

Uma ferramenta computacional efetiva para a Gestão Ambiental

Paulo Sérgio Dias da Silva (LCMAT/UENF – RJ/Brasil) - paulosd@uenf.br
• Av. Alberto Lamego, 2000, Horto Campos dos Goytacazes-RJ, 28013-602
Priscila Henriques Gomes Oliveira (LEPROD/UENF – RJ/Brasil) - phgomesoliveira@gmail.com
Gudelia Morales (LEPROD/UENF – RJ/Brasil) - gudelia@uenf.br

RESUMO A Gestão Ambiental torna-se, cada vez mais, uma área de suma importância na preservação dos recursos hídricos, da flora e da fauna do planeta. Embora tenha havido algum avanço na conscientização de empresários, cidadãos e na legislação, existe ainda uma deficiência de metodologias para ações eficazes, por parte das autoridades, quando necessário. Neste artigo, apresenta-se, como ferramenta confiável para tais ações, o método da Assimilação Variacional de Dados e o das Equações Adjuntas que, combinados, são capazes 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, permitindo um primeiro passo na remediação de um acidente envolvendo o derrame de óleo em corpos de água.

Palavras-chave Assimilação Variacional de Dados; Equações Adjuntas; Previsão de Trajetórias de Óleo no Mar.

ABSTRACT *Environmental Management is becoming an area of paramount importance in the preservation of water resources, flora and fauna of our planet. Despite the advances in entrepreneurs' and citizens' minds as well as in Law, there is still a deficiency in methodologies of efficient actions by the authorities, when necessary. We present here a reliable computational tool designed for those situations based on the Variational Data Assimilation and Adjoint Equations methods which, when combined, produce a methodology able to give, at a reasonable computational and temporal cost, a very realistic initial configuration of the system under examination to be used in computational simulations; particularly when only a set of partial observations and the dynamics of the systems are known, in order to take a first step to remedy an accident caused by an oil spillage on the sea surface.*

Keywords *Variational Data Assimilation; Adjoint Equations; Trajectory Prediction of an Oil Spillage.*

1. INTRODUÇÃO

Pode-se avaliar facilmente a importância da Gestão de Recursos Naturais, no contexto da Preservação Ambiental, considerando o crescimento vertiginoso de trabalhos técnico-científicos dedicados ao assunto, apenas na última década, acompanhado do fortalecimento da legislação ambiental. Contudo, quando se trata de gerir os recursos naturais ou de administrar corretamente os efeitos de resíduos industriais sobre o meio ambiente, de um ponto de vista estritamente técnico, a situação é ainda bastante desalentadora: uma coisa é definir e garantir a utilização racional dos recursos naturais, assegurando sua sustentabilidade; outra, bem diferente, é minimizar o impacto ambiental de certos acidentes, pois nem a segurança nas instalações industriais atinge ainda os 100% de eficiência, nem determinadas atividades bastante perigosas ao meio ambiente podem, por ora, ser simplesmente abandonadas.

Dentre os acidentes ambientais, há duas classes extremamente danosas, seja pela velocidade com que se desenvolvem, seja pela dificuldade para a previsão de seu alcance, a saber: os derrames de poluentes líquidos em rios e no mar e a emissão de gases potencialmente perigosos na atmosfera. No caso dos derrames de poluentes em corpos de água, considerando que atualmente cerca de 80% da produção de petróleo, no Brasil, são provenientes de plataformas marinhas, que o histórico de acidentes com vazamento de óleo tanto na exploração em plataformas quanto no transporte por navios não é tranquilizador, e que os efeitos nefastos desses derrames perduram, algumas vezes, por duas décadas, tempo necessário para a recuperação da fauna e flora atingidas, com importantes reflexos em atividades econômicas locais e na subsistência de habitantes, a redução de áreas atingidas, em caso de um derrame acidental de óleo, é um dos objetivos primordiais de gestores ambientais, exigindo deles uma capacidade de previsão rápida e confiável para uma eficiente tomada de decisões.

