

SIMULAÇÃO DE UMA PLUMA DE CONTAMINANTE NO RIO MACAÉ UTILIZANDO REDES NEURAS ARTIFICIAIS

Wagner Rambaldi Telles¹; Antônio José da Silva Neto²; Pedro Paulo G. Watts Rodrigues³, Orestes Llanes Santiago⁴, Mirtha Irizar Mesa⁵

RESUMO – O risco de falta d’água potável é um assunto abordado e debatido em todo mundo. Alguns países já sofrem com esse problema devido à poluição descontrolada das águas através de resíduos industriais e domésticos, dentre outros. Baseado nisso, modelos matemáticos e computacionais têm sido constantemente utilizados no estudo de contaminantes em sistemas fluviais, tornando-se importantes na prevenção e estimativa do comportamento de plumas de contaminantes nesses corpos hídricos. Neste trabalho busca-se uma primeira abordagem para a modelagem do comportamento de contaminante no Rio Macaé, um importante rio brasileiro situado no nordeste do Estado do Rio de Janeiro, tendo como ponto de partida estudos iniciais baseados em Redes Neurais Artificiais. Pretende-se em um primeiro instante, simular o comportamento de uma pluma de contaminante em um trecho do Rio Macaé confrontando os resultados experimentais obtidos em dois pontos do mesmo com os resultados numéricos obtidos via redes neurais treinada pelo método de Levenberg-Marquardt. Os resultados apresentados neste trabalho servirão como base para um posterior treinamento da rede neural com o intuito de se obter a concentração em qualquer ponto do trecho de interesse do Rio Macaé.

ABSTRACT – The risk of lack of drinking water is a matter raised and debated worldwide. Some countries already suffer from this problem due to uncontrolled water pollution by industrial and domestic waste, among others. Based on this, mathematical and computational models have been constantly used in the study of contaminants in river systems, making it important in the prevention and estimate the behavior of plumes of contaminants in water bodies. This paper is a first approach to modeling the behavior of contaminant in Macae River, a major river located in the northwestern Brazilian state of Rio de Janeiro, with a starting point for initial studies based on Artificial Neural Networks. It was the first time, simulate the behavior of a plume of contaminant in an excerpt of Mace River confronting the experimental results obtained in two points of this river with the numerical results obtained by neural networks using the Levenberg-Marquardt method. The results presented in this work serve as a basis for subsequent training of the neural network in order to obtain the concentration at any point in the stretch of interest of the Macae River.

Palavras-Chave – Rio Macaé, transporte de poluentes, backpropagation.

¹ Aluno de doutorado do curso de Pós-Graduação em Modelagem Computacional da UERJ: Rua Alberto Rangel, s/n, Vila Nova, Nova Friburgo-RJ, 28601-970, Tel: (22) 2528-8300, e-mail: wtelles@iprj.uerj.br

² Professor do curso de Pós-Graduação em Modelagem Computacional da UERJ: Rua Alberto Rangel, s/n, Vila Nova, Nova Friburgo-RJ, 28601-970, Tel: (22) 2528-8300, e-mail: ajsneto@iprj.uerj.br

³ Professor do curso de Pós-Graduação em Modelagem Computacional da UERJ: Rua Alberto Rangel, s/n, Vila Nova, Nova Friburgo-RJ, 28601-970, Tel: (22) 2528-8300, e-mail: pwatts@iprj.uerj.br

⁴ Professor do curso de Engenharia Elétrica da ISPJAE: Calle 114, nº 11901. Entre 119 y 129, Marianao, Ciudad de La Habana-Cuba, Tel: (537) 260-0641, e-mail: orestes@electrica.cujae.edu.cu

⁵ Professora do curso de Engenharia Elétrica da ISPJAE: Calle 114, nº 11901. Entre 119 y 129, Marianao, Ciudad de La Habana-Cuba, Tel: (537) 260-0641, e-mail: mirtha@electrica.cujae.edu.cu

1 – INTRODUÇÃO

Atualmente um dos grandes problemas que a humanidade enfrenta é a possível falta de água potável. Essa possível escassez de água se deve em grande parte à poluição hídrica, a qual vem apresentando constante crescimento e os principais corpos receptores de toda essa poluição são os rios, lagos, mares e os reservatórios subterrâneos. Medidas que possam vir a contribuir no processo de monitoramento e avaliação dos impactos causados nos recursos hídricos oriundos dessa poluição descontrolada, são de grande valia, para que, a partir das mesmas, ações que possam vir a minimizar esses impactos sejam tomadas. Nesse contexto, modelos de qualidade de água são propostos devido a vários fatores, dentre os quais podem ser citados o custo/benefício, a redução do tempo de análise, a contribuição no processo de tomada de decisões, etc. Segundo Telles *et al.* (2008) é crescente a utilização de modelos de variada complexidade que sirvam ao propósito de auxiliar nas decisões que envolvam o manejo de recursos hídricos. Os modelos matemáticos e computacionais se enquadram nessa categoria de ferramenta.

