



MINISTÉRIO DA CIÊNCIA E TECNOLOGIA

**INSTITUTO NACIONAL DE PESQUISAS ESPACIAIS**

INPE-15227-TDI/1319

## **ESTIMAÇÃO DE FONTE DE POLUIÇÃO ATMOSFÉRICA USANDO OTIMIZAÇÃO POR ENXAME DE PARTÍCULAS**

Eduardo Fávero Pacheco da Luz

Dissertação de Mestrado do Curso de Pós-Graduação em Computação Aplicada,  
orientada pelos Drs. Haroldo Fraga de Campos Velho e José Carlos Becceneri, aprovada  
em 26 de fevereiro de 2007.

O original deste documento está disponível em:

<<http://urlib.net/sid.inpe.br/mtc-m17@80/2008/02.12.12.07>>

INPE  
São José dos Campos  
2008

## **PUBLICADO POR:**

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE

Gabinete do Diretor (GB)

Serviço de Informação e Documentação (SID)

Caixa Postal 515 - CEP 12.245-970

São José dos Campos - SP - Brasil

Tel.:(012) 3945-6911/6923

Fax: (012) 3945-6919

E-mail: [pubtc@sid.inpe.br](mailto:pubtc@sid.inpe.br)

## **CONSELHO DE EDITORAÇÃO:**

### **Presidente:**

Dr. Gerald Jean Francis Banon - Coordenação Observação da Terra (OBT)

### **Membros:**

Dr<sup>a</sup> Maria do Carmo de Andrade Nono - Conselho de Pós-Graduação

Dr. Haroldo Fraga de Campos Velho - Centro de Tecnologias Especiais (CTE)

Dr<sup>a</sup> Inez Staciarini Batista - Coordenação Ciências Espaciais e Atmosféricas (CEA)

Marciana Leite Ribeiro - Serviço de Informação e Documentação (SID)

Dr. Ralf Gielow - Centro de Previsão de Tempo e Estudos Climáticos (CPT)

Dr. Wilson Yamaguti - Coordenação Engenharia e Tecnologia Espacial (ETE)

### **BIBLIOTECA DIGITAL:**

Dr. Gerald Jean Francis Banon - Coordenação de Observação da Terra (OBT)

Marciana Leite Ribeiro - Serviço de Informação e Documentação (SID)

Jefferson Andrade Ancelmo - Serviço de Informação e Documentação (SID)

Simone A. Del-Ducca Barbedo - Serviço de Informação e Documentação (SID)

### **REVISÃO E NORMALIZAÇÃO DOCUMENTÁRIA:**

Marciana Leite Ribeiro - Serviço de Informação e Documentação (SID)

Marilúcia Santos Melo Cid - Serviço de Informação e Documentação (SID)

Yolanda Ribeiro da Silva e Souza - Serviço de Informação e Documentação (SID)

### **EDITORAÇÃO ELETRÔNICA:**

Viveca Sant'Ana Lemos - Serviço de Informação e Documentação (SID)



MINISTÉRIO DA CIÊNCIA E TECNOLOGIA

**INSTITUTO NACIONAL DE PESQUISAS ESPACIAIS**

INPE-15227-TDI/1319

## **ESTIMAÇÃO DE FONTE DE POLUIÇÃO ATMOSFÉRICA USANDO OTIMIZAÇÃO POR ENXAME DE PARTÍCULAS**

Eduardo Fávero Pacheco da Luz

Dissertação de Mestrado do Curso de Pós-Graduação em Computação Aplicada,  
orientada pelos Drs. Haroldo Fraga de Campos Velho e José Carlos Becceneri, aprovada  
em 26 de fevereiro de 2007.

O original deste documento está disponível em:

<http://urlib.net/sid.inpe.br/mtc-m17@80/2008/02.12.12.07>

INPE  
São José dos Campos  
2008

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

---

L979e Luz, Eduardo Fávero Pacheco.

Estimação de fonte de poluição atmosférica usando otimização por enxame de partículas/ Eduardo Fávero Pacheco da Luz. – São José dos Campos: INPE, 2008.

84p. ; (INPE-15227-TDI/1319)

1. Algoritmos. 2. Otimização. 3. Métodos heurísticos.  
4. Partículas. 5. Transporte de poluição. I. Título.

CDU 519.688:532.55

---

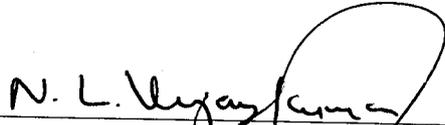
Copyright © 2008 do MCT/INPE. Nenhuma parte desta publicação pode ser reproduzida, armazenada em um sistema de recuperação, ou transmitida sob qualquer forma ou por qualquer meio, eletrônico, mecânico, fotográfico, microfilmico, reprográfico ou outros, sem a permissão escrita da Editora, com exceção de qualquer material fornecido especificamente no propósito de ser entrado e executado num sistema computacional, para o uso exclusivo do leitor da obra.

Copyright © 2008 by MCT/INPE. No part of this publication may be reproduced, stored in a retrieval system, or transmitted in any form or by any means, electronic, mechanical, photocopying, microfilming, recording or otherwise, without written permission from the Publisher, with the exception of any material supplied specifically for the purpose of being entered and executed on a computer system, for exclusive use of the reader of the work.

Aprovado (a) pela Banca Examinadora  
em cumprimento ao requisito exigido para  
obtenção do Título de Mestre em

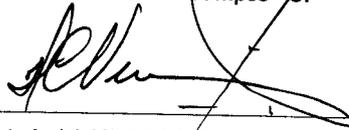
Computação Aplicada

Dr. Nandamudi Lankalapalli Vijaykumar



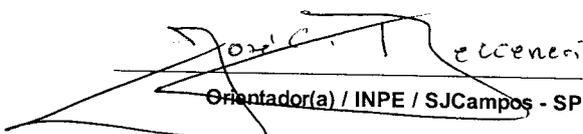
Presidente / INPE / SJC Campos - SP

Dr. Haroldo Fraga de Campos Velho



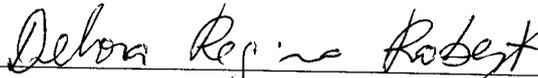
Orientador(a) / INPE / SJC Campos - SP

Dr. José Carlos Becceneri



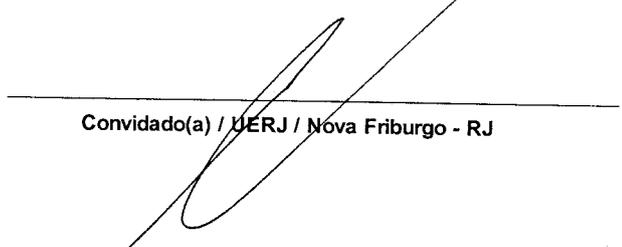
Orientador(a) / INPE / SJC Campos - SP

Dra. Débora Regina Roberti



Convidado(a) / UFSM / Santa Maria - RS

Dr. Antonio José da Silva Neto



Convidado(a) / UERJ / Nova Friburgo - RJ

Aluno (a): Eduardo Fávero Pacheco da Luz

São José dos Campos, 26 de Fevereiro de 2007.



*“A solução de um problema inverso consiste em determinar causas baseado na observação dos seus efeitos”.*

OLEG MIKHAILIVITCH ALIFANOV



*A meus pais...*



## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço a Deus, pela vida.

Ao Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE), por proporcionar um ambiente acolhedor e propício à pesquisa.

Aos pesquisadores do Laboratório Associado de Computação e Matemática Aplicada (LAC), em especial àqueles que lecionam no curso de Pós-graduação em Computação Aplicada (CAP), pelo conhecimento compartilhado.

Aos meus orientadores, Dr. Haroldo Fraga de Campos Velho e Dr. José Carlos Becceneri, pelas sugestões e sempre corretos direcionamentos.

À Dr<sup>a</sup>. Débora Regina Roberti, pelos ensinamentos, e pela boa acolhida.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), pelo auxílio financeiro.

E com muito carinho, aos meus amigos e amigas do INPE, que nestes dois anos, em toda e qualquer hora sempre estiveram ao meu lado quando precisei.



## **RESUMO**

A poluição atmosférica é um problema de aspecto global que leva cientistas e líderes mundiais a juntar esforços com o objetivo de obter soluções de médio e longo prazo para evitar problemas futuros. Uma das ações necessárias envolve a localização de fontes e a estimação da quantidade de emissão de poluentes. Atualmente, técnicas de problemas inversos podem ser utilizadas neste processo, e quando este problema é visto sob a ótica de um problema de otimização com restrições, o uso de técnicas alternativas de pesquisa operacional, tais como algoritmos bioinspirados, podem ser consideradas como uma alternativa viável e de comprovada robustez. Esta dissertação apresenta os resultados obtidos pela utilização de um algoritmo bioinspirado (PSO) e comparados com um método exato para a localização e estimação de fontes de poluição atmosférica.



# **ESTIMATION OF ATMOSPHERIC POLLUTING SOURCE USING PARTICLE SWARM OPTIMIZATION**

## **ABSTRACT**

Atmospheric pollution is a problem of global aspect that takes scientists and world leaders to join efforts with the objective of finding mid and long term solutions to avoid future problems. One of the necessary actions involves the localization of sources and the estimation of polluting emission quantities. Actually, inverse problem techniques can be used in this process, and when this problem is taken as an optimization problem with restrictions, the use of alternatives techniques can be considered feasible with proven robustness. This dissertation presents the results obtained by the use of a bioinspired algorithm (PSO) and compared with an exact method for localization and estimation of atmospheric polluting sources.



## SUMÁRIO

Pág.

### LISTA DE FIGURAS

### LISTA DE TABELAS

### LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

<b>CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO</b> .....	<b>23</b>
<b>CAPÍTULO 2 - DISPERSÃO DE POLUENTES NA ATMOSFERA</b> .....	<b>27</b>
2.1 Problema direto lagrangiano .....	28
2.1.1 Problema direto lagrangiano avançado .....	31
2.1.2 Problema direto lagrangiano regressivo .....	33
2.1.3 O Modelo LAMBDA .....	34
2.2 Modelo fonte-receptor .....	37
<b>CAPÍTULO 3 - PROBLEMA INVERSO</b> .....	<b>39</b>
3.1 Definição de problemas inversos .....	39
3.2 Problema inverso com regularização .....	41
3.3 Problema inverso como um problema de otimização .....	44
<b>CAPÍTULO 4 - OTIMIZAÇÃO POR ENXAME DE PARTÍCULAS</b> .....	<b>47</b>
4.1 Bases sócio-cognitivas .....	48
4.2 Detalhamento da técnica de PSO .....	50
4.3 Pseudocódigo do PSO .....	54
4.4 Variantes do PSO .....	55
4.4.1 PSO com inércia .....	56
4.4.2 PSO com turbulência (PSO-t) .....	57
<b>CAPÍTULO 5 - RESULTADOS</b> .....	<b>59</b>
5.1 Ambiente virtual de estudos .....	59
5.2 Determinação de parâmetros para o PSO .....	65
5.3 Resultados numéricos .....	67
5.3.1 Ruído de 5% .....	68
5.3.2 Ruído de 10% .....	70
5.4 PSO <i>versus</i> PSO-t .....	72
5.5 Estimação com ACO .....	73
<b>CAPÍTULO 6 - CONCLUSÕES</b> .....	<b>75</b>
6.1 Trabalhos futuros .....	76
<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b> .....	<b>79</b>



## LISTA DE FIGURAS

2.1 – Esquema de um modelo direto em física da atmosfera. ....	27
2.2 – Esquema de definição das trajetórias para os modelos de integração avançada ( <i>forward</i> ) e regressiva ( <i>backward</i> ). ....	30
3.1 – Problema direto e problema inverso. ....	40
3.2 – Processo de construção de modelos. Fonte: Goldbarg, Luna (2005). ....	45
3.3 – Concepção da estrutura de uma função com mínimos locais e mínimo global. Fonte: Adaptado de Roberti (2005). ....	45
4.1 – Bando de pássaros em vôo coordenado. ....	47
4.2 – Fluxo de controle para o PSO. Fonte: Adaptado de Kennedy e Eberhart (2001)..	51
4.3 – Esquema de atualização da posição do agente. Fonte: Adaptado de Kennedy e Eberhart (2001). ....	52
4.4 – a) Esquema para identificação do melhor local; b) esquema para identificação do melhor global. Fonte: Adaptado de Kennedy e Eberhart (2001). ....	53
5.1 – Área virtual de $1,5 \times 10^9 \text{ m}^3$ usada para o experimento de localização e estimação de fontes de poluição. ....	59
5.2 – Representação planar com as denominações das 25 subáreas da área virtual em estudo. ....	60
5.3 – Posicionamento dos sensores, representados por ●, na área de estudo. ....	61
5.4 – Esquemática da situação inicial do experimento. ....	62
5.5 – Esquema de limitantes adotados para o problema de otimização. ....	66
5.6 – Resultado gráfico da estimativa de intensidade através de PSO para um ruído de 5%. ....	70
5.7 – Resultado gráfico da estimativa de intensidade através de PSO para um ruído de 10%. ....	72
5.8 – Comparativo de convergência entre o PSO e PSO-t. ....	73



## LISTA DE TABELAS

5.1 – Posição dos sensores na área de estudo.....	61
5.2 – Dados meteorológicos de velocidade e direção média dos ventos adotados do experimento de Copenhagen. ....	62
5.3 – Comparativo de tempo de execução e ganho computacional para os métodos PSO e Q-N. ....	67
5.4 – Comparação de estimativa de resultados através dos métodos Q-N e PSO. Para o PSO estão a média de 25 sementes e o melhor resultado para a inserção de 5% de ruído.....	69
5.5 – Comparação de estimativa de resultados através dos métodos Q-N e PSO. Para o PSO estão a média de 25 sementes e o melhor resultado para a inserção de 10% de ruído.....	71



## **LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS**

- ACO - Ant Colony Optimization
- FDP - Função Densidade de Probabilidades
- INPE - Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais
- LAC - Laboratório Associado de Computação e Matemática Aplicada
- PI - Problemas Inversos
- PSO - Particle Swarm Optimization
- Q-N - quase-Newton



## CAPÍTULO 1

### INTRODUÇÃO

Por definição e senso comum, a atmosfera é uma fina camada que envolve alguns planetas e se compõe basicamente de gases e poeira, mantida próxima à superfície do planeta por força da gravidade.

A atmosfera que cobre a superfície do planeta Terra pode ser considerada como sendo um dos únicos recursos naturais que são compartilhados pelo mundo inteiro. Em nosso planeta a atmosfera é composta basicamente de nitrogênio (78,08%), oxigênio (20,94%) e uma ampla mistura de gases raros (0,98%), que podem ser argônio, dióxido de carbono, hélio, ozônio, hidrogênio, criptônio, metano, xenônio e radônio.

Esta mistura, que inicialmente pode não apresentar nenhum padrão, é fator essencial para grande parte da vida como a conhecemos no planeta Terra. Alterações, por menor que sejam, neste delicado equilíbrio podem trazer consequências desastrosas para várias formas de vida no planeta, inclusive para a atual espécie dominante.

Uma das principais formas de desequilíbrio é o aumento do efeito estufa (*greenhouse effect* – efeito em que alguns materiais são transparentes a radiação solar em algum intervalo do espectro eletromagnético, mas absorvem a radiação em outro domínio do espectro solar, aprisionando energia na forma de calor) (BNDES, 1999), que tem preocupado cientistas, políticos, dirigentes globais e a sociedade moderna. O efeito estufa é um processo natural e necessário da atmosfera terrestre para manter a temperatura do globo em um nível aceitável. Porém, o que tem chamado a atenção é o excessivo aumento da concentração dos gases causadores do efeito estufa na atmosfera.

Com o aumento da concentração desses gases, a temperatura média do planeta também sofrerá um acréscimo, trazendo alterações indesejadas em variáveis climáticas e hidrológicas. O acúmulo desses gases causadores do efeito estufa na atmosfera (dióxido

de carbono ( $\text{CO}_2$ ), metano ( $\text{CH}_4$ ) e vários tipos de clorofluorcarbonetos ( $\text{CF}_x\text{Cl}_x$ ) tem impacto direto no aumento do efeito estufa.

O efeito estufa é um dos problemas causados pela poluição em escala global. Todavia, a poluição atmosférica tem outras causas e conseqüências, desde chuva ácida, até desastres provocados por liberação industrial de gases venenosos, como ocorreu na fábrica de pesticidas da Union Carbide em Bhopal na Índia em 1984, onde estima-se que morreram de 2.500 a 5.000 pessoas neste episódio. Ou de nuvens radioativas, como aconteceu em abril de 1986 em Chernobyl, Rússia. É muito difícil ter certeza da quantidade de pessoas doentes ou que vieram a falecer devido a exposição à radiação, mas algumas estimativas relatam quase 500 mil casos de câncer com cerca de 100 mil casos de câncer com óbitos (PEOPLEANDPLANET.NET, 2007).