Uma análise dos procedimentos após o vazamento de óleo de um terminal da Petrobras na Baía da Guanabara, em janeiro de 2000, visando à contenção da mancha de óleo produzida, é um dos exemplos de que a modelagem computacional de derrame de poluentes em corpos de água (assim como a da emissão de gases na atmosfera) tem necessariamente de incorporar observações, posteriores ao fato, das regiões vizinhas àquela onde o evento ocorreu, para uma previsão precisa do desenvolvimento da mancha de óleo; uma tarefa que precede qualquer tomada de decisão efetiva.

Uma breve visão do que ocorreu, quando do vazamento de óleo, em 2000, na Baía da Guanabara, feita na seção 2, esclarecerá o método apresentado na seção 3, desenvolvido, inicialmente, para a previsão numérica do tempo e adaptado, como se verá na seção 4, ao problema da determinação da evolução da mancha de óleo.

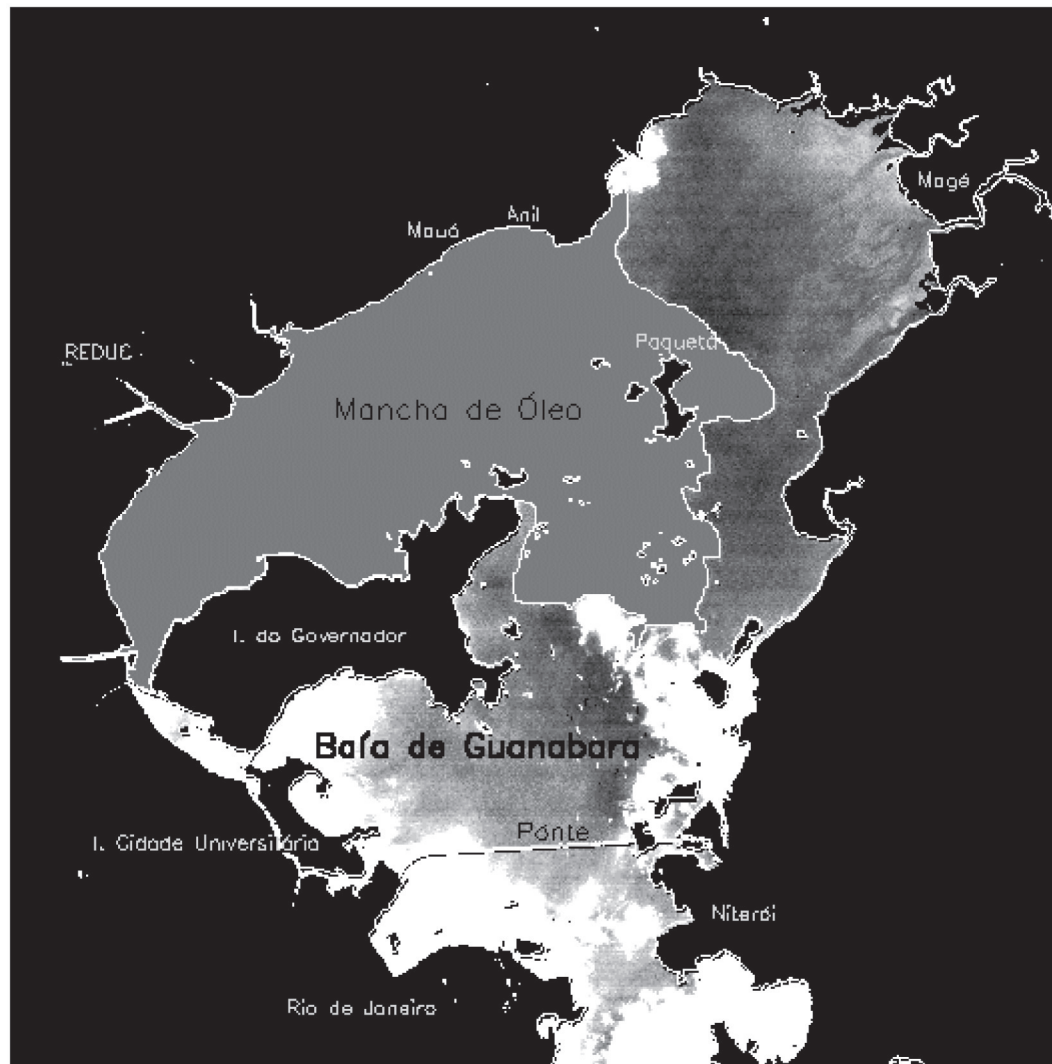
2. DESCRIÇÃO DE UM ACIDENTE

Os procedimentos da Petrobras, em caso de vazamento, seguem as seguintes etapas, na ordem apresentada (PETROBRAS, 2005¹): 1. Cercar com barreiras flutuantes, colocadas contra o vento e as correntes, a mancha formada, para evitar que o óleo se espalhe e 2. Retirar a mistura óleo e água, para a separação dos dois fluidos.

Em 18/01/2000, cerca de 1,3 mil toneladas de óleo combustível (tipo MF-380) vazaram de uma das 14 linhas do sistema de transferência de produtos da refinaria Duque de Caxias (REDUC) para o terminal da Ilha D'Água (TORGUA), na Baía de Guanabara. A mancha de óleo, que pode ser observada na Figura 1, se espalhou por extensa área e atingiu diversos ecossistemas, incluindo praias, costões rochosos e manguezais, localizados na parte norte/nordeste da baía. Dentre as praias mais seriamente atingidas, estão as do litoral de Magé, as praias de Mauá, Anil, Paquetá, Ilha do Governador e São Gonçalo. A Área de Proteção Ambiental de Guapimirim, severamente afetada, é um dos mais importantes nichos ecológicos da região, abrangendo um manguezal de 14 mil hectares (KAMPEL e AMARAL, 2002).

1 www.portalmaritimo.com

Figura 1 – Mancha de óleo formada em 19/01/2000, um dia após o vazamento.



Fonte: KAMPEL e AMARAL (2002).

