

## Estimativa dos Parâmetros de Dispersão em Rios Montanhosos Através do Algoritmo de Luus-Jaakola

Pedro Paulo Gomes Watts Rodrigues, Edson Pereira de Sousa, Francisco Duarte Moura Neto

Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro

pwatts@iprj.uerj.br; edsonsousa@oi.com.br; fmoura@iprj.uerj.br

Yoel Martínez González

Instituto Superior Politécnico José Antonio Echeverría - Ciudad de La Habana, Cuba

ymarq@cih.cujae.edu.cu

Recebido: 28/09/10 - revisado: 17/06/11 - aceito: 04/10/11

---

### RESUMO

*Este artigo apresenta a aplicação de uma técnica de otimização para problemas inversos (o método de Luus-Jaakola) nas estimativas dos parâmetros que caracterizam os mecanismos de dispersão em zonas mortas presentes em escoamentos naturais. A estratégia e modelo utilizados são comparados com o clássico método de Chatwin, a comparação sendo conduzida a partir de um estudo de caso, que envolveu a simulação do transporte de traçador em um pequeno rio, situado na região serrana do estado do Rio de Janeiro, que drena importante Área de Proteção Ambiental. A abordagem aqui adotada teve uma performance superior na minimização dos erros verificados na comparação entre simulação e observação.*

**Palavras-chave:** problemas inversos, modelos de dispersão, dispersão em rios montanhosos, Luus-Jaakola, Chatwin.

---

### INTRODUÇÃO

Modelos matemáticos são ferramentas de grande utilidade, na medida em que reduzem tempo de análise, custos e riscos na avaliação de impactos ambientais. Especificamente para o caso de lançamento de efluentes em rios, a Resolução CONAMA 257/05, que veio atualizar critérios de classificação de corpos de água quanto aos usos preponderantes, impõe que estudos específicos sejam conduzidos para avaliar o comportamento do poluente na zona de mistura, que pode ser entendida como a extensão dentro da qual a substância não está inteiramente misturada em toda seção transversal ao escoamento. O comportamento não gaussiano da distribuição da concentração do poluente nessa região representa um dos maiores obstáculos na modelagem desse processo de mistura.

O transporte de poluentes em rios suficientemente estreitos e rasos, na região que excede a zona de mistura, pode adequadamente ser simulado pela equação de advecção-dispersão. A solução dessa equação exige o conhecimento da vazão do rio e da área de sua seção transversal, dados de entrada do problema. Além disso, é necessário prescrever ou estimar o coeficiente de dispersão, cuja magnitude

pode ser influenciada pela batimetria do curso fluvial, turbulência e gradientes observados no escoamento, estando sujeito, portanto, a variações no tempo e no espaço (Harris et al, 1984). Esse coeficiente pode ser estimado de duas maneiras distintas, baseando-se em perfis de concentração observados em campo, ou através de fórmulas empíricas, que levam em conta as características hidráulicas do escoamento (Guymer, 1998; Kashfipour et al, 2002 e Barbosa et al, 2005).

De fato, a dispersão em cursos naturais tem sido baseada nos clássicos experimentos de Taylor (1954) em dutos, os quais estabeleceram que o perfil de distribuição de concentração de uma substância deve obedecer a uma distribuição gaussiana, sendo advectada a partir do ponto em que a substância é lançada no meio. Na realidade, na maior parte das vezes esse comportamento teórico não se verifica na natureza (Nordin et al, 1974), e muitos experimentos têm mostrado que essa distribuição apresenta forte assimetria Fischer (1967). Esse comportamento não-gaussiano pode estar relacionado ao aprisionamento temporário da substância, devido a alguma causa relacionada a irregularidades na seção transversal que possa, por exemplo, gerar contra-fluxos no escoamento. Alguns modelos têm sido construídos com o objetivo de incorporar esses

mecanismos no processo de mistura (Swamee et al, 2000 e Davis-Atkinson, 2000).

Neste trabalho é discutida uma nova metodologia para estimar o coeficiente de dispersão. O método é comparado com o Método de Chatwin, sendo avaliado em um estudo de caso que envolveu a simulação do transporte de um traçador em um rio montanhoso, situado no município de Nova Friburgo, Rio de Janeiro.

## ÁREA DE ESTUDO

O objetivo central deste trabalho é propor uma nova metodologia para estimar o coeficiente de dispersão em rios que apresentem geometria complexa, que é o caso de rios situados em regiões montanhosas.



**Figura 1 - Localização da área de estudo (1a) e vista do trecho do rio onde se realizou o experimento (1b)**  
Adaptado de Lugon et al (2008).

