

Um Modelo Numérico para a Previsão da Trajetória de Óleo à Deriva no Mar Utilizando uma Configuração Inicial Ótima

Paulo Sérgio Dias da Silva, Priscila Henriques Gomes Oliveira, Gudelia Morales

LCMAT/LEPROD/UENF

paulosd@uenf.br, phgomesoliveira@gmail.com, gudelia@uenf.br

Recebido: 25/05/09 - revisado: 06/11/09 - aceito: 11/12/09

RESUMO

Assimilação Variacional de Dados e Equações Adjuntas são dois métodos que, combinados, produzem uma metodologia capaz de fornecer uma condição inicial bastante realística de um sistema em estudo para simulações computacionais, a um custo computacional e temporal razoáveis, quando apenas algumas observações e a dinâmica do sistema são conhecidas. Neste artigo, os fundamentos matemáticos e os procedimentos para se obter o adjunto de um dado programa computacional, uma tarefa fundamental para a aplicação da metodologia, são examinados.

Palavras-chave: *Assimilação Variacional de Dados, Equações Adjuntas, Ajuste de Trajetórias.*

INTRODUÇÃO

Situações envolvendo o derrame acidental de óleo no mar não são em absoluto incomuns num país onde a maior parte de seu petróleo provém de atividades *off-shore*, realizadas a um ritmo que tornou a nação auto-suficiente quanto à produção desse importante insumo. Na década de 1990, foram 17 os acidentes maiores com vazamentos no mar e em rios do Brasil; nesta década, este número já está em 21, segundo o INPE (www.dsr.inpe.br)

Um problema comum a vazamentos em corpos de água, mais particularmente àqueles no mar, é a extrema dificuldade em obter-se a configuração da mancha produzida pelo óleo após um determinado intervalo de tempo, a fim de tomar-se qualquer decisão que vise a minimizar as consequências do vazamento. Neste artigo, apresenta-se uma metodologia para, uma vez ocorrido um derramamento de óleo no mar, determinar-se a trajetória da mancha do óleo derramado, como um primeiro passo no processo de atenuar os efeitos nocivos do acidente. Para que a previsão computacional seja de fato útil às tarefas subseqüentes, deve ser fornecida com uma rapidez e precisão só possível recorrendo-se a modelos matemáticos e computacionais eficientes

Escoamentos geofísicos, por exemplo, fluxos atmosféricos, oceânicos e em sua superfície, águas subterrâneas, constituem um domínio bastante complexo da modelagem computacional. Os mode-

los numéricos empregados na simulação do comportamento desses escoamentos são representações na forma discreta das leis físicas que os governam, em geral, um sistema evolutivo de equações diferenciais parciais. Portanto, a condição inicial, descrevendo o estado ou a configuração inicial do sistema em estudo, tem de ser conhecida, a fim de se controlar a evolução da trajetória do sistema no espaço e no tempo. No entanto, nem sempre está disponível uma configuração do sistema analisado que sirva adequadamente como condição inicial a simulações computacionais, devido ao tamanho do domínio espacial do problema e à escassez de instrumentos para coleta de dados que, em geral, a própria natureza desse domínio acarreta. Como esses escoamentos estão sujeitos a uma série de fenômenos de difícil inclusão em um modelo numérico e até mesmo em modelos analíticos, sendo ainda, em certas situações, extremamente sensíveis a variações em suas condições iniciais, uma boa maneira de estabelecer-se a condição inicial para simulações computacionais é considerar, além da dinâmica do escoamento, todo o conjunto de informações por observação disponível sobre o sistema em estudo.

Dado um sistema, conciliar todas as informações disponíveis a seu respeito, que, na situação a ser considerada, são sua dinâmica e um conjunto de observações do mesmo, com o objetivo de gerar uma configuração numérica que, ao ser empregada como a condição inicial em uma simulação da dinâmica do sistema, produza estados do modelo numérico que reproduzem com um grau de precisão

pré-estabelecido as observações disponíveis, é o que realiza o método da Assimilação Variacional de Dados. Esse método vem exercendo um papel de importância crescente nas rotinas de previsão numérica do tempo (Talagrand, 1977), área em que foi descoberto o primeiro sistema dinâmico caótico, na década de 1960 (Lorenz, 1963), o que explica o grande volume de trabalhos teóricos e numérico-experimentais na busca por métodos para a determinação de uma condição inicial adequada aos modelos numéricos de previsão do tempo. Como consequência, um método variacional para Modelos Numéricos de Previsão do Tempo foi pela primeira vez implementado em 1991 nos EUA (Parrish, Derber, 1992).

Um problema envolvendo escoamentos geofísicos, em sua forma discreta, produz um número muito elevado de variáveis, de tal forma que a Assimilação Variacional de Dados é, de imediato, uma metodologia computacionalmente intratável. Uma solução para esta dificuldade é obtida com o emprego do método das Equações Adjuntas, que adequadamente insere o problema da determinação de uma condição inicial no domínio da Teoria do Controle Ótimo (Lions, 1971), e que terá seus fundamentos matemáticos aqui analisados com o necessário rigor.