Note-se o alcance da mancha de óleo, pois se manguezais ao norte e nordeste foram atingidos, também o foi o manguezal próximo à Ilha do Fundão, já quase no extremo oeste da baía.

Enquanto muito tem sido feito no desenvolvimento de produtos químicos e equipamentos que ajudem a recolher a mistura óleo e água, o procedimento número 1, acima, continua o mesmo e suas deficiências aparecem seguidamente em acidentes com vazamentos no mar.

O modelo descrito nas próximas seções oferece uma alternativa mais eficiente ao procedimento número 2, por considerar não só a dinâmica do sistema óleo/mar, submetido à ação de ventos e correntes, mas também a disposição da mancha de óleo formada com o vazamento, e, então, simular computacionalmente a evolução da mancha, sob essas condições.

3. FORMULAÇÃO MATEMÁTICA DO PROBLEMA

Com o objetivo de dirimir as deficiências dos planos para remediar acidentes produzindo óleo à deriva, adota-se um método que, além da simulação computacional da dinâmica do sistema óleo/mar, incorpora observações da mancha de óleo produzida no acidente, com a finalidade de corrigir as previsões fornecidas pelas simulações.

Os dados necessários a um modelo confiável, séries históricas de ventos, correntes, salinidade, etc, são obtidos pelas empresas operando em plataformas. Quanto à assimilação de dados, ou seja, a maneira como as observações do sistema são empregadas na correção das simulações, há duas classes de algoritmos capazes de realizar tal tarefa: 1. algoritmos sequenciais consistem em, a cada instante de tempo em que existe uma observação disponível, verificar a discrepância entre a observação e a previsão feita por simulação para aquele instante e empregar a previsão corrigida pela observação como condição inicial para uma nova simulação. Este é o caso dos pilotos automáticos e, em geral, dos processos submetidos ao filtro de Kalman; 2. algoritmos variacionais realizam a correção da condição inicial do modelo empregando de uma vez todas as observações disponíveis, de modo que as previsões geradas por uma condição inicial tem de ajustar-se a todas as observações em um dado intervalo de tempo. A busca pela condição inicial é feita minimizando-se o erro entre as previsões obtidas com a condição inicial e a observação correspondente.

