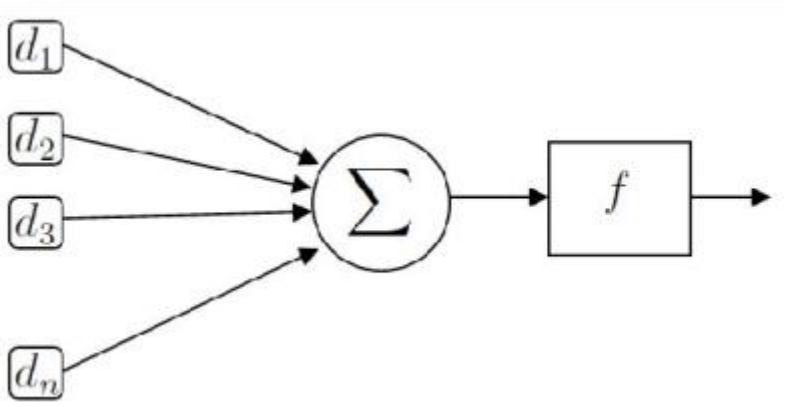


Figura 22 - Neurônio Artificial.
Fonte: O autor, 2012.

A escolha dos pesos é feito por um processo chamado de treinamento. Nesse, dois conjuntos são usados, um para a entrada dos dados chamados de padrões, e um para a saída, chamados de alvos. Nesse processo, os padrões são passados pela rede e os pesos são ajustados para que o resultado seja o alvo esperado. O tipo mais comum de rede neural a usar nesse tipo de treinamento é o perceptron, (BISHOP, 1995).

O Perceptron mais comum consiste de uma camada de entrada conectada por caminhos com pesos, associados a cada neurônio, fixos. A regra de treinamento do percepetron usa um ajuste iterativo dos pesos que é repetido até a convergência destes, ou seja, até que, dado um padrão, a rede retorne como resultado, o alvo esperado.

Na década de 70 foi demonstrado que uma rede tipo perceptron de uma camada não era capaz de identificar e classificar conjuntos que não fossem linearmente separáveis e as Redes Neurais Artificiais caíram no esquecimento até meados da década de 80. Nessa década, dois trabalhos independentes, de (PARKER, 1985) e (LE CUN, 1986), apresentaram um método de treinamento que atualizava os pesos

sinápticos através de uma propagação do erro no sentido oposto ao da rede (Back-propagation). Com esse método foi possível criar redes com múltiplas camadas, acabando com suas restrições, fazendo com que as redes neurais ficassem em evidência novamente, (FAUSETT, 1994).

3.3 ***Implementação do Problema Inverso***

O problema inverso foi modelado com o objetivo de utilizar resultados obtidos em somente uma única estação em um curto período de tempo. O fluxograma do esquema adotado na solução do problema inverso pode ser visualizado na Figura 23.

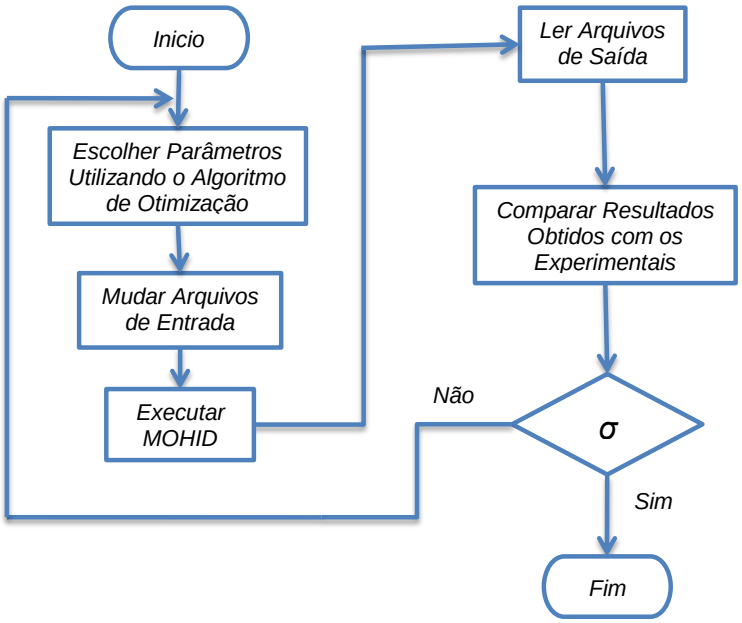


Figura 23 - Fluxograma Problema inverso.

Fonte: O autor, 2012.

Os dados de entrada do MOHID são identificados com uma palavra chave dentro dos respectivos arquivos de dados. Com isso, para modificar os arquivos de entrada, a fim de modificar os parâmetros a serem estimados, necessita-se saber somente quais são os arquivos onde estão estes parâmetros e suas respectivas palavras chave.

Para executar o MOHID é necessário copiar o arquivo "nonfiche.dat" do "Run"

que se está utilizando para a mesma pasta do executável, com o que o programa pode direcionar os arquivos de entrada. A partir disso pode-se fazer uma chamada, via linha de comando. Utilizou-se a função "system" do Fortran para automatização desse passo.

Os resultados do MOHID são gravados em colunas no arquivo de saída. Então, para extrair os resultados, basta saber somente em qual coluna está o resultado desejado. Com isso é calculado o somatório do erro quadrático do resultado contra os dados experimentais, sendo este o resultado utilizado pelo algoritmo de otimização, como valor da função objetivo. O procedimento é repetido até que uma condição de parada σ *(definida pelo método de otimização) seja satisfeita.*

Em todos os casos considerados neste trabalho, o número de dados experimentais é superior ao número de incógnitas. Sendo assim, o problema inverso é aqui formulado como um problema de otimização de dimensão finita, onde se procura minimizar a norma dada pela soma dos resíduos quadrados ponderada, em função da escolha do vetor de parâmetros.

No caso da Rede Neural, os padrões foram gerados pelo MOHID, e só então entregues ao programa de treinamento da rede. Uma vez a rede treinada basta então aplicar um sinal teste à entrada da rede e obter o resultado da solução do problema inverso, como pode ser observado na Seção 4.6.

4 **RESULTADOS**

Nesse Capitulo apresentam-se os resultados obtidos com o problema inverso para os diferentes métodos de otimização escolhidos. Os resultados encontrados são comparados levando em consideração um número fixo, aproximado, de chamadas à função objetivo.

4.1 **Casos Teste**

Na falta de dados experimentais reais, a estimação dos parâmetros foi testada usando dados sintéticos obtidos com o modelo desenvolvido no MOHID, adotando-se 2,5 m^2s^{-1} *para os coeficientes de difusão turbulenta e 0,025* m *para a altura da rugosidade, aplicando-se os métodos de Algoritmo Genético, Particle Collision Algorithms, Luus-Jaakola, Particle Swarm Optimization e Redes Neurais Artificiais. Com a região de busca variando de* $0{,}007m$ *a* $0{,}05m$ *para* R *e de* $0{,}1m^2s^{-1}$ *a* $5{,}0m^2s^{-1}$ *para* D*.*

Para avaliar a estabilidade da estimação com redes neurais foram definidos testes nos extremos e no centro do intervalo de busca dos outros métodos, totalizando 5 casos de teste, como mostrado na Tabela 3.

Tabela 3 - Casos teste.

Casos teste	*Rugosidade* (m)	*Coef. de Dif.* $(m^2 s^{-1})$
1	*0,007*	*0,1*
2	*0,007*	*5,0*
3	*0,05*	*0,1*
4	*0,05*	*5,0*
5	*0,025*	*2,5*

Fonte: O autor, 2012.

4.2 ***Algoritmos Genéticos***

Foram utilizados 60 valores de salinidade obtidos em um período de 1 hora de simulação. Utilizaram-se 30 gerações, com 5 indivíduos cada, com a probabilidade de cruzamento de 50% e 4% de mutação.

Os resultados mostrados a seguir representam o erro percentual de estimação da salinidade, dado por

$$E(t) = \frac{|Sl(t) - \overline{Sl}(t)|}{Sl(t)} \tag{53}$$

onde $Sl(t)$ *é a salinidade experimental e* $\overline{Sl}(t)$ *a salinidade calculada no instante* t*.*

Na Figura 24 é mostrada a evolução no tempo do erro, utilizando-se os valores obtidos para a simulação de 1 *hora. A estimativa obtida para os parâmetros foi de 2,5961x*$10^{-2} m$ *para a rugosidade e de 2,4921* $m^2 s^{-1}$ *para o coeficiente de difusão.*

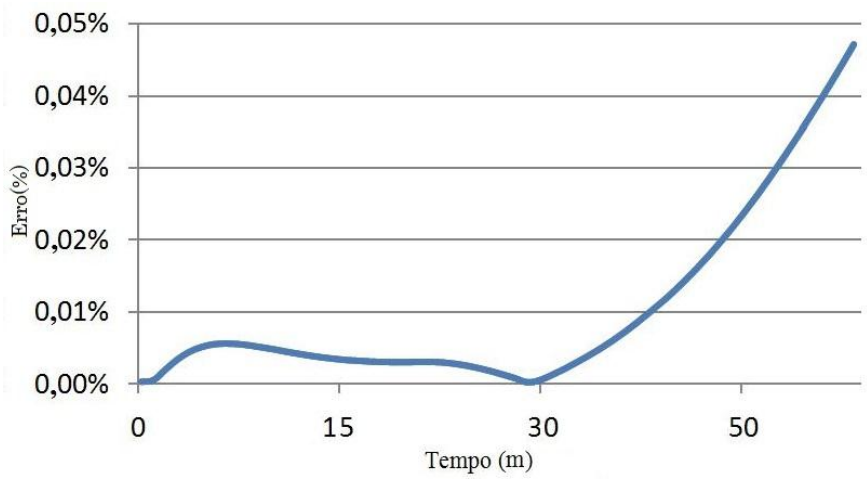


Figura 24 - Erro do resultado em 1 hora com parâmetros estimados com 1 hora de simulação.
Fonte: O autor, 2012.

Uma vez que o erro tende a aumentar com o tempo, foram utilizados os mesmos parâmetros estimados em comparação com os originais, após 12 horas de simulação (Figura 25). Pode-se ver que, mesmo utilizando um período de tempo muito maior para a estimativa do parâmetro, o erro não atinge 1%, mostrando que esta abordagem é, de fato, eficiente.

