

XXV SIMPÓSIO BRASILEIRO DE RECURSOS HÍDRICOS

DESEMPENHO DA PSO NO AJUSTE DE MODELO DE ESTIMATIVA DE TEMPERATURA SUPERFICIAL DA ÁGUA DE LAGOS

Carlos Henrique Saldanha Ferrari¹; Juan Martín Bravo¹; David da Motta-Marques¹ & Lúcia Ribeiro Rodrigues¹

Resumo: A temperatura da água regula processos químicos, físicos e biológicos em lagos. Ainda que esteja associada, enquanto parâmetro, à limnologia física, a temperatura da água está também intimamente associada à disponibilidade de oxigênio na coluna d'água e, portanto, à distribuição de espécies aquáticas nos lagos. Embora expressem relevantes informações destes ecossistemas, dados de temperatura da água medidos *in situ* de ambientes límnicos são, muitas vezes, de difícil obtenção. Esse cenário pode ser contornado com a utilização de dados obtidos via sensoriamento remoto, ou a partir de modelos de simulação de temperatura da água, objeto de estudo deste trabalho, que analisou o desempenho da otimização por enxame de partículas - do inglês, *Particle Swarm Optimization* (PSO) - no ajuste do Air2Water, modelo de estimativa da temperatura da água de lagos a partir de séries de temperatura do ar. Foi verificado o desempenho do método de otimização mono-objetivo acoplado ao Air2Water considerando 50, 100, 1000, 2000 e 5000 partículas e duas funções-objetivo (NSE e RMSE). Para a versão com 4 parâmetros do modelo, os resultados mostraram que o desempenho da PSO, mensurado por meio da função objetivo, foi, para a área de estudo aqui utilizada, pouco sensível à quantidade de partículas utilizadas, indicando a possibilidade de ajuste do modelo com um menor número de partículas comparado ao valor *default*, de 2000 partículas. Assim, foi obtido um ganho no tempo computacional que pode chegar a representar uma redução de 30 vezes no tempo de execução do processo de ajuste do Air2Water.

Abstract: Water temperature regulates chemical, physical and biological processes in lakes. Although it is associated, as a parameter, with physical limnology, water temperature is also closely associated with the availability of oxygen in the water column and, therefore, with the distribution of aquatic species in lakes. Whilst they express relevant information from these ecosystems, water temperature data measured *in situ* from limnic environments are often difficult to obtain. This scenario can be circumvented using data obtained via remote sensing, or from water temperature simulation models, the object of study of this work, which analyzed the performance of Particle Swarm Optimization (PSO) in the adjustment of the Air2Water, model of estimating the temperature of the water of the lakes from series of air temperature. The performance of the mono-objective optimization method coupled to Air2Water was verified considering 50, 100, 1000, 2000 and 5000 particles and two objective functions (NSE and RMSE). For the version with 4 parameters of the model, the results showed that the performance of the PSO, measured by the objective function, was, for the study area used here, a little sensitive to the number of particles used, indicating the possibility of adjusting the model with a smaller number of particles compared to the default value, of 2000 particles. Thus, a gain in computational time was obtained that may represent a reduction of 30 times in the execution time of the Air2Water adjustment process.

Palavras-Chave – Limnologia física; PSO; modelo de simulação de temperatura da água.

1) Afiliação: Instituto de Pesquisas Hidráulicas, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Av. Bento Gonçalves, 9500, Agronomia, Porto Alegre, Rio Grande do Sul, Brasil, 91501-970, telefone: (51) 3308-6563, e-mails: carlosh.sferrari@gmail.com e luciarrodrigues@gmail.com

INTRODUÇÃO

Os ambientes límnicos representam, do total de água na Terra, uma pequena parcela de 3% [Collischonn e Dornelles (2015)]. Por outro lado, estão associados a importantes serviços ambientais, encontrando-se, nessa ótica quantitativa, pressionados pela atividade humana e, assim, em condição de vulnerabilidade [Barbosa *et al.* (2019)]. O monitoramento destes corpos d'água é, nesse cenário, de grande interesse e pode ser realizado por meio de parâmetros que expressam suas características físicas, químicas e biológicas. Especificamente para lagos, o parâmetro crítico físico é a temperatura da água, que influencia diretamente os eventos de estratificação, além de reger processos químicos e biológicos nestes ecossistemas [Piccolroaz *et al.* (2013)].