Vemos assim que o fluxo de informações, nos algoritmos sequenciais, é sempre no sentido crescente do tempo, enquanto que, no caso dos algoritmos variacionais, como se busca um ajuste global das previsões às observações, este percorre todo o intervalo de tempo em que há observações disponíveis. Sendo assim, não é difícil concluir que algoritmos variacionais exijam um esforço computacional superior ao dos algoritmos sequenciais, sendo sua implementação possível somente com o emprego do método das equações adjuntas.

A seguir, são apresentadas a formulação matemática de cada um dos conceitos aqui empregados.

Definição: Sejam A um aberto em \mathbb{R}^n e $f:A \rightarrow \mathbb{R}$ uma função diferenciável. Então, $\forall x \in A$, 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 .

Seja S um sistema evolutivo, observado durante o intervalo de tempo $[t_1, t_2]$, do qual se dispõe de um conjunto de observações, coletadas no mesmo intervalo de tempo e distribuídas no domínio espacial, onde reside o foco de interesse sobre S . Além disso, é conhecida a dinâmica de S . Com base nessas informações, quer-se determinar a condição inicial do modelo de S , ou seja, a representação numérica da configuração de S no instante de tempo t_1 , a partir da qual uma simulação computacional de S gere configurações que se aproximem, dentro de uma precisão pré-estabelecida, das observações disponíveis de S , em instantes de tempo correspondentes, com o objetivo de se obter uma configuração do modelo em $t_j > t_2$, que venha a reproduzir a real configuração de S no instante t_j , também dentro da precisão aceita. Esse processo, conhecido como Assimilação de Dados por aqueles que estudam os problemas relacionados com a dinâmica de fluxos geofísicos, é, conceitualmente, semelhante à Melhor Estimativa Linear Não Tendenciosa (SORENSEN, 1980) da configuração de S em t_j dadas as configurações de S em $[t_1, t_2]$, sendo aqui resolvido, numa abordagem determinística, como um problema de controle ótimo, do qual a condição inicial do sistema é o dado de controle.

3.1. O método da assimilação de dados

Considera-se, inicialmente, a versão contínua do problema da Assimilação Variacional de Dados, por permitir um tratamento matemático adequado. Neste caso, os objetos matemáticos 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, \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, $[t_1, t_2]$, $E = \{Y; Y: [t_1, t_2] \times V \rightarrow V \text{ e } Y \in C^2\}$ e $F: E \rightarrow E$ um operador diferenciável.

- (iii) a função “peso” $W: [t_1, t_2] \rightarrow L(V)$, 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

$$J: E \rightarrow \mathbb{R}$$

$$X \alpha \frac{1}{2} \int \langle W(t)(X(t, x^p) - Z(t, x^p)), W(t)(X(t, x^p) - Z(t, x^p)) \rangle dt \quad (3)$$

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

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), ou seja, o seguinte problema de minimização com restrição:

Problema M_R : encontrar a solução de (2) que minimiza (3).

Como a solução do problema da Assimilação de Dados será obtida numericamente, é necessário resolver sua versão discreta; isto, no entanto, acarreta uma outra dificuldade: o número de variáveis resultantes da versão discreta do conjunto de equações, modelando a dinâmica de S , bem como de seu domínio espaço-temporal, é excessivamente grande. Portanto, seria computacionalmente muito econômico (e, em muitos problemas, só assim exequível) se, em lugar da solução $X \in E$, se procurasse a solução $X_1 \in E_1$, sendo $E_1 = \{X_1; x_1 = x|_{\{t_1\} \times V}, X \in E \text{ e } X \in C^2\}$ isomorfo ao conjunto dos operadores em V , a que se pode chamar o espaço das configurações iniciais de S , que minimizasse a restrição do funcional J a E_1 . 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. O método das Equações Adjuntas fornece, partindo-se da relação entre X e X_1 , a diferencial da restrição de J a E_1 .