A aplicação dos métodos da Assimilação Variacional de Dados e das Equações Adjuntas a problemas envolvendo derrame de óleo no mar se deve ao fato de, em geral, não se ter, em qualquer momento do intervalo de tempo determinado para a coleta de informações sobre o derrame, uma observação completa da mancha de óleo a partir dos instrumentos que fazem seu registro. Daí, se utilizar uma metodologia bem sucedida na previsão numérica do tempo também na previsão da trajetória de poluentes à deriva no mar. Alguns trabalhos, empregando basicamente o mesmo formalismo, têm surgido nos últimos 5 anos, principalmente relacionados a problemas de poluição atmosférica (Elbern, Strunk, Schimdt, Talagrand, 2007). A eficácia da metodologia é incontestável, possibilitando o tratamento computacional de problemas ambientais cujo número de variáveis de controle é da ordem de 10^5 a 10^7 , sendo já utilizado numa gama considerável de problemas, indo desde previsões em finanças (Kamien, Schwartz, 1991) a projetos de estruturas aerodinâmicas ótimas (Reuther, Jamenson, Farmer *et al*, 1996).

Na segunda seção deste trabalho são apresentados os fundamentos matemáticos dos dois métodos aqui utilizados: a Assimilação Variacional de Dados e o Método das Equações Adjuntas. Na ter-

ceira seção, a título de ilustração, trabalha-se com um modelo unidimensional que permite explorar vários aspectos dos métodos mencionados e desenvolver explicitamente a adjunta de uma dada equação. Finalmente, na terceira seção, descreve-se um experimento numérico bidimensional simplificado (embora sua dinâmica, bastante realista, já contenha os termos que trazem dificuldades às simulações computacionais), cujos resultados promissores levaram os autores a prosseguir em suas pesquisas.

FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

Inicia-se revendo um resultado da Análise Funcional que desempenha um papel crucial no desenvolvimento matemático que permite a redução de ordem no número de variáveis de controle no processo de Assimilação Variacional de Dados.

Definição: Sejam V um aberto em \mathbb{R}^n e $f: V \rightarrow \mathbb{R}$ uma função diferenciável. Então, $\forall x \in V$, a diferencial de f em x é o funcional linear tal que,

$$\forall v \in \mathbb{R}^n, df(x) \cdot v = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(x+tv) - f(x)}{t}.$$

Como $df(x)$ é um funcional linear de $(\mathbb{R}^n)^*$, o espaço vetorial dual de \mathbb{R}^n , decorrem de um resultado básico da Álgebra Linear a existência e a unicidade do vetor do \mathbb{R}^n , $\nabla f(x)$, tal que

$$df(x) \cdot v = \langle \nabla f(x), v \rangle, \quad (1)$$

sendo \langle, \rangle o produto interno canônico de \mathbb{R}^n .

Nas subseções seguintes, apresentam-se a formulação matemática dos dois métodos empregados numa metodologia eficaz ao tratamento computacional de problemas cuja dinâmica é complexa e que envolvem um número muito elevado de variáveis.

O método da Assimilação de Dados

Considere-se a seguinte situação: um sistema evolutivo S é analisado e, para tanto, dispõe-se de um conjunto de observações do sistema, coletadas no intervalo de tempo $[t_1, t_2]$, distribuídas no espaço e no tempo, ou seja, uma rede de instrumentos para a obtenção de dados sobre o sistema está disposta na região espacial onde reside o foco de interesse e colige informações durante o intervalo de tempo

arbitrado, embora nem todos os instrumentos façam, ao mesmo tempo, seus registros. Além disso, tem-se um modelo numérico capaz de simular a dinâmica do sistema. O objetivo é, com base nessas informações, determinar o estado ou a configuração de S em qualquer instante de tempo $t_f > t_2$, processo conhecido como Assimilação de Dados, entre aqueles que estudam os problemas relacionados com a dinâmica de fluxos geofísicos, e que, conceitualmente, é semelhante à Melhor Estimativa Linear Não Tendenciosa (Sorensen, 1980).

Pelo enfoque determinístico, tenta-se resolver o problema combinando-se em um modelo numérico todas as informações que se tem sobre S , tanto as provenientes de suas observações quanto às fornecidas pelo conhecimento de sua dinâmica, que gere uma condição inicial (isto é, a representação numérica da configuração inicial de S) tal que os estados do sistema fornecidos pelo modelo estejam em acordo, num sentido técnico aceitável e a ser definido a seguir, com as observações conhecidas.

Operacionalmente há duas classes de algoritmos capazes de realizar a Assimilação de Dados: sequenciais e variacionais. Nos algoritmos sequenciais, a cada instante de tempo em que há observações disponíveis, estas são utilizadas para corrigir a predição do modelo para aquele instante, produzindo um estado do sistema corrigido e a partir do qual será feita uma nova predição do estado do sistema. Este método está intimamente relacionado com o formalismo conhecido como filtro de Kalman (Kalman, 1960).

Nos algoritmos variacionais, busca-se um estado do sistema num instante de tempo, por exemplo, t_1 , tal que, se $X_1 = X(t_1)$ é a configuração do sistema no instante considerado, então os estados do sistema nos instantes de tempo posteriores a t_1 e produzidos pelo modelo a partir de X_1 estejam próximos (num sentido a ser bem definido posteriormente) das observações do sistema nos instantes de tempo correspondentes. Esse último método de resolução do problema é conhecido como Assimilação Variacional de Dados. É claramente iterativo, e nele, ao contrário dos algoritmos sequenciais, as informações sobre o sistema em estudo propagam-se para a frente e para trás no tempo, visando um ajuste global da evolução do modelo aos dados observados.

Neste trabalho optou-se pelo método da Assimilação Variacional de Dados, uma vez que este permite correções nas configurações do sistema para trás no tempo, o que é conveniente, quando se quer determinar uma configuração inicial ótima.