Embora traduzam muitas informações do metabolismo e da dinâmica de um lago na limnologia física, dados *in situ* de temperatura da água são de difícil obtenção [Tavares (2019)]. As causas vão desde o difícil acesso ao local de coleta [Guo *et al.* (2022)] até a complexa operação de estações capazes de mensurar tal parâmetro [Handcock *et al.* (2012)]. Para contornar a escassez de dados desta natureza, técnicas de sensoriamento remoto configuram-se como alternativas, bem como a utilização de modelos que estimam séries de temperatura da água a partir de variáveis que podem ser obtidas mais facilmente, como a temperatura do ar [Piccolroaz *et al.* (2013)].

Neste contexto, destaca-se o Air2Water, modelo de estimativa da temperatura superficial da água de lagos. Uma das vantagens no uso do Air2Water é a necessidade de uma única variável de entrada, a temperatura do ar, principal reguladora da troca de calor junto à superfície de lagos [Livingstone e Padisák (2007)]. Dessa forma, o modelo Air2Water representa uma ferramenta bastante útil, já que dados de temperatura do ar podem ser disponibilizados com alta resolução por modelos climáticos globais em ampla escala de tempo, reconstruídos em período histórico ou projetados em cenários futuros [Piccolroaz *et al.* (2013)].

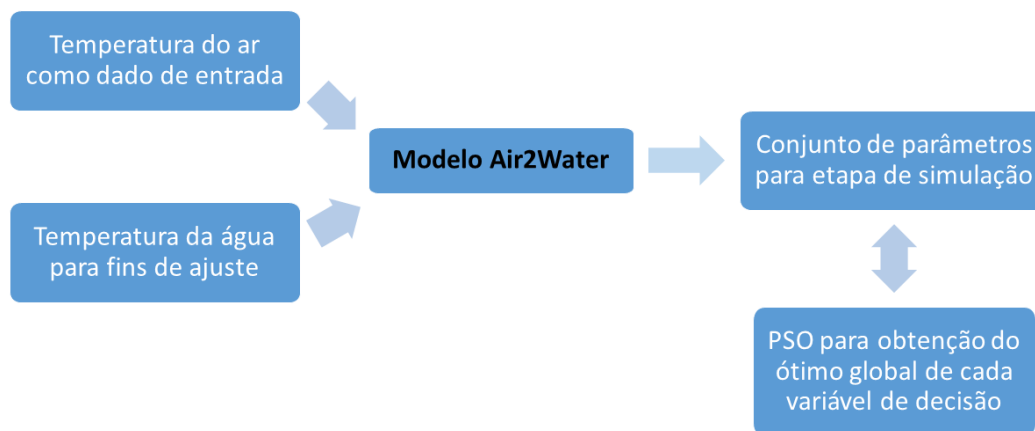
Com o objetivo de tornar ainda mais atrativo o uso do modelo Air2Water na estimativa da temperatura superficial da água, vêm sendo propostas melhorias como a de incremento no número de parâmetros, em relação à versão completa de 8, para representar de forma mais real a simulação dos processos de formação de gelo na superfície de lagos [Guo *et al.* (2022)]. No caso do presente estudo, o intuito é avaliar, para determinadas aplicações, a possibilidade de redução no custo computacional do processo de ajuste do modelo sem efeitos negativos sobre o seu desempenho, aqui mensurado pelos valores de função objetivo e para a versão mais simplificada do Air2Water, de 4 parâmetros, cujos resultados foram validados no artigo de apresentação do modelo [Piccolroaz *et al.* (2013)].

METODOLOGIA

Particle Swarm Optimization (PSO)

O método de otimização acoplado ao Air2Water, modelo utilizado neste estudo, é a otimização por enxame de partículas - do inglês, *Particle Swarm Optimization* (PSO). Por meio da PSO, cuja metodologia é na sequência resumida, o Air2Water obtém as variáveis de decisão a serem utilizadas na etapa subsequente, conforme esquema da Figura 1. No presente estudo, onde os procedimentos de calibração e verificação são considerados como etapa de ajuste, a versão do modelo utilizada foi a mais simples, de quatro parâmetros, pois foram quatro as variáveis de decisão determinadas via PSO.

Figura 1 – Fluxograma da PSO acoplada ao Air2Water junto à etapa de ajuste do modelo.