Com o intuito de analisar o comportamento dos poluentes em cursos d'água este artigo apresenta um estudo sobre os parâmetros de transporte de contaminantes em um trecho de grande interesse do rio Macaé devido a sua importância local e regional. O estudo aqui descrito baseou-se em ensaio experimental que consistiu no lançamento de um traçador (NaCl) no baixo Macaé, nas proximidades da usina termelétrica. A evolução no tempo das concentrações resultantes foram comparadas em dois pontos de coleta com os dados numericamente gerados através de redes neurais artificiais, onde foi utilizada uma arquitetura baseada no perceptron múltiplas camadas (MLP) com retro-propagação de erro (backpropagation) e o método de Levenberg-Marquardt.

2 – ÁREA DE ESTUDOS – RIO MACAÉ

O Rio Macaé é um rio situado no estado do Rio de Janeiro como mostra a figura 1. Este rio possui sua nascente situada na cidade de Nova Friburgo e seu leito flui na direção leste-sudeste com aproximadamente 136 km de extensão até a desembocadura no Oceano Atlântico (Costa, 1999).

Em seu leito, o Rio Macaé apresenta características pedregosas e sinuosas, atravessando por terrenos rochosos e acidentados, bem como trechos remanescentes de Mata Atlântica até atingir as planícies aluvionares na região da baixada, onde se encontram diversas áreas agrícolas e de plantio. Particular ênfase se dá às diversas retíficas, as quais são sua área mais crítica, devido às fortes intervenções em sua rede de drenagem (Amaral, 2003). O ensaio experimental aqui descrito desenvolveu-se em uma dessas extensões retificadas, às margens da qual situa-se a UTE Mário Lago.



Figura 1 – Mapa do Rio Macaé onde está localizada a região de interesse.
Fonte: (Lugon *et al.*, 2008).

2.1 – Trabalho de Campo

O trabalho de campo apresentado neste artigo foi realizado em um trecho da região baixa do Rio Macaé, situado nas proximidades da UTE Mário Lago, também conhecida como Termomacaé, que está localizada na rodovia BR 101 no município de Macaé-RJ, como mostra a figura 2.

Para a simulação do comportamento de uma pluma de contaminante na região estudada, foi utilizado NaCl como traçador, devido ao mesmo conseguir reproduzir de maneira satisfatória o comportamento de poluentes em cursos d'águas.

Rigo e Teixeira (1995) também enfatizam a viabilidade do uso de traçadores nesse tipo de experimento, pois além de determinar o modo como alguma substância conservativa, que é dissolvida no escoamento, mistura-se ao longo de um escoamento, pode eventualmente descrever a interferência da mesma no movimento do próprio fluido que escoar, o que não ocorreu neste estudo, em face das baixas concentrações utilizadas.

O experimento foi realizado no dia 29 de maio de 2008, data essa em que o Rio Macaé apresentava maiores riscos ambientais devido à baixa descarga disponível para diluição (Lugon *et al.*, 2008).

Para a preparação do traçador, diluiu-se 2000 g de cloreto de sódio em um recipiente contendo 10 l d'água, o que gerou um montante de aproximadamente 11 l. Este procedimento se repetiu por dez vezes a fim de gerar dois recipientes contendo 55 l de solução salina em cada recipiente. Através de um condutivímetro foi verificada uma concentração de 175 g/l em uma primeira determinação do campo e 172 g/l em uma segunda determinação. Enquanto a concentração salina no trecho do rio em análise apresentava 37 mg/l.

O lançamento se deu a 0,50 m da margem (transversal). Já as coletas das amostras ocorreram em dois pontos a jusante do ponto de lançamento. O primeiro ponto de coleta se deu a 50

m do ponto de lançamento e 0,50 m na transversal, enquanto que o segundo ponto de coleta estava localizado a 50 m na longitudinal e a 3 m na transversal, tendo o experimento durado cerca de 360 s. A tabela 1 mostra a relação “concentração x tempo” utilizada para treinamento da rede.



Figura 2 – Vista aérea da Termoeletrica Mário Lago e da região de estudo.
Fonte: Google Earth.

Tabela 1 – Valores das concentrações nas amostras utilizadas no treinamento da rede neural.