Assim, o controle da poluição atmosférica é necessário para evitar uma catástrofe num futuro próximo ou distante, que pode inclusive ameaçar a permanência da humanidade no controle do planeta. Para agirmos adequadamente contra os efeitos nocivos da poluição atmosférica devemos:

- Medir e conhecer as concentrações dos poluentes no ar;
- Definir as fontes de poluentes;
- Definir a qualidade do ar;
- Analisar os valores limites;
- Observar a evolução da qualidade do ar;
- Planejar ações que promovam uma melhora na qualidade do ar.

Ao longo dos tempos, os cientistas que se preocupam com os aspectos físicos da atmosfera terrestre forneceram um vasto instrumental de teorias e equações físico-matemáticas que descrevem com relativa segurança o comportamento da atmosfera.

De posse dessas teorias e equações, podemos simular o caminho percorrido pela partícula em suspensão de um contaminante na atmosfera, desde sua emissão na fonte até sua absorção ou difusão no meio. A este passo dá-se o nome de estudo do problema direto: modelos matemáticos que calculam a evolução da concentração dos poluentes na atmosfera. Existem várias abordagens para descrever o transporte de um poluente na atmosfera: modelos gaussianos, modelo euleriano e modelo lagrangiano. Um modelo lagrangiano será descrito com maiores detalhes no Capítulo 2.

No contexto de poluição atmosférica, uma questão é recorrente: dado um sistema de monitoramento de qualidade do ar (sensores que coletam/analisa amostras de ar), a partir destes dados será possível conhecer a origem destes poluentes?

A situação acima descreve um importante problema inverso em poluição atmosférica. Problemas inversos são aplicáveis em diversas áreas do conhecimento (CAMPOS VELHO et al., 2005). Neste caso, o problema direto consiste em calcular o campo de concentração do(s) poluente(s) através de um modelo matemático a partir de um instante inicial, conhecendo-se a intensidade e localização das fontes de poluição e as características do fluxo atmosférico (campo de vento, altura da camada limite planetária, tipo de escoamento turbulento, entre outras). O problema inverso em questão trataria de estimar a origem da(s) fonte(s) de poluição (localização e intensidade), a partir de um conjunto de dados de observação da concentração do(s) poluente(s) medido(s) em um número finito de estações.

Nesta dissertação utilizam-se técnicas de problemas inversos para resolver um problema relativo à estimação de fontes de poluição atmosférica.

Problemas inversos envolvem a determinação de causas desconhecidas a partir de efeitos observados. Todavia, PI's são problemas matematicamente mal postos, ou seja, não é possível assegurar existência, unicidade e dependência contínua dos dados de entrada (mal-condicionamento). No Capítulo 3 técnicas para resolver PI's serão apresentadas, mas basicamente, o PI é formulado como um problema de otimização com restrições (CAMPOS VELHO, 2003; RAMOS, 2006, SILVA NETO, 2005).

Devido ao mal-condicionamento dos PI's, é necessário incorporar uma informação adicional (conhecimento *a priori*), que geralmente é pensada a partir da realidade física. Em geral, tal condição é uma restrição que iremos impor ao conjunto de soluções candidatas.

Um dos primeiros trabalhos em âmbito nacional a tratar deste tema é a tese de doutorado de Débora Regina Roberti (ROBERTI, 2005), que se vale prioritariamente de um método determinístico (quase-Newton) para proceder à otimização do funcional.

Aqui, o PI de estimação de fontes de poluição atmosférica também é formulado como um problema de otimização. Contudo, esta dissertação apresenta a utilização de uma metodologia estocástica, bioinspirada (BARONE, 2003), para efetuar a minimização da função objetivo. Inicialmente pensou-se na aplicação de duas técnicas estocásticas: otimização por enxame de partículas (*Particle Swarm Optimization* – PSO) e otimização por colônia de formigas (*Ant Colony Optimization* – ACO). A primeira se vale do aspecto social existente em bando de pássaros ou cardumes de peixes para criar um algoritmo eficiente e de grande robustez para problemas contínuos. O segundo, baseado no comportamento colaborativo de formigas para a construção de rotas que foi primeiramente aplicado para problemas discretos (BONABEAU; DORIGO; THERAULAZ, 1999; DORIGO; STÜTZLE, 2004; DORIGO; BLUM, 2005).

De fato, ambas as implementações foram efetuadas. Contudo, não foram obtidas boas inversões com o ACO e decidiu-se não detalhar o algoritmo. Somente um teste realizado é mostrado com poucos comentários na seção 5.5. O Capítulo 4 é reservado para a descrição completa do PSO e melhorias propostas. O PSO apresentou bons resultados, superando com relativa margem, os resultados do método determinístico. Estes resultados são apresentados no Capítulo 5, que trata dos resultados numéricos.

O Capítulo 6 traz as conclusões, considerações finais e propostas de trabalhos futuros.

## CAPÍTULO 2

### DISPERSÃO DE POLUENTES NA ATMOSFERA

O problema direto em física da atmosfera que foi abordado levou em consideração a adoção de um modelo de transporte e difusão de um contaminante na atmosfera. Este transporte pode ser representado tanto no modelo euleriano como no lagrangiano. Assim, temos que, dadas as causas, que podem ser descritas como sendo a posição, a intensidade das fontes e/ou sumidouros de poluentes, as propriedades do escoamento e do domínio físico, encontramos os efeitos, ou seja, o campo de concentração do poluente em uma dada área de dispersão (FIGURA 2.1).

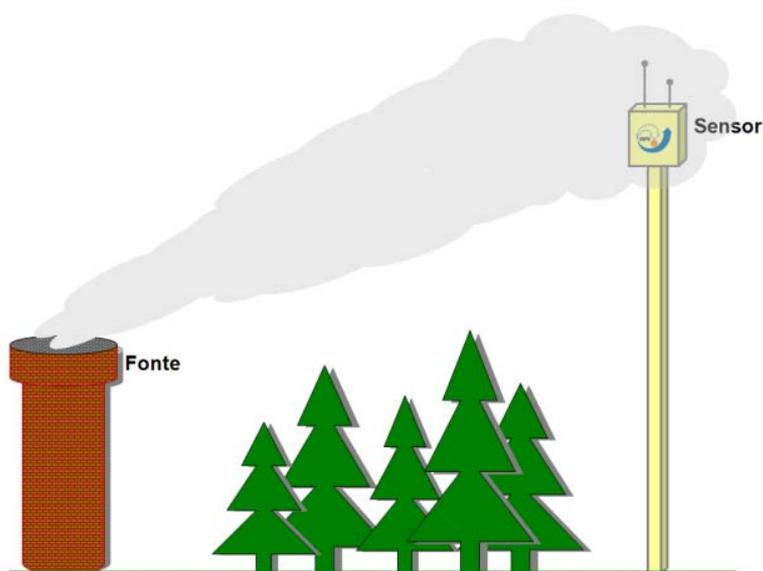


FIGURA 2.1 – Esquema de um modelo direto em física da atmosfera.

Estas abordagens, lagrangiana e/ou euleriana são atualmente utilizadas para modelar o transporte turbulento em fluidos. Turbulência é um regime dinâmico extremamente complexo (CASTELLI; FERRERO; ANFOSSI, 2002; DEGRAZIA, 2006; FLIERL; LEGG; FERRARI, 2006). O escoamento de um fluido pode ser matematicamente descrito por equações de conservação de *momentum* (Navier-Stokes), massa

(continuidade), calor (primeira lei da termodinâmica) e conservação de uma quantidade escalar genérica, além da equação de estado (lei do gás ideal).

Na aproximação lagrangiana a posição espacial  $(x,y,z)$  de uma partícula em determinado período de tempo  $t$  é determinada levando em consideração sua posição relativa em  $(x_0,y_0,z_0)$  no tempo inicial  $t_0$ . A aproximação euleriana considera o comportamento das variáveis turbulentas com relação a um sistema de coordenadas fixas, sendo possível a sua resolução numérica através do modelo direto.

Na descrição euleriana, o transporte de um contaminante na atmosfera pode ser modelado através do princípio da conservação de massa:

$$\frac{\partial C(\vec{x},t)}{\partial t} + u_i \frac{\partial C(\vec{x},t)}{\partial x_i} = v_c \frac{\partial^2 C(\vec{x},t)}{\partial x_i^2} + S \quad (2.1)$$

onde  $C(\vec{x},t)$  representa a concentração do contaminante na posição  $\vec{x}$  em dado momento  $t$ ;  $u_i$  é a velocidade do vento, que pode ser decomposta em três eixos  $(u_1, u_2, u_3)$ ; e  $v_c$  representa a difusividade molecular do contaminante;  $S$  representa o termo de fonte. O campo de concentração sofre o arraste do vento (com componentes  $u_i$ ). Este modelo não será usado nesta dissertação.

## 2.1 Problema direto lagrangiano

A descrição do modelo lagrangiano segue o texto da tese de doutorado de Roberti (2005).

Num modelo lagrangiano, a abordagem estatística exige a necessidade de se determinar as Funções Densidade de Probabilidade (FDP) relativas às distribuições espaciais das parcelas de fluido que compõem o escoamento em um ambiente turbulento. Logo, a evolução espaço-temporal da concentração média de um dado contaminante em uma dada parcela de fluido é dada pela equação abaixo

$$C(\vec{x}, t) = \int_{-\infty}^t \int S(\vec{x}_0, t_0) P(\vec{x}, t | \vec{x}_0, t_0) d\vec{x}_0 dt_0 \quad (2.2)$$

com  $P(\vec{x}, t | \vec{x}_0, t_0)$  sendo a FDP da parcela de fluido que está na posição  $\vec{x}_0$ , no instante  $t_0$  passar a ocupar a posição  $\vec{x}$  no tempo  $t$ , e  $S(\vec{x}_0, t_0)$  representa a função que descreve a distribuição espaço-temporal da fonte em termos da massa do poluente, por unidade de volume, entre as posições  $\vec{x}_0$  e  $\vec{x}$  nos instantes  $t_0$  e  $t$ , respectivamente.

O principal termo na Eq. 2.2 é a FDP, representada por  $P(\vec{x}, t | \vec{x}_0, t_0)$ . O cálculo deste parâmetro pode ser feito através da determinação da trajetória de um conjunto de partículas contidas no escoamento do fluido. Este conjunto de partículas deve ser suficientemente grande para garantir a determinação de uma trajetória relativamente precisa.

Uma boa maneira de estimar essas trajetórias é valer-se de um modelo lagrangiano de partículas baseado na equação de Langevin, onde o movimento das partículas num dado fluido de escoamento turbulento pode ser descrito de forma análoga ao movimento browniano. A adoção da teoria relativa ao movimento browniano permite tratar a aceleração sofrida pela partícula como sendo a soma das acelerações determinísticas e aleatórias (ROBERTI, 2005).

Para estabelecermos as relações entre a fonte de emissão de um dado poluente e sua concentração em dado ponto espacial, tanto o modelo lagrangiano quanto o modelo euleriano permitem o uso de dois diferentes modelos matemáticos para expressar a integração temporal, sendo estes o modelo avançado (*forward*) e o modelo regressivo (*backward*).

Na abordagem lagrangiana, o modelo de integração avançado (*forward*) tem por base o preceito de que as partículas são emitidas a partir do volume relativo à fonte e suas trajetórias são calculadas do tempo  $t_0$  até o tempo  $t$ . Em contrapartida, o modelo de integração regressiva (*backward*) faz com que as partículas sejam emitidas do volume

do sensor (o ponto final da partícula) e as respectivas trajetórias são traçadas a partir do tempo  $t$  regredindo ao ponto inicial, no tempo  $t_0$ , presumivelmente, a fonte (*source*) do poluente (FIGURA 2.2).

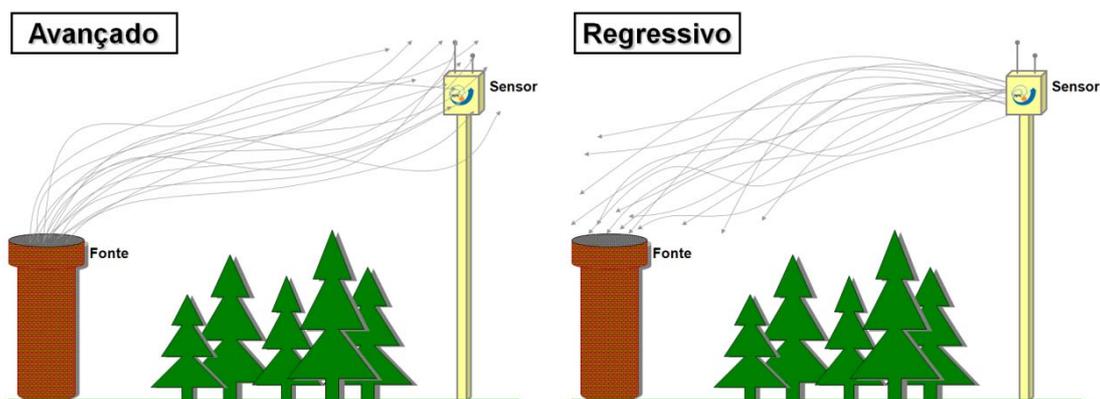


FIGURA 2.2 – Esquema de definição das trajetórias para os modelos de integração avançada (*forward*) e regressiva (*backward*).

Os fatores que norteiam a adoção de um modelo avançado ou regressivo no tempo levam em consideração principalmente o custo computacional que está envolvido no cálculo destes modelos, diretamente relacionado à quantidade de fontes e de sensores. Na literatura, o modelo lagrangiano em sua forma avançada é mais custoso computacionalmente (ROBERTI, 2005), dada a necessidade da simulação de um maior número de partículas para chegarmos a uma precisão estatística de maior acurácia.

Observemos a seguinte exemplificação da situação dada:

(...) considere uma extensa fonte de área que emite um contaminante; apenas as partículas que passarem por um volume de sensor,  $V_s$ , ( $V_s > 0$ , um volume em que possam ser, estatisticamente, encontradas as partículas), estarão contribuindo para o cálculo da concentração neste sensor e todas as outras são desprezadas. No entanto, um número bastante grande de partículas deve ser emitido pelo modelo para que o cálculo da concentração no sensor seja estatisticamente correta. Numa integração regressiva, um número muito menor de partículas pode ser emitido a partir do volume do sensor, que pode ter volume infinitesimal (ou bastante próximo do volume de um sensor real) sendo que apenas as partículas que tocarem a área da fonte contribuirão para o cálculo da concentração no sensor (ROBERTI, 2005, p. 12).

### 2.1.1 Problema direto lagrangiano avançado

O modelo de integração lagrangiano em seu modo avançado mostra que a concentração média de um contaminante na posição  $\vec{x}$  e no tempo  $t$ , com uma taxa de emissão na fonte  $S$  ( $\text{kg m}^{-3} \text{ s}^{-1}$ ), pode ser definida através de,

$$C(x, t) = \int_{-\infty}^t \int_{-\infty}^{\infty} S(\vec{x}_0, t_0) P^a(\vec{x}, t | \vec{x}_0, t_0) d\vec{x}_0 dt_0 \quad (2.3)$$

com  $P^a(\vec{x}, t | \vec{x}_0, t_0)$  sendo a densidade de probabilidade de transição avançada, definida para que  $P^a(\vec{x}, t | \vec{x}_0, t_0) d\vec{x}_0$  seja a probabilidade de que um elemento de fluido inicialmente em  $(\vec{x}_0, t_0)$  seja encontrado no tempo  $t$  e volume  $d\vec{x}$  centrado em  $\vec{x}$ . O cálculo de  $P^a(\vec{x}, t | \vec{x}_0, t_0)$  é dado em função do modelo lagrangiano avançado. Ainda, considerando que a taxa de emissão,  $S$ , seja uniforme sobre o volume da fonte, temos que,

$$S(\vec{x}_0, t_0) = SW(\vec{x}_0) \quad (2.4)$$

onde  $W(\vec{x}_0)$  é uma função de localização adimensional (0 ou 1), ou função característica, que quando fora da fonte é definida por 0 (zero). Quando temos turbulência e uma fonte estacionária, a concentração média do poluente é independente do fator tempo e a  $P^a$  depende somente de  $t - t_0$ , logo,

$$C(\vec{x}, t) = S \int_{t=0}^{\infty} \int_{\vec{x}_0=-\infty}^{\infty} W(\vec{x}_0) P^a(\vec{x}, t | \vec{x}_0, 0) d\vec{x}_0 dt \quad (2.5)$$

Assim, para o modelo de integração avançado no tempo, o cálculo prático da concentração média do contaminante é feito sobre um sensor de volume  $V_s$ ,

$$C^v(\vec{x}) = \frac{S}{V_S} \int_{V_S} \int_{t=0}^{\infty} \int_{\vec{x}_0=-\infty}^{\infty} W(\vec{x}_0) P^a(\vec{x}, t | \vec{x}_0, 0) d\vec{x}_0 dt d\vec{x} \quad (2.6)$$

A determinação de  $C^v(\vec{x})$  é dada pelo cálculo do “tempo de residência” (ROBERTI, 2005) médio das partículas no volume do sensor  $V_S$ ,

$$\overline{T^f}(\vec{x}, V_S | \vec{x}_0) = \int_{V_S} \int_{t=0}^{\infty} P^a(\vec{x}', t | \vec{x}_0, 0) dt d\vec{x}' \quad (2.7)$$

logo,

$$C^v(\vec{x}) = \frac{S}{V_S} \int_{\vec{x}_0=-\infty}^{\infty} W(\vec{x}_0) \overline{T^a}(\vec{x}, V_S | \vec{x}_0) d\vec{x}_0 \quad (2.8)$$

e ainda considerando que a fonte de emissão do poluente possui um volume de  $V_f$ , a Eq. 2.8 se transforma em:

$$C^v(\vec{x}) = \frac{S}{V_S} \int_{V_f} \overline{T^a}(\vec{x}, V_S | \vec{x}_0) d\vec{x}_0 \quad (2.9)$$

Assim, para a implementação,  $C^v(\vec{x})$  é calculado através de uma média dos tempos de residência de partículas individuais no volume do sensor, expresso por:

$$C^v(\vec{x}) = S \frac{V_f}{V_S} \frac{1}{N_{EVF}} \sum_{i=1}^{N_{PVS}} \overline{T_i^a}(\vec{x}, V_S | V_f) \quad (2.10)$$

com  $N_{EVF}$  exprimindo o número de partículas emitidas a cada passo no tempo a partir do volume da fonte e  $N_{PVS}$  sendo o número de partículas no volume do sensor.