A expressão “enxame de partículas” está associada ao aprendizado coletivo entre cada partícula do enxame, um dos princípios da PSO [Kennedy e Eberhart (1995)], que pode ser entendido como o compartilhamento de informações entre as soluções candidatas que, em busca do ótimo global, têm a sua velocidade dada, em cada iteração, pela Equação 1. Além do princípio de aprendizado coletivo, associado matematicamente ao coeficiente c_2 , outro parâmetro da PSO é a quantidade de partículas que participam do processo de ajuste do modelo, que será neste estudo avaliado de modo a verificar o desempenho do método de otimização acoplado ao Air2Water.

$$V_{t+1} = w * V_t + c_1 * r_1 * (X_{best(t)} - X_{(t)}) + c_2 * r_2 * (G_{best(t)} - X_{(t)}) \quad (1)$$

Em que:

$V_{(t+1)}$ = velocidade da partícula na nova iteração [comprimento/unidade de tempo];

$V_{(t)}$ = velocidade da partícula na iteração anterior [comprimento/unidade de tempo];

w = coeficiente de inércia;

c_1 : coeficiente de aprendizado individual [comprimento/unidade de tempo²];

c_2 : coeficiente de aprendizado coletivo [comprimento/unidade de tempo²];

r_1 e r_2 : números aleatórios com distribuição uniforme U [0,1);

$X_{best(t)}$ = melhor posição da partícula até a iteração anterior [comprimento];

$X_{(t)}$ = posição da partícula na iteração anterior [comprimento/unidade de tempo];

$G_{best(t)}$ = melhor posição entre as partículas do enxame até a iteração anterior [comprimento].

O coeficiente c_1 associa-se à memória própria de cada solução candidata na busca pelo ótimo global, além do aprendizado coletivo, associado ao c_2 . Ambos os coeficientes, no presente estudo, foram fixados em 2 [Kennedy e Eberhart (1995)], valor que lhes é tipicamente atribuído no método PSO, cujo componente de aleatoriedade é dado pelos números aleatórios r_1 e r_2 , enquanto o de inércia, aqui estabelecido entre 0,4 e 0,9, é expresso junto ao 1º termo da Equação 1. O 2º e 3º termo, por fim, são atualizados a cada iteração da PSO na etapa de ajuste do modelo a partir da nova posição da solução candidata dentro do espaço de busca em relação à melhor posição do grupo e à sua própria.

Área de estudo

O Lago Superior, objeto de teste do Air2Water [Piccolroaz *et al.* (2013)], foi também a área de estudo do presente trabalho para verificar o desempenho da PSO acoplada ao modelo à quantidade de partículas utilizadas em sua etapa de ajuste. Entre os Grandes Lagos da América do Norte, o Lago Superior, ilustrado na Figura 2, é o mais profundo e o de maior área superficial [Piccolroaz (2016)], configurando-se como um ambiente límnico de volume bastante expressivo (12.000 km³).

Figura 2 – Destaque do Lago Superior. Fonte: adaptada de Piccolroaz *et al.* (2013).



Classificado como dimítico quanto ao padrão de estratificação, o Lago Superior mistura-se duas vezes ao ano, quando a estratificação termal enfraquece e a ação do vento sobre a sua superfície é suficientemente forte para haver a mistura total da coluna d'água, cujo valor médio é de 147 metros [Piccolroaz (2016)]. Esse dado de profundidade, embora possa ser utilizado previamente ao ajuste do modelo na estimativa da faixa de variação de cada variável de decisão, não foi empregado no presente estudo dado o intuito de analisar o desempenho da PSO sem uma etapa de pré-processamento.

Ajuste do modelo

A única variável de entrada do Air2Water, temperatura do ar, foi obtida junto à Stannard Rock (STDM4), estação de responsabilidade do Centro Nacional de Dados de Boias [Piccolroaz *et al.* (2013)], que está situada a aproximados 35 metros da superfície do Lago Superior, altura suficiente para não ser danificada quando há formação de gelo nos meses mais frios. Dessa forma, atende-se a um dos requisitos do modelo de não existência de falhas na série de temperatura do ar, diferentemente da série de temperatura superficial da água, onde falhas são admitidas sem comprometimento do seu desempenho, desde que devidamente identificadas juntos aos arquivos auxiliares de processamento.