Para avaliar a robustez do método, um ruído foi adicionado aos dados simulados. Um ruído de 4% é considerado normal para este tipo de medida. Na Figura 26 é mostrada a comparação entre o resultado original e os dados com ruído de 4%.

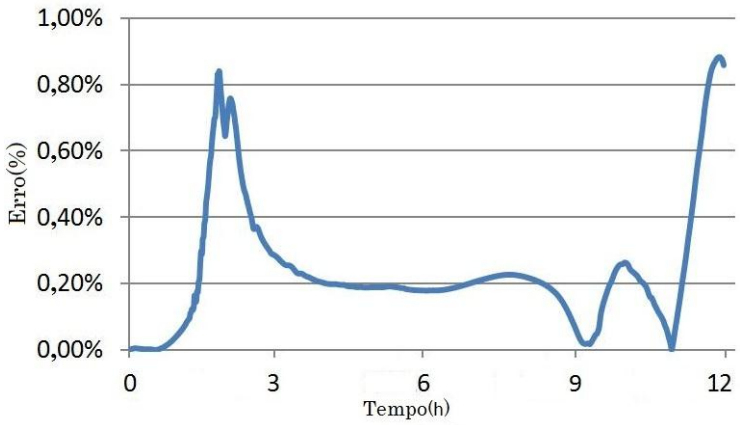


Figura 25 - Erro do resultado em 12 horas com parâmetros estimados com 1 hora de simulação.
Fonte: O autor, 2012.

Devido à pequena amplitude de variação da salinidade no período de 1 hora, o ruído adicionado tem um efeito muito sensível sobre os valores simulados para essa variável. Por esse motivo, a estimativa de parâmetros neste exemplo mostrou-se de baixa eficiência, resultando em 4,3906x $10^{-2} m$ *para a altura da rugosidade e 1,7976* $m^2 s^{-1}$ *para o coeficiente de difusão, onde o valor esperado era de 2,5x* $10^{-2} m$ *e 2,5* $m^2 s^{-1}$*, respectivamente, com um erro de estimação acima de 75% no caso da altura da rugosidade. Por esta razão, o período de simulação foi aumentado para 2 horas (Figura 27).*

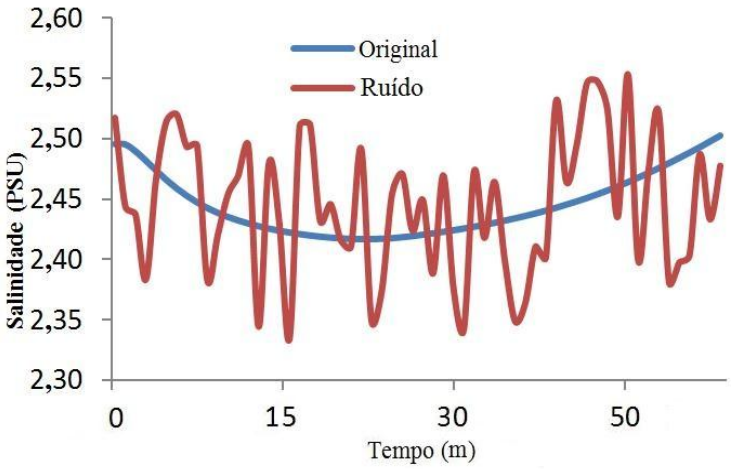


Figura 26 - Comparação da salinidade com e sem ruído em 1 hora.
Fonte: O autor, 2012.

Na Figura 28 é apresentado o erro relativo de uma simulação de 12 horas usando os valores estimados. Pode-se observar que o erro ocasionado pela aplicação do ruído não é significativamente maior, estando abaixo de 1,2%.

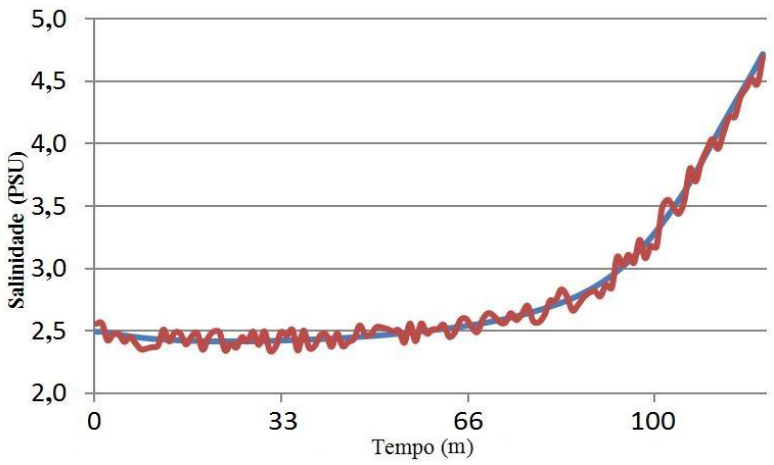


Figura 27 - Comparação da salinidade com e sem ruído em 2 horas.

Fonte: O autor, 2012.

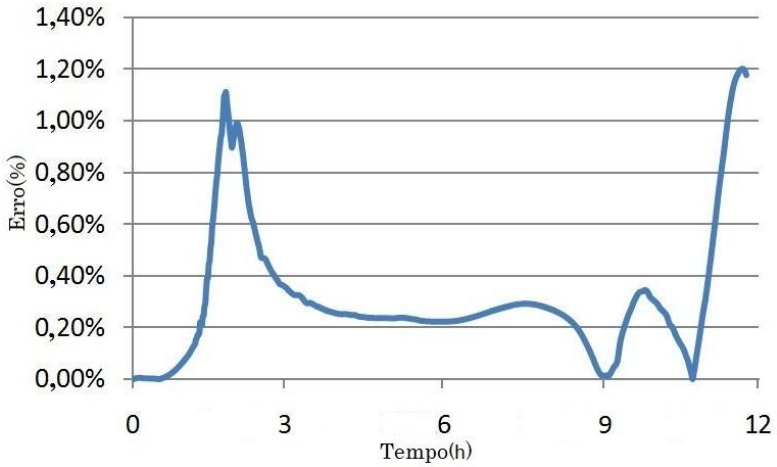


Figura 28 - Erro do resultado em 12 horas com parâmetros estimados com 2 horas de simulação, usando um sinal com 4% de ruído.
Fonte: O autor, 2012.

Esses resultados foram apresentados em (LIMA et al., 2009b).

4.3 ***Algoritmo de Colisão de Partículas(PCA)***

Os testes com o PCA foram realizados com 30 iterações para o loop externo, tendo-se variado o número de iterações adotadas no loop dentro do exploration, com

o objetivo de avaliar seu desempenho, (LIMA et al., 2009a).

Foram realizados testes com 5, 7 e 10 loops no exploration (Pseudocódigo 2, seção 3.1.2) e a seguir são mostrados os melhores, piores e resultados médios encontrados, em um total de 10 avaliações, para cada um desses testes.

A Figura 29 mostra os resultados encontrados com 5 loops no exploration usando um sinal de 1 hora sem ruído. Pode-se observar que apesar do pior resultado apresentar um erro muito grande, o melhor e o resultado médio obtiveram resultados parecidos, permanecendo com erro inferior a 0,7 %. Isso se deve ao fato de que somente 2 resultados foram efetivamente ruins, enquanto que o restante permaneceu próximo ao resultado médio.

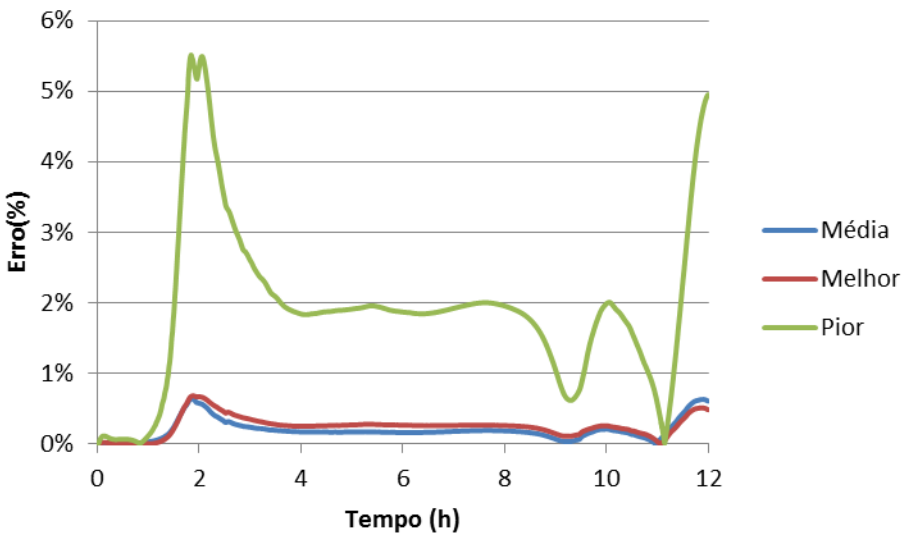


Figura 29 - Erro de estimação dos parâmetros usando PCA com 5 loops no exploration e sem ruído no sinal.
Fonte: O autor, 2012.

Utilizando 7 loops no exploration, percebeu-se uma grande melhora no melhor resultado encontrado e somente uma pequena melhora no pior e no resultado médio, Figura 30.