Concentração coletada a 0,5 m da margem				Concentração coletada a 3,0 m da margem	
Tempo(s)	Concentração (mg/l)	Tempo(s)	Concentração (mg/l)	Tempo(s)	Concentração (mg/l)
0	37,00	214	112,84	0	37,00
12	40,29	222	108,82	100	44,97
24	38,16	230	102,39	108	111,93
35	39,48	240	93,22	116	130,01
42	38,48	258	82,11	124	179,56
49	37,99	275	70,16	136	251,26
75	39,77	280	67,34	180	144,02
86	41,67	300	56,56	212	110,75
92	41,34	307	57,63	266	79,04
100	126,88	312	57,36	314	55,58
109	196,70	320	56,56	342	47,01
136	363,12	328	52,03		
146	230,86	335	47,34		
170	187,94	343	47,54		
190	157,66	348	45,88		
194	150,78	352	47,14		
205	123,43				

Com base nas concentrações experimentais, é possível estimar o perfil da concentração nos dois pontos de coleta para os demais tempos onde não ocorreram medições da mesma, como mostrado na figura 3.

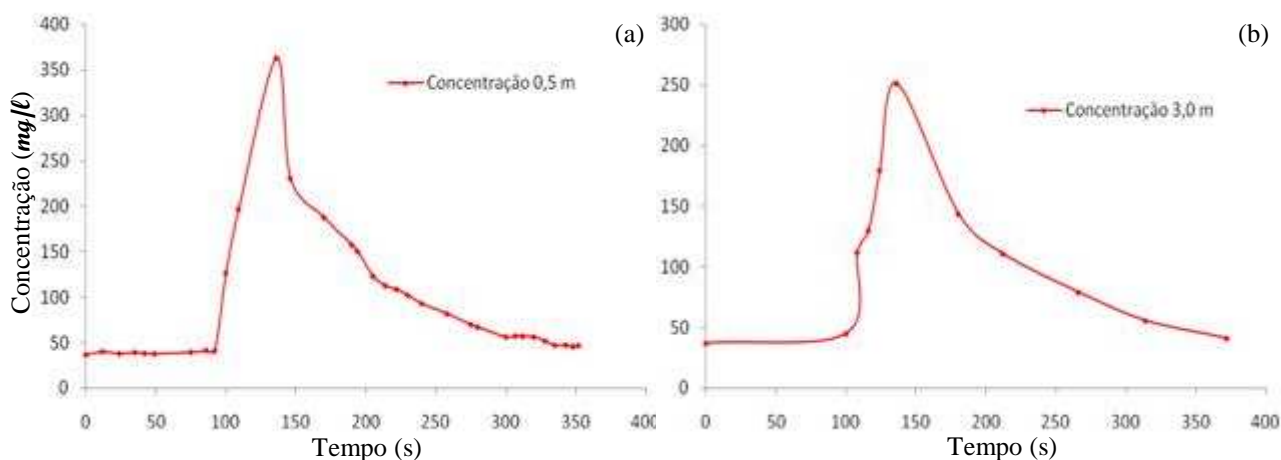


Figura 3 – (a) Perfil da concentração a 0,5 m da margem do rio; (b) Perfil da concentração a 3,0 m da margem do rio.

3 – REDES NEURAIS ARTIFICIAIS

As Redes Neurais Artificiais (RNAs) são estruturas paralelas compostas de neurônios artificiais – os quais simulam os neurônios biológicos humanos – densamente conectados que apresentam duas fases distintas de operação: a aprendizagem (treinamento) e a generalização.

O neurônio artificial é uma estrutura lógico-matemática que procura simular a forma, o comportamento e a funcionabilidade de um neurônio biológico. Dessa forma, os dendritos são substituídos por entradas cujas ligações com o corpo celular artificial são realizadas através de elementos chamados de pesos, os quais simulam as sinapses. Os estímulos captados pelas entradas são processados pela função soma e o limiar de disparo do neurônio biológico é representado pela função transferência (Tonsig, 2000). A maioria dos modelos de redes neurais possui alguma regra de treinamento, onde os pesos e suas conexões são ajustados com os padrões apresentados; elas aprendem através de exemplos (Yamamoto e Nikiforuk, 2000). Dentre as diferentes topologias neurais considera-se que as redes perceptron múltiplas camadas (MLP) que usam em seu treinamento a retro-propagação do erro, são aquelas implementadas com maior frequência devido à facilidade de implementação e sintaxe menos robusta.