Além da temperatura do ar como variável de entrada do Air2Water, a temperatura superficial da água é utilizada como balizadora do processo de ajuste do modelo. Neste caso, fez-se uso da série de temperatura da água obtida via sensoriamento remoto junto ao Laboratório de Pesquisa Ambiental dos Grandes Lagos, vinculado à Administração Nacional Oceânica e Atmosférica [Piccolroaz *et al.* (2013)]. A série temporal de temperatura superficial da água tem início e fim compatível com a de temperatura do ar (entre 01/01/1994 e 31/12/2011), com o período de calibração estabelecido nos primeiros 2/3 do intervalo (entre 1994 e 2005) e o de verificação no terço restante (entre 2006 e 2011).

O ajuste do modelo, por sua vez, é mensurado por meio das medidas de desempenho, também conhecidas como função-objetivo. No presente estudo, foram utilizadas duas funções-objetivo: o NSE (*Nash–Sutcliffe Efficiency*) e o RMSE (*Root-mean square error*), que também foram utilizados no artigo de apresentação do Air2Water [Piccolroaz *et al.* (2013)]. Dois conjuntos de procedimentos de ajuste foram executados: i) maximização do NSE, cujo valor máximo é igual a 1, e ii) minimização do RMSE, cujo valor mínimo é igual a zero. No total, 32 procedimentos de ajuste foram executados, com diferentes quantidades de partículas na PSO (50, 100, 1000, 2000 e 5000).

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Inicialmente, serão apresentados e discutidos os resultados do ajuste do modelo Air2Water com o NSE como função-objetivo, pois é uma medida de desempenho amplamente utilizada em aplicações hidrológicas [Piccolroaz *et al.* (2013)]. Os valores médios de NSE para os períodos de calibração e verificação são mostrados na Tabela 1, cuja primeira coluna indica o número de partículas utilizadas pela PSO e, sobrescrita, a quantidade de procedimentos de ajuste. Além disso, são apresentados os tempos médios de processamento em cada cenário para um computador com 2 processadores Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2697 v3 @ 2.60 GHz.

Tabela 1 – Valores médios do NSE e tempo de processamento para cada quantidade de partículas na PSO.

Nº de partículas (PSO)	NSE calibração	NSE verificação	Tempo [min]
50 ⁵	0,95	0,96	1,71
100 ⁵	0,95	0,96	3,34
1000 ⁵	0,95	0,96	34,13
2000 ²	0,95	0,96	67,86
5000 ²	0,95	0,96	161,62

Os valores médios de NSE obtidos mostraram-se iguais ou muito próximos dos obtidos no artigo de apresentação do modelo para o mesmo conjunto de dados e mesma versão do Air2Water: 0,95 para calibração e 0,97 para verificação [Piccolroaz *et al.* (2013)]. Dado que estes valores de função objetivo associam-se ao desempenho da PSO no ajuste do modelo, constata-se a manutenção da precisão do Air2Water em simular a temperatura superficial da água do lago em estudo a partir de temperatura do ar, mesmo com a redução do número de partículas utilizadas pela PSO. Ademais, entre o cenário com 50 partículas e o com 2000 (*default* do Air2Water), o ajuste do modelo ocorre num tempo de processamento praticamente 30 vezes menor, otimizando o custo computacional.

Além da igualdade dos resultados durante a calibração e a verificação para cada cenário, os valores médios de NSE muito próximos mesmo com a redução no número de partículas utilizadas pela PSO estão associados aos valores iguais para as variáveis de decisão na etapa de ajuste do modelo para cada cenário. Dessa forma, 50 partículas foram suficientes para obter o mesmo conjunto de parâmetros otimizados quanto utilizado o NSE como medida de desempenho para este estudo de caso.

Na sequência, apresenta-se e discute-se valores de RMSE como medida de desempenho da PSO no ajuste do Air2Water. Na Tabela 2, são mostrados os valores médios de RMSE para os períodos de calibração e verificação, o tempo médio de processamento e, sobrescrita junto à primeira coluna, a quantidade de procedimentos de ajuste em cada cenário, que corresponde ao número de partículas utilizadas pela PSO. Para a medida de desempenho agora considerada, expressa na mesma unidade

que a variável a ser posteriormente simulada (neste caso, em °C), busca-se a minimização do RMSE entre os dados observados e simulados de temperatura superficial da água [Piccolroaz *et al.* (2018)].

Tabela 2 – Valores médios do RMSE e tempo de processamento para cada quantidade de partículas na PSO.