3.2. 0 método das equações adjuntas

Reescreve-se a equação (3), resultando na equação (4).

$$\begin{aligned}
 J: E &\rightarrow \mathbb{R} \\
 X &\alpha \int_D T(X(t, x^p)) dD,
 \end{aligned}
 \tag{4}$$

sendo

$$\begin{aligned}
 T: E &\rightarrow \mathbb{R} \\
 X(\cdot, \cdot) &\alpha \frac{1}{2} \int W(\cdot)(X(\cdot, \cdot) - Z(\cdot, \cdot)), W(\cdot)(X(\cdot, \cdot) - Z(\cdot, \cdot)) >
 \end{aligned}$$

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

$$\langle X(\cdot, \cdot), Y(\cdot, \cdot) \rangle_E = \int_D \langle W(\cdot)(X(\cdot, \cdot)), W(\cdot)(Y(\cdot, \cdot)) \rangle dD,$$

empregando o Teorema da Representação de Riesz (KREYSZIG, 1989), obtém-se a equação (5), $\forall H \in E$,

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

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

Considera-se, na equação (6), a versão linear da equação (2):

$$\frac{\partial X}{\partial t} - \frac{\partial X}{\partial t} X = 0,
 \tag{6}$$

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, resultando na equação (7):

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

sendo $(\frac{\partial F}{\partial X})^*$ o adjunto do operador $(\frac{\partial F}{\partial X})$. Então, tem-se o seguinte resultado:

Teorema 1: Dada uma solução $X \in E$ de M_R , $X_1 \in E_1$, $X_1 = x|_{\{t_1\} \times V}$, é solução do seguinte problema de minimização sem restrição:

Problema M_S : encontrar $\delta X \in E_1$ que minimiza $\langle \nabla_{X_1} J, \delta X \rangle$.

Demonstração: ver Apêndice 1

Portanto, com o emprego do método da equação adjunta, projeta-se o conjunto solução $C^2([t_1, t_2] \times V, V)$ sobre $C^2(\{t_1\} \times V, V)$, o que representa, do ponto de vista computacional, uma redução considerável no número de variáveis do problema discreto. Além disso, essa projeção transforma um problema de minimização com restrição, num problema de minimização sem restrição, a saber: o problema de minimizar (3) sujeito à restrição (2), torna-se

$$\underset{\delta X \in E_1}{\text{Min}} \langle \nabla_{X_1} J, \delta X \rangle, \quad (8)$$

O problema M_R , envolvendo o funcional quadrático J , definido em (3), tem a existência de sua solução garantida, mas não a sua unicidade. Para obter a unicidade da solução de M_R , e de M_S , redefine-se o problema para o seguinte funcional quadrático:

$$J: E \rightarrow \mathbb{R}$$

$$X \alpha \frac{1}{2} \int \langle B(X_1 - X_b), B(X_1 - X_b) \rangle - \langle W(t)(X(t, x^0) - Z(t, x^0)), W(t)(X(t, x^0) - Z(t, x^0)) \rangle dD, \quad (3')$$

sendo, X_b uma estimativa disponível da configuração inicial de X e $B \in L(V)$ o operador determinado pelas informações estatísticas disponíveis sobre a estimativa de X_b . Então, tem-se o resultado a seguir:

Teorema 2: Dado o problema uma solução $X \in E$ de M_R ,

M_R' : encontrar a solução de (2) que minimiza (3'),

existe uma única solução X de M_R , $X_1 = X|_{E_1} \in E_1$ é a solução do problema M_S ,

M_S' : encontrar $\delta X_1 \in E_1$ que minimiza $\langle \nabla_{X_1} J', \delta X_1 \rangle$.