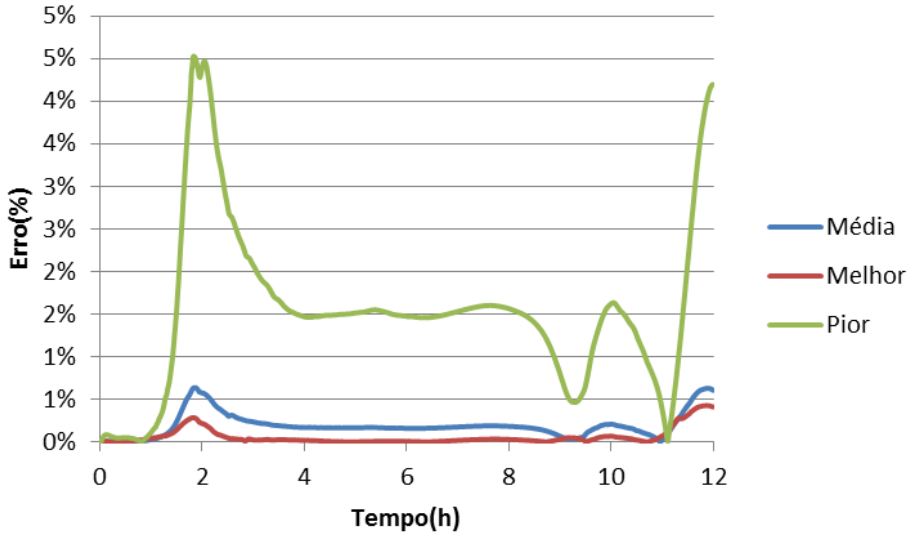


Figura 30 - Erro de estimação dos parâmetros usando PCA com 7 loops no exploration e sem ruído no sinal.
Fonte: O autor, 2012.

Os resultados encontrados quando foram utilizados 10 loops no exploration são mostrados na Figura 31. Nesse caso a piora nos resultados foi sensível, o que pode ter sido causado por um pequeno número de acessos à função exploration em uma das 10 estimações, gerando assim um resultado muito distante dos demais.

Como no GA, utilizou-se um sinal com ruído de 4% para testar o método, e como naqueles testes, o sinal foi tomado em duas horas de simulação a partir da maré mais baixa.

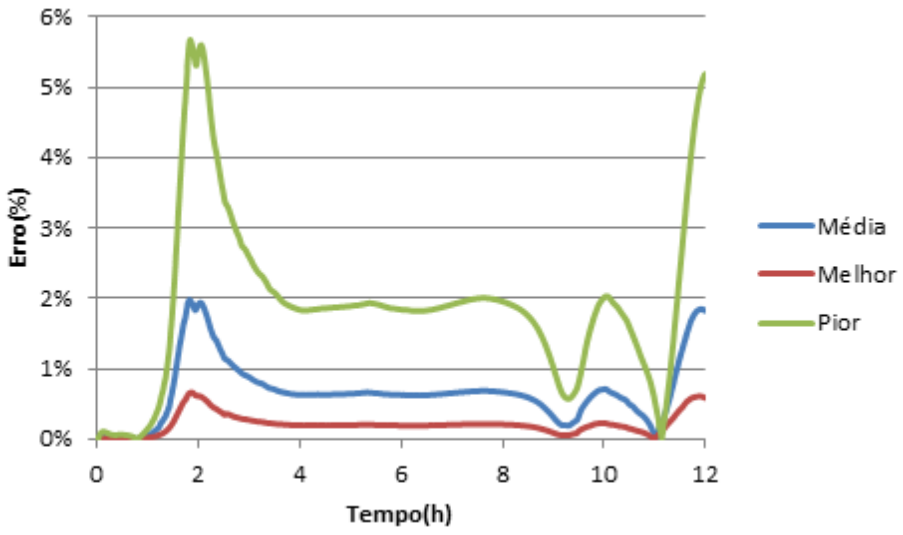


Figura 31 - Erro de estimação dos parâmetros usando PCA com 10 loops no exploration e sem ruído no sinal.
Fonte: O autor, 2012.

O resultado para 5 loops do exploration ficou muito ruim para o pior caso, como pode-se observar na Figura 32. Percebe-se, ainda, que, apesar do pior resultado ter um erro muito grande, o resultado médio apresentou um erro abaixo de 2%.

Diferentemente dos resultados encontrados quando utilizou-se um sinal sem ruído, a resposta dos testes usando 7 loops apresentou resultados piores do que os obtidos com 5 loops, Figura 33.

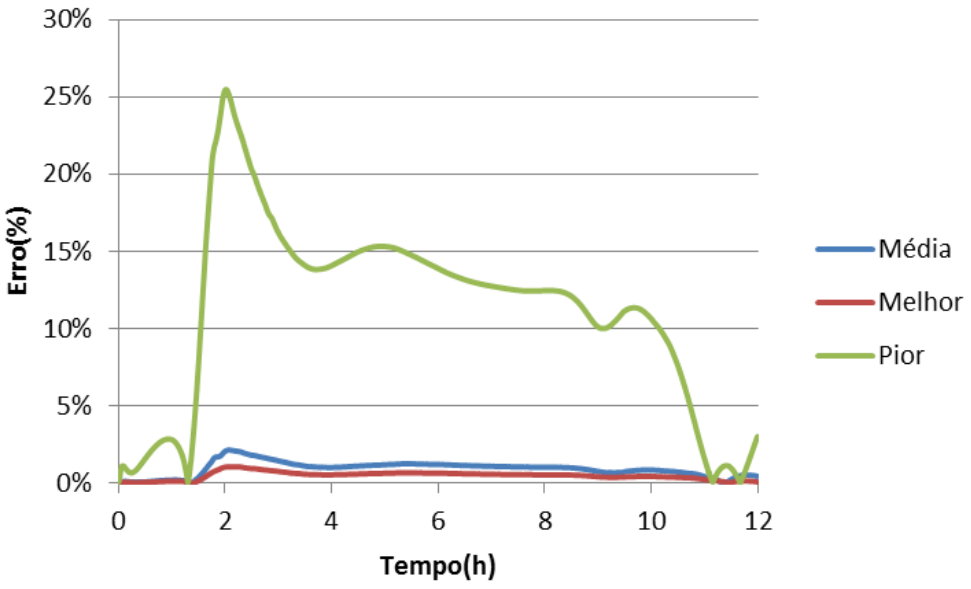


Figura 32 - Erro de estimação dos parâmetros usando PCA com 5 loops no exploration e com ruído de 4% no sinal.
Fonte: O autor, 2012.

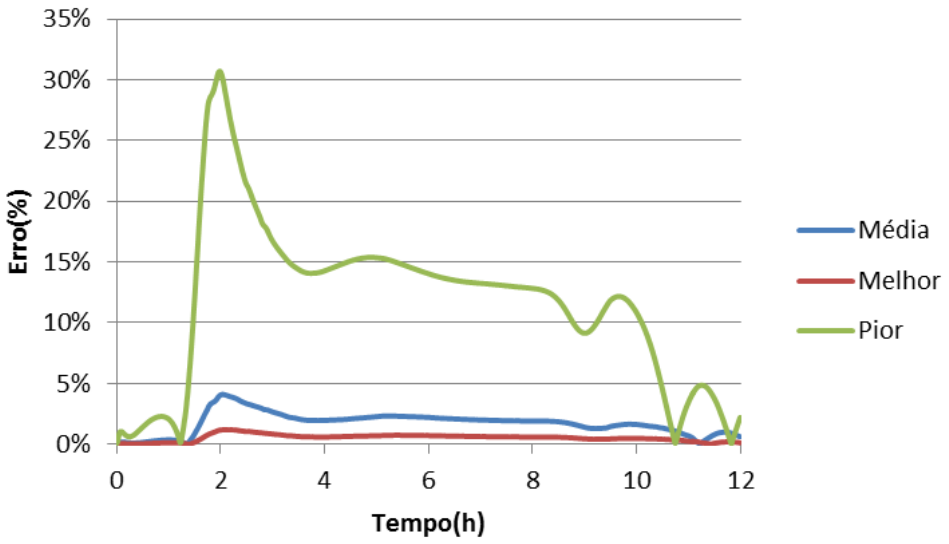


Figura 33 - Erro de estimação dos parâmetros usando PCA com 7 loops no exploration e com ruído de 4% no sinal.
Fonte: O autor, 2012.

Para esse caso, quando testou-se com 10 loops, os resultados melhoraram significativamente, Figura 34, com erros abaixo de 1,2% no melhor e no resultado médio.

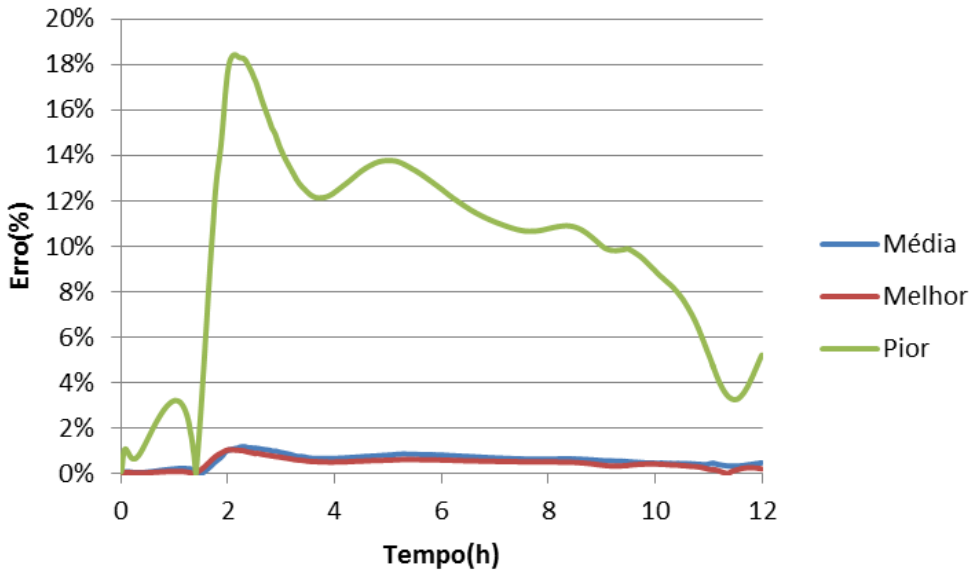


Figura 34 - Erro de estimação dos parâmetros usando PCA com 10 loops no exploration e com ruído de 4% no sinal.
Fonte: O autor, 2012.

4.4 ***Algoritmo Luus-Jaakola***

Com o objetivo de manter o mesmo número de chamadas à função objetivo adotado nos demais métodos, optou-se por utilizar $n_{out} = 30$ *e* $n_{in} = 5$ *para o número de loops externos e internos, respectivamente, no método de Luus-Jaakola. O coeficiente de contração utilizado foi de* $\varepsilon = 0{,}05$ *(Pseudocódigo 3, seção 3.1.3) e como nos outros testes foram realizados 10 testes de obtenção dos parâmetros, a fim de se verificar a estabilidade das respostas do método.*

Na Figura 35 são mostrados os erros, em 12 horas, na obtenção da salinidade com os parâmetros encontrados (melhor, pior resultado e média) pelo método LJ, utilizando um sinal sem ruído de uma hora. Esses mesmos resultados obtidos com um sinal de duas horas com ruído de 4% são mostrados na Figura 36. Na obtenção dos parâmetros com o sinal sem ruído pode-se observar que o erro manteve-se abaixo de 2% e que no caso com ruído o erro, no pior caso, atingiu um valor máximo próximo de 2,5%.