Nº de partículas (PSO)	RMSE calibração [°C]	RMSE verificação [°C]	Tempo [min]
50 ³	1,17	1,06	1,82
100 ³	1,17	1,06	3,29
1000 ³	1,17	1,06	33,29
2000 ²	1,17	1,06	64,60
5000 ²	1,17	1,06	163,81

Os valores de RMSE obtidos mostraram-se muito próximos dos obtidos no artigo de apresentação do modelo para o mesmo conjunto de dados e mesma versão do Air2Water: 1,21 para calibração e 1,08 para verificação [Piccolroaz *et al.* (2013)]. Associados ao desempenho da PSO no ajuste do modelo, estes valores de função objetivo indicam inclusive uma melhora na precisão do Air2Water em simular a temperatura superficial da água do Lago Superior, a partir de temperatura do ar, visto que menores valores de RMSE representam menores erros na simulação dos dados. Assim como se observou anteriormente com o NSE como medida de desempenho, houve manutenção nos valores de RMSE mesmo com a redução da quantidade de partículas utilizadas pela PSO.

Na Figura 3 e Figura 4, apresenta-se o ajuste entre temperatura superficial da água observada e simulada a partir de temperatura do ar pelo Air2Water entre os períodos de calibração e verificação. Graficamente, é possível observar, para ambos os períodos, a proximidade do ajuste para os valores de temperatura superficial da água, além de uma pequena subestimação das altas temperaturas, já observada na aplicação do modelo junto à Lagoa Mangueira [Tavares *et al.* (2019)], uma lagoa rasa costeira subtropical austral. Acerca das baixas temperaturas, especialmente no período de verificação, constata-se novamente uma subestimação dos valores de temperatura superficial da água.

Figura 3 – Etapa de ajuste do modelo Air2Water para o período de calibração (1994 a 2005).

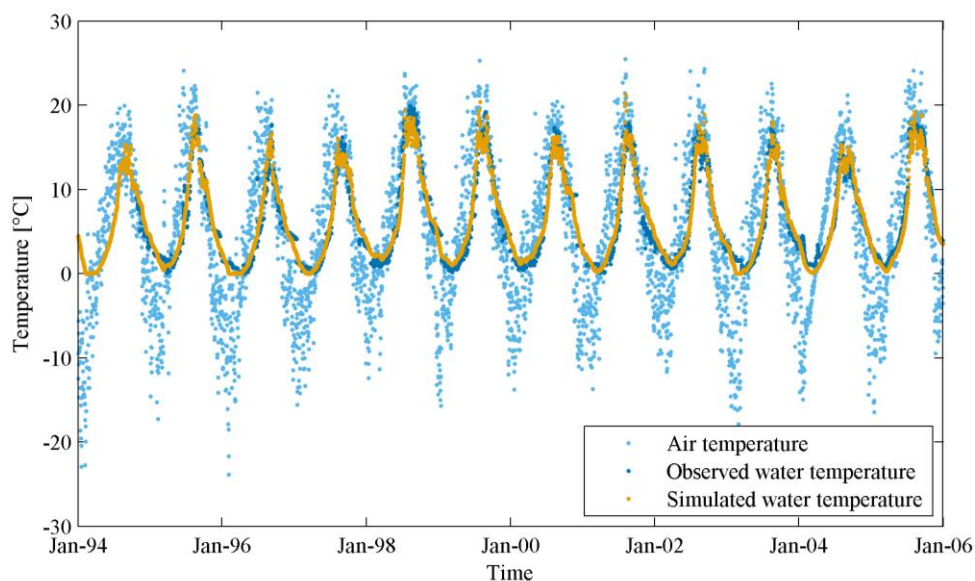
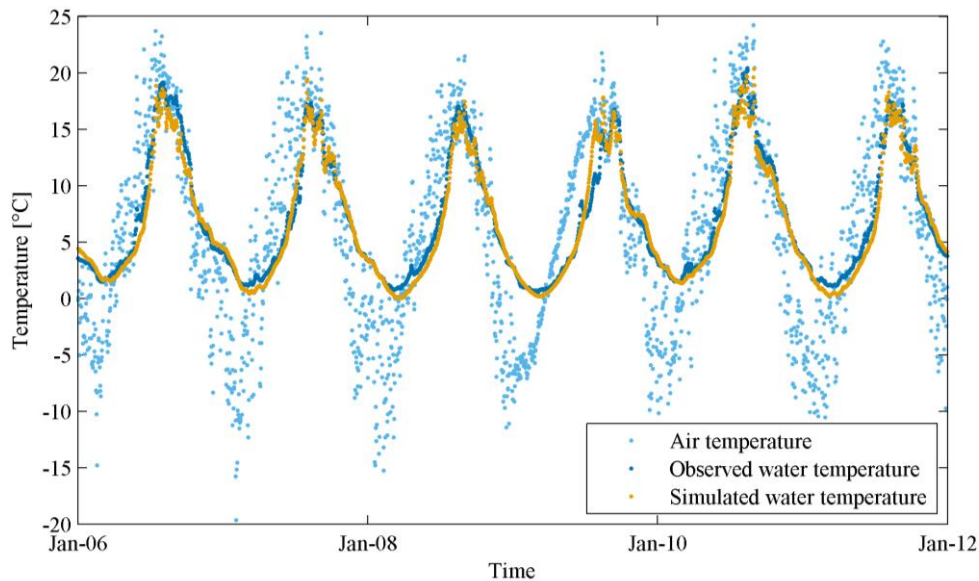