Demonstração: ver Apêndice 2

Sejam X_b a estimativa disponível da configuração inicial de X . Iterativamente, o problema da solução ótima será resolvido, buscando-se a perturbação $\delta X_1 \in E_1$ de $\delta X \in E$ tal que $(X_b + \delta X)$ seja a solução de M_S .

3.3. O método L-BFGS para minimização

Para resolver o problema (M_S) computacionalmente, é necessário aplicar um método de minimização para problemas sem restrição de grande porte. Neste trabalho, foi utilizado o método L-BFGS, onde atualizações da aproximação à matriz hessiana da função objetivo, são calculadas a custo razoável. O método L-BFGS pode ser visto como uma implementação do método quase-Newton BFGS, com a restrição na armazenagem de informações anteriores, pois a atualização da matriz H_k , definida como $H_{k+1} = (I - \rho_k s_k y_k^t) H_k (I - \rho_k y_k s_k^t) + \rho_k s_k s_k^t$, geralmente densa, é realizada armazenando um número m de pares de vetores $\{s_k, y_k\}$ anteriores. Este método é computacionalmente menos custoso, mais robusto e de fácil implementação, mas ele possui taxa de convergência baixa.

Todas as iterações subsequentes são dessa forma, isto é, uma correção é apagada e uma nova é inserida. Neste método, o usuário deve especificar o número m de correções do BFGS e definir a matriz H_0 que seja esparsa, simétrica e definida positiva e que se aproxima da hessiana de f (NOCEDAL, 1980).

Durante as primeiras m iterações, o método L-BFGS é idêntico ao método BFGS. Para $k > m$, H_k é obtida pela aplicação de m iterações de BFGS atualizadas por H_0 usando informação dadas pelas m iterações anteriores.

Uma descrição precisa do método L-BFGS encontra-se em (NOCEDAL e WRIGHT, 1999).

4. RESULTADOS

Antes da descrição dos resultados obtidos com o modelo computacional, descreve-se brevemente a implementação do método das equações adjuntas, um aspecto fundamental para a assimilação variacional de dados e que, por si só, constitui-se área de relevantes pesquisas matemáticas.

Atualmente, pelas muitas aplicações acadêmicas e industriais do método e pela extensão do trabalho para produzir tal programa computacional, a geração automática de programas adjuntos a um dado programa computacional, pode ser feita com o uso de aplicativos desenvolvidos especificamente para este fim (FAURE e PAPEGUAY, 1998). Tais aplicativos partem do princípio que um programa computacional em linguagem FORTRAN, por exemplo, consiste numa sequência ordenada de linhas de instrução e de eventuais sub-rotinas ou de funções, as quais são, por sua vez, também sequências ordenadas de linhas de instrução. Assim, estabelece-se, inicialmente, uma regra para derivar a instrução adjunta a uma única linha de instrução de um dado programa e, a seguir, a instrução adjunta à instrução resultante de duas linhas de instruções consecutivas.

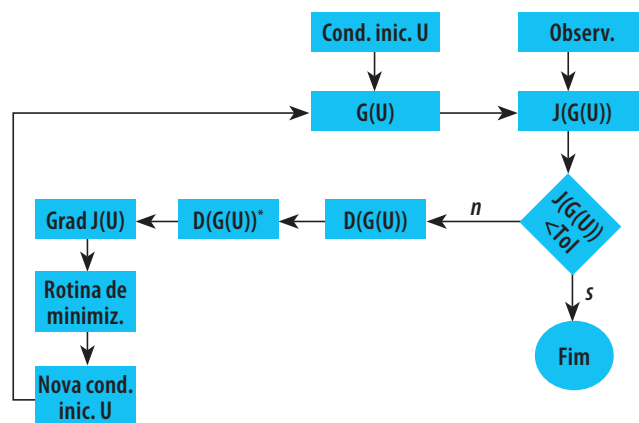
Estudou-se o problema da determinação da evolução de uma mancha produzida por um derrame de óleo, em uma região do mar, cuja hidrodinâmica é conhecida, dispondo-se também, de um conjunto de observações da mancha durante o intervalo de tempo $[t_1, t_2]$. Supôs-se que as observações são todas incompletas, de modo que, em qualquer instante $t_1 < t < t_2$, a observação disponível $Z(t)$, não reproduzindo integralmente a mancha de óleo, não poderia ser utilizada como “condição inicial” para a integração do modelo numérico.