Considera-se, a seguir, a versão contínua do problema da Assimilação Variacional de Dados. Neste caso, os objetos matemáticos disponíveis são:

- i. as observações do sistema S , $Z: [t_1, t_2] \times V \rightarrow V$, tal que, $\forall t \in [t_1, t_2]$, $Z_t: V \rightarrow V$ é um operador diferenciável definido no espaço vetorial V munido do produto interno $\langle \cdot, \cdot \rangle$, sendo $[t_1, t_2]$ o intervalo de assimilação.
- ii. a dinâmica do sistema S , dada por

$$\frac{\partial X}{\partial t} = F(X), \quad (2)$$

sendo $X: [t_1, t_2] \times V \rightarrow V$ a trajetória do sistema S durante o intervalo de assimilação, $[t_1, t_2]$, $E = \{Y: [t_1, t_2] \times V \rightarrow V\}$, conjunto de trajetórias, e $F: E \rightarrow E$ um operador diferenciável.

- iii. $W: [t_1, t_2] \rightarrow L(V)$ é a função "peso", sendo $L(V)$ o espaço vetorial dos operadores lineares em V , que resulta das informações estatísticas dos instrumentos utilizados na coleta de informações sobre S e que, a cada $t \in [t_1, t_2]$, associa o operador linear injetivo

$$W(t): V \rightarrow V$$

- iv. o funcional quadrático

$$J: E \rightarrow \mathbb{R} \\ \bar{x} \mapsto \frac{1}{2} \int_D \langle W(t)(X(\bar{x}) - Z(t\bar{x})), W(t)(X(\bar{x}) - Z(t\bar{x})) \rangle dD \quad (3)$$

sendo $D = \{(t, \bar{x}); t \in [t_1, t_2], \bar{x} \in V\}$.

O problema da Assimilação Variacional de Dados é, então, encontrar a trajetória dos estados do sistema S , $X: [t_1, t_2] \times V \rightarrow V$ tal que X seja a solução de (2) que minimize o funcional (3).

Essencialmente, portanto, X tem de ser tal que, a cada $t \in [t_1, t_2]$, se a norma do operador $\|W(t)\|$ for grande, a norma do operador erro no instante correspondente, $\|X(t, \bar{x}) - Z(t, \bar{x})\|$, tem de ser pequena, ou seja, se as informações estatísticas de que se dispõe sobre os instrumentos empregados indicam que as observações num certo instante t , $Z(t, \bar{x})$ são de alta qualidade, então o erro entre o estado do sistema gerado pelo modelo, $X(t, \bar{x})$, e as observações $Z(t, \bar{x})$, no mesmo instante t , deve ser pequeno. Neste sentido se diz que os esta-

dos X do sistema gerados pelo modelo devem estar próximos das observações Z .

Como se busca a solução numérica da versão discreta do problema anterior, seria computacionalmente muito econômico se, em lugar da solução X , se procurasse a solução $X_1: V \rightarrow V \in O(V)$, conjunto dos operadores em V , que minimizasse a restrição do funcional J a $O(V)$, sendo $O(V)$ adequadamente chamado o espaço das configurações iniciais de S . A dificuldade aqui é não existir uma relação explícita entre J e X_1 , pois J é uma função de X . No entanto, se o problema (2) for bem posto, então o conhecimento de X e o de X_1 são equivalentes, e esta é uma informação matemática (e não apenas do particular sistema em estudo) preciosa. Para minimizar a restrição do funcional J ao espaço das configurações iniciais $O(V)$ do sistema S , usa-se o método das equações adjuntas.

O método das Equações Adjuntas

O método das equações adjuntas é empregado para se obter a diferencial da restrição do funcional J ao espaço das configurações iniciais $O(V)$ de S , seguindo uma argumentação matematicamente bem definida, desenvolvida pelos autores.

Reescreve-se o funcional (3) como

$$J: E \rightarrow \mathbb{R} \\ X \mapsto \int_D T(X(t), \bar{x}) dD \quad (4)$$

sendo

$$T: E \rightarrow \mathbb{R} \\ X(t, \bar{x}) \mapsto \frac{1}{2} \langle W(t)(X(t, \bar{x}) - Z(t, \bar{x})), W(t)(X(t, \bar{x}) - Z(t, \bar{x})) \rangle$$

Como a diferencial de J em $X \in E$ é um funcional linear no espaço de Hilbert E com o produto interno

$$\langle X(t, \bar{x}), Y(t, \bar{x}) \rangle_E = \\ = \int_D \langle W(t)(X(t, \bar{x}) - Y(t, \bar{x})), W(t)(X(t, \bar{x}) - Y(t, \bar{x})) \rangle dD$$

é possível empregar-se um resultado da Análise Funcional, conhecido como o Teorema da Representação de Riesz (Kreyszig, 1989), obtendo-se, $\forall H \in E$,

$$dJ(X) \cdot H = \langle \nabla_X J(X), H \rangle_E = \int_D \langle \nabla_X T(X(t, \bar{x})), H(t) \rangle dD, \quad (5)$$

sendo $\nabla_X J$ e $\nabla_X T$, respectivamente, o gradiente de J e o de T .

Considera-se, a seguir, a versão linear da equação (2):

$$\frac{\partial X}{\partial t} - \frac{\partial F}{\partial X} X = 0, \quad (6)$$

que resulta da substituição do operador F pela sua aproximação de primeira ordem em torno de um ponto de equilíbrio, omitido na equação, e na qual empregou-se a notação $(\frac{\partial F}{\partial X})$ para sua diferencial neste ponto, e a seguinte equação adjunta

$$\frac{\partial X}{\partial t} + (\frac{\partial F}{\partial X})^* X + \nabla_X T = 0 \quad (7)$$

sendo $(\frac{\partial F}{\partial X})^*$ o adjunto do operador $(\frac{\partial F}{\partial X})$.