### 2.1.2 Problema direto lagrangiano regressivo

Para o modelo de integração regressiva, as partículas agora são emitidas em  $(\vec{x}, t)$  e sua situação final é analisada em  $(\vec{x}_0, t_0)$ , nos levando a uma estimativa da densidade de probabilidade condicional ao estado regressivo no tempo.

No intuito de facilitar a implementação, podemos adotar uma densidade de probabilidade condicional regressiva,  $P^r(\vec{x}_0, t_0 | \vec{x}, t)$ , como sendo a mesma obtida para a integração avançada:

$$P^r(\vec{x}_0, t_0 | \vec{x}, t) = P^a(\vec{x}, t | \vec{x}_0, t_0) \quad (2.11)$$

isto desde que possamos assumir condições de fluxo incompressíveis e uma atmosfera com características estacionárias (ROBERTI, 2005).

No modelo de tempo avançado, o  $P^a$  é dado pela média sobre o *ensemble* do tempo de residência das partículas no volume de um dado sensor,  $V_s$ , e de partículas emitidas pelo volume de uma dada fonte,  $V_f$ , já no modelo de tempo regressivo, o correspondente de tempo de residência da partícula pode ser dado pelo tempo gasto da partícula no volume da fonte,  $V_f$ , quando esta está centrada em  $\vec{x}_0$ , e por partículas emitidas pelo volume do sensor,  $V_s$ , em seu modo regressivo.

Na execução do modelo de tempo regressivo, a Eq. 2.7, que trata do tempo de residência, agora pode ser definida como,

$$\overline{T^r}(\vec{x}_0, V_f | \vec{x}) = \int_{V_f} \int_{t'=0}^{\infty} P^r(\vec{x}', t' | \vec{x}, 0) dt' d\vec{x}' \quad (2.12)$$

E quando o tempo de residência regressiva é substituído na Eq. 2.8 tem-se:

$$C^v(\vec{x}) = \frac{S}{V_s} \int_{V_s} \overline{T^r}(\vec{x}_0, V_s | \vec{x}) d\vec{x} \quad (2.13)$$

sendo que para a implementação temos,

$$C^v(\vec{x}) = S \frac{1}{N_{EVS}} \sum_{i=1}^{N_{PVF}} \overline{T_i^r}(\vec{x}_0, V_f | \vec{x}) \quad (2.14)$$

com  $N_{EVS}$  sendo o número de partículas emitidas a partir do volume do sensor e  $N_{PVF}$  sendo o número de partículas que atingiram o volume da fonte.

### 2.1.3 O Modelo LAMBDA

O modelo LAMBDA (acrônimo para *L*Agrangean *M*odel for *B*uoyant *D*ispersion in *A*tmosphere) foi adotado para estudar os processos de transporte e difusão de poluentes, em específico para um terreno plano. O modelo foi desenvolvido e apresentado pelo grupo de física da atmosfera do *Istituto di Scienze dell'Atmosfera e del Clima* (ISAC) seção de Turim (Itália), órgão do *Consiglio Nazionale delle Ricerche* (CNR), liderado pelo Dr. Domenico Anfossi. O código LAMBDA está baseado na forma tridimensional da equação de Langevin para um campo aleatório de velocidade, seguindo a derivação de Thomson (1987).

Em sua versão original, somente o modelo de integração avançada no tempo havia sido implementada. O modelo de integração regressivo foi implementado na tese de Roberti (2005), que em conjunto com a sua capacidade de

(...) estudar a dispersão de poluentes inertes em condições complexas (caracterizadas pela não-homogeneidade das variáveis que determinam a difusão), emitidos de qualquer tipo de fonte: pontual (chaminé), área (cidade) e linha (auto-estrada) (ROBERTI, 2005, p. 23),

o torna uma forte ferramenta apta a capacitar o estudo do modelo direto de maneira simples e ao mesmo tempo atendendo a várias características da realidade física que são necessárias para um bom ferramental científico.

O modelo de partículas LAMBDA se vale da simulação de certa quantidade de partículas computacionais, partículas fictícias, que imitam o comportamento de uma partícula do contaminante no mundo real, com o objetivo de simular os movimentos atmosféricos como os sofridos por elementos de fluido ou contaminantes liberados na atmosfera.

Assim, se valendo da Eq. 2.10 para a implementação do modelo de tempo avançado e da Eq. 2.14 para o modelo de tempo regressivo, a concentração do contaminante é calculada em um dado sensor.

Para a integração avançada (*forward*), temos que as partículas são emitidas por uma fonte de posição e tempo  $(\vec{x}_0, t_0)$ , com a concentração sendo calculada em um sensor também de posição e tempo  $(\vec{x}, t)$ . A estratégia adotada consiste na divisão do espaço de domínio em subdomínios centrados em  $\vec{x}$  representando o volume de um dado sensor.

O cálculo da concentração do contaminante em dado volume de sensor é obtida através da análise do tempo de residência dessa partícula na posição  $\vec{x}$ , que é levada em consideração, caso essa partícula permaneça neste subdomínio por um dado intervalo  $\Delta t$ , usualmente com  $\Delta t = 1s$ , assim temos, partindo da Eq. 2.10:

$$C^v(\vec{x}) = C(\vec{x}) = S \frac{V_f}{V_S} \frac{1}{N_{PEF}} \sum_{i=1}^{N_{PVS}} \Delta t = S \frac{V_f}{V_S} \frac{\Delta t}{N_{PEF}} N_{PVS} \quad (2.15)$$

com  $N_{PEF}$  sendo o número de partículas emitidas pela fonte em cada passo de tempo  $\Delta t$ ,  $N_{PVS}$  sendo o número de partículas no sensor,  $V_S$  o volume do sensor e  $V_f$  o volume da fonte.

Quando adotamos um modelo com mais de uma fonte e/ou mais de um sensor, podemos representar esta adição de valores com  $N_s$  para o número de sensores, e  $N_f$  para o número de fontes, com a concentração em cada sensor sendo calculada por:

$$C_j = \sum_{i=1}^{N_f} S_i \frac{V_{f,i}}{V_{s,j}} \frac{\Delta t}{N_{PEF,i}} N_{PVS,i,j} \quad (2.16)$$

com  $C_j$  sendo a concentração do  $j$ -ésimo sensor,  $S_i$  a intensidade da  $i$ -ésima fonte,  $V_{f,i}$  o volume da  $i$ -ésima fonte,  $V_{s,j}$  o volume do  $j$ -ésimo sensor,  $N_{PEF,i}$  o número de partículas emitidas da  $i$ -ésima fonte e  $N_{PVS,i,j}$  o número de partículas emitidas da  $i$ -ésima fonte que se encontram no  $j$ -ésimo sensor.

A definição da intensidade de emissão de uma dada  $i$ -ésima fonte, é auferida em  $[\text{kg s}^{-1}]$ , sendo ainda definida por:

$$Q_i = S_i V_{f,i} \quad (2.17)$$

logo, a Eq. 2.16 é redefinida, sendo agora expressa por:

$$C_j = \sum_{i=1}^{N_f} Q_i \frac{1}{V_{s,j}} \frac{\Delta t}{N_{PEF,i}} N_{PVS,i,j} \quad (2.18)$$

Já na integração de tempo regressiva (*backward*), as partículas são emitidas pelo sensor de posição  $\vec{x}$  no tempo  $t$  e somente aquelas, que no tempo  $t_0$ , se encontrarem na fonte de posição  $\vec{x}_0$  serão levadas em conta no cálculo. Assim, temos uma relação das posições das partículas e o tempo de residência é levado em consideração para sua posição com o volume da fonte relativo a  $V_f$ :

$$C^v(\vec{x}) = C(\vec{x}) = S \frac{1}{N_{PES}} \sum_{i=1}^{N_{PVF}} \Delta t = S \frac{\Delta t}{N_{PES}} N_{PVF} \quad (2.19)$$

com  $N_{PES}$  sendo o número de partículas emitidas pelo sensor e  $N_{PVF}$  o número de partículas que atingiram a fonte.

Quando de vários sensores e/ou fontes, a nomenclatura pode seguir o padrão adotado para o modelo avançado, com  $N_s$  para o número de sensores e  $N_f$  para o número de fontes, o que nos leva a:

$$C_j = \sum_{i=1}^{N_f} S_i \frac{\Delta t}{N_{PES,j}} N_{PVF,i,j} \quad (2.20)$$

com  $C_j$  sendo a concentração do  $j$ -ésimo sensor,  $S_i$  a intensidade da  $i$ -ésima fonte,  $N_{PES,j}$  o número de partículas que deixaram o  $j$ -ésimo sensor e  $N_{PVF,i,j}$  o número de partículas emitidas pelo  $j$ -ésimo sensor e que atingiram a  $i$ -ésima fonte no tempo  $\vec{x}_0$ .

Assim, substituindo a intensidade de emissão da Eq. 2.17, a Eq. 2.20 é reescrita na forma:

$$C_j = \sum_{i=1}^{N_f} \frac{Q_i}{V_{f,i}} \frac{\Delta t}{N_{PES,j}} N_{PVF,i,j} \quad (2.21)$$

## 2.2 Modelo fonte-receptor

Uma melhor resolução computacional da Eq. 2.18 e da Eq. 2.21 requer a sua minimização, ou seja, o uso de um modelo fonte-receptor, que reduz o esforço computacional requerido através da resolução iterativa do modelo direto.

Para  $N_f$  fontes de emissão de poluentes de intensidade desconhecida, a concentração de poluentes medido em  $N_s$  sensores relaciona-se da seguinte forma (ROBERTI, 2005):

$$\vec{C} = M \vec{S} \quad (2.22)$$

onde  $\vec{C}$  é um vetor cujos elementos representam as concentrações médias nos  $N_s$  sensores, assim,  $\vec{C} = (C_1, C_2, \dots, C_{N_s})$ , e os elementos do vetor  $\vec{S}$  representam as intensidades das  $N_f$  fontes, com  $\vec{S} = (S_1, S_2, \dots, S_{N_f})$ .

A matriz  $M$  é uma matriz de transição de estados conhecida como matriz fonte-receptor e seu cálculo é função do modelo de dispersão atmosférico, em nosso caso específico, o modelo LAMBDA.

A Eq. 2.22 também pode ser escrita como (ROBERTI, 2005):

$$C_j = \sum_{i=1}^{N_f} M_{ji} S_i \quad (2.23)$$

onde  $S_i$  é a intensidade da  $i$ -ésima fonte,  $C_j$  é a concentração do  $j$ -ésimo sensor. O cálculo de  $M_{ij}$  para as integrações avançada (*forward*) e regressiva (*backward*) no tempo é feito utilizando-se das trajetórias calculadas pelo modelo da forma que segue:

- Avançada: Para a matriz  $M_{ij}$ , quanto comparando a Eq. 2.23 com a Eq. 2.16, temos,

$$M_{ij} = \frac{V_{f,i}}{V_{s,j}} \frac{\Delta t}{N_{PEF,i}} N_{PVS,i,j} \quad (2.24)$$

- Regressiva: Para a matriz  $M_{ij}$ , quando comparando a Eq. 2.23 com a Eq. 2.20 temos,

$$M_{ij} = \frac{\Delta t}{N_{PES,j}} N_{PVF,i,j} \quad (2.25)$$

Sendo que a abordagem regressiva foi a utilizada neste trabalho.

## CAPÍTULO 3

### PROBLEMA INVERSO

#### 3.1 Definição de problemas inversos

Problemas diretos como o visto no capítulo anterior são problemas recorrentes em nosso dia a dia. O estudo de problemas diretos leva à compreensão de certos fenômenos físicos que permeiam a interação de vários elementos da natureza.

Porém, com o crescimento das ciências, principalmente com o auxílio de novos meios eletrônicos para maximizar e permitir o estudo de diversas áreas com maior precisão, tal como o advento dos computadores, microscópios eletrônicos e telescópios de grande potência, o simples conhecimento de fatos oriundos de problemas diretos se tornou, em alguns pontos, insuficiente para a total compreensão do fenômeno em estudo.

Quando tratamos os problemas diretos, partimos de uma situação causadora e chegamos, através da aplicação da metodologia, cálculo, ou equação, aos efeitos que são gerados por tal fenômeno.

Já para uma boa definição de problemas inversos, nós devemos ter em mente que “resolver um problema inverso é determinar causas desconhecidas a partir de efeitos desejados ou observados” (ENGL; HANKE; NEUBAUER, 1996). Esta é uma das definições mais recorrentes em uso, que nos leva a ver que estudar problemas inversos consiste-se de usar os resultados de observações para inferir os valores dos parâmetros que caracterizam o sistema que está sendo investigado.

Uma outra definição, atribuída a Alifanov, expressa que “a solução de um problema inverso consiste na determinação de causas desconhecidas baseada na observação dos seus efeitos. Em contraste com o correspondente problema direto, cuja solução envolve encontrar efeitos baseando-se numa completa descrição de suas causas” (MUNIZ, 1999).

Ou seja, se admitirmos que o nosso modelo matemático possa ser expresso por  $A(u) = f$ , então o modelo inverso pode ser representado por  $A^{-1}(f) = u$ . Assim, chegamos a um esquema que é amplamente difundido, e que representa a relação entre o problema direto e a sua contraparte em estudo, o problema inverso. Este esquema é de fácil abstração e é representado abaixo (FIGURA 3.1):

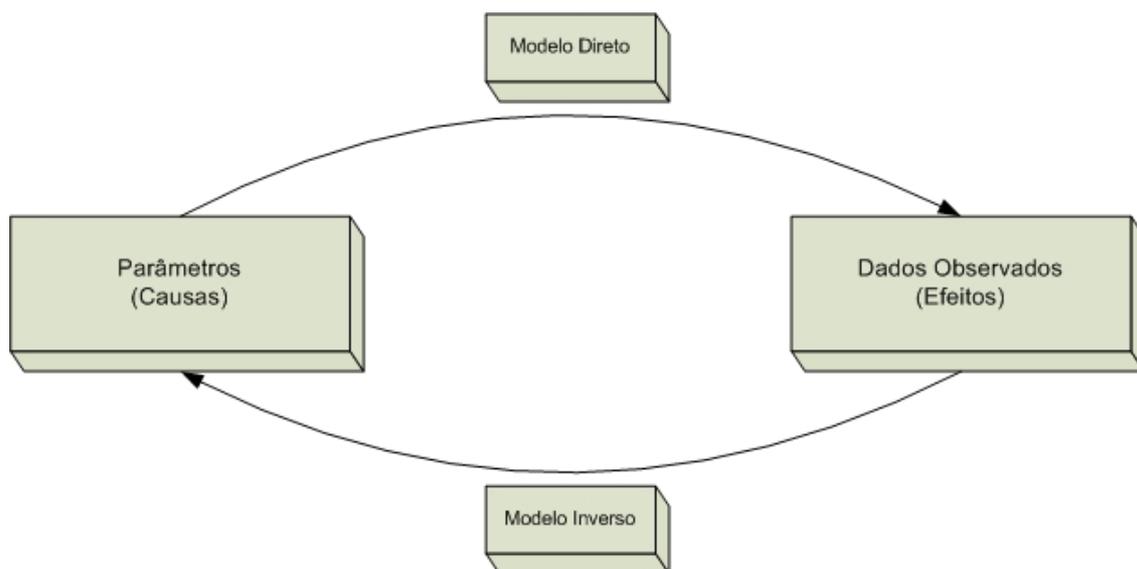


FIGURA 3.1 – Problema direto e problema inverso.