Com esse propósito, um experimento de campo foi conduzido no Rio São Pedro, localizado a aproximadamente 850 m de altitude, no noroeste do estado do Rio de Janeiro. Esse rio drena uma Área de Proteção Ambiental e, a despeito disso, tem

sido submetido a severo impacto ambiental decorrente de lançamento de esgotos *in natura*, o que tem ensejado estudos que visem a sua revitalização. A região aonde foi conduzido o experimento de campo é mostrada na Figura 1.

## MÉTODOS

### Modelo de Advecção-dispersão (MAD)

O transporte de massa de substâncias conservativas em escoamentos turbulentos pode ser formulado pela equação de transporte, dada por (Versteeg et al, 1995):

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} + w \frac{\partial c}{\partial z} = D_x \left( \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right) + D_y \left( \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right) + D_z \left( \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right) \quad (1)$$

onde  $c=c(x,y,z,t)$  é a concentração da substância,  $u$ ,  $v$  e  $w$  são, respectivamente, as componentes da velocidade nas direções  $x$ ,  $y$  e  $z$ , e  $D_x$ ,  $D_y$  e  $D_z$  são os coeficientes de difusão turbulenta, respectivamente nessas direções. Essa equação pode ser integrada na seção transversal ao escoamento,  $A$ , de modo que, tanto as componentes de velocidade quanto a própria concentração podem ser expressas por

$$\begin{aligned} c &= C + c' \\ u &= U + u' \\ v &= V + v' \\ w &= W + w' \end{aligned}$$

onde  $U$ ,  $V$ ,  $W$  e  $C$  são valores médios na seção e  $u'$ ,  $v'$ ,  $w'$  e  $c'$  são flutuações espaciais (Park, 1985). O transporte de substâncias conservativas lançadas em rios suficientemente estreitos e rasos, que transcorra a jusante do comprimento de mistura na seção transversal, pode, ainda, ser simplificado para (Fischer et al, 1979)

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_x \frac{\partial C}{\partial x} - \overline{u'c'} \right) \quad (2)$$

onde a barra indica a integração na seção  $A$ . O termo  $\overline{u'c'}$  advém da integração do termo advectivo (segundo do lado esquerdo da Eq. (2)), representa um produto de flutuações e tem natureza dispersiva. Por esse motivo, e à semelhança do que é feito na

promediação de Reynolds para o tempo (Verstaeg, 1995), o termo entre colchetes presente nessa equação pode ser parametrizado por (Barbosa et al, 2005)

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( D_x \frac{\partial}{\partial x} - \overline{u'c'} \right) = K_x \frac{\partial C}{\partial x} \quad (3)$$

Com o que, substituindo-se na Eq. (2), tem-se o que se denomina equação de advecção-dispersão, dada por

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = K_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (4)$$

onde  $K_x$  é o coeficiente de dispersão. O dito modelo de advecção-dispersão assume, ainda, as seguintes condições iniciais e de contorno (Fischer, 1979):

$$C(x, 0) = \frac{M_o}{A} \delta(x) \quad (5.a)$$

$$C(-\infty, t) = C(+\infty, t) = 0 \quad (5.b)$$

onde  $M_o$  é a massa total lançada no curso fluvial e  $\delta(x)$  é o delta de Dirac, centrado na origem do lançamento. A solução desse problema é dada por:

$$C(x, t) = C_0 + \frac{k}{\sqrt{t}} e^{-\frac{(x-Ut)^2}{4K_x t}} \quad (6)$$

onde  $C_0$  é a concentração da substância a montante do ponto de lançamento e

$$k = \frac{M_o}{A \sqrt{4\pi K_x}} \quad (7)$$

*Obtenção do coeficiente de dispersão através do Método de Chatwin*

Definidos  $M_o$  e  $A$ , a solução expressa pela Equação (2) impõe a necessidade de, ainda, conhecer-se  $U$  e  $K_x$ . Esses parâmetros podem ser obtidos através do método de Chatwin (Chatwin, 1971), como descrito no que segue.

