



08 a 11 de Outubro de 2018
Instituto Federal Fluminense
Búzios - RJ

AJUSTE DOS PARÂMETROS DE DISPERSÃO NO RIO MACAÉ COM O MÉTODO SIMULATED ANNEALING

Ruan de Rezende Faria¹ – rrfaria@hotmail.com

Wellington Betencurte da Silva¹ – wellingtonufes@gmail.com

Julio Cesar Sampaio Dutra¹ – julio.dutra@ufes.br

Wagner Rambaldi Telles² – wr_telles@yahoo.com.br

¹ UFES, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química – Alegre, ES, Brasil

² UFF, Instituto do Noroeste Fluminense de Educação Superior – Santo Antônio de Pádua, RJ, Brasil

Resumo. *O transporte de poluentes nos rios é fonte de estudo para vários autores, sendo que o problema considerado aqui tratou de um estudo de caso realizado no Rio Macaé. O objetivo do estudo foi determinar os valores dos parâmetros de dispersão que melhor ajustam o modelo ao conjunto de dados experimentais. A metodologia baseou-se na resolução por problemas inversos, em que o problema direto utilizou solução analítica e o inverso o método heurístico Simulated Annealing, também conhecido como “Recozimento simulado”. Foi possível ajustar o modelo e testar o método em um espaço de busca contínuo com uma função objetivo baseada no erro de predição no problema inverso. Os resultados foram satisfatórios e permitiram um melhor ajuste do modelo quando comparado àquele obtido por Telles (2009).*

Palavras-chave: *Problemas Inversos, Simulated Annealing, Modelagem Ambiental.*

1. INTRODUÇÃO

O transporte de poluentes em rios, nos últimos anos, tornou-se assunto importante em diversas áreas do conhecimento, devido à água ser um recurso universal de valor inestimável. O seu estudo é uma tarefa desafiadora, principalmente no âmbito da engenharia, e isso pode ser explicado pelo fato de que os rios são complexos e dinâmicos, que sofrem influência de diversas variáveis relacionadas à sua hidrodinâmica, geometria e até mesmo do ambiente externo (Ji, 2017). Com isso, a motivação ambiental para o estudo do transporte de poluentes em rios é muito ampla, envolvendo diferentes níveis de profundidade.

Dentre as diferentes abordagens para análise (Carr *et.al.*, 2007; Zeng *et.al.*, 2014), os métodos diretos são os mais usados na literatura. Estes métodos permitem determinar o perfil de concentração a partir de um traçador conservativo com as mesmas características do

poluente, considerando dados experimentais ou simulados tanto em laboratório quanto em campo (Bencala & Walters, 1983; Duarte & Boaventura, 2008; Bottacin-Busolin *et al.*, 2011). Apesar desses métodos diferirem, um problema central é o ajuste (ou estimativa) do coeficiente de dispersão longitudinal (D_L), o qual engloba os efeitos combinados de mistura turbulenta, difusão molecular e mistura devido ao cisalhamento vertical e lateral (Benedini & Tsakiris, 2013). Todos esses efeitos estão presentes, entretanto, a níveis de magnitude diferentes, dependendo das condições do rio.

Normalmente, as alternativas propostas na literatura para o ajuste da concentração têm a dispersão longitudinal como o principal parâmetro a se estimar (Benedini & Tsakiris, 2013; Socolofsky & Jirka, 2005). Neste intuito, o presente trabalho considera o ajuste do parâmetro D_L . Adicionalmente, outros dois parâmetros também importantes são determinados conjuntamente, como a velocidade (u) e da dispersão transversal (D_T). Para alcançar tal objetivo, foi empregada uma busca heurística, baseada no método *Simulated Annealing* (Kirkpatrick *et al.*, 1983), que foi inspirado no fato de metais assumirem um estado de baixa energia quando resfriados de maneira lenta e gradual. Essa busca emprega uma função objetivo para o problema inverso baseada no erro de aproximação do dados experimentais (predição).