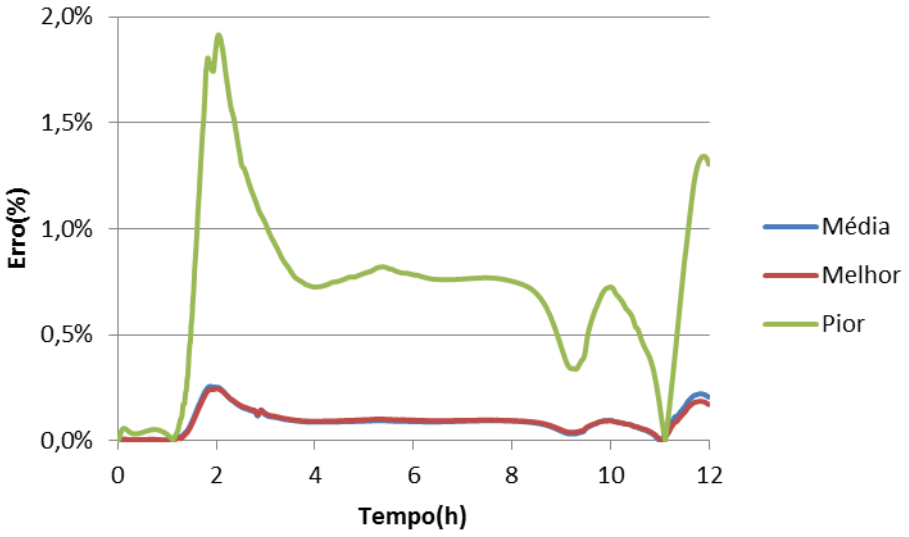


Figura 35 - Erro de estimação dos parâmetros usando LJ com sinal sem ruído.
Fonte: O autor, 2012.

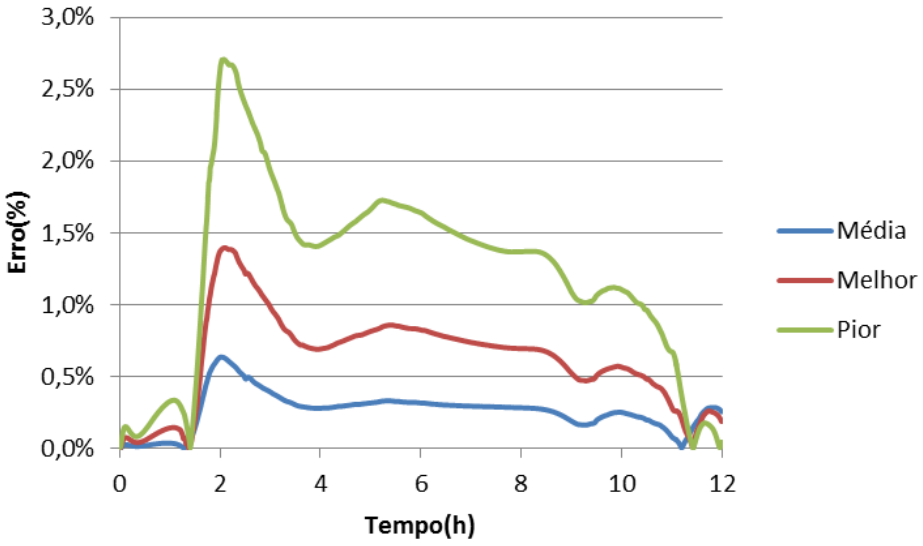


Figura 36 - Erro de estimação dos parâmetros usando LJ com ruído de 4% no sinal.
Fonte: O autor, 2012.

4.5 ***Particle Swarm Optimization (PSO)***

Diferentemente dos outros métodos, que refinam o resultado quanto maior o número de iterações, o PSO depende mais do número de partículas e menos do

movimento dessas. Por esse motivo adotaram-se 10 partículas ($n_part = 10$) em um total de 15 movimentações por partícula ($n_{out} = 15$), que difere da configuração 5/30, adotada nos métodos (GA, PCA e LJ). As constantes de inércia utilizadas foram $c_1 = 0{,}6$, $c_2 = 2$ *e* $c_3 = 2$.

Os resultados obtidos com essa configuração, utilizando um sinal sem ruído, apresentaram um alto desempenho, atingindo o valor exato em alguns casos. Apesar disso, no pior resultado os erros atingiram 6%, valor este acima do encontrado no pior caso do LJ (Figura 37). Em compensação, quando utilizou-se um sinal com ruído de 4% (Figura 38), o pior caso se manteve com erro abaixo de 6% e os demais, melhor e médio, se mantiveram com erros abaixo de 1,2%. Esses resultados mostram que o PSO tem a capacidade de atingir sua meta em poucas iterações, desde que se utilize um bom número de partículas. Mas como essas partículas têm posição e velocidade escolhida aleatoriamente, existe a chance de que nenhuma partícula passe pelo ótimo, levando a resultados indesejáveis.

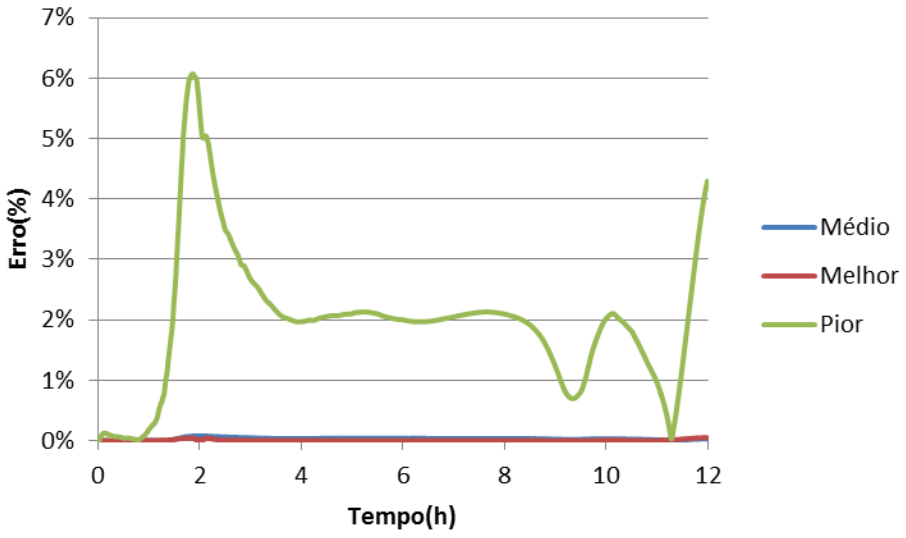


Figura 37 - Erro de estimação dos parâmetros usando PSO com sinal sem ruído.
Fonte: O autor, 2012.

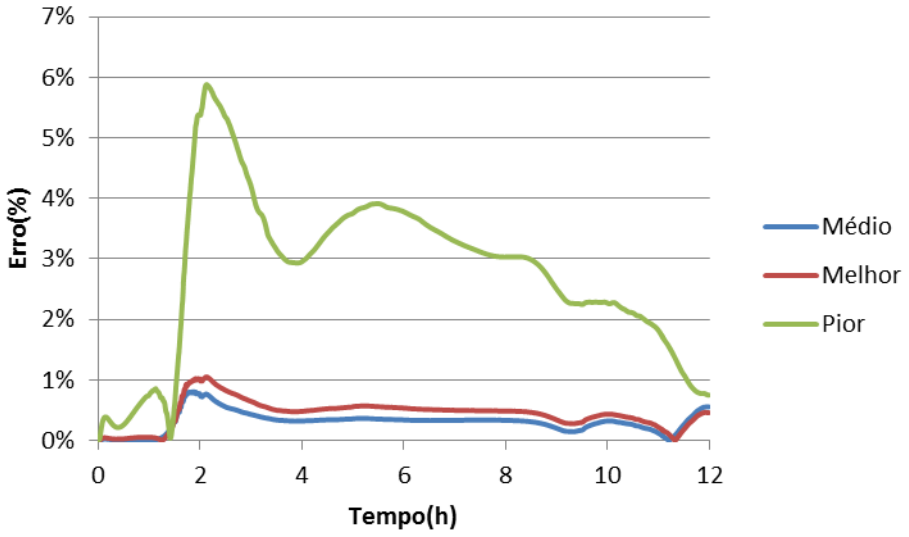


Figura 38 - Erro de estimação dos parâmetros usando PSO com ruído de 4% no sinal.
Fonte: O autor, 2012.

4.6 ***Redes Neurais Artificiais***

A variação da salinidade, durante duas horas de simulação, foi escolhida como o dado de entrada da rede neural. Assim, a rede foi treinada com padrões gerados da seguinte forma: a) 10 valores de R*, variando de* $0{,}007m$ *a* $0{,}05m$ *e 10 valores para* D*, variando de* $0{,}1m^2s^{-1}$ *a* $5{,}0m^2s^{-1}$*, gerando 100 padrões de treinamento; b) para cada padrão foram gerados cinco novos padrões, incluindo ruídos artificiais de 1%, 2%, 3%, 4% e 5%, totalizando 500 novos padrões de treinamento. Com isso, a rede foi definida com 60 neurônios de entrada e 2 de saída. Os dados de entrada, dessa rede representam 60 valores de salinidade, medidos em uma estação durante um período de duas horas a partir do ponto mais baixo da maré, enquanto os valores de saída são a altura da rugosidade e o coeficiente de dispersão turbulenta, respectivamente. A Figura 39 mostra o esquema da rede neural utilizada.*

O valor dos neurônios de saída foram normalizados para terem suas respostas no intervalo de -1 a 1, possibilitando assim a escolha de tangente hiperbólica como função de ativação na última camada.