Das Equações (6) e (7), tem-se que

$$\frac{k}{(C - C_0)\sqrt{t}} = e^{\frac{(x-Ut)^2}{4K_x t}} \quad (8)$$

Por outro lado, Sousa (2009) mostra que, atendidas determinadas condições, o parâmetro  $k$  pode ser expresso por

$$k = (C_p - C_0) \sqrt{t_p} \quad (9)$$

onde  $C_p$  é a concentração de pico medida na seção de amostragem,  $t_p$  é o instante de tempo em que essa concentração foi determinada. Dessa forma, a Equação (8) pode ser reescrita como

$$(C_p - C_0) \sqrt{t_p} = e^{\frac{(x-Ut)^2}{4K_x t}} \quad (10)$$

Aplicando-se logaritmo nos dois lados dessa equação e fazendo-se uso da Equação (4) para avaliar o coeficiente  $K_x$ , obtém-se

$$\left[ \ln \left( \frac{(C_p - C_0) \sqrt{t_p}}{(C - C_0) \sqrt{t}} \right) \right]^{1/2} = \frac{x}{2\sqrt{K_x}} - \frac{Ut}{2\sqrt{K_x}} \quad (11)$$

O lado esquerdo da Equação (11) representa o parâmetro de Chatwin, que dessa forma possui uma dependência linear com o tempo. A partir de dados de campo pode-se plotar pares de pontos (parâmetro de Chatwin *versus*  $t$ ) que obedeçam a essa relação. Se uma reta ajustar-se satisfatoriamente a esses pares, tem-se que o modelo gaussiano é válido. Dessa forma, o coeficiente  $K_x$  é determinado simplesmente da interseção dessa reta com o eixo ordenado ( $t=0$ ). Por outro lado, a velocidade  $U$  pode ser obtida fazendo-se o lado esquerdo da Equação (11) igual a zero.

#### Modelo de Dispersão com Zona Morta(MDZM)

O modelo de dispersão clássico, expresso pela Equação (4) foi desenvolvido com base em experimentos conduzidos em dutos uniformes, tendo a aplicabilidade restrita a um tempo (ou distância) suficientemente longos do ponto de lançamento, para que se garanta a completa mistura na seção transversal. Diversos experimentos em canais naturais, no entanto, têm indicado que a solução de tal modelo dificilmente se verifica. De fato, observações

têm mostrado que a assimetria da curva de distribuição da concentração  $C$ , contrariamente ao previsto pela teoria de Taylor (1954), tende muitas vezes a aumentar com o tempo ou distância (Atkinson et al, 2000).

Os processos que se encontram por detrás desse comportamento vêm sido explicados pelo que se chamam zonas mortas (ZM) dentro do escoamento, que seriam regiões de baixa velocidade causadas, por exemplo, por irregularidades na seção transversal, que propiciariam a retenção da substância simulada, de acordo com Atkinson et al(2000). Com o objetivo de incorporar tais mecanismos, esses autores propuseram um modelo alternativo, denominado Dispersion-Dead Zone Model (D-DZM). Esse modelo divide o escoamento entre uma parte, dita principal, e outra onde ocorrem as zonas mortas. No escoamento principal, o transporte de substância conservativa seria formulado por (Davis-Atkinson, 2000):

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} - K_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = -\frac{1}{\chi^2} \frac{\partial^2 C_S}{\partial x^2} \quad (12)$$

onde  $C_S$  é a concentração do traçador na zona morta e  $\chi = (A/A_s)^{1/2}$  é uma medida da relação entre a área da seção transversal ocupada pelo escoamento principal e aquela ocupada pelo escoamento onde se dá a zona morta ( $A_s$ ). Na zona morta o transporte da substância seria formulado por

$$\frac{\partial C_S}{\partial t} = -\frac{\chi^2}{\tau} (C - C_S) \quad (13.a)$$

$$C_S(x, 0) = 0 \quad (13.b)$$

$$C(x, 0) = \frac{M_o}{A} \delta(x) \quad (13.c)$$

$$UA \int_0^\infty C(x, t) dt = M_o \quad (13.d)$$

$$\lim_{x \rightarrow \infty} C(x, t) = 0 \quad (13.e)$$

onde  $\tau$  é uma escala de tempo característica para a troca de partículas entre o escoamento principal e o da zona morta.

A solução analítica do MDZM é dada por (Davis-Atkinson, 2000):

$$C(x, t) = C_T(x, t) e^{-\frac{t}{\tau}} + e^{-\frac{\chi^2 t}{\tau}} \int_0^t C_T(x, v) e^{\left(\frac{\chi^2 - 1}{\tau}\right) v} \left(\frac{v}{t-v}\right)^{1/2} I_1 \left[ \frac{2\chi v^{1/2} (t-v)^{1/2}}{\tau} \right] dv \quad (14.a)$$

Onde

$$C_T(x, t) = \frac{M_o}{2A(\pi K_x)^{1/2}} \exp \left[ -\frac{(x - Ut)^2}{4K_x} \right] \quad (14.b)$$

onde  $v$  é a variável de integração e  $I_1$  é a função de Bessel modificada, de primeiro tipo e primeira ordem. Dessa forma, a distribuição no espaço e no tempo da concentração da substância dependeria dos parâmetros  $K_x$ ,  $\chi$  e  $\tau$ . A obtenção desses parâmetros pode ser conduzida através da solução de um Problema Inverso.