2. MATERIAIS E MÉTODOS

2.1 Estudo de Caso: Transporte de Poluente no Rio Macaé

O estudo de caso baseou-se nos dados experimentais de Telles (2009). Este autor avaliou um trecho do Rio Macaé, localizado no Estado do Rio de Janeiro, com medidas de largura e profundidade, respectivamente, iguais a 42 m e 1 m. Fez-se o lançamento instantâneo e simultâneo de dois recipientes contendo, cada um, 55 L de solução salina oriunda da diluição de 20 kg de cloreto de sódio (traçador) nos mesmos, nas posições 50 m e 0,7 m em um domínio bidimensional (direções x e y , respectivamente). As medições foram realizadas em uma posição 100 m a jusante, com um condutivímetro, donde também foi possível determinar a concentração inicial do corpo d'água, sendo igual a 37 mg/L.

2.2 Solução do Problema Direto

A modelagem matemática do problema direto a ser resolvido é dada pela Eq. (1), a qual é resultante da equação da continuidade para uma mistura de vários componentes e representa a dinâmica do processo em estudo (Bird *et al.*, 2002). Neste modelo, C (mg/L) é a concentração do poluente; t (s) a variável de tempo; x a direção longitudinal, em que se consideram os fluxos difusivo e convectivo devido ao movimento do rio com velocidade v_x nesta mesma direção; y a direção transversal, em que se desenvolve apenas o fluxo difusivo; D_L (m^2/s) a dispersão longitudinal; e D_T (m^2/s) a dispersão transversal.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -v_x \frac{\partial C}{\partial x} + D_L \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial C}{\partial x} \right) + D_T \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial C}{\partial y} \right) \quad (1)$$

Como se trata de uma geometria simples, pode-se buscar a solução analítica usando o método da similaridade (Socolofsky & Jirka, 2005), com as condições de domínio infinito; campo de velocidade estacionário tal que $v_x = U$ (m/s); valores de dispersão constantes e independentemente da posição no domínio. Esta solução é dada pela Eq. (2), em que y_0 (m) e

x_0 (m) representam, respectivamente, posição de lançamento em x (m) e y (m); C_0 (mg/L) a concentração inicial do poluente no rio; M (g) a massa instantânea lançada no rio; e H (m) a profundidade do rio.

$$C(x, y, t) = C_0 + \frac{M}{4\pi H t \sqrt{D_T D_L}} \exp\left(-\frac{[(x-x_0)-Ut]^2}{4D_L t} - \frac{(y-y_0)^2}{4D_T t}\right) \quad (2)$$

2.3 Problema Inverso

O objetivo do problema inverso é prever, a partir de um efeito, a causa por trás de um problema. Neste trabalho, é feita uma busca heurística com o método *Simulated Annealing* proposto por Kirkpatrick *et al.* (1983), por analogia ao processo de recozimento de metais que leva a produtos mais estáveis e de menor energia. O recozimento físico (real) é caracterizado pelo aquecimento de um sólido além do seu ponto de fusão e, posteriormente pelo seu resfriamento, resultando em produtos mais estáveis, estruturalmente fortes e de menor energia. Assim, por analogia, o método de recozimento simulado (computacional) é um algoritmo de busca global, permitindo evitar pontos ótimos locais.