O algoritmo de retro-propagação (backpropagation) é o método de treinamento supervisionado mais popular de aprendizado em redes neurais de múltiplas camadas. Em síntese, são apresentados valores de entrada à rede, os quais são chamados de padrões, em seguida, compara-se a saída produzida pela rede a valores específicos, os quais são chamados alvos, caso a

saída não esteja dentro do esperado, calcula-se o erro, o qual é propagado a partir da camada de saída até a camada de entrada e os pesos das conexões das camadas internas vão sendo modificados conforme o erro propaga.

Com o intuito de modelar o comportamento da concentração na região de interesse, reproduzindo numericamente os dados obtidos no trabalho de campo descrito na Seção 2.1, foi realizado o treinamento da rede utilizando o algoritmo backpropagation e o método de Levenberg-Marquardt para a determinação dos pesos e bias, o qual, segundo Kinoshita *et al.* (2000), aumenta a velocidade de treinamento sem perder a qualidade de desempenho da rede.

3.1 – Método de Levenberg-Marquardt

Assim como o método Quase-Newton, o método de Levenberg-Marquardt é um método de otimização de segunda ordem o qual utiliza uma aproximação para a matriz Hessiana e para o gradiente a fim de atualizar os pesos e bias, ou seja:

$$H \approx J^T J \quad (1)$$

onde H é a matriz Hessiana, J é a matriz Jacobiana que contém a derivada primeira dos erros da rede com relação aos pesos e bias.

O método de Levenberg-Marquardt procura encontrar o melhor ajuste para um conjunto de dados tentando minimizar a soma dos quadrados dos resíduos, obtendo um novo vetor de pesos w_{n+1} , partindo do vetor de pesos w_n , ou seja:

$$w_{n+1} = w_n + \Delta w_n \quad (2)$$

onde:

$$\Delta w_n = [J_n^T J_n + \mu I]^{-1} J_n^T e(w) \quad (3)$$

Na Equação (3), $e(w)$ é a função erro, μ é o parâmetro (fator de amortecimento) de Marquardt e I é a matriz identidade. Quando μ é igual a zero, este é somente o método de Newton, usando a matriz Hessiana aproximada. Quando μ assume valores maiores, verifica-se uma descida em gradiente com pequenos valores incrementais. O método de Newton é mais rápido e preciso ao aproximar-se do erro mínimo, então o objetivo é mudar para o método de Newton tão rápido quanto

possível. Deste modo, μ é diminuído após cada etapa bem sucedida e é aumentado somente quando após uma nova tentativa ocorrer um aumento da discrepância entre a saída da rede e o alvo a ser considerado. Baseado neste procedimento, a discrepância sempre será reduzida a cada nova iteração do algoritmo (Brito Júnior *et al.*, 2007).

A implementação do método proposto nesta seção foi realizada no programa Matlab[®], assim como a construção dos gráficos referentes às simulações.

4 – RESULTADOS E DISCUSSÕES

Foram realizadas comparações entre os resultados experimentais e as simulações obtidas através do treinamento de uma rede neural com minimização do erro médio quadrático por Levenberg-Marquardt. Os resultados numéricos foram gerados em um computador com processador Intel Core 2 Duo com 2 GB de memória RAM. Em todas as simulações apresentadas aqui, o tempo de treinamento da rede neural foi muito baixo.

Para o treinamento da rede neural, foram realizadas simulações variando o número de camadas ocultas, bem como o número de neurônios presente em cada camada a fim de se obter o melhor encaixe entre os resultados numéricos com relação os dados experimentais.

Devido à aleatoriedade do Matlab na escolha dos pesos e bias, cada simulação foi processada em torno de 30 vezes a fim de se encontrar os melhores resultados numéricos, tendo como referência os dados experimentais obtidos no trabalho de campo.

Em todos os testes realizados, foram passados como padrão de treinamento 44 informações referentes a 6 parâmetros de influência significativa na modelagem da pluma de contaminante, são eles: posição de lançamento na longitudinal, posição de lançamento na transversal, quantidade do traçador lançada no rio, posição de coleta na longitudinal, posição de coleta na transversal e tempo de coleta.

De posse dessas informações a rede pode ser caracterizada por uma matriz $P_{6 \times 44}$ como padrão de entrada, o qual irá mapear um vetor $T_{1 \times 44}$ que representa as concentrações oriundas do trabalho de campo. A figura 4 apresenta a estrutura da rede neural.

A posição de lançamento na longitudinal e na transversal foi definida como 50,0 m e 0,50 m, respectivamente, enquanto que a concentração inicial lançada instantaneamente no rio como 40.816 *mg/l*, e a posição de coleta das amostras, 100 m na longitudinal e 0,50 m na transversal para o primeiro ponto e 100 m na longitudinal e 3 m na transversal para o segundo ponto de coleta; por fim, o tempo em que se deu a coleta das amostras é descrito na tabela 1. O alvo foi composto pelas concentrações das amostras coletadas com relação a seus respectivos tempos (tabela 1).