#### Formulação do Problema Inverso

De acordo com Silva Neto e Moura Neto (2005), Problemas Inversos podem ser classificados considerando-se a dimensão do espaço no qual o modelo matemático é definido e a dimensão do espaço ao qual as variáveis ou parâmetros estimados pertencem.

O problema inverso considerado neste trabalho consiste na estimação de parâmetros presentes no modelo de dispersão com zona morta, a partir de medições experimentais da concentração de uma substância lançada em um ponto determinado de curso fluvial, medições essas feitas em intervalos regulares de tempo. Deve-se salientar que esses parâmetros também estão presentes na solução explícita dessa equação. Esse é um problema inverso em que o modelo matemático é de dimensão infinita e aqui se está interessado na estimação de uma quantidade de dimensão finita.

Um método que se baseie nas medições, ao longo do tempo, de concentrações em um curso d'água abre a possibilidade de que se estimem, de forma simultânea, parâmetros de interesse. Isso pode ser desejável, principalmente se forem consideradas as dificuldades de se fazer essas determinações experimentalmente, como é o caso dos parâmetros  $\chi$  e  $\tau$ .

## A função objetivo

De acordo com Mesa (2000), o problema inverso normalmente é mal-posto, um vez que pode gerar soluções não-únicas e instabilidade nos parâmetros identificados, como consequência de vários erros : das próprias medições experimentais, do efeito de escala, interpolação e, ainda, das condições iniciais e de fronteira assumidas.

É comum, na prática de estimação de parâmetros, fazer-se uso do desvio-padrão como critério que indique o ótimo para um dado conjunto de parâmetros, que pode ser dado por

$$\min F(\Theta), F(\Theta) = \sqrt{\frac{\sum \sum [\Psi - \Psi(\Theta)]^2}{N_T N_o}} \quad (15)$$

onde  $\Theta_i \leq \Theta \leq \Theta_s$ , sendo  $\Theta$  o vetor de parâmetros, aqui com N componentes,  $\Theta_i$  e  $\Theta_s$  são, respectivamente, os vetores que contêm os limites inferiores e superiores para os parâmetros,  $N_T$  é o número de iterações,  $N_o$  é o número de nós,  $\Psi_{ij}^o$  são as observações e  $\Psi_{ij}$  os valores calculados para a variável simulada.

### Escolha:

- um espaço de busca inicial  $r^{(0)}$ ,
- um número de loops externos (N)
- um número de loops internos (M)
- um coeficiente de contração  $\varepsilon$ .

### Gere aleatoriamente uma solução inicial $X^*$

For i=1 to N

For j=1 to M

$X^{(j)} = X^* + R^{(j)} r^{(i-1)}$ , onde  $R^{(j)}$  é uma matriz diagonal de números entre -0.5 e 0.5

If Fitness ( $X^{(j)}$ ) < Fitness ( $X^*$ )

$X^* = X^{(j)}$

End if

End for

$r^{(i)} = (1 - \varepsilon) r^{(i-1)}$

End for

## Algoritmo de busca direta proposto por Luus-Jaakola

Há várias técnicas de Problemas Inversos, das quais se destaca a desenvolvida por Luus e Jaakola (1973). O algoritmo de Luus-Jaakola (LJ), como é conhecido, é de concepção simples e está estruturado de tal forma que soluções aleatórias são geradas e comparadas com as observações, de modo que progressivamente a região onde se dá a busca pelo ótimo dos parâmetros é reduzida. A Figura 2 exibe um pseudocódigo do algoritmo.

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

### Levantamento de dados de campo

No local onde se deu o experimento, o Rio São Pedro é bastante estreito (largura média de 2.4 m) e raso (profundidade média de 0.48 m). O ensaio consistiu no lançamento instantâneo de 2000 g de NaCl, diluídos em 15 l de água do rio, sendo o volume foi descarregado no centro do escoamento. Ao mesmo tempo amostras de água foram coletadas a, respectivamente, 50 e 100 m do ponto de lançamento, a cada 15 s, totalizando 60 amostras. A condutividade das amostras foi medida imediatamente após a coleta e a concentração de NaCl obtida através de curvas de calibração, que relacionaram condutividade e concentração.

A modelagem do fenômeno de mistura exige o conhecimento da vazão do rio. Na ocasião em que se realizou o experimento, bem como nos três dias anteriores, não houve precipitação e, dada as dimensões da bacia contribuinte, foi satisfatório assumir que o escoamento manteve-se em regime permanente durante o ensaio experimental.