Utilizou-se o MatLab para treinar duas RNA, uma com 3 e outra com 5 cama-

das, ou seja 1 e 3 camadas escondidas, respectivamente. Essas redes foram treinadas com 20 mil épocas, usando Gradiente descendente com momento, como função de otimização. A função de ativação utilizada, em todas as camadas, foi a tangente hiperbólica. Em cada caso teste foi usado um sinal sem ruído e um com 4% de ruído.

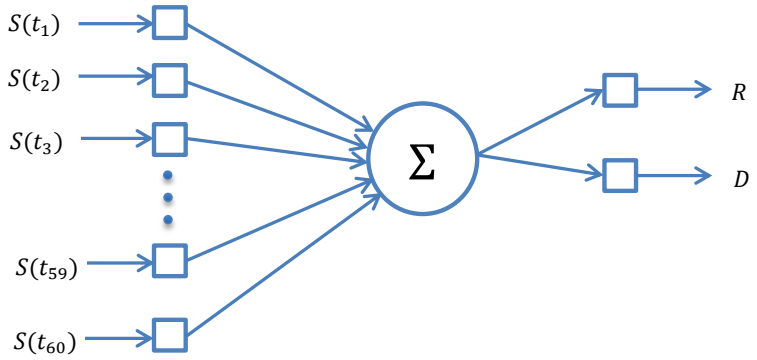


Figura 39 - Representação esquemática da Rede Neural.
Fonte: O autor, 2012.

Nas Tabelas de 4 até 7 são mostrados os resultados da rede para diferentes sinais de entrada, em diferentes configurações de rede. A segunda e terceira colunas destas tabelas apresentam a relação entre os valores estimados, $\hat{R}$ *e* $\hat{D}$*, e os valores usados para gerar o sinal usado na entrada da rede,* R *e* D*. Na quarta coluna destas tabelas apresenta-se o erro máximo pontual, cometido ao usar os parâmetros estimados para realizar 12 horas de simulação, (LIMA, et al., 2009c).*

Pode-se observar na Tabela 4 que, para o primeiro e terceiro casos, o erro na obtenção de D *chega a aproximadamente* 70%*. Por esse motivo, o erro em uma simulação de 12 horas usando esses parâmetros pode chegar próximo à* 10% *no primeiro caso e* 3% *no terceiro. O baixo erro no terceiro caso deve-se ao fato de que, apesar do coeficiente de difusão ter sido mal estimado, a estimativa obtida para a rugosidade foi capaz de garantir uma boa simulação gerada pelo modelo hidrodinâmico, quando adotado um maior intervalo de tempo.*

Tabela 4 - Três camadas Sem Ruído.

Casos teste	$\hat{R}/R$	$\hat{D}/D$	*Erro máximo*
1	*1,2571*	*1,6950*	*9,71%*
2	*1,0429*	*0,9730*	*1,00%*
3	*0,9460*	*1,6870*	*2,84%*
4	*0,9740*	*0,9649*	*0,68%*
5	*0,9960*	*0,9956*	*0,15%*

Fonte: O autor, 2012.

O resultado de quando se entra com dados com ruído de 4% *é mostrado na Tabela 5, podendo-se observar que, quando são utilizados esses sinais, a estimação dos parâmetros fica prejudicada, com exceção do primeiro e do terceiro casos. Esse fato demonstra a dificuldade que a rede tem ao estimar valores pequenos de* D*.*

Tabela 5 - Três camadas com Ruído de 4%.

Casos teste	$\hat{R}/R$	$\hat{D}/D$	*Erro máximo*
1	*1,1857*	*1,5780*	*7,40%*
2	*1,1857*	*0,9853*	*3,01%*
3	*0,9180*	*1,2720*	*1,95%*
4	*0,9240*	*0,9472*	*1,82%*
5	*0,9760*	*1,1488*	*3,67%*

Fonte: O autor, 2012.

Por outro, lado pode-se notar uma pequena melhora nos resultados quando foi utilizada uma configuração com 5 camadas (Tabela 6). Já ao utilizar-se um sinal com ruído de 4% na RNA de 5 camadas, os resultados mostraram-se um pouco melhores do que no sinal sem ruído, com exceção do caso 4 (Tabela 7).

Tabela 6 - Cinco camadas sem Ruído.

Casos teste	$\hat{R}/R$	$\hat{D}/D$	*Erro máximo*
1	*1,2143*	*1,4803*	*8,17%*
2	*1,0714*	*0,9820*	*1,42%*
3	*0,9320*	*1,5240*	*2,27%*
4	*0,9800*	*0,9533*	*0,97%*
5	*1,0201*	*1,0026*	*0,51%*

Fonte: O autor, 2012.

Tabela 7 - Cinco camadas com Ruído de 4%.

Casos teste	$\hat{R}/R$	$\hat{D}/D$	*Erro máximo*
1	*1,0428*	*1,6700*	*4,34%*
2	*1,0571*	*0,9843*	*1,08%*
3	*0,9420*	*1,1350*	*1,25%*
4	*0,9700*	*0,9161*	*1,78%*
5	*1,0200*	*0,9993*	*0,48%*

Fonte: O autor, 2012.

4.7 ***Problema Inverso em Dois Passos***

Como visto na sessão 2.5 o nível da água é mais sensível à rugosidade enquanto que a salinidade é mais sensível ao coeficiente de difusão. Por esse motivo é razoável considerar um problema em dois passos, onde primeiramente é fixado um dos parâmetros e estimado o outro, através da resposta mais sensível a este, e em seguida fixa-se o parâmetro que foi estimado e estima-se o outro, com sua respectiva resposta mais sensível. Nesta tese adotou-se uma estimação iniciando-se pela altura da rugosidade, usando o nível da água, seguida da estimação do coeficiente de difusão, usando a de salinidade.

Um esquema dessa abordagem é mostrado na Figura 40, onde a difusão é fixada e estima-se a altura da rugosidade, usando o nível da água. Com a rugosidade

estimada estima-se o coeficiente de difusão usando a salinidade. Ao final, o critério de parada σ é verificado. Se este não for satisfeito realizam-se os dois passos novamente.

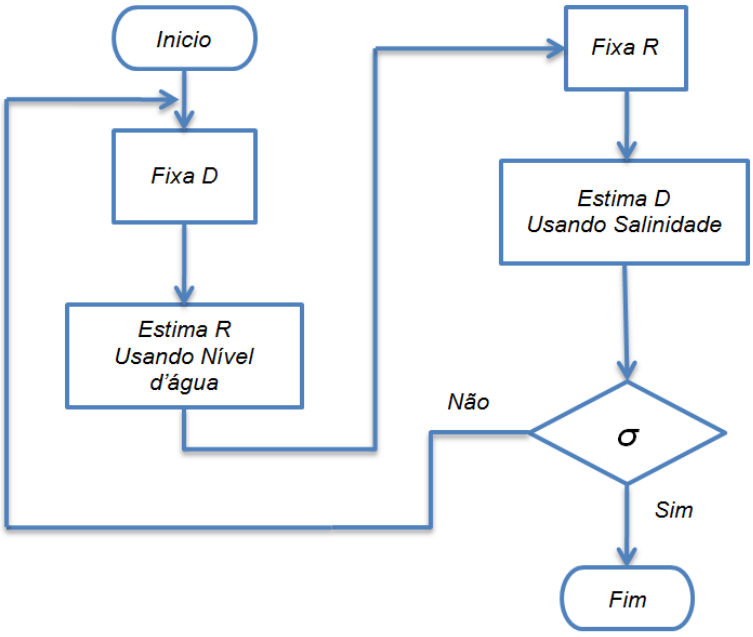


Figura 40 - Fluxograma do problema inverso em dois passos aplicado à estimação de R e D.
Fonte: O autor, 2012.

Para testar esse esquema optou-se por utilizar o método de LJ que apresentou melhor desempenho dentre os testes realizados (problema inverso em um passo), mesmo no pior caso.

Nos testes realizados verificou-se que não é possível estimar os parâmetros com um pequeno número de repetições dos dois passos e nem mesmo poucas avaliações em cada chamada do problema inverso, mesmo em se tratando de problemas unidimensionais. Por esse motivo, optou-se por utilizar uma configuração que mantivesse aproximadamente o mesmo número de chamadas à função objetivo adotado nos testes realizados em um passo, a fim de definir um critério de comparação.

O problema inverso em dois passos com LJ foi modelado utilizando a condição de parada σ igual a seis loops (realizar os dois passos seis vezes), $n_{out} = 8$ *e* $n_{in} = 3$ *para os loops do método LJ com fator de contração* $\varepsilon = 0{,}2$*, para aumentar a velocidade de convergência.*

Os resultados a seguir mostram o erro de estimação levando em considera-

ção a salinidade, como apresentados nos testes anteriores, mesmo utilizando, neste caso, o nível d'água para estimação.

Pode-se ver pela Figura 41 que o erro cometido usando esse tipo de abordagem é inferior ao erro obtido com o problema inverso em um passo. Mesmo no pior resultado encontrado, o erro permaneceu abaixo de 1,2%, enquanto que no melhor e na média os resultados apresentaram um ótimo desempenho, permanecendo com erro abaixo de 0,3%.

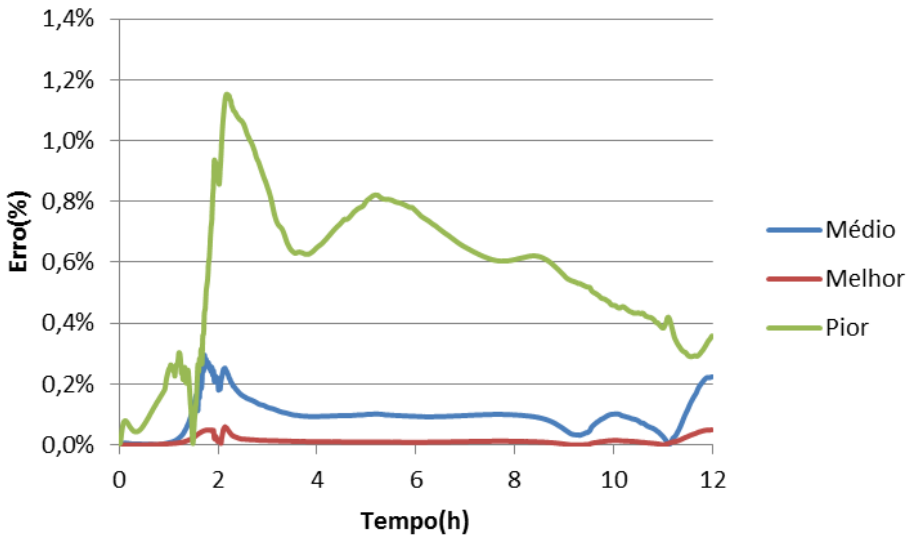


Figura 41 - Erro de estimação dos parâmetros usando LJ em dois passos com sinal sem ruído.
Fonte: O autor, 2012.