O algoritmo emprega uma sequência de temperaturas decrescentes para gerar soluções de um problema de otimização, começando com um valor de temperatura elevado e, a cada nova temperatura (resfriamento), geram-se soluções até que o equilíbrio àquela temperatura seja alcançado. Em seguida, a temperatura é rebaixada e o processo prossegue até o congelamento, ou seja, não se obtém mais melhoras. Sua representação de uma maneira estruturada e sequencial é ilustrada de acordo com a Fig.1, adaptada de Kirkpatrick *et al.* (1983), em que os principais parâmetros que caracterizam o algoritmo são os seguintes: a temperatura inicial (T_0), a temperatura de congelamento (T_c), a taxa de resfriamento (α), o número de iterações para atingir o equilíbrio térmico (AS_{max}) e a solução inicial da função objetivo (S).

```

1. DADO ( $\alpha$ ,  $S_{Amax}$ ,  $T_0$ ,  $T_c$  e  $S$ ) FAÇA
2.  $S^* \leftarrow S$ ; {Melhor solução obtida até então}
3. IterT  $\leftarrow$  0; {Número de iterações na temperatura T}
4.  $T \leftarrow T_0$ ; {Temperatura corrente}
5. ENQUANTO ( $T > T_c$ ) FAÇA
6. ENQUANTO (IterT  $<$   $S_{Amax}$ ) FAÇA
7. IterT  $\leftarrow$  IterT + 1;
8. GERAR (um vizinho  $S' \in N(S)$ );
9.  $\Delta \leftarrow f(S') - f(S)$ ;
10. SE ( $\Delta < 0$ )
11.  $S \leftarrow S'$ ;
12. SE ( $f(S') < f(S^*)$ )
13.  $S^* \leftarrow S'$ ;
14. FIM-SE;
15. SENÃO
16. TOMAR ( $x \in [0,1]$ );
17. SE ( $x < e^{-\Delta/T}$ )
18.  $S \leftarrow S'$ ;
19. FIM-SE;
20. FIM-SE;
21. FIM-ENQUANTO;
22.  $T \leftarrow \alpha * T$ ; IterT  $\leftarrow$  0;
23. FIM-ENQUANTO;
24. RETORNAR ( $S^*$ );
    
```

Figura 1 – Pseudocódigo do método *Simulated Annealing*.

A função objetivo foi dada como o erro quadrático médio (*RMS*) mostrado na Eq. (3). Nesta expressão, P é o vetor de parâmetros, $C_i(P)$ a concentração estimada no tempo t_i , Y_i é a concentração medida no tempo t_i , e N o número total de medidas. Logo, a partir de uma estimativa inicial para a função objetivo, a minimização do *RMS* é almejada.

$$RMS(P) = \left(\sum_{i=1}^N [Y_i - C_i(P)]^2 / N \right)^{0,5} \quad (3)$$

A cada iteração, uma solução vizinha é gerada aleatoriamente no espaço de busca com novos parâmetros do modelo (P_{next}), conforme a Eq. (4), até obter-se uma melhora da aproximação dos dados (isto é, redução do *RMS*). Nesta expressão, w é uma variável randômica com distribuição normal, tal que $w \sim N(0,1)$; σ é o desvio padrão dos erros de medidas, o qual, nesse trabalho, foi definido de maneira arbitrária.

$$P_{next} = P(1 + w\sigma) \quad (4)$$

3. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Para a obtenção de resultados, primeiramente, a solução analítica, dada pela Eq. (1), foi configurada a partir da melhor estimativa alcançada por Telles (2009), a saber: dispersão longitudinal (D_L) igual a 0,33 m²/s, dispersão transversal (D_T) igual a 0,008 m²/s e velocidade (u) igual a 0,35 m/s, a qual também foi considerada como a solução inicial do problema. Cabe ressaltar que, diferentemente deste trabalho, em Telles (2009), o modelo matemático descrito pela Eq. (1) foi resolvido numericamente utilizando o Método dos Volumes Finitos.

Por outro lado, os parâmetros do *Simulated Annealing* também devem ser definidos para que a busca seja realizada da melhor maneira possível. A tabela 1 sumariza-os para todas as condições a serem simuladas, atentando-se as seguintes pontuações: A temperatura inicial (T_0) deve ser alta o bastante para permitir movimentos livres entre soluções vizinhas; O valor utilizado para α simulou a condição de resfriamento lento; a temperatura de congelamento (T_c), em teoria, deveria ser igual à zero. $ASmax$ foi escolhido de acordo com a dimensão do problema; a solução inicial (S) foi definida de acordo com o *RMS*.