Figura 4 – Etapa de ajuste do modelo Air2Water para o período de verificação (2006 a 2011).



Com destaque agora para o período de calibração na etapa de ajuste do modelo, apresenta-se a convergência das soluções candidatas na PSO em torno do ótimo global para 50 partículas (Figura 5) e para 5000 partículas (Figura 6). Mesmo com menos partículas utilizadas pela PSO, obtém-se o mesmo ótimo global (em laranja) para cada um dos quatro parâmetros da versão mais simples do Air2Water, ratificando a ideia de que, no presente estudo, a redução no número de partículas da PSO não implicou em piora nos valores de função-objetivo, trazendo como benefício menores custos computacionais e tempos médios de processamento na etapa de ajuste do modelo.

Figura 5 – Convergência de 50 soluções candidatas da PSO na etapa de ajuste do modelo.

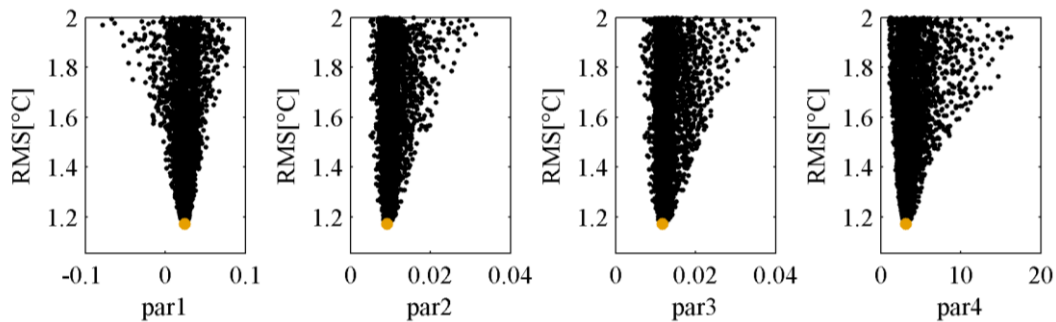
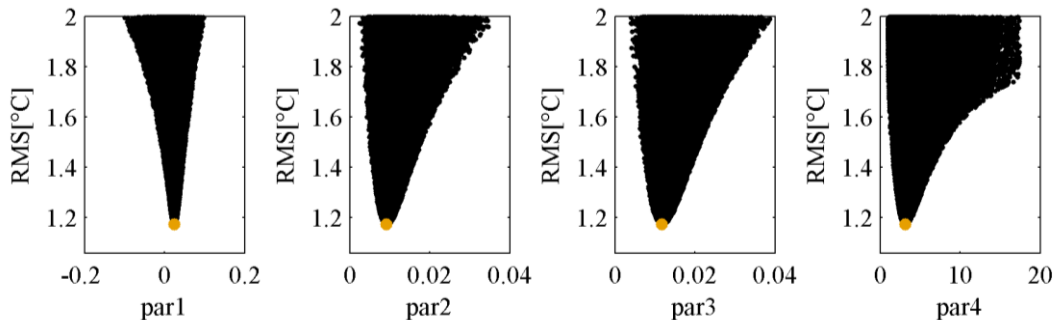


Figura 6 – Convergência de 5000 soluções candidatas da PSO na etapa de ajuste do modelo.