O resultado obtido com ruído de 4% mostrou-se muito estável, apresentando uma pequena variação entre os três resultados apresentados, permanecendo com erro inferior a 0,7%, mesmo no pior caso (Figura 42). Esse efeito deve-se, muito provavelmente, ao uso de um resultado do modelo hidrodinâmico em um período maior de tempo, aumentando assim sua influência na escolha dos parâmetros.

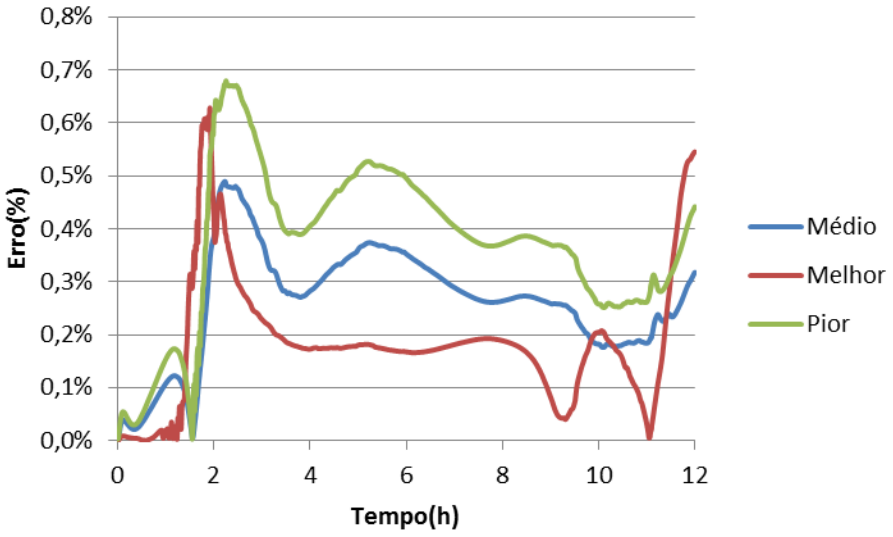


Figura 42 - Erro de estimação dos parâmetros usando LJ em dois passos com ruído de 4% no sinal
Fonte: O autor, 2012.

4.8 ***Problema Inverso Utilizando a Parte mais Sensível dos Dados***

Outra estratégia que pode ser tirada da analise de sensibilidade é tomar os dados não em todo intervalo de simulação, mas onde sua sensibilidade seja maior. Esse fato pode ser observado na Figura 20, onde o coeficiente de sensibilidade se torna maior à medida que o tempo avança.

Por esse motivo, a estratégia nos testes que se seguem foi manter os mesmos parâmetros anteriores e variar o intervalo de obtenção, considerando somente a segunda metade do intervalo de tempo simulado. Com isso, o teste de estimação dos parâmetros usando uma hora de simulação em um sinal sem ruído passa a considerar somente a segunda meia hora, descartando-se a primeira, e no teste com duas horas de simulação em um sinal com ruído de 4% é utilizada somente a segunda hora como intervalo de obtenção dos dados, para avaliação da função objetivo.

Na Figura 43 podem ser observados os resultados dessa estratégia, onde se pode verificar que o melhor resultado se manteve comparável ao obtidos anteriormente. O problema aqui encontrado é que dois dos dez resultados obtidos ficaram muito distantes dos demais, levando a média para longe dos parâmetros alvo. Em

geral os resultados permaneceram próximos dos obtidos com o LJ utilizando todo o intervalo de busca. Esse resultado já era esperado, já que na primeira meia hora de simulação a sensibilidade é quase zero, ou seja, essa estratégia deixa somente de somar valores próximos de nula, que já não afetavam o desempenho do método.

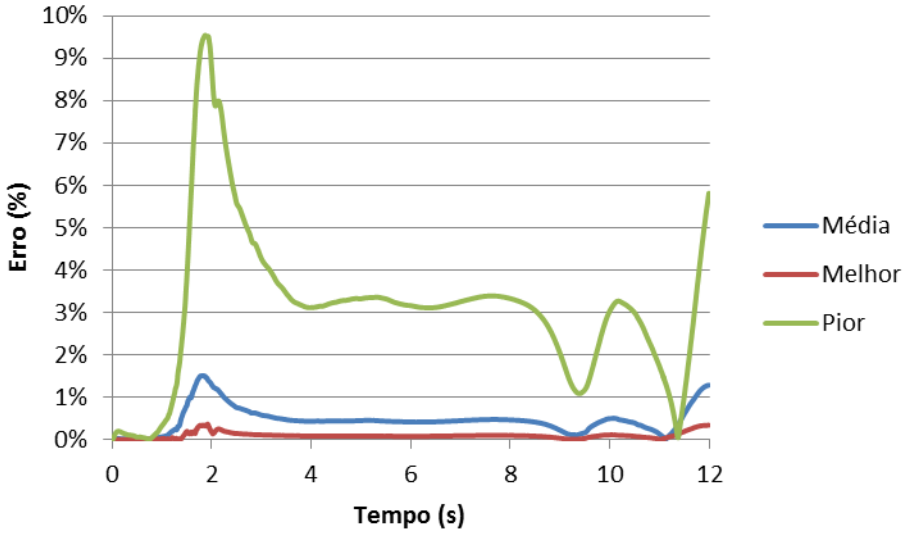


Figura 43 - Erro de estimação dos parâmetros usando LJ com uso da segunda metade dos dados com sinal sem ruído.
Fonte: O autor, 2012.

Os resultados obtidos com o sinal sem ruído não se repetem no sinal com ruído, que tem seu desempenho aumentado significativamente (Figura 44). Esse efeito se deve ao fato de que, nesse caso, desprezar pontos pouco sensíveis significa diminuir o ruído somado ao sinal total.

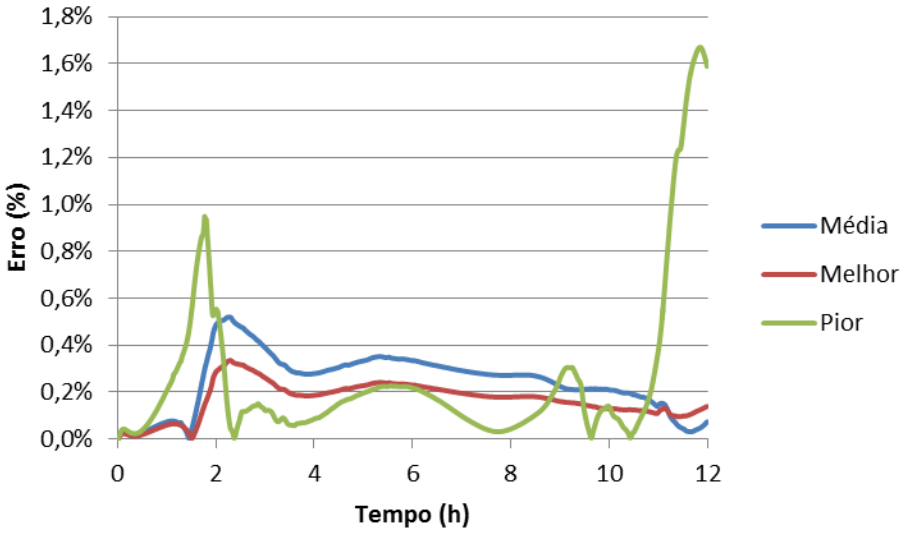


Figura 44 - Erro de estimação dos parâmetros usando LJ com uso da segunda metade dos dados com ruído de 4% no sinal
Fonte: O autor, 2012.

5 CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

5.1 Conclusões

A abordagem GA provou ser bastante eficiente para estimar os parâmetros altura da rugosidade e coeficientes de difusão turbulenta, resultando uma calibração com erro inferior a 1,2%. Além disso, pode-se ver que, ainda que usando um curto período de tempo nas medições, os parâmetros foram estimados com boa precisão, mesmo quando foram utilizados esses parâmetros para calibrar o modelo em um tempo maior de simulação. Também foi observado que quando se tem um sinal com ruído, o período de medições deve ser aumentado para obter-se uma boa estimativa. Comparando com os resultados obtidos no GA, os demais métodos levam desvantagem. Isso deve-se ao fato de que no GA restringiu-se a 128 valores para cada parâmetro, devido à abordagem binária, enquanto que nos outros métodos a escolha dos parâmetros podia ser feita sem restrições, limitada somente pela precisão computacional.

Os resultados obtidos com o PCA não se mostraram conclusivos quanto à eficácia no aumento do número de loops no exploration. Como dito anteriormente, isso se deve ao falto de, em um algoritmo aleatório como este, sempre existir a possibilidade do exploration ser pouco acessado. Apesar disso, foi verificado uma estimação de regular a ótima em 80% dos casos, mostrando que essa abordagem, mesmo podendo apresentar erros muito grandes, tem uma grande possibilidade de gerar bons resultados.

O método LJ mostrou-se o melhor em relação à estabilidade de resultados apresentando um erro inferior a 3% mesmo no pior caso. Esse fato se mostra ainda mais surpreendente se levarmos em consideração que este é o método mais simples dentre todos os métodos apresentados.

O PSO apresentou resultados muito bons, até mesmo quase exatos, em muitas de suas respostas, quando os parâmetros foram estimados com um sinal sem ruído. Esse ótimo desempenho não foi verificado nos testes com ruído, apresentando um resultado de igual a pior ao obtido pelo LJ.