Tabela 1 – Parâmetros do Simulated Annealing para as condições simuladas.

T_0	T_c	α	$ASmax$	S	
				Condição de Telles (2009)	Condição aleatória
1000	0,01	0,975	9	38,5395	86,8330

A Fig. 2 caracteriza o ajuste obtido com a metodologia empregada. A solução analítica dada pela Eq. (2), configurada com os parâmetros obtidos por Telles (2009) e a deste trabalho estimam, com bom nível de exatidão, as concentrações inicial e final do traçador. No entanto, pode-se ver também que a solução analítica com os parâmetros de Telles (2009) subestimou o valor de concentração máxima no rio. Como o método empregado permite a busca do mínimo global de *RMS*, o resultado deste presente trabalho permitiu uma melhor aproximação dos dados experimentais, em uma faixa maior de tempo. Com isso, fica nítida a contribuição do

método heurístico para a busca paramétrica, acrescentando-se a este resultado a boa adequação da solução analítica ao problema sob análise.

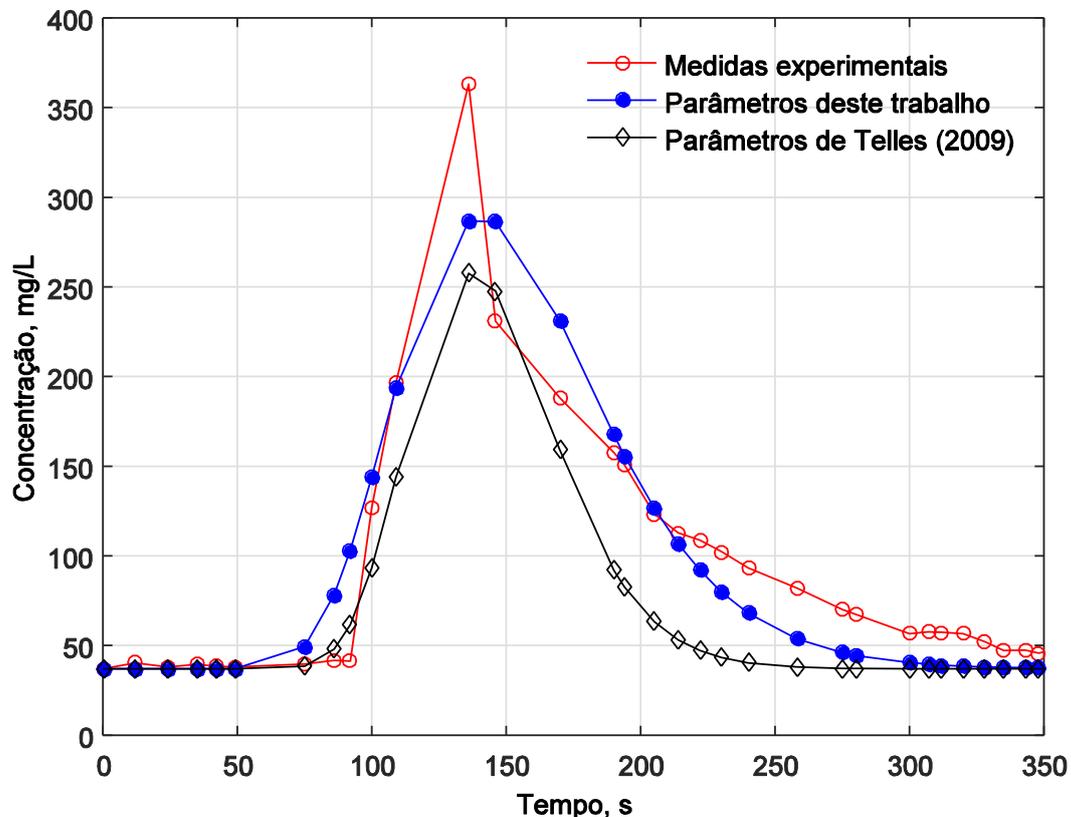


Figura 2 – Comparação entre a aproximação dos dados experimentais com a solução analítica configurada com os parâmetros de Telles (2009) e com a melhor solução obtida neste trabalho com o método *Simulated Annealing*.