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 $u^p = (u, v)$, sendo $u = 0.1 \times 10^{-1} \text{ m/s}^{-1}$ e $v = 0.0$, C a concentração do óleo e D o coeficiente de difusividade variável. O transporte do óleo foi descrito pela equação de advecção-difusão bidimensional

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} - D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) = 0 \quad (9)$$

que é o modelo de transporte de óleo na superfície do mar, universalmente empregado em Lehr e Cekirge (1980). Na Figura 2, tem-se o fluxograma do programa para a Assimilação de Dados, via o Método das Equações Adjuntas.

Figura 2 – Fluxograma para assimilação variacional de dados.



Fonte: Elaboração dos autores.

Integrou-se, então, a equação (9), tendo como condição inicial o derrame produzido artificialmente (Figura 3a) e, com a integração de (9) (em $G(U)$), foram armazenadas, como observações do sistema, as configurações obtidas nos instantes $t = 10 \times i$, $i = 1, \dots, 9$. Nas Figuras 3b e 3c, são mostradas as configurações parciais da mancha de óleo para $t = \Delta_t \times 20$ e $t = \Delta_t \times 90$, respectivamente.

Figura 3a – Configuração inicial.

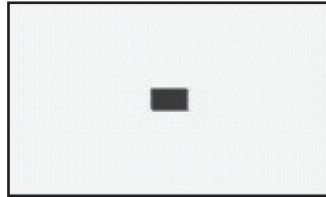


Figura 3b – Configuração parcial em $t = \Delta_t \times 20$.

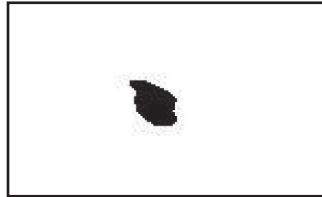
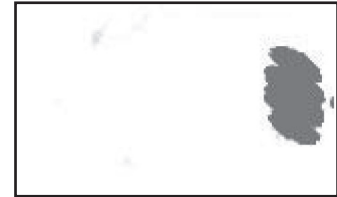


Figura 3c – Configuração parcial em $t = \Delta_t \times 90$.



Fonte: Dados da pesquisa.

Perturbou-se aleatoriamente a configuração inicial da Figura 3a, utilizando-se a função RAND da biblioteca do FORTRAN 90, obtendo-se a configuração inicial perturbada (Figura 4), a partir da qual se inicia o processo da Assimilação Variacional de Dados, sendo que, após a primeira integração de (9) para a geração das observações, a equação (9) passa a ser integrada com uma condição inicial obtida da rotina de minimização e o erro entre as configurações geradas pelo modelo e as observações, sendo avaliado em $J(G(U))$, que, se estiver acima da tolerância estabelecida, faz com que o programa principal chame a sub-rotina $D(G(U))^*$ para obter a integração para trás, no tempo da equação adjunta (7), a qual fornece o gradiente do funcional J , com relação às condições iniciais do problema, o qual é passado à rotina de minimização (L-BFGS), fornecendo uma nova configuração inicial U que, ao ser integrada em $G(U)$, diminuirá o valor de $J(G(U))$.