Quando analisamos a estrutura matemática de um problema inverso, devemos ter em mente que este está caracterizado como sendo pertencente à classe de problemas mal-postos. Na definição do matemático francês Jacques Hadamard, um problema mal-posto é aquele que viola uma ou mais das seguintes condições (CAMPOS VELHO, 2003), admitindo-se  $(x | x \in X)$  e  $(y | y \in Y)$  com  $K : X \rightarrow Y$  um operador (linear ou não-linear) e a equação  $Kx = y$ :

- Existência: Para qualquer  $y \in Y$  existe (pelo menos um)  $x \in X$  tal que  $Kx = y$ ;
- Unicidade: Para qualquer  $y \in Y$  existe no máximo um  $x \in X$  tal que  $Kx = y$ , isto é, se  $Kx_1 = Kx_2$ ,  $x_j \in X$ , então  $x_1 = x_2$ ;

- Estabilidade: A solução  $x$  depende continuamente de  $y$ , isto é, para qualquer seqüência  $\{x_n\} \subset X$  tal que  $Kx_n \rightarrow Kx$  ( $n \rightarrow \infty$ ), então  $x_n \rightarrow x$  ( $n \rightarrow \infty$ ), ou seja, deve haver dependência contínua (suave) com os dados de entrada.

Quando existe a não satisfação de qualquer uma das propriedades acima, o problema é dito mal-posto. No caso particular da violação da 3ª condição, a de estabilidade, a denominação “mal-condicionada” ou “problema mal-condicionado” é adotada (MUNIZ, 1999; DE VITO et al., 2005).

### 3.2 Problema inverso com regularização

Pelo fato de estarmos trabalhando com um PI relacionado à física da atmosfera, devemos ter em mente que o principal objetivo deste é determinar a concentração de um determinado poluente, que pode ser obtido matematicamente através de um modelo de dispersão de poluentes na atmosfera, que pode ser dado pelo modelo matemático abaixo:

$$C(\vec{x}, t, \vec{W}) = C^{Mod}(\vec{x}, t, \vec{W}) \quad (3.1)$$

com  $\vec{W}$  correspondendo ao(s) parâmetro(s) atmosférico(s) desconhecido(s) ou um termo de fonte ou sumidouro de poluentes. É suposto que estejam disponíveis dados de concentração do poluente medidos por algum sistema  $C^{Exp}(\vec{x}, t)$ . O problema inverso pode ser formulado com o objetivo de minimizar o funcional dos resíduos quadráticos,

$$F(\vec{W}) = \|\vec{R}\|_2 = \vec{R}^t \vec{R} \quad (3.2)$$

onde  $R$  é expresso por

$$R_i(\vec{W}) = C_i(\vec{x}, t, \vec{W}) - C_i^{Exp}(\vec{x}, t) \quad (3.3)$$

e  $\vec{W} = (W_1, W_2, \dots, W_N)^t \in \mathfrak{R}^N$  se torna o vetor de incógnitas que o problema busca.

Quando combinamos a Eq. 3.2 com a Eq. 3.3, podemos então escrever o funcional, ou função objetivo, de uma forma mais explícita, com  $N_s$  representando o número de sensores:

$$F(\bar{W}) = \sum_{i=1}^{N_s} \left[ C_i(\vec{x}, t, \bar{W}) - C_i^{Exp}(\vec{x}, t) \right]^2 \quad (3.4)$$

Quando nos deparamos com o funcional acima, temos que levar em consideração a aplicação de um operador de regularização, com o objetivo de contornar o problema causado pelo mal-condicionamento deste problema inverso (TIKHONOV; ARSENIN, 1977; CAMPOS VELHO, 2003; RAMOS, 2006; SILVA NETO, 2005). Assim, a inserção de informação *a priori* ao funcional é obtida com o uso de um multiplicador de Lagrange:

$$F(\alpha, \bar{W}) = \sum_{i=1}^{N_s} \left[ C_i(\vec{x}, t, \bar{W}) - C_i^{Exp}(\vec{x}, t) \right]^2 + \alpha \Omega(\bar{W}) \quad (3.5)$$

com  $\Omega(\bar{W})$  sendo o operador de regularização e  $\alpha \in \mathfrak{R}^+$  o multiplicador de Lagrange ou parâmetro de regularização (TIKHONOV; ARSENIN, 1977).

A definição do valor relacionado ao parâmetro de regularização,  $\alpha$ , é um dos maiores desafios quando trabalhamos com problemas inversos com regularização. Devemos sempre ter em mente duas condições que surgem nos extremos da possibilidade de seleção desta constante:

- $\alpha \rightarrow 0$ : A regularização pouco afeta o resultado obtido, quando  $\alpha = 0$  não há inclusão da regularização no resultado, o que pode levar a amplificar o ruído existente no dado experimental (informação não física);
- $\alpha \rightarrow \infty$ : Neste caso, quando há muita inclusão da regularização, o resultado acaba perdendo informação da realidade física, nos levando a um resultado restrito, unicamente centrado em uma solução regular.

O método da curva-L foi apresentado por Hansen em 1992, e é uma das metodologias citadas na literatura empregada para estimar o parâmetro de regularização, onde o parâmetro ótimo é identificado como o ponto de máxima curvatura no gráfico da diferença quadrática (fidelidade do resultado) *versus* regularização (suavidade do resultado).

A definição do operador de regularização também varia fortemente com base no problema que está sendo atacado. Duas são as principais técnicas que foram abordadas neste trabalho, e na tese de Roberti (2005).

A primeira é o operador de regularização de Tikhonov de ordem- $n$ , ou Tikhonov- $n$ , introduzido por Tikhonov e Arsenin (1977) e sendo um dos mais utilizados em diversas classes de problemas inversos. Sua expressão é dada por:

$$\Omega(\bar{W}) = \sum_{n=0}^p \left\| \bar{W}^{(n)} \right\|_2^2 \quad (3.6)$$

com  $\bar{W}^{(n)}$  sendo a expressão da  $n$ -ésima derivada, ou diferença, da função  $\bar{W}$ .

O segundo é o operador de regularização baseado no princípio de máxima entropia. O operador de regularização entrópica é descrito como:

$$\Omega(\bar{W}) = \sum_{n=0}^p S^{(n)}(\bar{W}) \quad (3.7)$$

$S^{(n)}(\bar{W})$  sendo a entropia de  $n$ -ésima ordem de uma função (ou vetor, no caso de um problema discreto), expressa por:

$$S^{(n)}(\bar{W}) = - \int s(\vec{r}) \log [s(\vec{r})] d\vec{r} \quad (3.8)$$

e  $s(\vec{r})$ ,

$$s(\vec{r}) = \frac{\overline{W}^{(n)}(\vec{r})}{\int \overline{W}^{(n)}(\vec{r}) d\vec{r}} \quad (3.9)$$

$\overline{W}^{(n)}$  representa a  $n$ -ésima derivada, ou sua diferença para o caso discreto, da função  $\overline{W}$ . Pela teoria,  $S^{(n)}$  apresenta o valor máximo global quando  $s(\vec{r}) = x$ , com  $x \in \mathfrak{R}$  (uma distribuição uniforme), já seu menor valor é dado quando a distribuição de probabilidades de  $s(\vec{r})$  é um delta de Dirac ( $\delta(\vec{r})$ ) (CAMPOS VELHO, 2003, ROBERTI, 2005).

### 3.3 Problema inverso como um problema de otimização

“Um modelo é um veículo para uma visão bem estruturada da realidade. Um modelo pode também ser visto, com os devidos cuidados, como uma representação substitutiva da realidade” (GOLDBARG; LUNA, 2005, p. 1).

Quando admitimos que o problema inverso que está sendo estudado é um modelo representativo da realidade, devemos também ter o conhecimento de que infelizmente não é possível que o modelo seja uma representação fiel a toda complexidade física da realidade. É necessária uma simplificação para que se possa representar este modelo do mundo real em um ambiente virtual e limitado, tal como o encontrado em computadores (PIDD, 1999).

Quando passamos a focar a modelagem, que agora é diferente do conceito adotado para a palavra “modelo”, tentamos efetuar uma simulação da realidade, estruturalmente muito mais complexa que a representação mais simples do modelo. Sendo o processo de modelagem compreendido como uma aproximação da realidade, alguns princípios são definidos por Pidd (1999) para sua simplificação, com o objetivo de tornar o modelo de mais fácil manutenção, adaptação ou eventual expansão.

Goldbarg e Luna (2005) apresentam o fluxograma a seguir (FIGURA 3.2) com o objetivo de resumir o processo de modelagem a uma ótica operacional de forma bem geral, levando em consideração o ciclo de vida de um modelo.

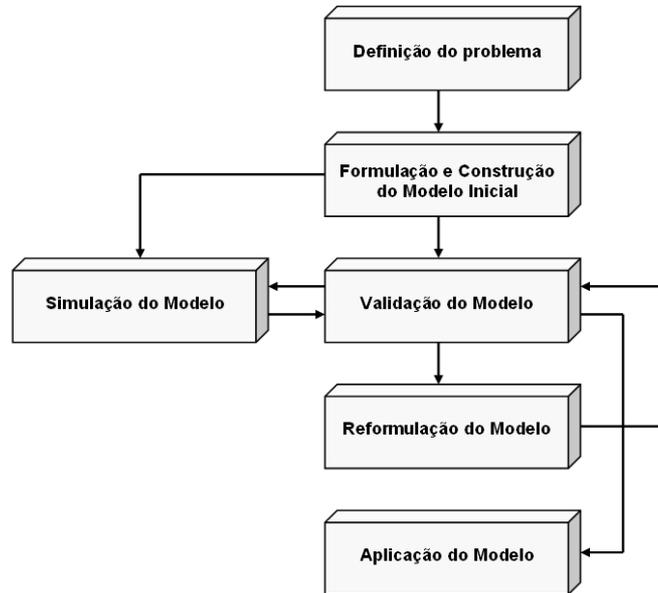


FIGURA 3.2 – Processo de construção de modelos.  
Fonte: Goldbarg, Luna (2005).

Após a fase de definição e validação da função objetivo, passamos à fase que corresponde a sua otimização. Novamente retornamos ao problema inverso representado como um problema de otimização com restrições. Aqui, buscamos minimizar um dado funcional (ou maximizar, conforme o problema), ou seja estamos tentando localizar o ponto mínimo da curva que representa o funcional (FIGURA 3.3).

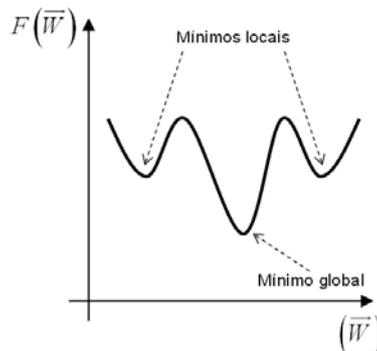


FIGURA 3.3 – Concepção da estrutura de uma função com mínimos locais e mínimo global.  
Fonte: Adaptado de Roberti (2005).

Roberti (2005) utiliza uma técnica de problema inverso para a estimação de emissão de fontes-área, onde o PI é formulado como um problema de otimização, para qual a função objetivo é expressa pela norma-2 da diferença entre os dados de concentração medidos, descrito por  $C_i^{Exp}$ , e os dados obtidos através de um modelo matemático,

$C_i^{Mod} = \sum_{j=1}^m M_{ij} Q_j$ , associados a um operador de regularização,  $\Omega(Q)$ . A equação abaixo

é semelhante à Eq. 3.5, que define o problema inverso que está sendo atacado,

$$F(\alpha, Q) = \sum_{j=1}^m [C_j^{Exp} - C_j^{Mod}(Q)]^2 + \alpha \Omega(Q) \quad (3.10)$$

onde  $\alpha$  é o parâmetro de regularização e  $Q = [Q_i]^T$ ,  $i = 1, 2, \dots, m$ , sendo  $m$  o número de sensores onde a intensidade de emissão está sendo estimada.

Roberti (2005) usou o método determinístico quase-Newton e um regularizador de Máxima Entropia de 2ª ordem (CAMPOS VELHO et al., 2000; RAMOS et al., 1999) para a melhor resolução deste problema de otimização em uma situação em específico. Os resultados foram satisfatórios, validando o método proposto, e abrindo novos caminhos para o estudo de novas técnicas que podem ser aplicadas.

## CAPÍTULO 4

### OTIMIZAÇÃO POR ENXAME DE PARTÍCULAS

A otimização por enxame de partículas, ou do original *Particle Swarm Optimization* (PSO) é um método de busca heurística relativamente recente que é inspirado pelo comportamento colaborativo e de grupo de populações biológicas (BARONE, 2003) (FIGURA 4.1). Este é um método adequado para otimização de funções não-lineares contínuas.

A teoria de enxames (*swarming theory*), proposta por Kennedy e Eberhart (1995) tem inspiração no comportamento de vôo de bandos de pássaros e nado de cardumes de peixes. Computacionalmente, técnicas de *artificial life* (da computação evolutiva) são usadas para auxiliar a construção desta nova teoria no ambiente virtual (BARONE, 2003).



FIGURA 4.1 – Bando de pássaros em vôo coordenado.

Vários cientistas, incluindo zoólogos, se interessaram pelas regras que gerenciam a sincronia de um grande número de pássaros em vôo, levando em consideração as bruscas mudanças de direção, e características como dispersão e reagrupamento. Deste interesse, modelos foram gerados para uma melhor compreensão do fenômeno.

Os modelos gerados se baseiam fortemente na manipulação das distâncias inter-individuais, ou seja, em grosso modo, a sincronia do comportamento de bando pode ser

caracterizado por uma função que gerencia o esforço do pássaro em manter uma distância ótima entre seus colegas de bando (KENNEDY; EBERHART, 1995, 2001).

A função básica desta técnica é promover uma troca de informações entre os elementos do grupo simulado (as assim denominadas partículas), nos levando ao desenvolvimento de um algoritmo de otimização não-determinístico (estocástico) eficiente, robusto e de simples implementação computacional.

#### **4.1 Bases sócio-cognitivas**

A teoria sócio-cognitiva que dá o suporte ao modelo de enxame de partículas é relativamente simples. O processo de adaptação cultural, teoricamente, compreende um componente de alto-nível, visto na formação de padrões através dos indivíduos e na habilidade de resolver problemas, e um componente de baixo-nível, o comportamento dos indivíduos, que pode ser resumido em termos de três princípios, de acordo com Kennedy e Eberhart (2001):

- Avaliar;
- Comparar;
- Imitar.

A tendência de avaliar estímulos, para classificá-los como positivos ou negativos, atrativos ou repulsivos, é talvez a característica comportamental mais presente em diversos organismos vivos. Mesmo as bactérias se tornam agitadas, tumultuadas, quando o ambiente é nocivo. O aprendizado não pode ocorrer a menos que o organismo possa avaliar, possa distinguir características do ambiente que possam atrair e características que repelem, ou seja, possam diferenciar o bom do ruim. Deste ponto de vista, o aprendizado pode até mesmo ser definido como mudanças que possibilitem o organismo melhorar a avaliação média de seu ambiente.

Segundo Kennedy e Eberhart (2001), a teoria de comparação social de Festinger, apresentada em 1954, descreve algumas das maneiras com que as pessoas usam outros

indivíduos como um padrão para avaliarem a si mesmos, e como a comparação com outros pode servir como um tipo de motivação a aprender e mudar. A teoria de Festinger na sua forma original não foi determinada em uma maneira que seja facilmente testada ou contestada, e poucas das predições geradas pela teoria não foram confirmadas, mas em geral ela serviu como espinha dorsal para teorias sócio-psicológicas subseqüentes. Em quase tudo que pensamos e fazemos, nós nos julgamos através de comparação com outros: a nossa aparência, a nossa riqueza, o nosso humor, a nossa inteligência.

As escalas de QI (Quociente de Inteligência) são normalizadas para uma média da população; em outras palavras, a nossa pontuação diz como estamos quando comparados a outros pontos. Indivíduos em exames de partículas comparam a si mesmos com seus vizinhos na medida crítica e imitam somente aqueles vizinhos que são superiores a si mesmos. O padrão para o comportamento social é definido pela comparação com outros.