Sejam $Y: [t_1, t_2] \times V \rightarrow V$ a solução de (7) tal que $Y(t_1) = 0 \in O(V)$ e X uma solução qualquer de (6). Tem-se, então que

$$\langle \frac{\partial X}{\partial t} - \frac{\partial F}{\partial X} X, Y \rangle + \langle \frac{\partial Y}{\partial t} + (\frac{\partial F}{\partial X})^* Y + \nabla_X T, X \rangle = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle Y, X \rangle + \langle \nabla_X T, X \rangle = 0$$

$$\therefore \frac{\partial}{\partial t} \langle Y, X \rangle = - \langle \nabla_X T, X \rangle$$

$$\langle Y, X \rangle \Big|_{t_1}^{t_2} = - \int_{t_1}^{t_2} \langle \nabla_X T, X \rangle dt = - \langle \nabla_X J, X \rangle$$

$$\therefore \langle Y_1, X_1 \rangle = \langle \nabla_X J, X \rangle \quad (8)$$

O significado de (8) deve ficar claro: seu lado direito é a expressão da diferencial de J (em relação a X), $dJ(X)$. Como X_1 é a projeção sobre $O(V)$ de X , o lado esquerdo de (8) é a expressão da diferencial da restrição de J (em relação a X_1). Pela unicidade do vetor gradiente, que permite a representação da última diferencial como um produto interno em $O(V)$, tem-se que Y_1 é precisamente o gradiente da restrição do funcional J a $O(V)$, ou seja, Y_1 é a projeção de $\nabla_X J$ sobre $O(V)$, isto é,

$$Y_1 = \nabla_{X_1} J. \quad (9)$$

Uma vez obtido $\nabla_{X_1} J$, e com uma configuração inicial X_1 escolhida, é possível buscar-se a perturbação $H \in V_1$ de X_1 tal que a trajetória X , solução de (2) e determinada pela configuração inicial $(X_1 + H)$, minimize (3). Para tanto, o conhecimento de

$\nabla_{x_p} J$ será utilizado juntamente com o de $J(X)$ e de X_1 , numa rotina de minimização baseada em gradientes, como, por exemplo, a L-BFGS (Liu, Nocedal, 1989), empregada em problemas de larga escala, a fim de determinar-se a configuração inicial com as propriedades requeridas. Note-se que o gradiente da restrição do funcional J a V_1 , $\nabla_{x_p} J$, passado à rotina de minimização, nada mais é que a solução da equação adjunta (7) com a condição $Y(t_2) = 0$.

UM EXEMPLO UNIDIMENSIONAL

Considera-se a seguinte situação: fluido (água) escoando em um rio ou canal de comprimento $l = x_2 - x_1$, durante um intervalo de observação $[t_1, t_2]$. Uma certa quantidade de poluente é derramada acima da entrada do canal no instante t_1 . Admite-se que o transporte do poluente é descrito pela equação de advecção-difusão unidimensional.

$$\frac{\partial c}{\partial t} + a \frac{\partial c}{\partial x} - k \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = 0, \quad (10)$$

com as condições inicial e de contorno:

$$\begin{cases} c(x, t_1) = f(x), & x_1 < x < x_2 \\ c(x_1, t) = g(t), & t_1 < t < t_2 \\ c(x_2, t) = h(t), & t_1 < t < t_2 \end{cases}$$

sendo $a: D \rightarrow \mathbb{R}$ a velocidade, k o coeficiente de difusividade e $c: D \rightarrow \mathbb{R}$ a concentração do poluente em $D = \{(x, t) \in \mathbb{R}^2; x_1 < x < x_2 \text{ e } t_1 < t < t_2\}$, que minimiza o funcional J , cuja fronteira é Γ .

Supondo que esteja disponível um conjunto de observações $\tilde{c}: D \rightarrow \mathbb{R}$ do canal durante o intervalo de tempo $[t_1, t_2]$, o problema da Assimilação de Dados consiste em encontrar uma solução de (10) que minimize o funcional

$$J: \mathbb{IE} \rightarrow \mathbb{R} \\ c \mapsto \frac{1}{2} \int_D (c - \tilde{c})^2 dD \quad (11)$$

sendo $\mathbb{IE} = C^2(D, \mathbb{R}) = \{f: D \rightarrow \mathbb{R} \text{ , } f \text{ é duas vezes diferenciável}\}$, ou seja:

$$\begin{aligned} \text{Min } J &= \frac{1}{2} \int_D (c - \tilde{c})^2 dD \\ \text{s.a. } \frac{\partial c}{\partial t} + a \frac{\partial c}{\partial x} - k \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} &= 0 \end{aligned} \quad (12)$$

Obtida a solução do problema, pode-se determinar em que instante de tempo o poluente atingirá um ponto x , sendo $x > x_2$.

Suponha-se ser de interesse apenas a posição x da frente da mancha de óleo com relação a um ponto de referência em uma das margens do canal. A geometria espacial do problema é, neste caso, unidimensional.