A rede neural mostrou-se uma boa ferramenta para estimar os parâmetros de

um modelo que simule o escoamento e transporte em estuários, quando devidamente treinada. Mesmo quando o erro se mostrou significativamente alto, os resultados representaram uma boa aproximação, se comparado com o tamanho do intervalo de busca. O uso de um sinal com ruído não gerou um resultado efetivamente pior, mesmo usando sinais com ruídos diferentes dos usados na fase de treinamento. Além disso, para a configuração de 5 camadas, os resultados com ruídos foram melhores. Isso mostra que uma configuração de 5 camadas tem um poder de generalização maior para sinais com ruído, já que foram usadas mais configurações de treinamento com ruído.

Como mencionado anteriormente os resultados do problema inverso em dois passos foram obtidos com seis iterações dos dois passos, não sendo possível a estimação dos parâmetros em uma ou duas iterações somente. Como também não foi possível calibrar o modelo hidrodinâmico estimando somente R*, fazendo uso de um número reduzido de avaliações à função objetivo, para em seguida calibrar o modelo de transporte com a estimação de* D*, mostrando que apesar de se estar estimando o parâmetro através da solução de um problema inverso unidimensional, nesse caso, o método LJ necessita de um número razoável de avaliações. Por esse motivo, optou-se por avaliar o ganho de estabilidade com essa abordagem, mantendo o mesmo número de avaliações à função objetivo usadas nos exemplos anteriores.*

A abordagem de descartar a primeira metade dos dados se mostrou eficiente, quando se utilizou um sinal com ruído. Esse efeito deve-se ao fato de que a primeira meia hora de simulação não oferece muita sensibilidade e sua contribuição para o valor da função objetivo é quase nula, o que não se repete quando se utiliza um sinal com ruído, que se amplifica com o aumento da quantidade de dados experimentais, dificultando a estimação dos parâmetros.

A técnica desenvolvida nesta tese demonstrou ter um grande potencial como ferramenta de calibração de modelos hidrodinâmicos.

Em modelos estuarinos os parâmetros do rio se diferem dos parâmetros do resto do estuário e, apesar de neste trabalho ter sido utilizada somente um parâmetro para toda região do estuário, é possível a identificação de um número maior de parâmetros utilizando a mesma técnica, com um número maior de estações de medição.

5.2 ***Trabalhos Futuros***

Uma parte imprescindível para continuação desse estudo é a estimação de parâmetros para o modelo através de dados reais, uma vez que a confrontação entre os dados de campo e os obtidos pelo modelo poderão fazer parte da construção do ferramental de gestão dos recursos hídricos da região.

A batimetria utilizada, tanto para a região marinha quanto para a região fluvial, é antiga e possui grandes lacunas em sua cobertura dificultando uma construção aceitável do perfil do leito do estuário. Com o objetivo de se realizar um melhor estudo a partir da utilização dos dados reais faz-se necessário também à obtenção da batimetria da região, com dados atualizados e com maior precisão.

Como visto nas seções anteriores, nesse trabalho, não se considerou a influência do vento nas simulações. Essa simplificação do modelo tem efeito significativo quando consideramos grandes extensões de superfície e no caso específico do estuário de Macaé os resultados podem se alterados se considerarmos o vento no mesmo sentido no rio influenciado o modelo hidrodinâmico ao longo de toda a extensão do rio, aumentando ou diminuindo a penetração salina.

Além disso, essa técnica poderá ser empregada na obtenção de outros dados, como identificação de lançamento de poluentes no rio, ajudando as autoridades no controle ambiental da região.

REFERÊNCIAS

AARTS, E.; KORST, J. Simulated Annealing and Boltzmann Machines. New York: John Wiley and Sons, 1989.

ABBOT, M. B.; BASCO, D. R. Computational Fluid Dynamics, an Introduction for Engineers. [S.l.]: Logan Group, UK Limited, 1989.

ABBOTT, M. B.; DAMSGAARDAND, A.; RODENHUIS, G. S. System 21, Jupiter, a design system for two dimensional nearly horizontal flows. Journal of Hydraulic Research, p. 1-28, 1973.

AMARAL, K. Estuário do rio macaé: Modelagem computacional como ferramenta para o gerenciamento integrado de recursos hídricos. COPPE/UFRJ. Rio de Janeiro, p. 150. 2003.

ARAKAWA, A.; LAMB, V. R. Computational design of the basic dynamical processes of the UCLA General Circulation Model. Methods of Computational Physics, v. 17, p. 174-264, 1977.

BACKHAUS, J. A three dimensional model for the simulation of shelf sea dynamics. Dt. Hydrogr.Z., v. 38, p. 165-187, 1985.

BATES, P. D.; LANE, S. N.; FERGUSON, R. I. Computational fluid dynamics: aplication in environmental hydraulics. [S.l.]: WILEY, 2005.

BEQUETTE, F. El Agua: ¿Una Crisis Inminente? Revista El Correo de la UNESCO, 1998.

BISHOP, C. M. Neural Network for Pattern Recognition. New York: Oxford University Press. inc., 1995.

BOWIE, G. L.; MILLS, W. B.; PORCELLA, D. B.; CAMBELL, C. L.; PAGENDORF, J. R.; RUPP, G. L.; JOHNSON, K. M.; CHAMBERLIN, C. E. Rates, Constants and Kinetic Formulations in Surface Water Quality Modeling. U. S. Environmental Protection Agency, 1985.

BRASIL. RESOLUÇÃO CONAMA nº 1, de 23 de janeiro de 1986. LICENCIAMENTO AMBIENTAL – Normas e procedimentos, 1986. 2548-2549.

BRASIL. LEI Nº 9.433, DE 8 DE JANEIRO DE 1997.

BRASIL. RESOLUÇÃO CONAMA nº 357, 17 março 2005. 58-63.

BRAUNSCHWEIG, F. Generalização de um modelo de circulação costeira para albufeiras. MSc. Thesis , Instituto Superior Técnico, Technical University of Lisbon, 2001.

CANCINO, L.; NEVES, R. Hydrodynamic and sediment suspension modelling in estuarine systems. Part II: Application to the Western Scheldt and Gironde estuaries. Journal of Marine Systems, v. 22, p. 117-131, 1999.

CHAU, K. A review on the integration of artificial intelligence into coastal modeling. Journal of Environmental Management, v. 80, p. 47-57, 2006.

CHIPPADA, S.; DAWSON, C.; WHEELER, M. Agodonov-type finite volume method for the system of shallow water equations. Computer methods in applied mechanics and engineering, v. 151(01), p. 105-130, 1998.

COELHO, H.; SANTOS, A.; ROSA, T. L.; NEVES, R. Modelling the wind driven flow off Iberian Peninsula. GAIA, v. 8, p. 71-78, 1994.

DECYK, V. K.; NORTON, C. D.; SZMANSKI, B. K. Expressing Object-Oriented Concepts in Fortran90. [S.l.]: ACM Fortran Forum, v. 16, 1997.

DOWDING, K. J.; BLACKWELL, B. F. Applications of Sensitivity Coefficients for Heat. Numerical Heat Transfer, 36, p. 33-55.1999.

DYER, K. Estuaries: A Physical Introduction. [S.l.]: John Wiley & Sons, 1997.

ENGELBRECHT, A. P. Computational intelligence: an introduction. 2.ed. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2007.

ESTRADA, V.; PARODI, E. R.; DIAZ, M. S. Determination of biogeochemical parameters in eutrophication models with simultaneous dynamic optimization approaches. Computers and Chemical Engineering, v. 33, p. 1760-1769, 2009.

ETEMAD-SHAHIDI, A.; IMBERGER, J. Optimal estimation of parameters for a estuarine eutrophication model. Dynamics of Atmospheres and Oceans, v. 39, n. 3-4, p. 175-187, 2004.

FAUSETT, L. Fundamentals of Neural Networks. [S.l.]: Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1994.

FEMAR-FUNDAÇÃO ESTUDOS DO MAR. Catálago de Estações Maregráficas Brasileiras, 1974. Disponivel em: <http://www.fundacaofemar.org.br/biblioteca/emb/tabelas/176.html,%20Acessada%20em%20outubro%20de%202008%20>. Acesso em: out. 2008.

FLETCHER, C. A. J. Computational techniques for fluid dynamics. Volume I. 2nd Edition. Springer Series in Computational Physics. New York: Springer Verlag. p. 401, 1991.

GANJU, N. K.; SCHOELLHAMER, D. H. Calibration of an estuarine sediment transport model to sediment fluxes as anintermediatestepforsimulationofgeomorphicevolution. Continental Shelf Research, v. 29, p. 148-158, 2009.

HILLIER, F. S.; LIEBERMAN, G. J. Introdução à pesquisa operacional. Tradução de Ariovaldo Griesi. 8.ed. [S.l.]: Bookman, 2010.

HIRSCH, C. Numerical computation of internal and external flows. Vol I: Fundamentals of numerical discretization. Wiley Series in Numerical Methods in Engineering. Chichester: John Wiley and Sons, 515 p. 1988.

HOLLAND, J. H. Adaptation in Natural and Artifitial Systems. [S.l.]: Ann Arbor, MI: University of Michigan Presse, 1975.

HSU, M.-H.; KUO, A. Y.; KUO, J.-T.; LIU, W.-C. Procedure to calibrate and verify numerical models of estuarine hydrodynamics. Journal of Hydraulic Engineering, p. 166-182, 1999.

HU, K.; DING, P.; WANG, Z.; YANG, S. A 2D/3D hydrodynamic and sediment transport model term for the Yangtze previous Estuary, China. Journal of Marine Systems, v. 77, n. 1-2, p. 114-136, 2009.

INAG. Análise económica das utilizações da água no contexto da Directiva Quadro da Água. Grupo de Economia da Água (GEA) – Direcção de Serviços de Planeamento (DSP) do Instituto da Água (INAG), Lisboa, 2001.

JAMES, I. D. A general three-dimensional eddy-resolving model for stratified seas. In: Three-dimensional models of marine and estuarine marine and estuarine. Elsevier Oceanography Series 45, Amsterdam, p. 1-33, 1987.

KARR, C. L.; YAKUSHIN, I.; NICOLOSI, K. Solving inverse initial-value, boundary-value problems via genetic algorithm. Engineering Applications of Artificial Intelligence, v. 13, p. 625-633, 2000.

KELMAN, J. Outorga e Cobrança pelo Uso de Recursos Hídricos. O Estado das Águas no Brasil. Brasilia: ABRH. 1999.