Através de um consenso quase que geral, a imitação deveria estar em todo o lugar na natureza; esta é de fato uma maneira muito efetiva de se aprender a fazer coisas. Apesar disso, conforme demonstração por diversos experimentos, poucos animais são capazes de imitação real; de fato, estes afirmam que somente humanos e alguns pássaros são capazes disto. Algumas variações leves do aprendizado social são encontradas entre outras espécies, mas nenhuma comparada com nossa habilidade de imitar um ao outro. Enquanto “macaco vê, macaco faz”, descreve bem o comportamento imitativo de nossos primos, a imitação humana inclui “pegar a perspectiva de outra pessoa”, não somente imitar um comportamento, mas realizar o seu propósito, executando novamente este comportamento quando necessário. Como exemplo, o uso individual de um objeto como ferramenta pode chamar a atenção de outro indivíduo para o objeto; este segundo indivíduo pode usar o mesmo objeto, mas de uma maneira diferente. A imitação de verdade é central à sociedade humana, e é central à aquisição e manutenção de certas habilidades mentais.

Os três princípios de avaliação, comparação e imitação podem ser combinados, mesmo em entidades sociais simplificadas, existentes e criadas para programas de computador, possibilitando a eles a se adaptarem a ambientes complexos e desafiadores, resolvendo problemas extremamente difíceis.

#### **4.2 Detalhamento da técnica de PSO**

O algoritmo de PSO (FIGURA 4.2) busca pelo ótimo, em geral, em um espaço de busca infinito que é frequentemente simbolizado como  $\mathfrak{R}^n$ , o espaço  $n$ -dimensional de números reais. Efetivamente, é claro, a busca ocorre no espaço computável, e como estamos usando computadores, avisos relacionados a erros de arredondamento, dentre outros, são válidos (KENNEDY; EBERHART, 2001).

O espaço multidimensional é referido por vários nomes, dependendo da situação. Suas outras denominações incluem: espaço de estados, espaço de fase e hiperespaço (KENNEDY; EBERHART, 2001, p. 310).

Tentativas de usar o PSO para resolver problemas num espaço de busca discreto foram feitas (CLERC, 2007), porém, os resultados obtidos não satisfizeram alguns testes simples, sendo que um maior estudo para a definição de parâmetros, ou ajuste de funções de velocidade e posicionamento, se torna necessário.

Na técnica original proposta por Kennedy e Eberhart (1995), o bando de pássaros é representado perante um ambiente bi-dimensional. As posições de cada pássaro (partícula) neste espaço são representadas por sua equivalente cartesiana  $(x,y)$ , sendo ainda expressa a sua velocidade de deslocamento em cada eixo específico do plano  $(v_x,v_y)$ .

No controle da iteração, cada partícula, a menor parte do bando a ser simulado, possui um movimento próprio que corresponde à soma de três termos distintos. O primeiro termo corresponde a inércia da partícula que simboliza a maneira com que a partícula se move. O segundo termo se relaciona à atração da partícula com relação ao melhor ponto em que já se posicionou. O terceiro termo também se relaciona com a atração ao

posicionamento da partícula, porém, agora ligada ao melhor ponto da solução que todo o grupo já encontrou. Cada um destes termos será melhor detalhado no decorrer deste capítulo.

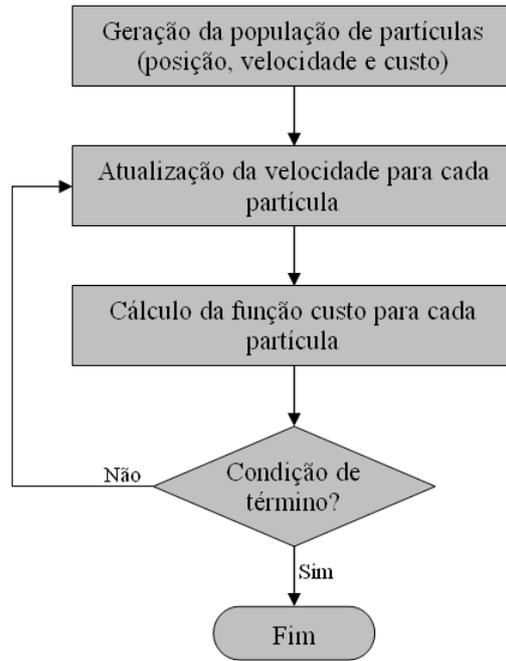


FIGURA 4.2 – Fluxo de controle para o PSO.

Fonte: Adaptado de Kennedy e Eberhart (2001).

A posição da partícula  $i$  é designada pelo vetor algébrico  $\vec{x}_i$ . Naturalmente pode haver qualquer número de partículas, e cada vetor pode ser de qualquer dimensão. Mudanças na posição de uma partícula podem ser definidas como  $\Delta\vec{x}_i$ , uma variação em sua posição anterior. Esta variação é impingida pela aplicação de uma certa velocidade,  $\vec{v}_i$ . A velocidade é um vetor que é somado às coordenadas de posição com o objetivo de mover a partícula de um passo de tempo para outro:

$$\vec{x}_i = \vec{x}_i(t-1) + \vec{v}_i(t) \quad (4.1)$$

A questão então é definir regras que movam a partícula de uma maneira desejada, de tal forma que tentativas sejam alocadas de forma ótima enquanto buscamos pelo ótimo global. O algoritmo de enxame de partículas examina o espaço de buscas pela modificação imposta pelo termo de velocidade (FIGURA 4.3).

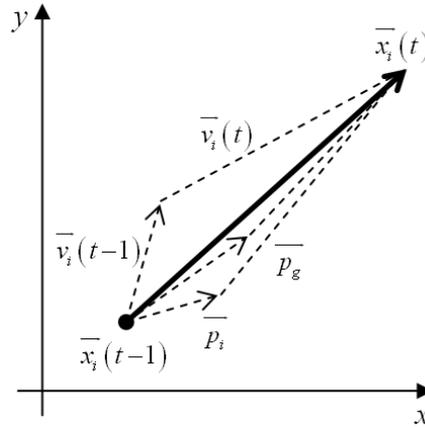


FIGURA 4.3 – Esquema de atualização da posição do agente.  
 Fonte: Adaptado de Kennedy e Eberhart (2001).

Como o sistema é dinâmico, a cada indivíduo é presumido um movimento, isto pode ser definido como mudança a todo o tempo. A direção do movimento,  $\vec{x}_i(t)$ , é a função da posição atual,  $\vec{x}_i(t-1)$ , da velocidade,  $\vec{v}_i(t-1)$ , da localização do melhor sucesso do indivíduo,  $\vec{p}_i$ , e da melhor posição encontrada por qualquer membro da vizinhança,  $\vec{p}_g$ :

$$\vec{x}_i(t) = f(\vec{x}_i(t-1), \vec{v}_i(t-1), \vec{p}_i, \vec{p}_g) \quad (4.2)$$

Assim, a mudança na posição é a função da diferença entre a melhor posição e a posição atual do indivíduo e a diferença entre a melhor posição da vizinhança e a posição atual do indivíduo. Logo, a fórmula para a definição da velocidade, levando em consideração variáveis contínuas, ajusta a velocidade e a posição da partícula em  $\mathfrak{R}^n$ :

$$\begin{cases} \vec{v}_i(t) = \vec{v}_i(t-1) + c_1(\vec{p}_i - \vec{x}_i(t-1)) + c_2(\vec{p}_g - \vec{x}_i(t-1)) \\ \vec{x}_i(t) = \vec{x}_i(t-1) + \vec{v}_i(t) \end{cases} \quad (4.3)$$

onde as variáveis  $c_i$  são números aleatórios. O efeito disto é que as partículas circulam de forma irregular em torno de um ponto definido como a média ponderada das melhores posições, do indivíduo e do bando:

$$\frac{c_1 \vec{p}_i + c_2 \vec{p}_g}{c_1 + c_2} \quad (4.4)$$

Por conta dos números aleatórios, a localização exata deste ponto muda a cada iteração.

Para o atual modelo, simplesmente temos que os indivíduos tendem a ser influenciados pelo melhor sucesso de qualquer indivíduo de sua vizinhança, ou seja, o membro de sua vizinhança que tem tido o melhor resultado até o momento (KENNEDY; EBERHART, 2001, HASSAN et al., 2005).

Indivíduos podem ser conectados a outros de acordo com um grande número de esquemas. A grande maioria das implementações de enxames de partículas usam dois princípios sociométricos simples. O primeiro, chamado *gbest* (FIGURA 4.4.a), conecta conceitualmente todos os membros da população com cada um. O efeito disto é que cada partícula é influenciada pela melhor performance de qualquer membro da população total. O segundo, chamado *lbest* (FIGURA 4.4.b), *g* para *global* e *l* para *local*, cria uma vizinhança para cada indivíduo contendo si mesmo e seus *k* vizinhos mais próximos. Por exemplo, se  $k = 2$ , então cada indivíduo *i* será influenciado pela melhor performance entre o grupo constituído pelas partículas  $i-1$ ,  $i$  e  $i+1$ . Diferentes topologias de vizinhança podem resultar em diferentes tipos de efeitos observados (KENNEDY; EBERHART, 2001).

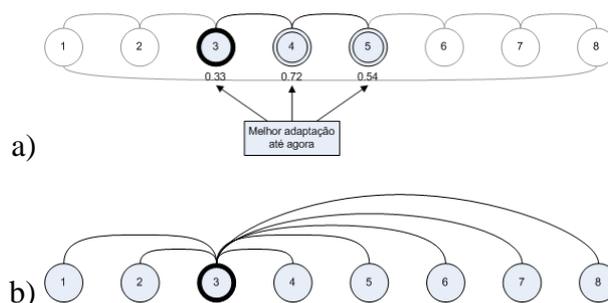


FIGURA 4.4 – a) Esquema para identificação do melhor local; b) esquema para identificação do melhor global.

Fonte: Adaptado de Kennedy e Eberhart (2001).

As decisões por si serão estocásticas, por não haver melhor razão teórica de que o não conhecimento de todas as forças envolvidas, pois não é muito razoável que qualquer

decisão esteja baseada somente em fatos isolados e talvez desconhecidos. Uma certa quantidade de aleatoriedade permite a exploração (*exploration*) de novas possibilidades, e também permite a utilização (*exploitation*); assim nós podemos balancear entre estes dois modos de busca pelo ajuste da incerteza das decisões (KENNEDY; EBERHART, 2001, p. 294).

As posições e as velocidades das partículas são comumente inicializadas aleatoriamente. As posições são sempre distribuídas sobre o domínio de cada dimensão.

Uma outra questão sempre tida no momento da implementação é: “Quantas partículas devem ser usadas?”. Não há uma resposta conveniente a esta questão, mas segundo a literatura a escolha entre 20 e 50 partículas frequentemente parece funcionar bem (KENNEDY; EBERHART, 2001).

### 4.3 Pseudocódigo do PSO

O pseudocódigo apresentado a seguir é referente à versão canônica do PSO para a otimização de problemas preferencialmente não-lineares no domínio  $\mathfrak{R}$ , inicialmente apresentado por Kennedy e Eberhart (1995, 2001) como fruto de suas pesquisas envolvendo a minimização de funções reais através da técnica mais simplificada por eles proposta (PARSOPOULOS; VRAHATIS, 2002).

```

Repita
  Para  $i = 1$  até número_de_indivíduos
    Se  $G(\vec{x}_i) > G(\vec{p}_i)$  então faça //  $G()$  é o fitness da função
      Para  $d = 1$  até número_de_dimensões
         $p_{id} = x_{id}$ 
      Próximo  $d$ 
    Fim faça
     $g = i$ 
    Para  $j = \text{índice\_de\_vizinhos}$ 
      Se  $G(\vec{p}_j) > G(\vec{p}_g)$  então faça
         $g = j$ 
      Fim faça
    Próximo  $j$ 
  Para  $d = 1$  até número_de_dimensões

```

$$\begin{aligned}
v_{id}(t) &= v_{id}(t-1) + c_1(p_{id} - x_{id}(t-1)) + c_2(p_{gd} - x_{id}(t-1)) \\
v_{id} &\in (-V_{\max}, +V_{\max}) \\
x_{id}(t) &= x_{id}(t-1) + v_{id}(t)
\end{aligned}$$

Próximo  $d$   
Próximo  $i$   
Até critério

Quando passamos a considerar a otimização de funções reais, a maneira de considerarmos a aplicação das variáveis  $c_i$  se altera consideravelmente. Para  $c_1$  regulando a força de atração para o melhor ponto de cada partícula, Kennedy e Eberhart (1995), assim como Shi e Eberhart (1998a) e Eberhart e Shi (2001), definem este como sendo o peso relativo à cognição, ou seja, o reforço do conhecimento próprio, dado por  $p_{id}$ , o melhor local. Já para  $c_2$  que está relacionado ao conhecimento da melhor posição global, alcançada por um membro do grupo,  $p_{gd}$ , o melhor global, o termo regula o conhecimento social da partícula.

De uma forma ampla, esta é uma maneira de ajustarmos o peso dado para o conhecimento próprio da partícula em contrapartida ao conhecimento geral do bando.

Mantendo a aleatoriedade do movimento com a multiplicação de números aleatórios em cada componente, cognitiva e social, temos uma nova equação, baseada na Eq. 4.3, que controla a velocidade de cada partícula, com a atualização de sua posição se mantendo inalterada,

$$\begin{cases} v_{id} = v_{id} + c_1 rand_1(p_{id} - x_{id}) + c_2 rand_2(p_{gd} - x_{id}) \\ x_{id} = x_{id} + v_{id} \end{cases} \quad (4.5)$$

#### 4.4 Variantes do PSO

Em específico, duas variantes do PSO foram abordadas neste estudo, sendo que uma delas foi desenvolvida pelo grupo de pesquisadores do Laboratório Associado de Computação e Matemática Aplicada (LAC) do Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE) e a outra é uma variante proposta por um dos criadores do PSO.

#### 4.4.1 PSO com inércia

O conceito de inércia, proposto por Shi e Eberhart (1998a) vem com o objetivo de balancear o peso dado para as buscas do tipo mais global e local, quando as partículas estão varrendo o espaço de busca.

A inserção de um novo parâmetro na Eq. 4.3, que tanto pode ser uma constante quanto uma função não-linear de tempo (SHI; EBERHART, 1998a) leva a uma simplificação no algoritmo canônico, pelo motivo de que este novo fator permite a retirada da verificação do respeito dos limites da área de busca.

No algoritmo, quando se faz necessária a verificação da condição  $v_{id} \in (-V_{\max}, +V_{\max})$ , isto faz com que a partícula não ultrapasse as fronteiras do espaço de busca. Um passo a mais para verificação, e quando trabalhamos com espaços multi-dimensionais, o tempo computacional para efetuarmos esta operação acaba sendo relativamente elevado.

Com o novo parâmetro de inércia, expresso por  $w$ , além de eliminarmos este relativo inconveniente, um maior poder de controle no comportamento de exploração global ou local é permitido. A nova equação então é dada por,

$$v_{id}(t) = wv_{id}(t-1) + c_1(p_{id} - x_{id}(t-1)) + c_2(p_{gd} - x_{id}(t-1)) \quad (4.6)$$

A equação que define a nova posição para a partícula, após a atualização de sua velocidade continua inalterada (Eq. 4.1).

Segundo a experimentação (SHI; EBERHART, 1998a, EBERHART; SHI, 2001), o valor dado para a nova constante de inércia  $w$  influencia diretamente o controle sobre o tipo de exploração efetuado pelas partículas no seguinte esquema:

- $w < 0,8$ : o algoritmo funciona em um modo de busca local, explorando fortemente (*exploitation*) frações do espaço de busca;

- $w > 1,2$ : o algoritmo trabalha no modo de exploração global (*exploration*), agindo sobre uma maior área do espaço, buscando por espaços não explorados previamente;
- $0,8 < w < 1,2$ : teoricamente o ponto intermediário para um bom balanço entre a busca global e local, e por consequência aqui se concentram os melhores valores de inércia para a maioria dos problemas.

No Capítulo 5, que trata dos resultados obtidos e expõe as considerações relativas a este trabalho, será feito um comentário mais específico quanto à seleção do valor da constante de inércia adotado para a resolução do problema em estudo, assim como também será apresentada sua justificativa de seleção.

#### **4.4.2 PSO com turbulência (PSO-t)**

O conceito original que permeou a construção de algoritmos baseados no comportamento de bandos de pássaros e cardumes de peixes, levou em consideração a interação que os indivíduos têm entre si e com o meio. Estes indivíduos, computacionalmente identificados como sendo partículas virtuais de um enxame, devem ser influenciados pelos seus companheiros, assim como por certas variáveis ambientais para possibilitar uma maior mimetização do mundo real.