A determinação da vazão pelo método clássico de correntometria esbarraria na dificuldade de se definir a área da seção transversal, de geometria complexa, além das limitações impostas ao uso do molinete fluviométrico, pelas baixas profundidades observadas no local. Por outro, o método químico, mais indicado para rios que apresentem essas características (Santos et al, 2001), possui o inconveniente de ser extremamente sensível à leitura de condutividade. Isso se torna particularmente crítico para soluções que, após a mistura com o corpo receptor, resultem em muito diluídas, fato observado no experimento de campo. Sendo assim, a vazão foi determinada pela integração das próprias curvas de concentração observadas nos dois pontos de coleta, pela expressão

Figura 2 - Pseudocódigo do algoritmo de Luus-Jaakola

$$Q = \frac{M_0}{\int_0^{\infty} C(x, t) dt} \quad (16)$$

Onde  $Q$  é a vazão,  $M_0$  a massa de traçador injetada e  $\int_0^{\infty} C(x, t) dt$  representa a área sob a curva de distribuição de concentração no tempo. A vazão assim calculada foi de, respectivamente,  $0.6789 \text{ m}^3\text{s}^{-1}$  e  $0.6419 \text{ m}^3\text{s}^{-1}$  nas seções a 50 e 100 m do ponto de injeção.

Esses valores foram os empregados nas duas abordagens adotadas neste estudo. Finalmente, para fins de suporte à abordagem unidimensional aqui adotada, na seção localizada a 100 m do ponto de injeção, em dado momento, três amostras foram coletadas, respectivamente, ao centro e nas margens esquerda e direita, sendo que as concentrações mostraram variação desprezível, demonstrando completa homogenização da solução na seção transversal.

### Estimação de parâmetros

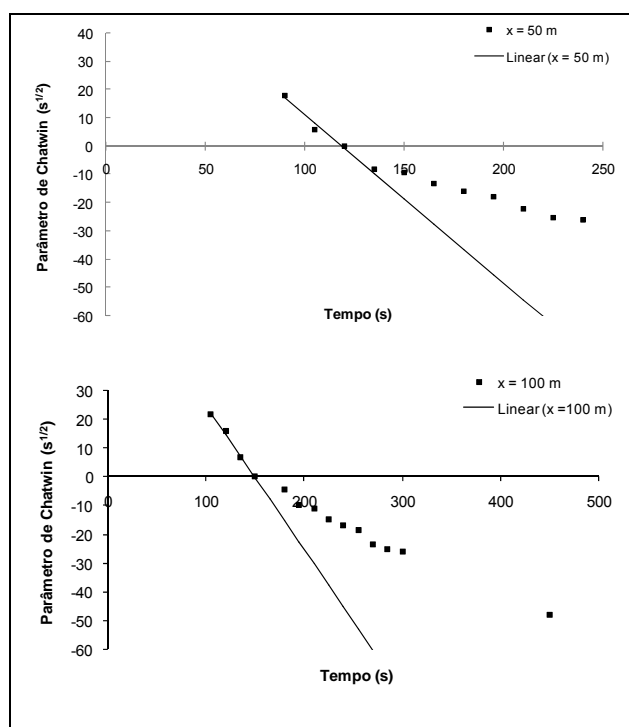
Com o objetivo de se reproduzir as curvas observadas nas duas seções de amostragem, dois métodos foram utilizados para se obter o coeficiente de dispersão, presente tanto na solução analítica do MAD quanto no MDZM. No emprego do MAD, utilizou-se o método de Chatwin, enquanto no MDZM a busca tanto pelo coeficiente de dispersão, quanto dos outros parâmetros essenciais à solução, foi empreendida através do método de Luus-Jaakola.

A Figura 3 apresenta a variação do parâmetro de Chatwin contra o tempo, para as duas seções. Pode-se observar que em ambas as estações não ficou configurada uma relação linear, se considerado todos os instantes de coleta.

Ainda que não satisfeita essa relação linear, aplicando-se o método calculou-se  $K_x$  e  $U$  para ambas as estações, resultados que são apresentados na Tabela 1. Observa-se um grande aumento no coeficiente de dispersão entre uma estação e outra, que é acompanhado pelo aumento da velocidade

**Tabela 1 - Valores de  $K_x$  e  $U$  a análise de Chatwin**

| Distância<br>(m) | $K_x$<br>( $\text{m}^2/\text{s}$ ) | $U$<br>(m/s) |
|------------------|------------------------------------|--------------|
| 50               | 0.1262                             | 0.4221       |
| 100              | 0.4459                             | 0.6677       |



