

# 1

## Introdução

Os estuários muitas vezes estão próximos a centros urbanos e industriais e são usados como rotas para o mar, locais de descarte convenientes e como áreas recreativas. Eles também servem como poços para sedimento e contaminantes transportados por rios. Em consequência do aumento populacional e da dependência dos estuários é necessária uma melhor administração dos seus recursos.

A remediação de ambientes contaminados e os programas de monitoramento requerem: estimativas de concentrações e persistência das substâncias, seu destino, taxas de transporte e transformação e particionamento entre os compartimentos que formam o ambiente. Na ausência de dados obtidos através de um monitoramento, os modelos ambientais são freqüentemente o único modo capaz de prever de forma aproximada as concentrações dos contaminantes nos compartimentos ambientais. A modelagem matemática é uma importante ferramenta em tarefas de controle da poluição e na estimativa de riscos potenciais.

O principal objetivo do trabalho é a estimativa de parâmetros característicos da Baía de Guanabara e de alguns contaminantes (hidrocarbonetos policíclicos aromáticos (HPAs)), usados em modelos de multimeios, como o modelo “**Quantitative Water Air Sediment Interaction**” (QWASI). Esse objetivo é alcançado usando técnicas do problema inverso.

Seja o problema do transporte de contaminantes no ambiente. Quando a geometria, as propriedades do meio tais como o coeficiente de transferência de massa, a quantidade de emissão do contaminante e as condições de contorno são conhecidas, as concentrações do contaminante nos diferentes meios podem ser calculadas. Este problema é conhecido como *problema direto*. No problema direto tem-se uma informação completa e precisa dos dados do problema.

Quando uma ou mais propriedades e/ou a quantidades de emissão direta e indireta não são conhecidas, mas medidas experimentais das concentrações do

contaminante nos meios estão disponíveis, pode-se tentar estimar as grandezas desconhecidas. Este problema é conhecido como *problema inverso*. No problema inverso tem-se uma informação incompleta e imprecisa dos dados do problema.

As Figuras 1.1 e 1.2 fazem referência às definições do problema direto e inverso respectivamente.

Algumas técnicas utilizadas para a solução de problemas inversos têm como primeiro passo a solução do problema direto. O problema direto está baseado nas equações de balanço de massa de contaminantes nos compartimentos tanto para um meio ambiente em regime estacionário como em regime transitório. A solução do problema direto em regime estacionário é feita segundo o modelo QWASI. No regime transiente, as equações diferenciais desse modelo são resolvidas através do método de Runge-Kutta de quarta ordem. Para a solução dos dois problemas inversos apresentados neste trabalho, visando a estimativa dos parâmetros e emissões de HPAs na Baía de Guanabara, se utilizou o método de máxima entropia generalizada e o método de mínimos quadrados.

Os objetivos do presente trabalho são:

- Adaptar um modelo de multimeios existente que descreve o comportamento de uma substância química poluente dentro da Baía de Guanabara.
- Estimar as emissões de 10 poluentes (HPAs) na Baía de Guanabara: antraceno, fenantreno, pireno, fluoranteno, criseno, naftaleno, fluoreno, benzo(b)fluoranteno, benzo(k)fluoranteno e benzo(a)pireno.
- Simular a variação das concentrações na água e no sedimento em função do tempo para uma emissão exagerada de alguns hidrocarbonetos na Baía de Guanabara. Com esta finalidade, desenvolveu-se um procedimento que permitiu estimar as concentrações em função do tempo para um exercício simulado de contaminação a partir de uma descarga direta do poluente.

Para o desenvolvimento deste trabalho foram seguidos os seguintes passos, apresentados esquematicamente na Figura 1.3:

1º PASSO: Considerando a Baía de Guanabara como uma coluna formada pelos compartimentos ar, água e sedimento, em regime estacionário, as equações de balanço de massa do contaminante em cada compartimento são resolvidas. Cada um dos compartimentos que formam o ambiente são considerados homogêneos;



\* calculada segundo as equações do modelo de multimeios QWASI

Figura 1.1 - O problema direto



\* dados obtidos experimentalmente através de medições no ambiente

Figura 1.2 - O problema inverso

2º PASSO: Devido à existência de muitos parâmetros desconhecidos, é necessária uma estimativa destes usando técnicas de problemas inverso. Além disso, nesta etapa são estimadas as emissões de alguns HPAs;

3º PASSO. Resolvendo as equações de balanço de massa transiente dos contaminantes, utilizando os parâmetros estimados no passo 2, é possível estimar as concentrações de contaminantes na água e no sedimento em função do tempo e simular o caso de uma emissão direta de um HPA na Baía de Guanabara.