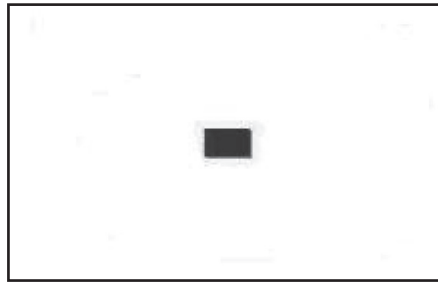
Figura 4 – Configuração inicial perturbada aleatoriamente.



Fonte: Dados da pesquisa.

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 (Figura 5).

Figura 5 – Configuração inicial recuperada (compare-se com a Figura 3a).



Fonte: Dados da pesquisa.

No exemplo considerado, a condição inicial ótima (Figura 5) é obtida após chamadas da sub-rotina de minimização, recuperando a condição inicial do problema, com um erro em torno de 2%.

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 um método 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.

5. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste trabalho, foram apresentados e discutidos aspectos matemáticos e numéricos que permitem analisar o método desenvolvido 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, suplementando uma rede de observação já existente ou para sua implantação.

6. APÊNDICES

6.1. Demonstração do Teorema 1

Sejam $Y: [t_1, t_2] \times V \rightarrow V$ a solução de (7) tal que $Y(t_2) = 0$ e $\delta X \in E_1$ uma perturbação de uma solução qualquer de (6). Tem-se, então, que

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

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

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

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

$$\therefore \langle Y_1, \delta X_1 \rangle = \langle \nabla_X J, \delta X \rangle \tag{8}$$

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 de X sobre E_1 , o lado esquerdo de (8) é a expressão da diferencial da restrição de J (em relação a X_1) a E_1 . Pela unicidade da representação da última diferencial como um produto interno em E_1 , tem-se que Y_1 é precisamente o gradiente da restrição do funcional J a E_1 , ou seja, Y_1 é a projeção de $\nabla_X J$ sobre E_1 , isto é,

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

6.2. Demonstração do Teorema 2

Basta redefinir o produto interno em E como:

$$\langle X(\cdot, \cdot), Y(\cdot, \cdot) \rangle_E \int_D \langle B(X(t_1, \cdot)), B(Y(t_1, \cdot)) \rangle_{E_1} + \langle W(\cdot)(X(\cdot, \cdot)), W(\cdot)(Y(\cdot, \cdot)) \rangle dD,$$

e utilizar todo o desenvolvimento que antecede o Teorema 1 e em sua demonstração.

7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

KAMPEL, M.; AMARAL, S. **Imagens TM/Landsat na detecção de mancha de óleo na Baía da Guanabara – RJ**, publicações INPE, 2002.

FAURE, C.; PAPEGAY, Y. **Odyssee User's Guide Version 1.7**, INRIA, 1998.

KREYSZIG, E. **Introductory Functional Analysis with Applications**. John Wiley and Sons, 1989.

LEHR, W. J.; CEKIRGE, H. M. Oil slick movements in the Arabian Gulf. **Proceeds of Petroleum and Marine Environment**, Monaco, 1980.

LIU, D. C.; NOCEDAL, J. On The Limited Memory BFGS Method For Large Scale Optimization. **Mathematical Programming** N° 45, pp.503-528, 1989.

MENDONÇA, M. W. **O Método L-BFGS com Fatoração Incompleta para a Resolução de Problemas de Minimização**. Dissertação do Curso de Pós-Graduação em Matemática e Computação Científica, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2005.

NOCEDAL, J. Updating Quasi-Newton Matrices with Limited Storage. **Mathematics of Computation**, 35, pp. 773-782, 1980.

NOCEDAL, J.; WRIGHT, S. J., **Numerical Optimization**. Springer Series in Operations Research. New York: Springer-Verlag, 1999.

SORENSEN, H. W. **Parameter estimation: principles and problems**. Marcel Dekker, 1980.

TALAGRAND, O. Assimilation of observations, an introduction. **Journal of Meteorological Society of Japan**, 1997, v. 75, n. 1B, pp.: 191-209.