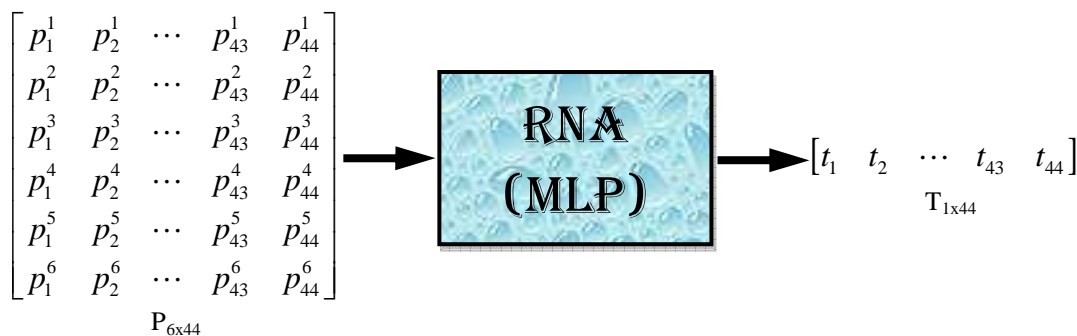
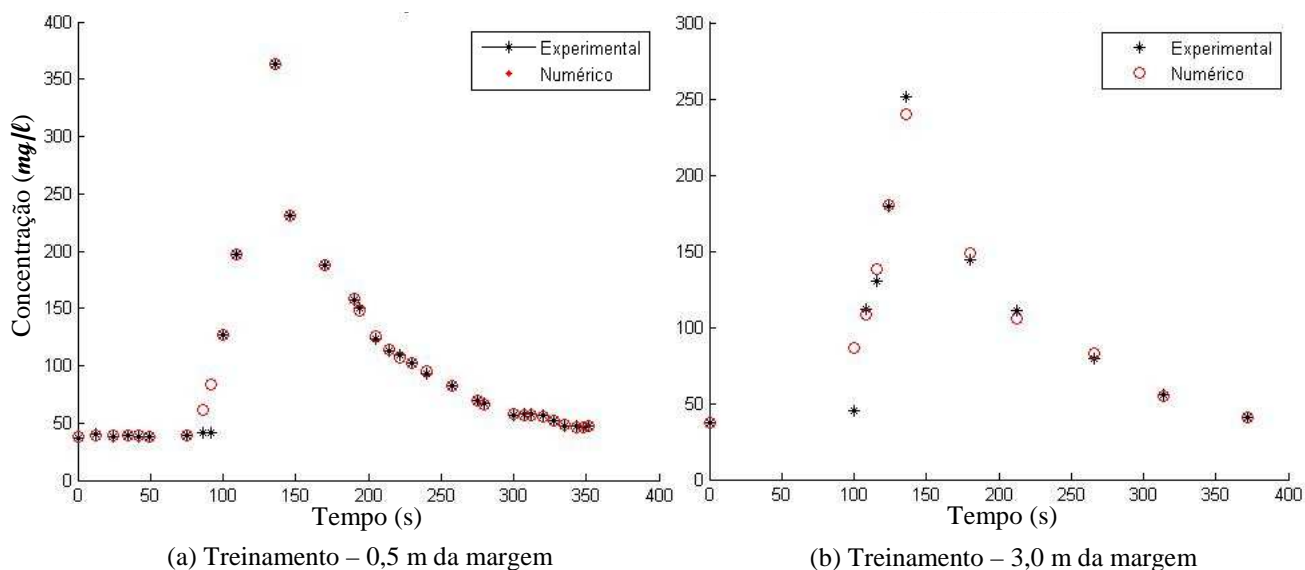


Figura 4 – Esquema da rede neural utilizado na simulação da pluma de contaminante no Rio Macaé.

Inicialmente foi realizado o treinamento da rede neural utilizando apenas uma camada oculta e variando a quantidade de neurônios na camada escondida. Para efeito de validação do treinamento, a rede foi testada com um conjunto de dados que não fizeram parte do treinamento, ou seja, foi verificado o comportamento da rede para os intervalos temporais [0, 352] (0,5 m da margem) e [0, 372] (3,0 m da margem), tomando como intervalo entre duas posições temporais 1 min. A tabela 2 contém os parâmetros, enquanto a figura 5 apresenta os resultados obtidos com a melhor configuração para o treinamento da rede com uma camada oculta.

Tabela 2 – Valores da configuração da rede neural utilizada nas simulações.