Sejam

$$\begin{aligned} \Gamma_e &= \{(x, t) \in \mathbb{R}^2; x = x_1 \text{ e } t_1 < t < t_2\} \\ \cup \{(x, t) \in \mathbb{R}^2; x = x_2 \text{ e } t_1 < t < t_2\} \\ \cup \{(x, t) \in \mathbb{R}^2; t = t_1 \text{ e } x_1 < x < x_2\}, & \text{ a fronteira de entrada, ou seja, o lugar geométrico dos dados de entrada de } D \text{ e} \\ \Gamma_s &= \{(x, t) \in \mathbb{R}^2; x = x_1 \text{ e } t_1 < t < t_2\} \\ \cup \{(x, t) \in \mathbb{R}^2; x = x_2 \text{ e } t_1 < t < t_2\} \\ \cup \{(x, t) \in \mathbb{R}^2; t = t_2 \text{ e } x_1 < x < x_2\}, & \text{ a fronteira de saída, ou seja, o lugar geométrico dos dados de saída de } D. \end{aligned}$$

Nos conjuntos $\{(x, t) \in \mathbb{R}^2; x = x_1 \text{ e } t_1 < t < t_2\}$ e $\{(x, t) \in \mathbb{R}^2; x = x_2 \text{ e } t_1 < t < t_2\}$, estabelecem-se as condições de fronteira do problema, enquanto que em $\{(x, t) \in \mathbb{R}^2; t = t_1 \text{ e } x_1 < x < x_2\}$ determinam-se as condições iniciais do problema. No conjunto $\{(x, t) \in \mathbb{R}^2; t = t_2 \text{ e } x_1 < x < x_2\}$, tem-se o comportamento da solução de (12) no instante t_2 , final do intervalo em estudo.

Em $\mathbb{IE} = C^2(D, \mathbb{R})$, define-se o produto escalar

$$\text{como: } \langle u, v \rangle_{\mathbb{IE}} = \int_D u(x, t) v(x, t) dD.$$

Para todo c e $\delta c \in C^2(D, \mathbb{R})$, sendo δc uma perturbação de c , seja J o funcional definido em (11). Então, por definição, obtém-se:

$$dJ(c) \cdot \delta c = \langle \nabla J(c), \delta c \rangle_{\mathbb{IE}} = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{J(c + t\delta c) - J(c)}{t} =$$

$$\begin{aligned}
 &= \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{2t} \int_D (2tc\delta c + t^2(\delta c)^2 - 2t\tilde{c}\delta c) dD \\
 &= \int_D \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{2t} (2tc(c - \tilde{c}) + t^2(\delta c)^2) dD \\
 &= \int_D \delta c(c - \tilde{c}) dD
 \end{aligned} \quad (13)$$

Portanto, pelo Teorema da Representação de Riesz

$$\nabla_{\mathbb{IE}} J(c) = c - \tilde{c} \quad (14)$$

Para u e $v \in \mathbb{IE}$, consideram-se as restrições $u_e = u|_{\Gamma_e}$ e $v_e = v|_{\Gamma_e}$, e $\mathbb{IE}_0 = \{u|_{\Gamma_e}; u \in \mathbb{IE}\}$. Portanto, Γ_e é um espaço vetorial real, pois se u_e e $v_e \in \mathbb{IE}_0$, então u e $v \in \mathbb{IE}$, que é um espaço vetorial real, logo $u + \alpha v \in \mathbb{IE}$, donde $(u + \alpha v)_e \in \mathbb{IE}_0$, $\forall \alpha \in \mathbb{R}$. Em \mathbb{IE}_0 define-se o produto interno:

$$\langle u_e, v_e \rangle_{\mathbb{IE}_0} = \int_{\Gamma_e} u(x, t) v(x, t) d\Gamma_e,$$

de modo que o gradiente da restrição do funcional J à fronteira de entrada de D , Γ_e , $J_e = J|_{\Gamma_e}$, é dado por uma expressão da forma:

$$dJ_e(u_e) \delta u_e = \langle \nabla J_e(u_e), \delta u_e \rangle_{\mathbb{IE}_0} = \int_{\Gamma_e} \nabla J(u_e) \delta u_e d\Gamma_e \quad (15)$$

Mostra-se agora que o processo pelo qual se obtém (15), a partir de (13), não é outro senão o método de integração por partes, com as condições de fronteiras adequadas ao presente objetivo.

Utilizando em (15) o fato de que $\nabla J(c) = c - \tilde{c}$, tem-se para uma solução c de (12) e uma perturbação δc de c , que:

$$dJ(c) \cdot \delta c = \int_D (c - \tilde{c})(x, t) \delta c(x, t) dD$$

Definindo

$$\begin{aligned}
 &L: C^2(D, \mathbb{R}) \rightarrow C(D, \mathbb{R}) \\
 &c \mapsto \frac{\partial c}{\partial t} + a \frac{\partial c}{\partial x} - k \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}
 \end{aligned}$$

tem-se que, para toda $\delta c \in \mathbb{IE}$ perturbação de $c \in \mathbb{IE}$ tal que $L(c) = 0$,

$$L(\delta c) = \frac{\partial \delta c}{\partial t} + a \frac{\partial \delta c}{\partial x} - k \frac{\partial^2 \delta c}{\partial x^2} = 0.$$

Seja $\delta'c \in \mathbb{IE}$. Então,

$$\begin{aligned}
 dJ(c) \cdot \delta c &= \int_D (c - \tilde{c})(x, t) \delta c(x, t) dD = \\
 &\int_D [(c - \tilde{c}) \delta c - \left(\frac{\partial \delta c}{\partial t} + a \frac{\partial \delta c}{\partial x} - k \frac{\partial^2 \delta c}{\partial x^2} \right) \delta'c] dD. \therefore \\
 \therefore dJ(c) \cdot \delta c &= \int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} (c - \tilde{c}) \delta c dx dt - \\
 &- \int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} \left(\frac{\partial \delta c}{\partial t} + a \frac{\partial \delta c}{\partial x} - k \frac{\partial^2 \delta c}{\partial x^2} \right) \delta'c dx dt
 \end{aligned} \quad (16)$$