**Figura 3 - Aplicação da análise de Chatwin.**  
A linha sólida é a reta de regressão.

Por outro lado, a aplicação do método de Luus-Jaakola gerou um outro conjunto de parâmetros, a serem empregados na solução analítica do MDZM. Como o método de Luus-Jaakola consiste em um algoritmo de busca, é necessário estabelecer-se um critério que indique a partir de que  $N$  e  $M$  (vide pseudocódigo na Figura 2) a acurácia da solução torna-se insensível ao número de iterações. Um bom critério para essa avaliação é o coeficiente de variação ( $C_v$ ), dado por

$$C_v = \frac{\sigma}{\mu} \quad (17)$$

onde  $\sigma$  e  $\mu$  são, respectivamente, desvio-padrão e média, obtidos a partir de  $N \times M$  iterações. Na Figura 4 é mostrada a variação do  $C_v$  em relação a  $N$ , respectivamente para as estações a 50 e 100 m do ponto de injeção. Verifica-se que, para ambas,  $C_v$  torna-se desprezível a partir de  $N=50$ . Assim, na aplicação de Luus-Jaakola, foram adotados os parâmetros encontrados após 50 iterações.

Adotando-se esse critério, os parâmetros obtidos pelo algoritmo de Luus-Jaakola foram os mos-

trados na Tabela 2 para um tempo médio de computação de 139 segundos.

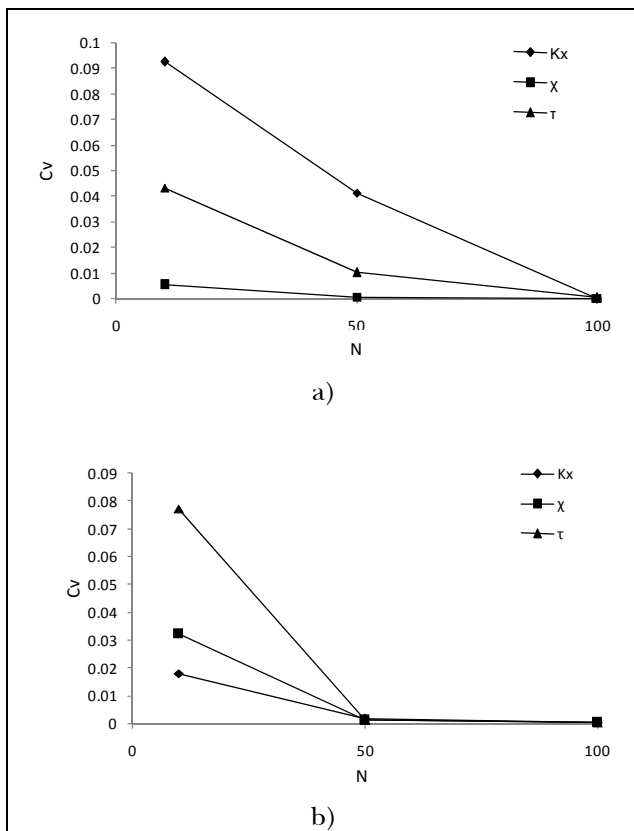


Figura 4 - Variação do  $C_v$  em relação a  $N$ :  
a) 50 m, b) 100 m.

Tabela 2 - Estimativa de  $K_x$ ,  $\chi$  e  $\tau$  obtida com o algoritmo de Luus-Jaakola

| X (m) | Par. Est.       | $K_x$ ( $m^2/s$ ) | $\chi$ | $\tau$ (s) |
|-------|-----------------|-------------------|--------|------------|
| 50    | $\mu_\theta$    | 0.0051            | 1.370  | 15.93      |
|       | $\sigma_\theta$ | 4.47E-05          | 4E-04  | 0.043      |
|       | $C_v(\%)$       | 0.86              | 0.03   | 0.3        |
| 100   | $\mu_\theta$    | 1.0734            | 2.769  | 835.2      |
|       | $\sigma_\theta$ | 0.0007            | 0.003  | 0.728      |
|       | $C_v(\%)$       | 0.06              | 0.12   | 0.09       |

Na Tabela 3 se mostra a análise estatística do experimento numérico realizado. Entre as estações, o coeficiente de dispersão estimado apresentou uma variação muito superior à verificada quando se adotou o método de Chatwin. Já a variação observada

para o parâmetro  $\chi$  deve ser entendida como uma progressiva redução da relevância da zona morta sobre o transporte da substância, à medida que o escoamento evolui a partir do ponto de injeção.