Parâmetros	Valores
Número de camadas ocultas	1
Número de neurônios nas camadas ocultas	30
Funções de ativação	Tangente Hiperbólica Linear
Método	Levenberg-Marquardt
Taxa de Aprendizagem	0,001
Número máximo de épocas	5000



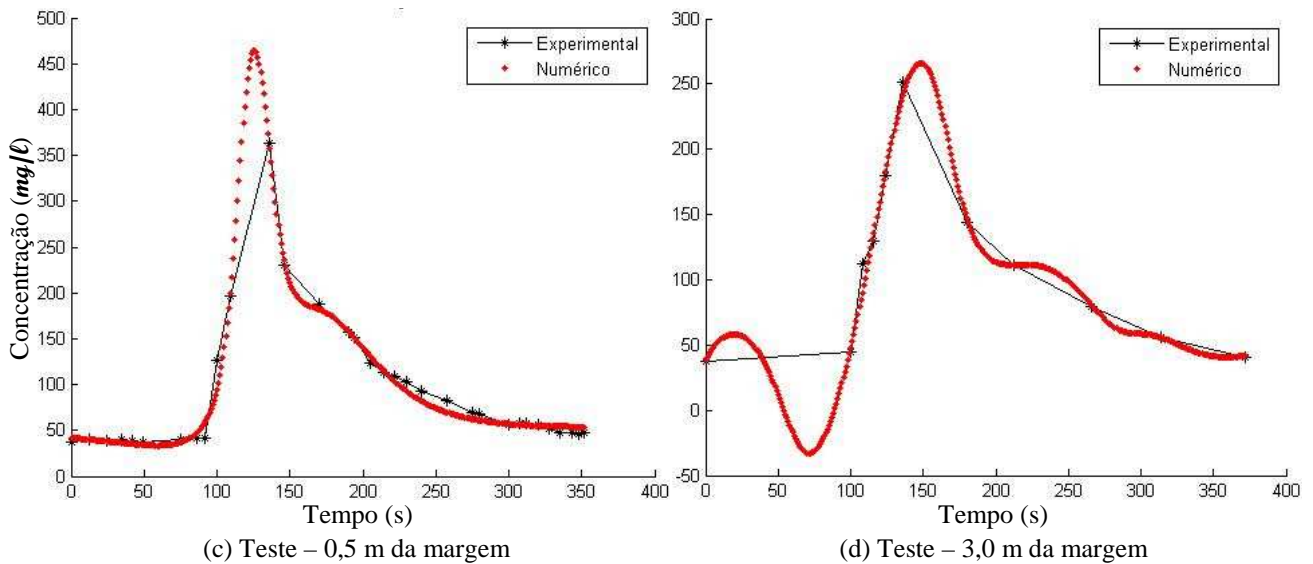
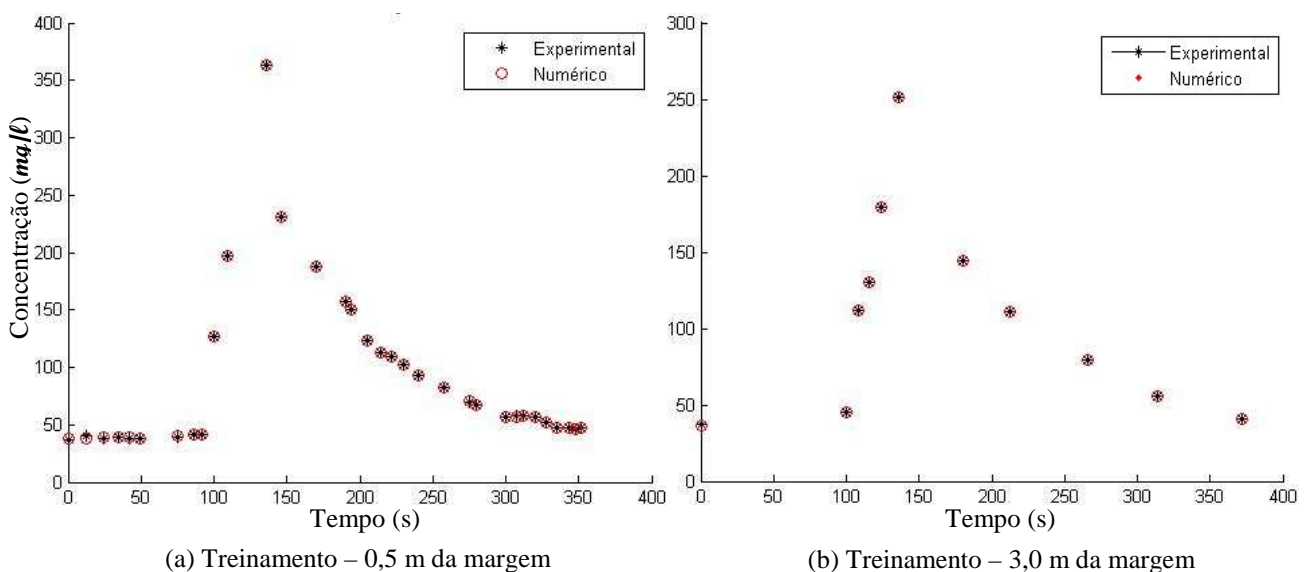