A Fig. 3 traz o número de soluções requeridas para se obter uma melhora no ajuste para duas soluções iniciais distintas, sendo a primeira a solução de Telles (2009) (Fig. 3a) e a outra uma condição aleatória definida pelo algoritmo de busca (Fig. 3b). Observa-se que, à medida que aumenta o número de soluções sucessivamente melhores, a aceitação de movimentos de piora é reduzida. Isso significa que, ao final das iterações, praticamente não se aceitam movimentos de piora e o método se comporta como o método da descida e subida. Apesar disso, a aproximação final nos dois casos foi melhor que a proposta inicialmente, mostrando que o método também é aplicável para problemas com espaço de busca contínuo.

Por último, a análise completa sobre os resultados obtidos é resumida na Tabela 2, contemplando os valores de *RMS* e dos parâmetros, para cada melhora obtida. Os resultados mostram que o valor mínimo não foi alcançado. Mas, isso não compromete o resultado, uma vez que não se dispôs dos erros de medidas para caracterizar a exatidão da aproximação dos dados experimentais. Além disso, houve ausência de medidas no período de transição da concentração, o que significa perda de informação para o problema inverso.

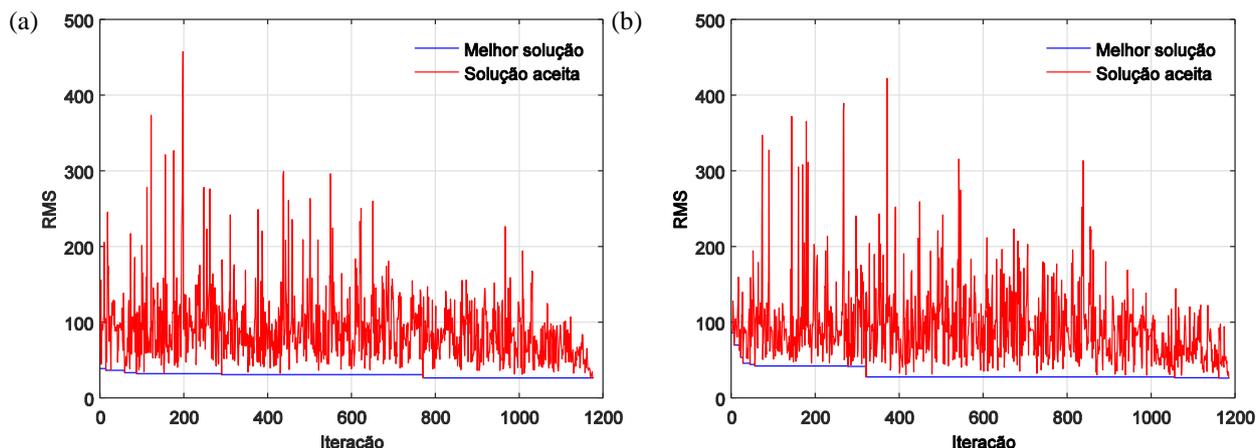


Figura 3 – Desempenho do algoritmo de busca *Simulated Annealing* para (a) condição inicial dada por Telles (2009) e (b) condição aleatória definida pelo algoritmo de busca.

Tabela 2 – Resultados obtidos pelo *Simulated Annealing*.