Integrando por partes os termos da segunda parcela de (16), tem-se

$$\begin{aligned}
 &\int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial \delta c}{\partial t} \delta'c dx dt = \int_{t_1}^{t_2} \delta c \delta'c \Big|_{x_1}^{x_2} dx - \int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial \delta'c}{\partial t} \delta c dx dt \\
 &a \int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial \delta c}{\partial x} \delta'c dx dt = a \int_{t_1}^{t_2} \delta c \delta'c \Big|_{x_1}^{x_2} dt - a \int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial \delta'c}{\partial x} \delta c dx dt \\
 &- k \int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial^2 \delta c}{\partial x^2} \delta'c dx dt = -k \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial \delta c}{\partial x} \delta'c \Big|_{x_1}^{x_2} dt + \\
 &+ k \int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial \delta c}{\partial x} \frac{\partial \delta'c}{\partial x} dx dt = \\
 &= -k \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial \delta c}{\partial x} \delta'c \Big|_{x_1}^{x_2} dt + k \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial \delta'c}{\partial x} \delta c \Big|_{x_1}^{x_2} dt - \\
 &- k \int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial^2 \delta'c}{\partial x^2} \delta c dx dt
 \end{aligned}$$

Portanto,

$$\begin{aligned}
 dJ(c) \cdot \delta c &= \int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} [(c - \tilde{c}) \delta c dx dt - \int_{x_1}^{x_2} \delta c \delta'c \Big|_{t_1}^{t_2} dx - a \int_{t_1}^{t_2} \delta c \delta'c \Big|_{x_1}^{x_2} dt \\
 &+ k \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial \delta c}{\partial x} \delta'c \Big|_{x_1}^{x_2} dt - k \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial \delta'c}{\partial x} \delta c \Big|_{x_1}^{x_2} dt + \\
 &+ \int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} \delta c \left(\frac{\partial \delta'c}{\partial t} + a \frac{\partial \delta'c}{\partial x} + k \frac{\partial^2 \delta'c}{\partial x^2} \right) dx dt \\
 \therefore dJ(c) \cdot \delta c &= - \int_{t_1}^{t_2} \delta c \delta'c \Big|_{x_1}^{x_2} dx - a \int_{t_1}^{t_2} \delta c \delta'c \Big|_{x_1}^{x_2} dt + \\
 &+ k \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial \delta c}{\partial x} \delta'c \Big|_{x_1}^{x_2} dt - k \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial \delta'c}{\partial x} \delta c \Big|_{x_1}^{x_2} dt + \\
 &+ \int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} \delta c \left(\frac{\partial \delta'c}{\partial t} + a \frac{\partial \delta'c}{\partial x} + k \frac{\partial^2 \delta'c}{\partial x^2} + (c - \tilde{c}) \right) dx dt
 \end{aligned}$$

Tomando-se, então, $\delta'c$ como solução da equação adjunta não-homogênea

$$\frac{\partial \delta'c}{\partial t} + a \frac{\partial \delta'c}{\partial x} + k \frac{\partial^2 \delta'c}{\partial x^2} + (c - \tilde{c}) = 0, \text{ a condição inicial } \delta'c(t_2, x) = 0, \forall x \in [x_1, x_2], \text{ e condições de fronteira } \delta'c(t, x_1) = \delta'c(t, x_2) = 0, \forall t \in [t_1, t_2], \text{ obtém-se:}$$

$$\begin{aligned} dJ(c) \cdot \delta c &= \int_{x_1}^{x_2} \delta c(t_1, x) \delta'c(t_1, x) dx + \\ &+ k \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial \delta'c(t, x_1)}{\partial x} \delta c(t, x_1) dt \\ &- k \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial \delta'c(t, x_2)}{\partial x} \delta c(t, x_2) dt \\ dJ(c) \cdot \delta c &= \\ &= \left\langle \delta'c(t_1, x) + k \left(\frac{\partial \delta'c(t, x_1)}{\partial x} - \frac{\partial \delta'c(t, x_2)}{\partial x} \right), \delta c(t, x) \right\rangle_{\mathbb{E}_0} \quad (17) \end{aligned}$$

Logo, o gradiente de J com relação às condições iniciais e de fronteira, ou seja, restrito ao espaço Γ_e , dado por (11), é:

$$\nabla_{\mathbb{E}_0} J = \delta'c(t_1, x) + k \left(\frac{\partial \delta'c(t, x_1)}{\partial x} - \frac{\partial \delta'c(t, x_2)}{\partial x} \right) \quad (18)$$

Portanto, em vez de resolver-se iterativamente o problema (11), por meio de uma rotina de minimização, considera-se o problema:

$$\text{Min}_{\delta'c \in \mathbb{E}_0} \langle \nabla_{\mathbb{E}_0} J, \delta'c \rangle,$$

que representa um ganho considerável nas computações necessárias.

EXPERIMENTO NUMÉRICO

Estudou-se o problema da determinação da evolução de uma mancha produzida por um derrame de óleo em uma região do mar cuja hidrodinâmica é conhecida, dispondo-se também de um conjunto de observações da mancha no intervalo de tempo $[t_1, t_2]$. Supôs-se que as observações eram todas incompletas, de modo que, em qualquer instante $t_1 < t < t_2$, a configuração disponível $Z(t)$ não reproduzindo integralmente a mancha de óleo, não poderia, portanto, ser utilizada como condição inicial para a integração do modelo numérico no instante t .