Figura 5. Perfis das concentrações obtidas nos pontos de coleta após o treinamento e teste da rede neural com 30 neurônios na camada oculta, decorridas 531 épocas.

Verifica-se que o treinamento da rede neural com apenas uma camada oculta representado pela figura 5 (a) não conseguiu modelar satisfatoriamente o pico de concentração.

Foi realizado então o treinamento da rede neural utilizando duas camadas ocultas e variando o número de neurônios das mesmas a fim de se obter o melhor conjunto de parâmetros que representasse numericamente os dados obtidos no trabalho de campo. A validação se deu com o mesmo conjunto de dados utilizados para o teste da rede com apenas uma camada oculta. A figura 6 apresenta os resultados obtidos com o treinamento da rede com a melhor configuração, contendo 14 e 8 neurônios nas primeira e a segunda camadas escondidas, respectivamente. As funções de ativação foram Tangente Hiperbólica, Tangente Hiperbólica e Linear. Os demais parâmetros são os mesmos apresentados na tabela 2.



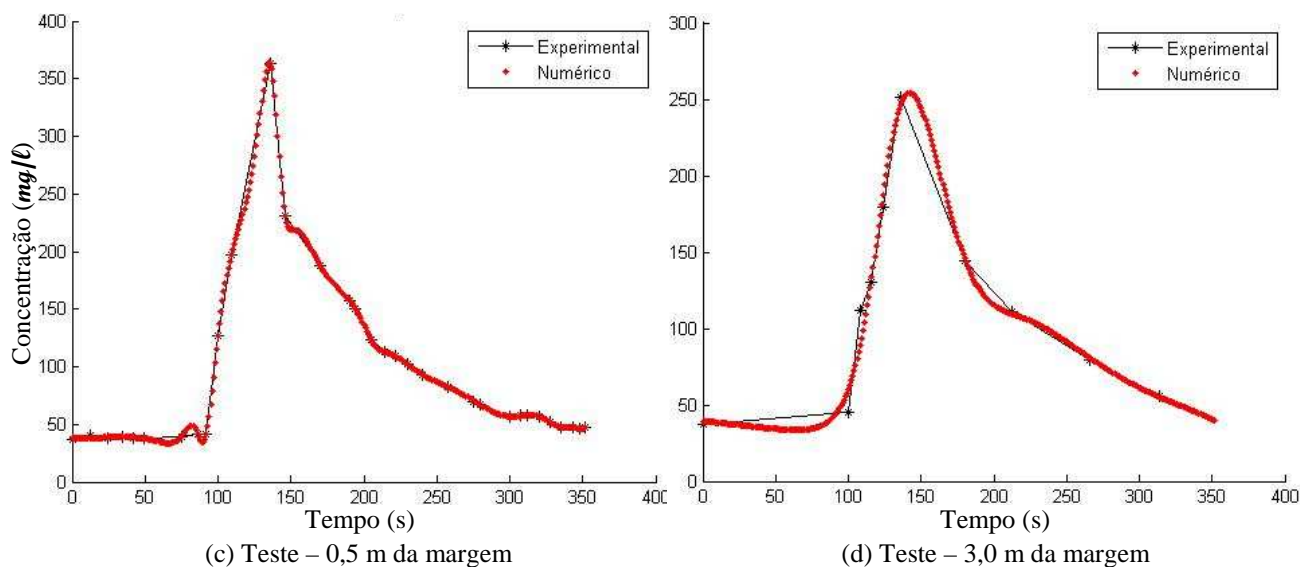


Figura 6 – Perfis das concentrações nos pontos de coleta obtida a 0,5 m da margem e após o treinamento e teste da rede neural com 14 e 8 neurônios na primeira e segunda camadas escondidas, respectivamente, decorridas 1280 épocas.

Observa-se na figura 6, um melhor ajuste do resultado numérico aos dados experimentais no que se refere ao pico de concentração da pluma de contaminante (traçador).