<i>Simulated Annealing</i>	Dispersão D_L (m^2/s)	Dispersão D_T (m^2/s)	Velocidade (m/s)	RMS
Condição inicial*	0,33	0,008	0,35	38,5395
1ª melhora	0,8948	0,0054	0,3081	36,3207
2ª melhora	0,5018	0,0059	0,3108	33,1469
3ª melhora	0,3726	0,0059	0,3312	31,8418
4ª melhora	0,7120	0,0049	0,3234	30,6425
5ª melhora	0,6733	0,0032	0,3218	26,3658
6ª melhora	0,5742	0,0033	0,3319	25,6170

* valores fornecidos pela solução de Telles (2009).

4. CONCLUSÃO

Este trabalho levou a uma melhor configuração para a solução analítica dada pela Eq. (2), em comparação à utilização dos dados obtidos por Telles (2009). Conclui-se assim, que o *Simulated Annealing* é uma opção viável para estimação dos principais parâmetros do problema de transporte de poluentes em rios. Embora não permita realizar um tratamento estatístico dos dados, pode-se utilizá-lo incorporado em outras metodologias como, por exemplo, informação *a priori* para o tratamento do problema com filtros de partículas.

REFERÊNCIAS

- Bencala, K.E.; Walters, R.A. (1983), Simulation of solute transport in a Mountain Pool-and-Riffle stream: a transient storage model. *Water Resources Research*, 19, 718-724.
- Benedini, M.; Tsakiris, G. (2013), “*Water quality modelling for rivers and streams*”. Springer Netherlands.
- Bird, R.B.; Stewart, W.E; Lightfoot, E.N. (2002), “*Transport Phenomena*”, 2nd ed., John Wiley & Sons, New York .
- Bottacin-busolin, A.; Marion, A.; Musner, T.; Tregnaghi, M.; Zaramella, M. (2011), Evidence of distinct contaminant transport patterns in rivers using tracer tests and a multiple domain retention model. *Advances in Water Resources*, 34, 737-746.

- Duarte, A.A.; Boaventura, R.A.R. (2008), “Dispersion modelling in rivers for water sources protection, based on tracer experiments: case studies”, *II International Conference on Waste management, water pollution, air pollution, indoor climate*, Greece, 205-210.
- Ji, Z.G. (2017), “*Hydrodynamics and water quality: Modeling Rivers, Lakes, and Estuaries*”, 2nd ed., John Wiley & Sons, Hoboken.
- Kirkpatrick, S.; Gelatt, C.D.; Vecchi, M.P. (1983), Optimization by Simulated Annealing. *Science*, 220, 671-680.
- Socolofsky, S.A.; Jirka, G.H. (2005), “*Special topics in mixing and transport processes in the environment. Engineering Lectures*”, 5th ed., Texas A&M University, Texas.
- Telles, W.R. (2009), “Simulação do Transporte Horizontal Bidimensional de Substância Conservativa”, Dissertação de Mestrado, IPRJ/UERJ, Nova Friburgo.
- Carr, Meredith L.; Rehmann, Chris R. *Measuring the dispersion coefficient with acoustic Doppler current profilers*. *Journal of hydraulic engineering*, v. 133, n. 8, p. 977-982, 2007.
- Zeng, Yuhong; Huai, Wenxin. *Estimation of longitudinal dispersion coefficient in rivers*. *Journal of Hydro-environment Research*, v. 8, n. 1, p. 2-8, 2014.

ADJUSTMENT OF DISPERSION PARAMETERS IN THE MACAÉ RIVER WITH THE SIMULATED ANNEALING METHOD

Abstract. *The transport of pollutants in the rivers is a source of study for several authors, and the problem considered here dealt with data from the Rio Macaé. The objective of the study was to determine the values of the dispersion parameters that best fit the model for the data set. The methodology was based on the resolution by inverse problems, in which the direct problem employed analytical solution and the inverse the heuristic method Simulated Annealing. It was possible to adjust the model and test the method in a continuous search space with an objective function based on the prediction error in the inverse problem. The results were satisfactory and allowed a better fit of the model than that obtained by Telles (2009).*

Keywords: *Inverse Problems, Simulated Annealing, Environmental modeling.*