Kennedy e Eberhart (1995) consideraram somente as interações sociais destas partículas para a construção do PSO, sendo que outras variáveis foram descartadas no processo de aperfeiçoamento do algoritmo. Algumas destas variáveis representavam o ambiente espacial onde estas partículas se encontravam.

Um grupo de pesquisa do LAC/INPE, formado pelos doutores José Carlos Becceneri, Stephan Stephany e Haroldo Fraga de Campos Velho propôs a inserção de uma variável na teoria do PSO com o objetivo de aproximar o ambiente virtual criado em computador com o ambiente real, fonte de inspiração original do algoritmo (BECCENERI et al., 2006).

Esta aproximação é dada através da incorporação de turbulência atmosférica no cenário computacional. Esta nova variável interfere de maneira independente, aleatória e esporádica o caminho que a cada partícula efetua durante o seu vôo.

Para simular esta turbulência, um novo parâmetro,  $q_0$ , com valor real atribuído entre 0 e 1 é usado por um esquema de roleta para ativar ou não a influência da turbulência nas partículas. Detalhadamente, a cada iteração do algoritmo um número aleatório é gerado e comparado a  $q_0$  com o objetivo de incluir ou não a turbulência no vôo das partículas.

A inclusão da turbulência em cada velocidade relativa a uma dimensão de vôo da partícula é regida pela equação abaixo, que determina a intensidade de aplicação da turbulência,

$$iturb = (w + c_1 + c_2)G(x_{gbest}) \frac{1}{T-t} \quad (4.7)$$

com  $w$  sendo a constante de inércia,  $c_1$  o componente cognitivo que reforça o conhecimento próprio da partícula,  $c_2$  o componente social que reforça o conhecimento do bando,  $G(x_{gbest})$  o ajuste, ou *fitness* da posição da melhor partícula para o problema,  $T$  o total de iterações reservado para execução do algoritmo e  $t$  a iteração atual.

Após a determinação da intensidade da turbulência,  $iturb$ , a sua aplicação a cada velocidade relativa à dimensão de vôo da partícula é feita independentemente,

$$v_{id} = v_{id} \cdot iturb \cdot rand_i$$

Após a aplicação na velocidade, a atualização da posição da partícula continua inalterada, sendo regida pela Eq. 4.1.

Esta variante foi utilizada para a estimação da localização e intensidade das fontes de poluição em conjunto com a variante de inércia. Os resultados relativos a sua utilização são demonstrados no Capítulo 5, que trata dos resultados numéricos e comentados no Capítulo 6.

## CAPÍTULO 5

### RESULTADOS

Com o objetivo de utilizar a técnica de *Particle Swarm Optimization* na minimização de um funcional relacionado a um problema inverso de estimação e localização de fontes de emissão de poluentes na atmosfera, e dada a situação específica de adotarmos um problema já estudado e validado através de uma técnica determinística (ROBERTI, 2005; ROBERTI et al., 2005a, 2005b), aqui apresentamos os resultados, que se mostraram satisfatórios, com uma melhora significativa em tempo de execução e com a diminuição de erro acumulado.

#### 5.1 Ambiente virtual de estudos

Para compararmos os resultados obtidos por Roberti (2005), reproduzimos o ambiente computacional inicialmente adotado para seu Caso 6, sendo este representado por uma área tridimensional, de terreno plano, sem desníveis, com dimensões de 1.500 m × 1.000 m × 1.000 m (FIGURA 5.1).

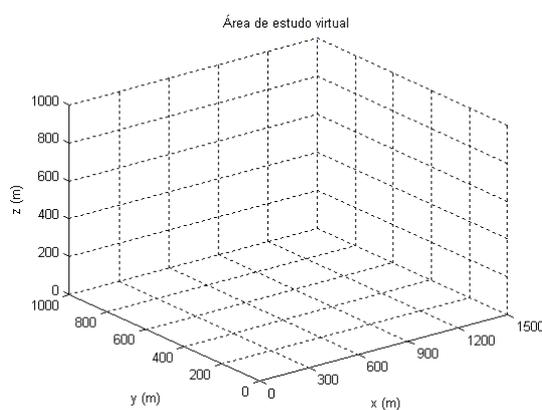


FIGURA 5.1 – Área virtual de  $1,5 \times 10^9 \text{ m}^3$  usada para o experimento de localização e estimação de fontes de poluição.

A área do experimento virtual foi dividida em subdomínios de intervalos regulares, com o objetivo de diferenciarmos as áreas que concentram as fontes de emissão, assim como

para possibilitar o cálculo da taxa de emissão de cada fonte de área específica. Os subdomínios, divididos com base nos eixos  $x$  e  $y$ , possuem 300 m (largura)  $\times$  200 m (comprimento).

Após procedermos a uma planificação (para os eixos  $x$  e  $y$ ) da área virtual, assim como a marcação (denominação) das 25 subáreas (FIGURA 5.2), duas sub-regiões são definidas com diferentes taxas de emissão de poluentes.

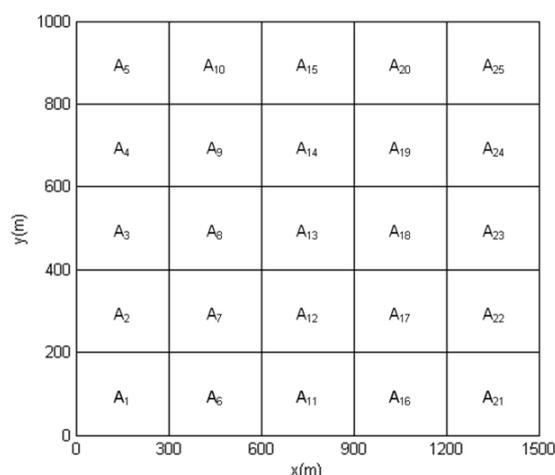


FIGURA 5.2 – Representação planar com as denominações das 25 subáreas da área virtual em estudo.

As duas sub-regiões, aqui denominadas de  $R_1$  e  $R_2$ , com dimensões 600 m  $\times$  600 m  $\times$  1 m, possuem taxas de emissão distintas, e possuem como elementos as seguintes subáreas:

$$\{A_2, A_3, A_4, A_7, A_8, A_9\} \subseteq R_1$$

$$\{A_{12}, A_{13}, A_{14}, A_{17}, A_{18}, A_{19}\} \subseteq R_2$$

A sub-região  $R_1$  tem uma taxa de emissão dada de  $10 \text{ gm}^{-3}\text{s}^{-1}$ , já a sub-região  $R_2$  tem maior emissão, sendo esta definida por  $20 \text{ gm}^{-3}\text{s}^{-1}$ .

Uma terceira sub-região,  $R_3$ , composta pelas subáreas restantes,

$$\{A_1, A_5, A_6, A_{10}, A_{11}, A_{15}, A_{16}, A_{20}, A_{21}, A_{22}, A_{23}, A_{24}, A_{25}\} \subseteq R_3$$

não possui emissão de poluentes, ou melhor definindo, possui uma taxa de emissão de  $0 \text{ gm}^{-3}\text{s}^{-1}$ .

Para a aquisição dos dados necessários à inversão do problema de localização e estimação de fontes, assim como em um ambiente real, seis sensores, com uma área de detecção de  $0,1 \text{ m} \times 0,1 \text{ m} \times 0,1 \text{ m}$ , posicionados a uma altura de 10 m, são instalados na área, nas disposições definidas pela TABELA 5.1. A representação visual dos sensores é vista na FIGURA 5.3.

TABELA 5.1 – Posição dos sensores na área de estudo.

Sensor	Posição x (m)	Posição y (m)
1	400	500
2	600	300
3	800	700
4	1.000	500
5	1.200	300
6	1.400	700

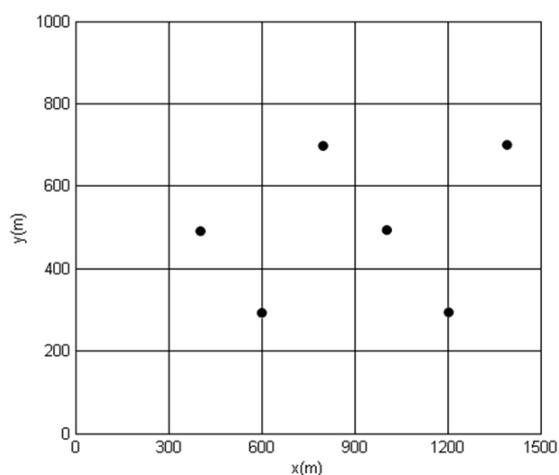


FIGURA 5.3 – Posicionamento dos sensores, representados por ●, na área de estudo.

A situação inicial do experimento é sintetizada pela FIGURA 5.4, sendo estas as distribuições de taxas de emissões e as localizações que estão sendo buscadas pela inversão do problema da mesma maneira.

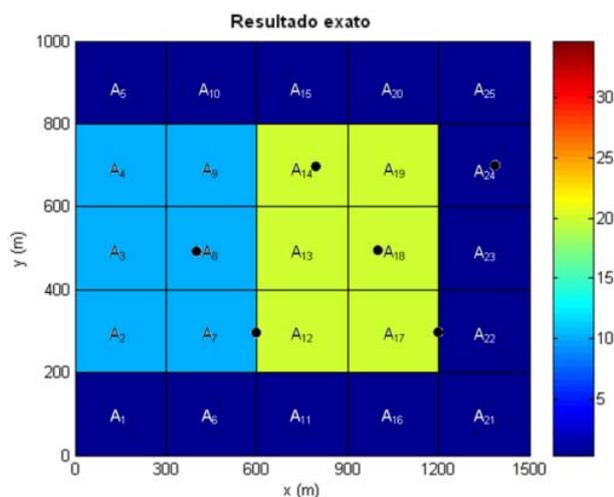


FIGURA 5.4 – Esquematização da situação inicial do experimento.

Os dados meteorológicos usados pelo modelo LAMBDA para simular a dispersão das partículas pelo vento são tirados do experimento de Copenhagen (ROBERTI, 2005), e são dados pela TABELA 5.2, que trazem as velocidades e direções médias de três estratos de vento obtidas em cinco horários diferentes. Estes dados são referentes às medições efetuadas no dia 19/10/1978 (GRINING; LICK, 1984).

TABELA 5.2 – Dados meteorológicos de velocidade e direção média dos ventos adotados do experimento de Copenhagen.

Horário (h:m)	Velocidade $\bar{U}$ (m/s)			Direção $\bar{U}$ (°)		
	10 m	120 m	200 m	10 m	120 m	200 m
12:05	2,6	5,7	5,7	290	310	310
12:15	2,6	5,1	5,7	300	310	310
12:25	2,1	4,6	5,1	280	310	320
12:35	2,1	4,6	5,1	280	310	320
12:45	2,6	5,1	5,7	290	310	310

Ainda segundo o estudo acima, o modelo adotado para a simulação das partículas de poluentes soltas na atmosfera deve seguir o passo de integração regressiva no tempo (*backward*). Isto justificado pelo ganho computacional devido à existência de um menor número de sensores, quando comparado com o número de subdomínios usados para estimar a intensidade de emissão de poluentes.

O modelo é configurado para executar 1.800 (mil e oitocentas) iterações, com uma variação temporal de  $\Delta t = 1$  s, o que corresponde a simular 30 min. (trinta minutos) de emissão de partículas. Para poupar esforço computacional, nos primeiros 10 min de simulação, as posições das partículas não são registradas, mas após este tempo, e a cada intervalo de 2 min, as posições das partículas são verificadas, o que permite a designação de um subdomínio de origem para cada partícula em específico. Desta designação, podemos construir a média das concentrações do modelo (Eq. 5.1), conforme o requerido pelo modelo LAMBDA,

$$C^{Mod}(x_j) = \frac{1}{10} \sum_{n=1}^{10} \left[ \sum_{i=1}^{25} S_i \frac{\Delta t}{N_{PES,j}} N_{PVF,i,j,n} \right] \quad (5.1)$$

com  $x_j$  sendo a posição de cada um dos 6 sensores posicionados na área de estudo, logo  $j = 6$ ,  $N_{PES,j}$  sendo o número de partículas emitidas por cada sensor, com o número de partículas emitidas sendo definido como  $N_{PES,j} = 1000$  para reproduzirmos o experimento de Roberti (2005),  $N_{PVF,i,j,n}$  sendo a quantidade de partículas fictícias emitidas pelo  $j$ -ésimo sensor que atingiram o volume da  $i$ -ésima fonte no  $n$ -ésimo instante de tempo.

Pelo fato de 10 min já serem descontados do total de tempo de simulação, e dos 20 min restantes, só a cada 2 min uma verificação da posição das partículas é feita, 10 são os instantes de tempo em que ocorrem esta checagem.

A geração dos dados experimentais, usados para a validação do modelo, é dada através da inserção de ruído nos dados gerados pelo modelo LAMBDA,

$$C^{Exp}(x_j) = C^{Mod}(x_j)[1 + \sigma\mu] \quad (5.2)$$

Duas situações são analisadas quanto à inserção de ruído nos dados:

- $\sigma = 0,05$ : para representar a inserção de 5% (cinco por cento) de ruído nos dados experimentais;
- $\sigma = 0,1$ : para representar a inserção de 10% (dez por cento) de ruídos nos dados experimentais.

Para ambos os casos, considerando a adoção do modelo de integração regressiva no tempo (*backward*) e a quantidade de sensores  $j=6$ , o funcional que o PSO deve minimizar é dado pela equação abaixo,

$$F(\alpha, S) = \sum_{j=1}^6 [C_j^{Mod}(S) - C_j^{Exp}]^2 + \alpha\Omega(S) \quad (5.3)$$

onde, em específico, o vetor  $S$  vem representar a intensidade de emissão referente a cada um dos 25 subdomínios da área em estudo,  $S = \{A_1, \dots, A_{25}\}$ , porém, quando verificamos que a sub-região denominada  $R_3$  não possui emissão de poluentes, esta informação pode ser incorporada ao modelo, retirando 13 subáreas da equação, logo, diminuindo consideravelmente a complexidade, assim como o tempo computacional, requerido para os cálculos, levando a concentração dos esforços para a união das sub-regiões  $R_1$  e  $R_2$ ,

$$R_1 \cup R_2 = \{A_2, A_3, A_4, A_7, A_8, A_9, A_{12}, A_{13}, A_{14}, A_{17}, A_{18}, A_{19}\} = S$$

Isto é dito “inclusão de informação *a priori*”, ou seja, estamos adicionando informação previamente conhecida com o objetivo de minimizar o mal-condicionamento provocado pela violação de uma das condições de Hadamard (CAMPOS VELHO, 2003).

Outra maneira de inserir informação *a priori* no modelo é possível através do ajuste do parâmetro de regularização, em conjunto com a adoção de um operador de regularização que melhor se adapte à situação.

## 5.2 Determinação de parâmetros para o PSO

Para as duas versões do PSO apresentadas anteriormente, a variante com inércia foi a que obteve maior sucesso na solução deste problema em específico. A versão com turbulência teve bons resultados para algumas instâncias, porém na média, o seu desempenho foi inferior ao obtido pelo PSO com inércia.

Este fato se deve, provavelmente, pela necessidade de um melhor ajuste nas funções do núcleo da versão PSO-t, que necessita de maior estudo e definição de uma versão geral, de ampla aplicação para diversos problemas.

No PSO com inércia, conforme bibliografia (SHI; EBERHART, 1998a, EBERHART; SHI, 2001, SETTLES, 2006) a definição padrão dos parâmetros  $w$ ,  $c_1$  e  $c_2$  seguem um esquema heurístico para vários problemas, sendo que na média,  $w = 0,9$ ,  $c_1 = 2,0$  e  $c_2 = 2,0$  são boas escolhas. Porém, quando estes parâmetros foram utilizados nesta dissertação, os resultados obtidos não chegaram ao resultado esperado.

A própria literatura cita casos em que determinadas classes de problemas necessitam a definição de um novo conjunto de parâmetros (SHI; EBERHART, 1998a). Dada esta informação, novos parâmetros foram determinados, também de maneira heurística, para a solução deste problema de inversão pelo conhecimento prévio da solução exata.

O novo conjunto de parâmetros estabelecidos foi:

- $w = 0,2$ ;
- $c_1 = 0,1$ ;
- $c_2 = 0,2$ .

Porém, nada impede a definição de um novo conjunto de parâmetros que permita minimizar ainda mais o erro obtido, tornando a solução estimada do problema mais próxima da solução exata (CARLISLE; DOZIER, 2000; SHI; EBERHART, 1998b; TILLET et al., 2005).

Conforme a teoria original do PSO (KENNEDY; EBERHART, 1995), a quantidade de partículas, ou pássaros, é definida conforme o problema, sendo que uma média de 20-50 partículas é um ponto comum para uma ampla gama de problemas. Já o critério de parada para o algoritmo, que tanto pode ser por uma minimização de erro ou tempo pré-estabelecido (quantidade máxima de iterações) pode variar fortemente, sendo que este também é altamente dependente do problema.