5 – CONCLUSÕES E CONSIDERAÇÕES

Comparando-se os resultados numéricos obtidos através do treinamento com redes neurais com minimização do erro médio quadrático por Levenberg-Marquardt com os dados experimentais, verifica-se que o treinamento com apenas uma camada oculta não conseguiu modelar de forma satisfatória o pico de concentração da pluma de contaminante, como mostra a figura 5. Verifica-se também que os resultados apresentados pela rede após o treinamento com duas camadas ocultas, consegue um melhor ajuste numérico em relação aos dados experimentais do que o treinamento da rede com apenas uma camada oculta.

Conclui-se também que mesmo as simulações apresentando uma forte relação entre os dados experimentais e os resultados numéricos nos seus respectivos tempos de análise, a rede treinada com apenas uma camada oculta não foi capaz de realizar uma generalização para a modelagem do pico de concentração da pluma de contaminante quando utilizado um conjunto de padrões que não fizeram parte do treinamento da rede neural, diferentemente do treinamento da rede com duas camadas ocultas, as quais apresentaram uma melhor generalização frente aos dados experimentais.

O intuito desse trabalho foi explorar uma primeira abordagem da dispersão de poluentes no Rio Macaé, tendo como enfoque e parâmetros para o treinamento da rede as concentrações obtidas em apenas dois pontos de coleta. A partir deste estudo inicial, busca-se, como expectativa para trabalhos futuros, uma generalização da rede neural com o intuito de se obter a concentração em

qualquer ponto do rio no trecho de interesse e em qualquer instante de tempo a partir do modelo computacional para o problema de transporte de contaminantes.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem à CAPES, CPNq e à empresa Termomacaé Ltda.

BIBLIOGRAFIA

Amaral, K. J. (2003). “*Estuário do Rio Macaé: Modelagem Computacional como Ferramenta para o Gerenciamento Integrado de Recursos Hídricos*”, Tese de Doutorado, UFRJ, Rio de Janeiro.

BRITO JÚNIOR, C.A.R.; BEZERRA, E.M.; PARDINI, L.C.; ANCELOTTI JÚNIOR, A.C.; PEREIRA, M.S.; DE BARROS, E.; DE CAMARGO, L.R. (2007). “*Redes Neurais Artificiais aplicadas para a predição do comportamento dinâmico-mecânico de compósitos de matriz epóxi reforçados com fibras de carbono*”. Revista Matéria, Rio de Janeiro, v. 12, n. 2, pp. 346-357.

COSTA, H. (1999). “*Subsídios para Gestão dos Recursos Hídricos das Bacias Hidrográficas dos Rios Macacu, São João, Macaé e Macabu*”. Secretaria de Estado de Meio Ambiente e Desenvolvimento Sustentável (SEMADS), Rio de Janeiro.

KINOSHITA, S. K.; MARQUES, P. M. A. E FRÈRE, A. F. (2000). “*Utilização de Análise de Componentes Principais e Redes Neurais Artificiais para a Classificação de Nódulos em Mamogramas Digitalizados*” in Anais do XVII Congresso Brasileiro de Engenharia Biomédica, Florianópolis, 1, p. 1214-1216.

LUGON JR., J.; RODRIGUES, P. P. G. W. E SILVA NETO A. J. (2008). “*Assessment of Dispersion Mechanisms in Rivers by Means of an Inverse Problem Approach*”. Inverse Problems in Science and Engineering, v.16, n.8, p. 967-979.

RIGO, D. e TEIXEIRA, E.C. (1995). “*Emprego de traçadores no projeto e otimização de unidades de tratamento de água e efluentes*” in Anais do XVIII Congresso Brasileiro de Engenharia Sanitária e Ambiental, Salvador.

YAMAMOTO, Y. e NIKIFORUK, P. (2000). “*A New Supervised Learning Algorithm for Multilayered and Interconnectd Neural Networks*”. IEEE Transactins on Neural Networks, v. 11, n. 1.

TELLES, W. R. (2009). “*Simulação do transporte bidimensional horizontal de substância conservativa*”, Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional), Universidade do Estado do Rio de Janeiro – UERJ/IPRJ, Nova Friburgo.

TELLES, W. R.; SILVA NETO, A. J.; LUGON, JR. J. E RODRIGUES, P. P. G. W. (2008). “*Simulação do comportamento de uma pluma de traçador conservativo via o método dos Volumes Finitos*” in Anais do XI Encontro de Modelagem Computacional, Volta Redonda.

TONSIG, S. L. (2000). *Redes Neurais Artificiais Multicamadas e o Algoritmo Backpropagation*. Universidade de São Paulo, São Paulo-SP, 22 p.