Tabela 3 - Análise estatística dos parâmetros estimados

| X (m) | $K_x$ ( $m^2/s$ ) | $\chi$ | $\tau$ (s) | F( $\Theta$ )<br>cc.(9)-<br>(g/l) |
|-------|-------------------|--------|------------|-----------------------------------|
| 50    | 0.0052            | 1.37   | 15.92      | 3.6016<br>(50x50)                 |
| 100   | 1.0742            | 2.76   | 836.3      | 2.5866<br>(50x50)                 |

Na Figura 5 são comparadas as simulações geradas a partir dos dois modelos com as observações de campo. Observa-se que, a despeito de o método de Chatwin ter permitido uma melhor simulação do pico de concentração, o MDZM utilizando parâmetros obtidos através de Luus-Jaakola apresentou muito melhor adequação aos dados observados.

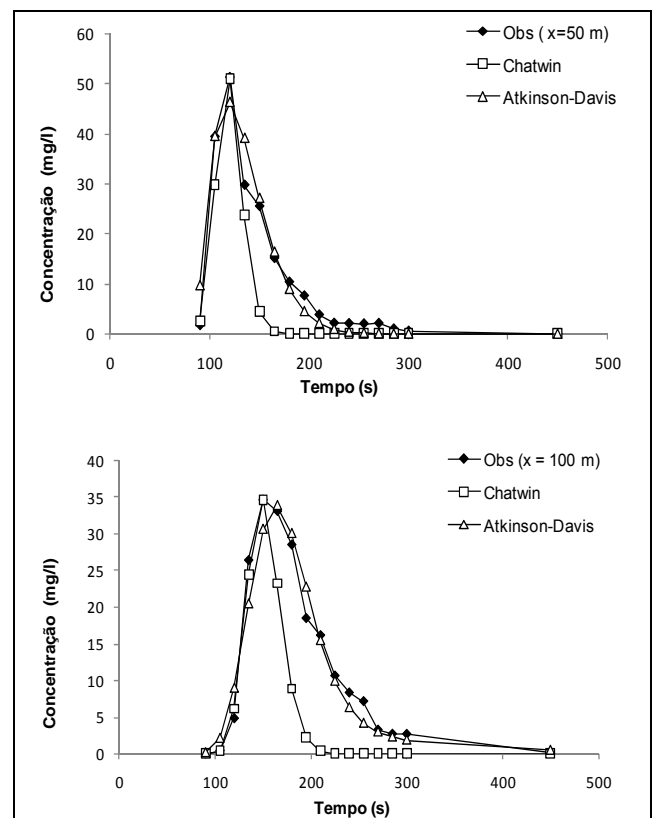


Figura 5 - Comparação das distribuições simuladas e observadas da concentração do traçador

A avaliação dos dois métodos pode ser conduzida através da própria função objetivo (vide Equação (15)), que aqui deve ser entendida como uma medida do erro médio na comparação das simulações com as observações. Os valores decorrentes da aplicação do método de Chatwin foram de 7.8745 mg/l (estação a 50m da injeção) e 8.8987 mg/l (estação a 100 m da injeção), enquanto que a adoção do modelo proposto por Atkinson-Davis gerou erros muito menores (vide Tabela 3), de 3.6016 mg/l e 2.5866 mg/l, respectivamente, mostrando muito maior eficiência na reprodução dos mecanismos dispersivos no trecho de rio estudado.

## CONCLUSÕES

Neste trabalho mostrou-se que a utilização da solução analítica proposta por Atkinson-Davis (2000) para o modelo de dispersão com zona morta, acoplada ao algoritmo de Luus-Jaakola, constitui-se em uma ferramenta mais robusta para reproduzir os mecanismos de dispersão de substâncias em rios naturais, sendo particularmente útil em rios montanhosos.

O bom desempenho dessa estratégia foi contrastado com o método de Chatwin, que encontra ampla aceitação na solução desse tipo de problema, mas que, no entanto, tem a sua aplicabilidade restrita por não contemplar os mecanismos presentes em zonas mortas. A estratégia aqui adotada ainda teve a vantagem de ter um desempenho superior na região de descenso da distribuição de concentração da substância.

Por último, deve-se destacar que neste estudo optou-se por uma avaliação do transporte de dada substância conservativa em regime de escoamento representativo do período de estio, o qual, por conta da baixa diluição, se apresenta como o cenário ambientalmente mais preocupante. Assim, embora os resultados obtidos possam contribuir para o entendimento do transporte de poluentes em rios montanhosos, deve-se ter em conta a particularidade da situação estudada, de modo que seria desejável uma avaliação similar para uma situação de cheia.

## AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem à FAPERJ (Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro)

e ao CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico).