O primeiro passo do experimento foi produzir um derrame artificial de óleo em um domínio espacial de $6000\text{m} \times 4400\text{m}$, discretizado por uma malha bidimensional de 21×21 nós, sendo $\Delta x = 300\text{m}$, $\Delta y = 220\text{m}$ e o intervalo de tempo para a análise $[0, 30000]$ em segundos, com $\Delta t = 300\text{s}$. Tomou-se a velocidade do meio como $\bar{u} = (u, v)$, sendo $u = 1 \cdot 10^{-2} \text{ms}^{-1}$ e $v = 0$ e k o coeficiente de difusividade variável. O transporte do óleo foi descrito pela equação de advecção-difusão bidimensional

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} - k \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) = 0, \quad (19)$$

que é o modelo de transporte de óleo na superfície do mar universalmente empregado (Lehr, Cekirge, 1980).

A fim de compreender a execução computacional dos procedimentos anteriormente descritos, examine-se o fluxograma do programa para a Assimilação Variacional de Dados via o Método das Equações Adjuntas, conforme a Figura 1.

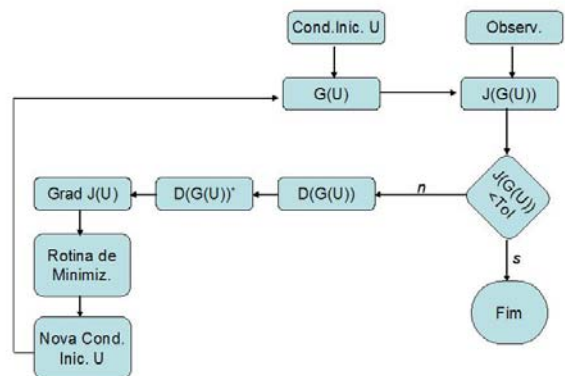


Figura 1 - Fluxograma para a Assimilação Variacional

Integrou-se, então, a equação (19) em $G(U)$ com uma condição inicial arbitrária, conforme a figura 2, e foram, então, armazenadas, como observações do sistema, as configurações obtidas nos instantes $t = 10 \times i$, $i = 1, \dots, 9$. São mostradas as configurações parciais da mancha de óleo para $t = \Delta t \times 50$ e $t = \Delta t \times 90$, respectivamente, nas Figura 3 e Figura 4. Perturbou-se, então, a configuração inicial aleatoriamente, utilizando-se a função RAND da biblioteca do FORTRAN 90, obtendo-se a configuração perturbada, conforme a Figura 5. A partir daí se inicia o processo da Assimilação Variacional de Dados, sen-

do que em $G(U)$ a equação (19) é integrada com uma condição inicial obtida da rotina de minimização, e o erro entre as configurações geradas pelo modelo e as observações é avaliado em $J(G(U))$. Se o erro estiver acima da tolerância estabelecida, o programa principal chama a sub-rotina $D(G(U))^*$ para obter a integração para trás no tempo da equação adjunta não-homogênea de (19)

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + k \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) = 0, \dots \quad (20)$$

a qual fornece o gradiente do funcional J com relação às condições iniciais do problema, e que é passado à rotina de minimização, fornecendo uma nova configuração inicial U que, ao ser integrada em $G(U)$, diminuirá o valor de $J(G(U))$. Quando o erro entre as configurações geradas pelo modelo e as observações, avaliado em $J(G(U))$, estiver abaixo da tolerância estabelecida, o programa termina com a condição inicial ótima determinada, conforme Figura 6. No exemplo considerado, como as configurações geradas pelo modelo computacional foram tomadas como as observações do sistema (procedimento conhecido na literatura como "identical twins"), a condição inicial ótima recupera a condição inicial do problema, conforme Figura 6.

Observe-se que não há problema em integrar a equação de advecção-difusão (19) e sua adjunta não-homogênea (20) em um mesmo programa, uma vez que cada uma dessas etapas é realizada em diferentes sub-rotinas.