A seguir, é feita uma breve descrição dos capítulos seguintes que compõem esta tese. No capítulo 2 é feita uma revisão bibliográfica dos trabalhos publicados sob modelos ambientais. No capítulo 3 aborda-se o impacto dos hidrocarbonetos no ambiente. No capítulo 4 descreve-se a Baía de Guanabara, sua importância e sua influência sobre a comunidade. No capítulo 5 apresenta-se a formulação e solução do problema direto baseado nas equações utilizadas no modelo ambiental de multimeios QWASI para os regimes estacionário e transitório. No capítulo 6 apresenta-se a formulação de dois casos que serão

resolvidos com técnicas do problema inverso. No primeiro caso, tem-se um sistema formado por 10 equações e 16 incógnitas e no segundo caso, um sistema de equações de 2 equações e 3 incógnitas. As técnicas utilizadas na solução são o método de máxima entropia generalizada e o método de mínimos quadrados, respectivamente. No capítulo 7 apresenta-se os resultados obtidos através do problema inverso para a obtenção de alguns parâmetros necessários ao modelo ambiental QWASI. Determine-se, assim, os valores das concentrações dos hidrocarbonetos antraceno, fenantreno, pireno, fluoranteno e criseno, na água. Finalmente, a emissão dos contaminantes naftaleno, fluoreno, benzo(b)fluoranteno, benzo(k)fluoranteno e benzo(a)pireno é estimada.

No Apêndice 1 é descrito de forma resumida o modelo de multimeios QWASI. No Apêndice 2 discorre-se sobre o mexilhão perna-perna, como um organismo indicador. No Apêndice 3 discute-se o método de máxima entropia generalizada e a função de Bregman. No Apêndice 4 apresentam-se as tabelas extraídas de teses realizadas sobre medidas experimentais na Baía de Guanabara. Destas tabelas são obtidos os valores médios utilizados como dados de entrada nos problemas direto e inverso. No Apêndice 5 apresenta-se resultados para o caso 1 do problema inverso baseado nas tabelas de Hamacher (1996) e Azevedo (1998).

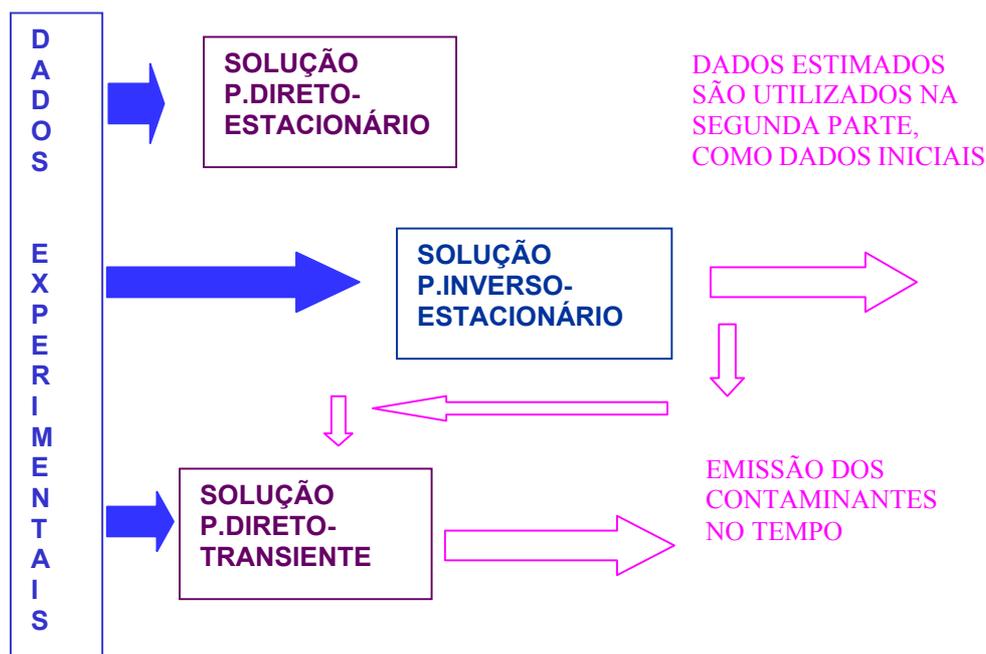


Figura 1.3 - Esquema dos passos desenvolvidos nesse trabalho