Com o tempo máximo para este problema pré-estabelecido para 100 (cem) iterações, uma quantidade inferior de partículas, 12 (doze) ao todo, foi a menor quantidade que permitiu estimarmos os resultados que serão posteriormente apresentados. Aumentar a quantidade de partículas ou a quantidade máxima de iterações não revelou ganho significativo, quando comparando a minimização do custo da função objetivo *versus* o tempo de execução.

Outro parâmetro definido, ou melhor, outro conjunto de parâmetros definidos, foi o limitante superior do problema de otimização. Em nosso caso, foi adotado como limitante o resultado obtido pelo método determinístico Q-N (ROBERTI, 2005). Assim, o PSO só considera uma melhora no custo aquele ponto do espaço  $n$ -dimensional em que o custo da função é menor em relação ao resultado obtido pelo Q-N (FIGURA 5.5).

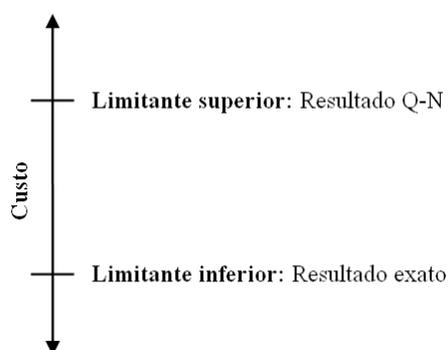


FIGURA 5.5 – Esquema de limitantes adotados para o problema de otimização.

Logo, como conhecemos o limitante inferior, o resultado exato, temos como objetivo reduzir o limitante superior do problema, ou seja, temos que obter um valor menor, reduzir o *gap* existente entre os limitantes superior e inferior, através da minimização do funcional por PSO.

### 5.3 Resultados numéricos

A implementação do PSO, em suas formas canônica e variantes se deu através da linguagem de programação FORTRAN, com o objetivo de compatibilizar o código com o modelo LAMBDA, assim como permitir uma melhor comparação com o método determinístico quase-Newton adotado por Roberti (2005).

Em uma primeira análise, quando verificamos o tempo de execução dos programas, já constatamos ganho na ordem de 33,42% quando comparamos as execuções da minimização do funcional pelo método estocástico em contraste com o método determinístico (TABELA 5.3).

TABELA 5.3 – Comparativo de tempo de execução e ganho computacional para os métodos PSO e Q-N.

	Tempo de execução	Ganho
<b>PSO</b>	1.748,434 s	↑ 33,42%
<b>Q-N</b>	2.626,597 s	–

Para a técnica de PSO, este é um tempo médio, tirado da execução de 25 sementes aleatórias e executadas em uma mesma máquina. O tempo para o método quase-Newton não varia significativamente para diversas execuções do mesmo, dada sua característica determinística.

Dos resultados obtidos, a determinação do erro segue o padrão adotado por Roberti (2005), com sua equação dada por,

$$E_s (\%) = 100 \frac{1}{12} \sum_{i=1}^{12} \left[ \frac{|S_i^{estimado} - S_i^{exato}|}{S_i^{exato}} \right] \quad (5.4)$$

que determina o percentual de erro em comparação com o resultado exato.

### 5.3.1 Ruído de 5%

Na primeira situação em estudo, com a inserção de 5% de ruído nos dados,  $\sigma = 0,05$  para a Eq. 5.2, o erro médio obtido para a estimação das duas áreas de emissão foi da ordem de 13,38%, já a melhor iteração obteve um erro de 13,22%. O método determinístico, Q-N, para esta mesma quantidade de ruído teve erro na ordem de 15,82%.

A comparação dos resultados, exato, Q-N e PSO é vista na TABELA 5.4, e a FIGURA 5.6 mostra a estimação efetuada pelo PSO.

Na média, o erro para a sub-região  $R_1$  ficou em torno de 14,76% para a estimação por PSO, enquanto que a estimação por Q-N chegou a um erro de 16,03%. Já a sub-região  $R_2$  obteve erro médio de 12% para o PSO e 15,60% para o Q-N.

Outro fato que chama a atenção para os resultados obtidos por PSO é que o parâmetro de regularização,  $\alpha$ , que para Roberti (2005) neste caso foi de  $\alpha = 1 \times 10^{-6}$ , não teve grande influência na obtenção dos resultados, ou seja,  $\alpha = 0,0$  e não houve inserção de informação *a priori* advinda da regularização.

TABELA 5.4 – Comparação de estimativa de resultados através dos métodos Q-N e  $\overline{\text{PSO}}$ . Para o  $\overline{\text{PSO}}$  estão a média de 25 sementes e o melhor resultado para a inserção de 5% de ruído.

Área	Exato ( $\text{gm}^{-3}\text{s}^{-1}$ )	Q-N ( $\text{gm}^{-3}\text{s}^{-1}$ )	$\overline{\text{PSO}}$ ( $\text{gm}^{-3}\text{s}^{-1}$ )	PSO* ( $\text{gm}^{-3}\text{s}^{-1}$ )
A <sub>2</sub>	10,00	09,82	09,34	09,20
A <sub>3</sub>	10,00	09,63	10,07	10,22
A <sub>4</sub>	10,00	11,26	11,26	11,09
A <sub>7</sub>	10,00	08,76	10,95	10,79
A <sub>8</sub>	10,00	11,06	10,93	11,10
A <sub>9</sub>	10,00	15,51	14,99	14,77
A <sub>12</sub>	20,00	20,12	20,79	20,48
A <sub>13</sub>	20,00	19,25	19,83	19,54
A <sub>14</sub>	20,00	11,52	13,06	12,87
A <sub>17</sub>	20,00	17,88	18,72	18,44
A <sub>18</sub>	20,00	23,82	22,76	22,42
A <sub>19</sub>	20,00	23,44	22,47	22,14

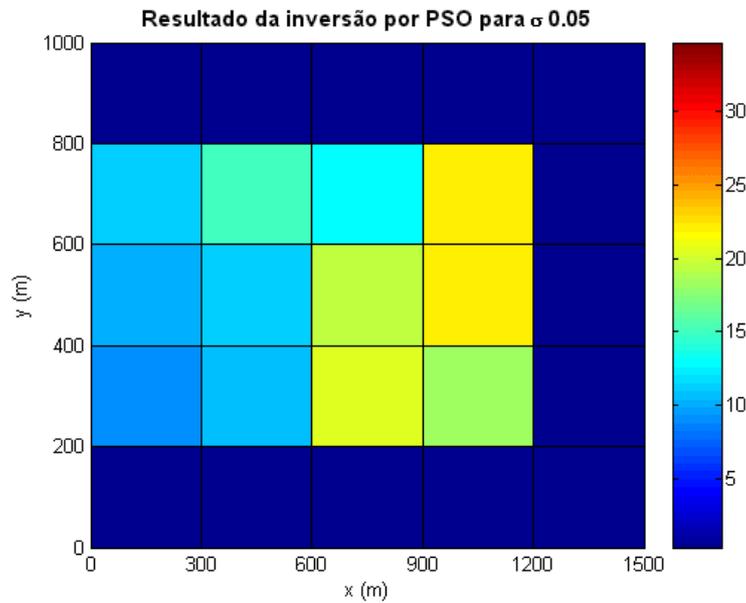


FIGURA 5.6 – Resultado gráfico da estimativa de intensidade através de PSO para um ruído de 5%.

### 5.3.2 Ruído de 10%

A segunda situação estudada, com a inserção de 10% de ruído através da Eq. 5.2 nos dados,  $\sigma = 0,1$ , trouxe uma margem de acerto maior, seguindo o mesmo padrão observado em Roberti (2005). Para o PSO, a média das 25 sementes obteve um erro estimado de 10,85%, a melhor iteração obteve erro de 10,26%, em contrapartida, o método determinístico Q-N obteve erro na casa de 14,73%, um ganho relativamente significativo para o PSO, dado o menor tempo de execução.

A TABELA 5.5 mostra o comparativo dos resultados, junto com a representação gráfica do resultado do PSO na FIGURA 5.7.

Para 10% de ruído, o erro médio do PSO para a sub-região  $R_1$  foi de 8,69%, no método Q-N o erro ficou em 12,18%. Já na sub-região  $R_2$  a média do PSO obteve 13,01% contra 17,29% para o Q-N.

Para o parâmetro de regularização, o método Q-N necessitou de um  $\alpha = 1 \times 10^{-5}$ , novamente o PSO não teve necessidade de inserção de regularização, ou seja,  $\alpha = 0.0$  mais uma vez.

TABELA 5.5 – Comparação de estimativa de resultados através dos métodos Q-N e  $\overline{\text{PSO}}$ . Para o  $\overline{\text{PSO}}$  estão a média de 25 sementes e o melhor resultado para a inserção de 10% de ruído.

Área	Exato ( $\text{gm}^{-3}\text{s}^{-1}$ )	Q-N ( $\text{gm}^{-3}\text{s}^{-1}$ )	$\overline{\text{PSO}}$ ( $\text{gm}^{-3}\text{s}^{-1}$ )	PSO* ( $\text{gm}^{-3}\text{s}^{-1}$ )
A <sub>2</sub>	10,00	08,97	09,83	9,69
A <sub>3</sub>	10,00	09,97	10,40	10,25
A <sub>4</sub>	10,00	12,52	10,79	10,63
A <sub>7</sub>	10,00	07,98	10,50	10,34
A <sub>8</sub>	10,00	10,14	12,06	12,24
A <sub>9</sub>	10,00	11,56	11,28	11,12
A <sub>12</sub>	20,00	13,84	14,56	14,35
A <sub>13</sub>	20,00	22,65	22,67	22,34
A <sub>14</sub>	20,00	14,14	15,85	16,09
A <sub>17</sub>	20,00	19,99	21,56	21,24
A <sub>18</sub>	20,00	21,17	20,05	19,75
A <sub>19</sub>	20,00	24,90	21,74	21,42

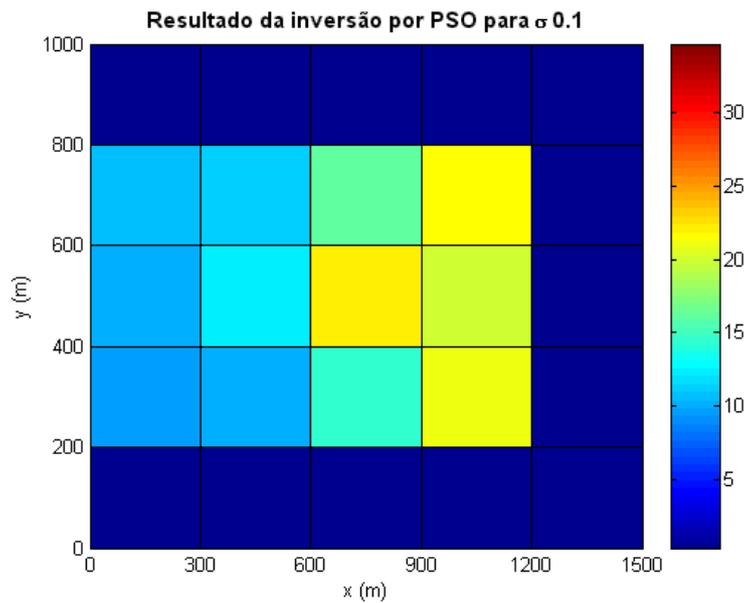


FIGURA 5.7 – Resultado gráfico da estimativa de intensidade através de PSO para um ruído de 10%.

#### 5.4 PSO versus PSO-t

A variante do PSO que inclui um parâmetro de turbulência no ambiente virtual também foi testada e comparada contra sua variante canônica e contra o método determinístico Q-N, com o objetivo de estudar a aplicabilidade desta nova técnica para este problema em específico.

Os resultados obtidos não chegaram a ser absolutamente melhores que o PSO, porém quando fazemos uma análise mais apurada, verificamos que a convergência do PSO-t é relativamente mais rápida (FIGURA 5.8). Isto significa que o PSO-t leva uma quantidade menor de iterações para chegar a um mesmo nível que o PSO.

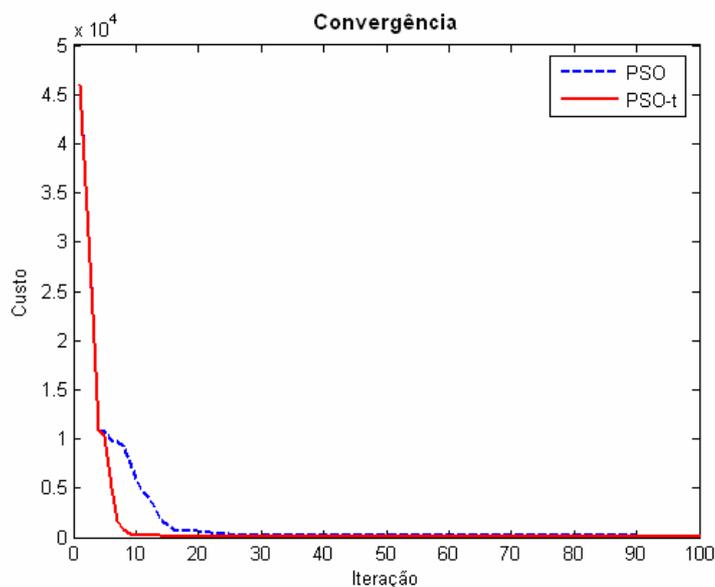


FIGURA 5.8 – Comparativo de convergência entre o PSO e PSO-t.

Porém, a média dos erros do PSO-t foi bem superior ao obtido pelo PSO, sendo que para a estimação de algumas subáreas o resultado obtido escapou um pouco do limite de erro esperado.

Ainda assim, esta habilidade de convergência em uma menor quantidade de tempo é um novo campo, relativamente amplo, que deve ser estudado e explorado, além de demonstrar certa força nesta variante desenvolvida no INPE. Maiores estudos devem ser conduzidos com este algoritmo para melhor capacitá-lo a resolver problemas com uma menor taxa de erros.

### 5.5 Estimação com ACO

Com o objetivo de comparação dos resultados obtidos com outra heurística bioinspirada, uma implementação da técnica de *Ant Colony Optimization* (ACO) (DORIGO; STÜTZLE, 2004; DORIGO; GAMBARDELLA, 1997; DORIGO; MANIEZZO; CORLONI, 1996) foi efetuada em linguagem FORTRAN, e adaptada para trabalhar num pseudo-espaco multidimensional de números reais,  $\mathfrak{R}^n$ .

Porém, os resultados obtidos (TABELA 5.6) para a inversão ficaram longe de se serem considerados satisfatórios, com um erro na ordem de 23,75%.

TABELA 5.6 – Tabela comparativa da estimação feita por uma das melhores sementes do ACO.

Área	Exato ( $\text{gm}^{-3}\text{s}^{-1}$ )	ACO* ( $\text{gm}^{-3}\text{s}^{-1}$ )
$A_2$	10,00	08,00
$A_3$	10,00	05,00
$A_4$	10,00	11,00
$A_7$	10,00	11,00
$A_8$	10,00	19,00
$A_9$	10,00	16,00
$A_{12}$	20,00	18,00
$A_{13}$	20,00	18,00
$A_{14}$	20,00	17,00
$A_{17}$	20,00	20,00
$A_{18}$	20,00	19,00
$A_{19}$	20,00	19,00

Uma investigação mais detalhada relativa a uma melhor seleção dos parâmetros usados (BECCENERI; SANDRI; LUZ, 2006; YUAN; GALLAGHER, 2004) deve ser conduzida, com o objetivo de validar esta técnica para o problema tratado nesta dissertação.

## CAPÍTULO 6

### CONCLUSÕES

Nesta dissertação a estimativa de fontes de área de poluição atmosférica é apresentada e expressa como um problema inverso, sendo formulado um problema de otimização com restrições. Posteriormente foi apresentada a técnica estocástica bioinspirada que foi utilizada para minimizar o funcional do problema de otimização e possibilitar a estimação de intensidade de fontes de área de poluição em um espaço tridimensional.

Para comprovarmos a aplicabilidade desta técnica na resolução de problemas inversos relacionados ao transporte de poluentes na atmosfera, um caso de teste foi selecionado da tese de doutorado da Dr<sup>a</sup>. Débora Regina Roberti. Este caso em específico foi selecionado justamente por apresentar um bom resultado para a estimação por um método determinístico (Q-N), além de trazer à tona a sua aplicação em um problema de fácil transposição para situações reais.

Quando da obtenção dos resultados, foi verificado um ganho relativo, quando focamos o aspecto tempo computacional na obtenção dos resultados. Porém, como se trata de um método estocástico, este pode é um fato digno de nota, pois em geral, métodos determinísticos requerem um menor esforço computacional.