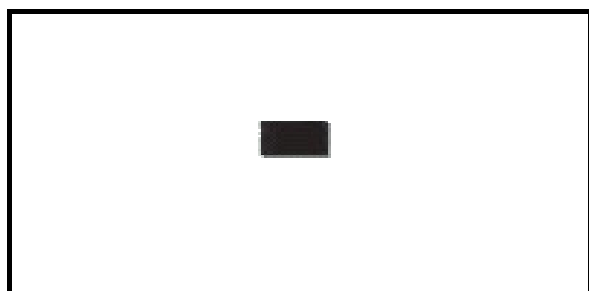


Figura 2 - Condição inicial do sistema

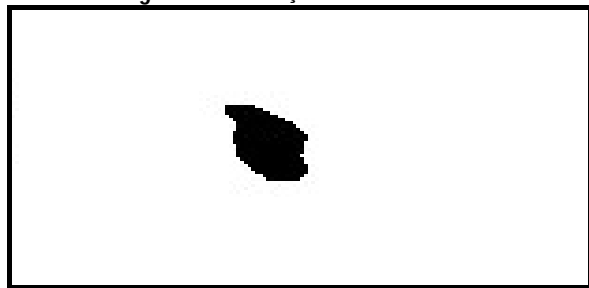


Figura 3 - Configuração parcial do sistema em $t = \Delta t \times 50$

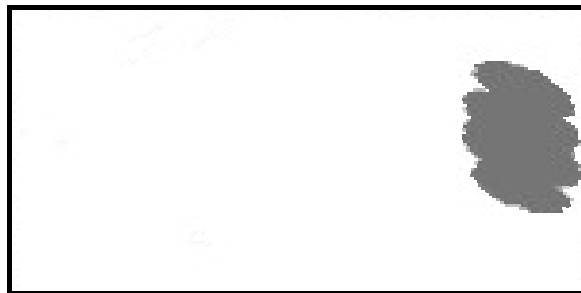


Figura 4 - Configuração parcial do sistema em $t = \Delta t \times 90$



Figura 5 - Configuração inicial perturbada aleatoriamente

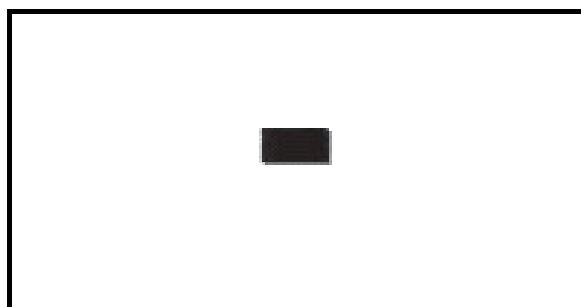


Figura 6 - Configuração inicial do sistema recuperada (compare-se com a figura 2)

CONCLUSÕES

A utilização da Assimilação de Dados, em que as observações do sistema estudado agem como uma condição à qual a simulação computacional do sistema também tem de satisfazer, combinada com o Método das Equações Adjuntas, fornece uma estratégia para a obtenção de configurações computacionais do sistema estudado bastante confiáveis e com alta precisão, a um custo computacional baixo e num intervalo de tempo que permite tomadas de decisão durante um derrame acidental de óleo em rios ou no mar.

Neste trabalho, foram apresentados e discutidos aspectos matemáticos e numéricos que permitem analisar a metodologia desenvolvida e sua implementação. A aplicação a problemas reais exige,

deste modo, a disponibilidade de dados para a assimilação e o desenvolvimento da adjunta ao sistema de equações que descreve a dinâmica do sistema considerado.

Uma questão posterior, que pode ser ainda abordada com o formalismo aqui desenvolvido, é a da localização ótima de instrumentos de observação (Daescu, Navon, 2004) suplementando uma rede de observação já existente ou para sua implantação.

Pretende-se que os resultados aqui apresentados motivem a interação com grupos de pesquisa no Brasil.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem ao suporte financeiro da CAPES.

REFERÊNCIAS

- DAESCU, D., NAVON, I.M. Adaptive observations in the context of 4D-Var data assimilation. *Meteorological Atmospheric Physics*, 85, p.205-226, 2004.
- ELBERN, H., STRUNK, A., SCHIMDT, H., TALAGRAND, O. Emission rate and chemical state estimation by 4-dimensional variational inversion. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 7, p.3749-3769, 2007.
- FAURE, C., PAPEGAY, Y. *Odyssee User's Guide*, Version 1.7, INRIA, 1998.
- KALMAN, R.E. A new approach to linear filtering and prediction problems. *Transaction of the ASME – Journal of Basic Engineering*, 82 (Series D), p.33-45, 1960.
- KAMIEN, M.I., SCHWARTZ, N.L. *Dynammic optimization: the calculus of variation and optimal control in economics and management*. 2. ed. Cambridge: Elsevier Science, 1991. 396p.
- KREYSZIG, E. *Introductory Functional Analysis with Applications*. New York: John Wiley and Sons, 1989. 704p.
- LEHR, W.J., CEKIRGE, H. M. Oil slick movements in the Arabian Gulf. *Proceeds of Petroleum and Marine Environment*, Monaco, 1980. 18p.
- LIONS, J.L. *Optimal Control of Systems Governed by Partial Differential Equations*. Berlin Heidelberg New York: Springer-Verlag, 1971. 396p.
- LIU, D., NOCEDAL, J. On the limited memory BFGS method for large scale minimization. *Mathematical Programming*, 45, p.503-528, 1989.
- LORENZ, E.N. Deterministic non-periodic flows. *Journal of Atmospheric Sciences*, 20, p.130-141, 1963.
- REUTHER, J., JAMESON, A., FARMER, J., MARTINELLI, L., SAUNDERS, D. Aerodynamic shape optimization of complex aircraft configurations via an adjoint formulation. *AIAA*, p.96-94, 1996.
- PARRISH, D.F., DERBER, J.D. The National Meteorological Center spectral statistical interpolation analysis system. *Mon. Wea. Rev.*, 120:1747–1763, 1992.
- SORENSEN, H.W. *Parameter estimation: principles and problems*. United Kingdom.: Marcel Dekker, 1980. 382p.
- TALAGRAND, O. Assimilation of observations, an introduction. *Journal of Meteorological Society of Japan*, v. 75, n. 1B, p.191-209, 1997.

Numerical Model to Forecast the Trajectory of Drifting Oil at Sea Using an Optimal Initial Configuration

ABSTRACT

Variational Data Assimilation and Adjoint Equations are two methods which can be combined in order to produce a methodology able to generate, at a reasonable computational and temporal cost, a very realistic initial configuration of a system under examination to be used in computational simulations, in particular when only a set of observations and the dynamics of the systems are known. In this paper, the mathematical foundations and the algorithmical procedures to obtain the adjoint of a given computational program, an essential task in order to apply the methodology, are examined.

Keywords: *Variational Data Assimilation, Adjoint Equations, Adjustment of Trajectories.*