KENNEDY, J.; EBERHART, R. Particule Swarm Optimization. IEEE International Conference on Neural Networks. IV., p. 1942 - 1948, 1995.

KIM, U.; KALUARACHCHI, J. J. Application of parameter estimation and regionalization methodologies to ungauged basins of the Upper Blue Nile River Basin, Ethiopia. Journal of Hydrology, v. 362, p. 39–56, 2008.

KIRKPARTRICK, S.; GELETT, C. D.; VECCHI, M. P. Optimization by simulated annealing. Science, v. 220, p. 621-630, 1983.

KRAUSE, G.; RODRIGUES, F. A. Recursos Hídricos no Brasil. Ministério do Meio Ambiente, dos Recursos Hídricos e da Amazônia Legal / Secretaria de Recursos Hídricos. [S.l.], p. 30. 1998.

LE CUN, Y. Learning Processes in an Asymmetric Threshold Network. In Bienenstock, E., Fogelman-Soulie, F., and Weisbuch, G., editors, Disordered systems and biological organization, p. 223-240, 1986.

LEENDERTSEE, J. J. Aspects of a computational model for long water wave propagation. Rand Corporation, Memorandum RM-6230-RC, Santa Monica, 1967.

LEITÃO, P. C. Modelo de Dispersão Lagrangeano Tridimensional. Ms. Sc. Thesis, 1996.

LIMA, E. B.; RODRIGUES, P. P. G. W.; SILVA NETO, A. J.; MESA, M. I.; SANTIAGO, O. L.; LUGON JUNIOR, J. L. Inverse Problem for Parameter Estimation In: Model of Estuarine Hydrody-namics. In: IX CONGRESO INTERNACIONAL DE INGENIERÍA HIDRÁULICA Y V SEMINARIO INTERNA-CIONAL DEL USO INTEGRAL DEL AGUA. Santiago, Cuba: [s.n.]. 2009a.

LIMA, E. B.; RODRIGUES, P. P. G. W.; SILVA NETO, A. J.; MESA, M. I.; SANTIAGO, O. L.; LUGON JUNIOR, J. L. Parameter Estimation in Model of Estuarine Hydrodynamics Based on Genetic Algorithms. In: 20TH INTERNATIONAL CONGRESS OF MECHANICAL ENGINEERING. GRAMADO: [s.n.]. 2009b.

LIMA, E. B.; RODRIGUES, P. P. G. W.; SILVA NETO, A. J.; MESA, M. I.; SANTIAGO, O. L.; LUGON JUNIOR, J. L. Redes Neurais na Obtenção dos Parâmetros de Um Modelo Computacional para o Estuário de Macaé. In: 30TH IBERIAN LATIN-AMERICAN CONGRESS ON COMPUTATIONAL METHODS IN ENGINEERING. Búzios: [s.n.]. 2009c.

LIMA, E. B.; SILVA NETO, A. J.; RODRIGUES, P. P. G. W. Simulação bidimensional do escoamento e transporte no estuário do rio Macaé. In: ENCONTRO DE MODELAGEM COMPUTACIONAL. Volta Redonda: [s.n.]. 2008.

LUUS, R.; JAAKOLA, T. H. I. Optimization by Direct Search and Systematic Reduction of the Size of Search Region. AIChE Journal, v. 19, p. 760-766, 1973.

MARTINS, F. Modelação Matemática Tridimensional de Escoamentos Costeiros e Estuarinos usando uma Abordagem de Coordenada Vertical Genérica. Ph. D, Thesis, Universidade Técnica de, 1999.

MARTINS, F.; LEITÃO, P.; SILVA, A.; NEVES, R. 3D modeling in the Sado estuary using a new generic vertical discretization approach. Oceanologica Acta, v. 24, p. 51-62, Fevereiro 2001.

MELANIE, M. An Introduction to Genetic Algorithms. Fifth printing. ed. Cambridge: MIT Press, 1999.

MIRANDA, L. B.; CASTRO, B. M.; KJERFVE, B. Pricípios de Oceanográfica Física Estuatina. São Paulo: Editora Universidade de São Paulo, 2002.

MIRANDA, R. Nitrogen Biogeochemical Cycle Modeling in the North Atlantic Ocean. Ms. Sc. Thesis, Universidade Técnica de Lisboa, 1999.

MIRANDA, R.; BRAUNSCHWEIG, F.; LEITÃO, P.; NEVES, R.; MARTINS, F.; SANTOS, A. Mohid 2000, A Costal integrated object oriened model. Hydraulic Engineering Software VIII, WIT Press. [S.l.]: [s.n.]. 2000.

MONTERO, P. Estudio de la hidrodinámica de la Ría de Vigo mediante un modelo de volúmenes finitos (Study of the hydrodynamics of the Ría de Vigo by means of a finite volume model). Ph. D, Thesis, Universidad de Santiago de Compostela, 1999.

MONTERO, P.; GÓMEZ-GESTEIRA, M.; TABOADA, J. J.; RUIZ-VILLARREAL, M.; SANTOS, A. P.; NEVES, R. J. J.; PREGO, R.; PÉREZ-VILLAR, V. On residual circulation of Vigo Ría using a 3D baroclinic model. Boletín Instituto Español de Oceanografía, v. 15. SUPLEMENTO-1, 1999.

MUNAVALLI, G. R.; KUMAR, M. S. M. Water quality parameter estimation in a distribution system under dynamic state. Water Research, v. 39, n. 18, p. 4287-4298, 2005.

NEVES, R. J. D. J. Étude Expérimentale et Modélisation Mathématique des Circulations de Marée et Residuelle dans l'Estuaire du Sado. Univ. de Liège. Bélgica. 1985.

NEVES, R.; COELHO, H.; LEITÃO, P.; MARTINS, H.; SANTOS, A. A numerical investigation of the slope current along the western European margin In: Burgano V., Karatzas G., Payatakas A., Brebbia C., Gray W. and Pinder G. Computational Methods in Water Resources XII, v. 2, p. 369-376, 1998.

PARKER, D. B. Learning-logic, Technical Report TR-47. [S.l.]: Center for Comp. Research in Economics and Management Sci., MIT, 1985.

PÉREZ-VILLAR, V. Ordenación Integral del Espacio Maritimo-Terrestre de Gali-cia: Modelización informática (Integrated Management of the Galician Maritime-Terrestrial Space: Numerical Modelling). Final report by the Grupo de Física Non Lineal, Consellería de Pesca, Marisqueo e Acuicultura. Xunta de Galicia., 1999.

RAO, S. S. Engineering Optimization, Theory and Practice. Third Edition. ed. [s.l.]: John Wiley & Sons, Inc., 1996.

RODRIGUES, P. P. W. G.; LIMA, E. B.; SILVA NETO, A. J.; LUGON JUNIOR, J. Modelling and sensitivity analysis for estuarine hydrodynamics.In: IX SIMPOSIO INTERNACIONAL DE AUTOMATIZACIÓN. Havana, Cuba, 2009.

ROSMAN, P. C. Modelos de Circulação em Corpos d'Água Rasos. In R.C. Vieira da Silva (Ed.). Rio de Janeiro: Numerical Methods in Water Resources, ABRH, 1989.

SACCO, W. F.; OLIVEIRA, C. R. E.; PEREIRA, C. M. N. Two stochastic optimization algorithms applied to nuclear reactor core design. Progress in Nuclear Energy, v. 48, n. 6, p. 525-539, 2006.

SANTOS, A. J. Modelo Hidrodinâmico Tridimensional de Circulação Oceânica e Estuarina. Ph. D, Thesis, Universidade Técnica de Lisboa, Instituto Superior Técnico, 1995.

SHEN, J. Optimal estimation of parameters for a estuarine eutrophication model. Ecological Modelling, v. 191, n. 3-4, p. 521-537, 2006.

SHEN, J.; JIA, J.-J.; SISSON, G. M. Inverse estimation of nonpoint sources of fecal coliform for establishing allowable load for Wye River, Maryland. Water research, v. 40, p. 3333-3342, 2006.

STRUB, I. S.; PERCELAY, J.; STACEY, M. T.; BAYEN, A. M. Inverse estimation of open baoudary condition in tidal channnel. Ocean Modelling, v. 29, p. 85-93, Março 2009.

TABOADA, J. J. Aplicación de modelos numéricos al estudio de la hidrodinámica y del flujo de partículas en el Mar Mediterráneo (Application of numerical models for the study of hydro-dynamics and particle fluxes in the Mediterranean Sea). Ph. D.

Thesis, Universidad de Santiago de Compostela., 1999.

TABOADA, J. J.; PREGO, R.; RUIZ-VELLARREAL, M.; MONTERO, P.; GÓMEZ-GESTEIRA, M.; SANTOS, A.; PÉREZ-VILLAR, V. Evaluation of the seasonal variations in the residual patterns in the Ría de Vigo (NWSpain) by means of a 3D baroclinic model. Estuarine Coastal and Shelf Science, v. 47, p. 661-670, 1998.

TOBOADA, J. J.; RUÍZ-VILLARREAL, M.; GÓMEZ-GESTEIRA, M.; MONTERO, P.; SANTOS, A. P.; PÉREZ-VILLAR, V.; PREGO, A. Estudio del transporte en la Ría de Pontevedra (NOEspaña) mediante un modelo 3D: Resultados preliminares. In: Estudos de Biogeoquímica na zona costeira ibérica,Eds. A.Da Costa, C. Vale and R. Prego Servicio de Publicaciones da Universidade de Aveiro in press., 2000.

VALLINO, J. J.; HOPKINSON, C. S. Estimation of Dispersion and Characteristic Mixing Times in Plum Island Sound Estuary. Estuarine, Coastal and Shelf Science, v. 46, p. 333-350, 1997.

WROBEL, L. C.; EIGER, S.; ROSMAN, P. C.; TUCCI, C. E.; CIRILLO, J. A.; CABRAL., J. P. Métodos Numéricos em Recursos Hídricos. [S.l.]: Coleção ABRH de Recursos Hídricos, 1989.

YANG, Z.; HAMRICK, J. M. Optimal control of salinity boundary condition in a tidal model using a variational inverse method. Estuarine, Coastal and Shelf Science, v. 62, n. 1-2, p. 13-24, 2005.