Com relação ao erro na estimação, o método estocástico PSO também superou os resultados obtidos pelo Q-N. Não somente na estimação global das duas áreas de emissão propostas, mas como também a taxa de erro para as áreas em separado superaram as taxas obtidas pelo método determinístico.

Para a média dos resultados da execução de 25 sementes independentes do PSO, a análise nos leva a apontar certa robustez por parte do algoritmo estocástico. A diferença da estimação obtida pela média das 25 sementes pouco se distanciou da estimação feita pela melhor semente. Assim, temos uma baixa dispersão dos resultados relativos à estimação.

Quando aplicamos a variante que envolve turbulência atmosférica, desenvolvida no INPE, para o problema atacado, os resultados obtidos foram um pouco distantes do bom resultado obtido pela versão sem turbulência. Porém, como o demonstrado no capítulo anterior, que trata dos resultados numéricos e de suas análises, pode-se observar que o novo fator imposto pela adoção da turbulência faz com que o PSO-t tenha uma convergência mais rápida, quando comparada com a versão padrão.

Este ganho na velocidade de convergência pode ser melhor explorado se houver um estudo que possibilite a compreensão desta tendência e que crie regras para a adoção de parâmetros que diminuam a taxa de erro para a estimação.

Caso semelhante ocorreu com a estimação proposta por ACO. Os resultados obtidos poderão ser melhorados quando da definição de um melhor conjunto de parâmetros que se adaptem ao problema inverso de estimação de intensidade e localização de fontes de emissão de poluição atmosférica.

## **6.1 Trabalhos futuros**

Com o objetivo de melhorar ainda mais os resultados obtidos, está sendo proposta uma melhor seleção do conjunto de parâmetros em uso. Apesar do conjunto de parâmetros adotados não necessitar da informação *a priori* fornecida pelo operador de regularização, isto porque o parâmetro de regularização foi tão próximo de zero, que o valor zero para  $\alpha$  foi adotado. Técnicas estatísticas de determinação destes parâmetros para o PSO-t podem ser adotadas.

Para permitir a adoção destes novos mecanismos de avaliação, é necessário aumentar consideravelmente o poder computacional disponível para uso. A melhor maneira disto ocorrer é paralelizar o código (FOSTER, 1995), tornando sua execução possível em ambientes de computação de alto desempenho.

Testar a estimação das fontes por outras técnicas de PSO também é uma alternativa viável. Dentro destas possibilidades, uma nova variante do PSO, com a adição de

parâmetros adaptativos está sendo desenvolvida no LAC/INPE e é uma alternativa promissora.

O conceito relacionado aos parâmetros adaptativos vem do pensamento biológico sugerido por pesquisadores do meio da ecologia comportamental (KREBS, 1966) de que os animais se adaptam a mudanças no ambiente, assim como também a mudanças provocadas pelos elementos de seu próprio grupo.

O principal ponto desta mudança se caracteriza por uma alteração no foco de seu comportamento social. Na natureza, quando um espécime se sente seguro junto ao seu bando, o comportamento é guiado pelo *modus operandi* do grupo, ou seja, o indivíduo se torna parte do todo, o seu comportamento é regido pela vontade geral. Porém, no instante em que este indivíduo verifica que o seu bando não está lhe trazendo benefícios (proteção, alimento, dentre outros) seu comportamento pode se alterar, este indivíduo pode se afastar do bando, adotando uma postura mais solitária, mais individual.

Assim, os pesquisadores José Carlos Becceneri e Stephan Stephany, do LAC/INPE, estão propondo a adoção de um esquema que mimetize este comportamento adaptativo. De maneira geral, o indivíduo começa de uma forma coesa com seu bando, ele acredita nas informações providas pelo bando. No PSO canônico, isso equivale a um peso maior para o parâmetro  $c_2$ . Porém, se não houver uma melhora significativa para este indivíduo (a função objetivo não é minimizada, ou maximizada) por um dado período de tempo, a atitude deste indivíduo pode se alterar, este pode deixar de confiar no bando e começar a ter mais vontade própria, isto equivale a um maior peso para o parâmetro  $c_1$ .

O incremento ou decremento de um parâmetro em detrimento de outro pode ser dado por uma infinidade de regras lineares, ou não, baseadas no tempo total de execução ou nas parcelas de tempo em que é verificado se houve ou não melhora, fato este que guia a decisão de alterar o peso social ou cognitivo.

Outras técnicas, tais como a *Marriage in Honey Bees Optimization* (MBO) (ABBASS, 2001), podem ser alternativas com potencial de gerar resultados satisfatórios.



## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABBASS, H. A. MBO: Marriage in honey bees optimization, a haplometrosis polygynous swarming approach. In: IEEE CONGRESS ON EVOLUTIONARY COMPUTATION, 2001, Seoul, South Korea. *Proceedings...* Seoul: IEEE, v. 1, 2001, p. 207-214. ISBN 0-7803-6657-3. Disponível em: <[http://ieeexplore.ieee.org/xpls/abs\\_all.jsp?isnumber=20223&arnumber=934391&count=102&index=29](http://ieeexplore.ieee.org/xpls/abs_all.jsp?isnumber=20223&arnumber=934391&count=102&index=29)>. Acesso em: 20 dez. 2006.

BARONE, D. A. C. (org.). *Sociedades artificiais: a nova fronteira da inteligência nas máquinas*. Porto Alegre: Bookman, 2003.

BECCENERI, J. C.; SANDRI, S.; LUZ, E. F. P. Conception of pheromone dispersion for ant colony optimization. In: CONGRESSO NACIONAL DE MATEMÁTICA APLICADA E COMPUTACIONAL, 29., 2006, Campinas, Brasil. *Anais...* Campinas: SBMAC, 2006. CD-ROM.

BECCENERI, J. C.; STEPHANY, S.; CAMPOS VELHO, H. F.; LUZ, E. F. P. Addition of atmosphere turbulence in the particle swarm optimization algorithm. In: CONGRESSO NACIONAL DE MATEMÁTICA APLICADA E COMPUTACIONAL, 29., 2006, Campinas, Brasil. *Anais...* Campinas: SBMAC, 2006. CD-ROM.

BLUM, C. Ant colony optimization: Introduction and recent trends. *Physics of Life Reviews*, v. 2, n. 4, p. 353-373, 2005.

Banco Nacional de Desenvolvimento Econômico e Social (BNDES). *Efeito estufa e a convenção sobre mudança do clima*. Brasília: Ministério da Ciência e Tecnologia. Coordenação de Pesquisa em Mudanças Globais. 1999.

BONABEAU, E.; DORIGO, M.; THERAULAZ, G. *Swarm intelligence*. New York: Oxford University Press, 1999.

- CAMPOS VELHO, H. F. *Problemas inversos: conceitos básicos e aplicações*. IV Encontro de Modelagem Computacional. Nova Friburgo, RJ. 2003. (Notas de curso)
- CAMPOS VELHO, H. F.; BARBOSA, V. C. F.; ROBERTI, D. R.; SOUTO, R. P.; SHIGUEMORI, E. H. Inverse analysis in geoscience problems. In: IBERIAN LATIN AMERICAN CONGRESS ON COMPUTATIONAL METHODS IN ENGINEERING, 26., 2005, Guarapari, Brasil. *Anais...* Guarapari: ABMEC & AMC, 2005. p. 237-249.
- CAMPOS VELHO, H. F.; MORAES, M. R.; RAMOS, F. M.; DEGRAZIA, D. A. An automatic methodology for estimating eddy diffusivity from experimental data. *Il Nuovo Cimento*, v. 23C, n. 1, p. 65-84, 2000.
- CARLISLE, A.; DOZIER, G. Adapting particle swarm optimization to dynamic environments. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON ARTIFICIAL INTELLIGENCE, 2000, Las Vegas, EUA. *Proceedings...* Las Vegas: ICAI, 2000. p. 429-434.
- CASTELLI, S. T.; FERRERO, E.; ANFOSSI, D. Turbulence statistics estimation and dispersion simulation scenarios in urban environment. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON HARMONISATION WITHIN ATMOSPHERIC DISPERSION MODELLING FOR REGULATORY PURPOSES, 8., 2002, Sofia, Bulgaria. *Anais...* Sofia: ICH, 2002 p. 315-319.
- CLERC, M. *Discrete particle swarm optimization: illustrated by the traveling salesman problem*. 2000. Disponível em: <[http://clerc.maurice.free.fr/ps0/ps0\\_tsp/Discrete\\_PSO\\_TSP.htm](http://clerc.maurice.free.fr/ps0/ps0_tsp/Discrete_PSO_TSP.htm)>. Acesso em: 24 jan. 2007.
- DE VITO, E.; ROSASCO, L.; CAPONNETTO, A.; DE GIOVANNINI, U.; ODONE, F. Learning as an inverse problem, *Journal of Machine Learning Research*, v. 6(May), p. 883-904, 2005.
- DEGRAZIA, G. A. *Turbulência atmosférica*. Laboratório Associado de Computação e Matemática Aplicada. Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, São José dos Campos, 2006. (Notas de aula)

- DORIGO, M.; BLUM, C. Ant colony optimization theory: a survey. *Theoretical Computer Science*, v. 344, n. 2-3, p. 243-278, 2005.
- DORIGO, M.; GAMBARDELLA, L. M. Ant colony system: a cooperative learning approach to the traveling salesman problem. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, v. 1, n. 1, p. 53-66, 1997.
- DORIGO, M.; MANIEZZO, V.; COLORNI, A. Ant system: optimization by a colony of cooperating agents. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics - Part B*, v. 26, n. 1, p. 29-41, 1996.
- DORIGO, M.; STÜTZLE, T. *Ant colony optimization*. Cambridge: The MIT Press, 2004.
- EBERHART, R. C.; SHI, Y. Particle swarm optimization: developments, applications and resources. In: CONGRESS ON EVOLUTIONARY COMPUTATION, 2001, Seoul, Korea. *Proceedings...* Piscataway: IEEE, 2001. p. 81-86. ISBN 0-7803-6657-3.
- ENGL, H. W.; HANKE, M.; NEUBAUER, A. *Regularization of inverse problems*. Dordrecht, Kluwer: 1996.
- FLIERL G. R.; LEGG, S.; FERRARI, R. *Turbulence in geophysical systems*. Spring 2004. MIT OpenCourseWare (Notas de aula). Disponível em: <<http://ocw.mit.edu/NR/rdonlyres/Earth--Atmospheric--and-Planetary-Sciences/12-820Spring-2004/ECB3EB5D-C958-4BDA-9295-68D034B14C79/0/lec15.pdf>>. Acesso em: Dez. 2006.
- FOSTER, I. *Designing and building parallel programs*. New York: Addison Wesley, 1995.
- GOLDBARG, M. C.; LUNA, H. P. L. *Otimização combinatória e programação linear: modelos e algoritmos*. 2 ed. Rio de Janeiro: Elsevier, 2005.

GRYNING, S. E.; LYCK, E. Atmospheric dispersion from elevated source in an urban area: comparison between tracer experiments and model calculations. *Journal Climate Applied Meteorology*, v. 23, p. 651-654. 1984.

HASSAN R.; COHANIM B.; DE WECK O. L.; VENTER G. A comparison of particle swarm optimization and the genetic algorithm. In: MULTIDISCIPLINARY DESIGN OPTIMIZATION SPECIALIST CONFERENCE, 1., 2005, Austin, EUA. *Anais...* Austin: AIAA, 2005. p. 1-13.

KENNEDY, J.; EBERHART, R. C. *Swarm intelligence*. New York: Morgan Kaufmann, 2001.

KENNEDY, J.; EBERHART, R. C. Particle swarm optimization. In: IEEE INTERNATIONAL CONFERENCE ON NEURAL NETWORKS, 1995, Perth, Australia. *Proceedings...* v. 4, Piscataway: IEEE, 1995. p. 1942-1948. ISBN 0-7803-2768-3. Disponível em: <[http://ieeexplore.ieee.org/xpls/abs\\_all.jsp?isnumber=10434&arnumber=488968&count=128&index=76](http://ieeexplore.ieee.org/xpls/abs_all.jsp?isnumber=10434&arnumber=488968&count=128&index=76)>. Acesso em: 25 dez. 2006.

KREBS, J. R. *Introdução à ecologia comportamental*. São Paulo: Atheneu Editora, 1966.

MUNIZ, W. B. *Um problema inverso em condução do calor utilizando métodos de regularização*. Porto Alegre: CPGMAp da UFRGS, 1999. 79 p. Dissertação (Mestrado em Matemática Aplicada) – Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 1999.

PARSOPOULOS, K. E.; VRAHATIS, M. S. Particle swarm optimization method for constrained optimization problems. In: *Intelligent technologies - theory and application: new trends in intelligent technologies*, v. 76 of Frontiers in Artificial Intelligence and Applications, p. 214-220, IOS Press, 2002.

PEOPLEANDPLANET.NET. *Chernobyl death toll 'could near 100,000'*. Disponível em: <<http://www.peopleandplanet.net/doc.php?id=2746>>. Acesso em: 25 jan. 2007.

PIDD, M. Just modeling through: a rough guide to modeling. *Interfaces*. v. 29, n. 2, p. 118-138, 1999.

RAMOS, F. M. *Problemas inversos*. Pós-graduação em Computação Aplicada. Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais. 2006. (Notas de aula)

RAMOS, F. M.; CAMPOS VELHO, H. F.; CARVALHO, J. C.; FERREIRA, N. J. Novel approaches on entropic regularization, *Inverse problems*, v. 15, n. 5, p. 1139-1148, 1999.

ROBERTI, D. R. *Problemas inversos em física da atmosfera*. 2005. 141 p. Tese (Doutorado em Física) – Santa Maria, Universidade Federal de Santa Maria, Centro de Ciências Naturais e Exatas, 2005.

ROBERTI, D. R.; ANFOSSI, D.; CAMPOS VELHO, H. F.; DEGRAZIA, G. Estimation of emission rate of pollutant atmospheric source. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON INVERSE PROBLEMS IN ENGINEERING: THEORY AND PRACTICE, 5., 2005a, Cambridge, UK. *Proceedings...* Cambridge: Taylor and Francis Ltd, v. 3, 2005a.

ROBERTI, D. R.; ANFOSSI, D.; CAMPOS VELHO, H. F.; DEGRAZIA, G. Estimação da taxa de emissão e localização de fontes. *Ciencia e Natura*, Santa Maria, v. Esp, p. 131-134, 2005b.

SEIBERT, P. Inverse modeling with a lagrangian particle dispersion model: application to point releases over limited time intervals. In: SCHIERMEIER, F. A.; GRYNING, S. E. (ed.), *Air pollution modeling and its application*. São Paulo: Kluwer Academic Publishers, p. 381-390. 2001.

SETTLES, M. *An introduction to particle swarm optimization*. Disponível em: <[www.cs.uidaho.edu/~tsoule/cs472fall05/particleswarm.pdf](http://www.cs.uidaho.edu/~tsoule/cs472fall05/particleswarm.pdf)>. Acesso em: Dez. 2006.

SHI, Y.; EBERHART, R. C. A modified particle swarm optimizer. In: IEEE INTERNATIONAL CONFERENCE ON EVOLUTIONARY COMPUTATION,

1998a, Nagoya University, Japan. *Proceedings...* Piscataway: IEEE, 1998a. p. 69-73. ISBN 978-0780348691.

SHI, Y.; EBERHART, R. C. Parameter selection in particle swarm optimization. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON EVOLUTIONARY PROGRAMMING, 7., 1998b. *Proceedings...* London: Springer-Verlag, 1998b. p. 591-600. V. W. Porto, N. Saravanan, D. E. Waagen, and A. E. Eiben, Eds. Lecture Notes In Computer Science, vol. 1447,

SILVA NETO, A. J. *Problemas inversos: aplicações em engenharia e medicina*. Rio de Janeiro: Quartas Científicas, UERJ. 2005.

TIKHONOV, A. N.; ARSENIN, V. Y. *Solution of ill-posed problems*. Traduzido por Fritz John. New York: John Wiley, 1977.

TILLET, J.; RAO, T. M.; SAHIN, F.; RAO, R. M. Darwinian particle swarm optimization. In: INDIAN INTERNATIONAL CONFERENCE ON ARTIFICIAL INTELLIGENCE, 2., 2005, Pune, India. *Proceedings...* Pune: IICAI, 2005. p. 1474-1487. ISBN 0-9727412-1-6.

THOMSON, D. J. Criteria for selection of stochastic models of particle trajectories in turbulent flows. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 180, p. 529-556. 1987.

YUAN, B; GALLAGHER, M. Statistical racing techniques for improved empirical evaluation of evolutionary algorithms. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON PARALLEL PROBLEM SOLVING FROM NATURE, 8., 2004, Birmingham, UK. *Proceedings...* Birmingham: PPSN, 2004. p. 172-181.