## REFERÊNCIAS

- Atkinson, T.C. and Davis, P.M., 2000. Longitudinal dispersion in natural channels:1. Experimental results from the River Severn, Britains. *Hydrol. Earth System Sci.*, 4, 345-353.
- Barbosa Jr., A. R., Silva G.Q., Neves, B.V.B, Devens, J.A., 2005. Métodos diretos de determinação do coeficiente de dispersão longitudinal em cursos d'água naturais Parte 1 – Fundamentos teóricos. *Revista Escola de Minas, Minas Gerais*, 58(2), 139-145
- Chatwin, P.C., 1971. On the interpretation of some longitudinal dispersion experiments. *J. Fluid Mec.*, 48, 689-702
- Davis, P.M. and Atkinson, T.C., 2000. Longitudinal dispersion in natural channels:2. Na aggregated dead zone model and its application to the River Severn, Britain. *Hydrol. Earth System Sci.*, 4, 373-381.
- Fischer, H.B., 1967. The mechanics of dispersion in natural stream, *J. Hydraul. Div. A.S.C.E.*, 93, 187-216.
- Fischer H.B., List, E.J., Koh, R.C.Y., Imberger J., Brooks, N.H., 1979 *Mixing in inland and coastal waters*. New York: Academic Press, 483p.
- Guymer I., 1998. Longitudinal dispersion in sinuous channel with changes in shape. *J Hydraul Eng A.S.C.E.*, 124, 33-40.
- Harris, J., Bale, A.J., Bayne, B.L., Mantoura, R.F.C., Morris, A.W., Nelson, L.A., Radford, P.J., Uncles, R.J., Weston, S.A. and Widdows, J., 1984. A Preliminary Model of the Dispersal and Biological Effect of Toxin in the Tamar Estuary, England. *Ecological Modelling*, 22, 253-284.
- Kashefipour, S. and Falconer, R., 2002. Longitudinal dispersion coefficients in natural channels, *Water Research*, 36, 1596-1608.
- Lugon Jr, J., Silva Neto, A.J., Rodrigues, P.P.G.W., 2008. Assessment of dispersion mechanisms in rivers by means of an inverse problem approach, *Inverse Problems in Science and Engineering*, 8, 967-979.
- Luus, R e Jaakola, T.H.I.(1973) Optimization by Direct Search and Systematic Reduction of the Size of Search Region, *AICDhE Journal*, 19, 760-766.
- Mesa, H. R. (2000), Solución del Problema Inverso en Modelos de Flujo del Agua Subterránea Mediante un Algoritmo de Convergencia Global. Tesis de Doctorado en Ciencias Técnicas. ISPJAE. CIH. Ciudad de La Habana. Cuba.
- Nordin, C.F. and Sabol, G.V., 1974. Empirical data on longitudinal dispersion in rivers. *U.S. Geol. Surv. Water Resour. Invest.*, 20-74.



- Park, J.P., 1985. Modelling of Pollutant Dispersion. PhD Thesis, Newcastle upon Tyne, 313 pp.
- Santos, I., Fill, H.F., Sugai, M.R. von B., Buba, H., Kishi, R.T., Marone, E., Lautert, L.F. de C., 2001. Hidrometria Aplicada. Curitiba: LACTEC, 372 p.
- Silva Neto, A. J., Moura Neto, F. D., 2005. Problemas Inversos: Conceitos Fundamentais e Aplicações. Rio de Janeiro, EdUERJ, 172 pp.
- Sousa, E.P., 2009. Avaliação de Mecanismos Dispersivos em Rios Através de Problemas Inversos. Dissertação de Mestrado, Nova Friburgo, 125 pp.
- Swamee, P.K., Pathak, S. K. and Sohrab, M. 2000. Empirical relations for longitudinal dispersion in streams. *J. Env. Eng*, 126 (11), 1056-1062.
- Taylor, G.I., 1954. The dispersion of matter in turbulent flow through a pipe. *Proc. Roy. Soc. London, Ser A*, 223, 446-468.
- Versteeg, H.K. and Malalasekera, W., 1995. Computational Fluid Dynamics, An Introduction to Finite Volume Method. Logman Group, London, 257 pp.

***Estimation of Dispersion Parameters in Mountain Rivers Using the Luus-Jaakola Algorithm***

**ABSTRACT**

*This article presents the use of an optimization technique for inverse problems (the Luus –Jaakola method) to estimate the parameters which characterize dispersion mechanisms in dead zones present in natural flows. The strategy and model used are compared to the classical method of Chatwin, and the comparison is performed based on a case study that involved the simulation of tracer transport in a small river in the mountains of the state of Rio de Janeiro, which drains a major Environmental Protection Area. The approach adopted here had a superior performance in minimizing the errors found in the comparison between simulation and observation.*

**Key-words:** Inverse problems, dispersion models, dispersion in mountain rivers, Luus-Jaakola, Chatwin..