CONCLUSÃO

Na análise da redução da quantidade de partículas utilizadas pela PSO, método de otimização utilizado para esta aplicação, não foram identificados impactos negativos no desempenho do ajuste do modelo, mensurado pelas medidas de desempenho aqui apresentadas e discutidas. Assim, a estimativa dos parâmetros para simular a temperatura superficial da água do lago estudado se manteve bastante satisfatória mesmo com menos partículas utilizadas pela PSO. Em conjunto, foram reduzidos os custos computacionais e os tempos médios de ajuste do modelo, tornando-se ainda mais atrativo.

Além da possibilidade aqui apresentada e discutida para o uso do Air2Water, é possível ainda a sua utilização na estimativa da temperatura superficial de lagos com diferentes características morfológicas [Guo *et al.* (2022)], outra vantagem que o torna particularmente atraente. Com isso, para trabalhos posteriores, recomenda-se a aplicação deste modelo para estimar, em período histórico e em projeções futuras, a temperatura superficial de lagoas rasas costeiras e subtropicais, vulneráveis às mudanças climáticas decorrentes do aquecimento global [(Wieliczko *et al.* (2021))].

AGRADECIMENTOS ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), pelo financiamento; a Sebastião Piccolroaz, Marco Toffolon e Bruno Majone, pela disponibilização gratuita do modelo Air2Water; e ao Laboratório de Ecotecnologia e Limnologia Aplicada (LELA/IPH-UFRGS), pelo apoio científico e revisão deste trabalho.

REFERÊNCIAS

- BARBOSA, C. C. F.; NOVO, E. M. L. d. M.; MARTINS, V. S. (2019). *Introdução ao Sensoriamento Remoto de Sistemas Aquáticos: princípios e aplicações*. Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE), São José dos Campos-SP, 161p.
- COLLISCHONN, W.; DORNELLES, F. (2015). *Hidrologia para Ciências Ambientais*. Associação Brasileira de Recursos Hídricos (ABRH), Porto Alegre-RS, 350p.
- GUO, L.; ZENG, H.; WU, Y.; FAN, L.; WEN, M.; LI, J.; ZHANG, F.; ZHU, L.; ZHANG, B. (2022). "An integrated dataset of daily lake surface water temperature over the Tibetan Plateau". *Earth System Science Data*, 14, pp. 3411–3422.
- HANDCOCK, R. N.; TORGERSEN, C E; CHERKAUER, K A; GILLESPIE, A R; TOCKNER, K; FAUX, R N; TAN, J. (2012). "Thermal Infrared Remote Sensing of Water Temperature in Riverine Landscapes". *Fluvial Remote Sensing for Science and Management*, 1, pp 85-113.
- KENNEDY, J.; EBERHART, R. (1995). "Particle Swarm Optimization" in Anais da Conferência sobre Redes Neurais do Institute of Electrical and Electronics Engineers (IEEE), Perth-WA (Australia), 1995, pp. 1942-1948.
- LIVINGSTONE, D. M.; PADISÁK, J. (2007). "Large-scale coherence in the response of lake surface-water temperatures to synoptic-scale climate forcing during summer". *Limnology and Oceanography*, 52 (2), pp. 896-902.
- PICCOLROAZ, S. (2016). "Prediction of lake surface temperature using the air2water model: guidelines, challenges, and future perspectives". *Advances in Oceanography and Limnology*, 7(1), pp. 36-50.
- PICCOLROAZ, S.; HEALEY, N. C.; LENTERS, J. D.; SCHLADOW, S. G.; HOOK, S. J.; SAHOO, G. B.; TOFFOLON, M. (2018). "On the predictability of lake surface temperature using air temperature in a changing climate: A case study for Lake Tahoe (U.S.A.)". *Limnology and Oceanography*, 63, pp. 243–261.

PICCOLROAZ, S., TOFFOLON, M.; MAJONE, B. (2013). "A simple lumped model to convert air temperature into surface water temperature in lakes". *Hydrology and Earth System Sciences*, 17, pp 3323-3338.

TAVARES, M. H. (2019). "Estimativas da temperatura superficial da água por sensores remotos: acurácia e aplicabilidade com modelos de temperatura". Dissertação apresentada ao Programa de Pós Graduação em Recursos Hídricos e Saneamento Ambiental da Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Porto Alegre-RS, 102p.

TAVARES, M. H.; MARQUES, D. M.; FRAGOSO JR., C. R. (2019). "Combinando modelo de temperatura da água e sensoriamento remoto para estimar o efeito da mudança climática sobre a temperatura da lagoa Mangueira-RS" in *Anais do XXIII Simpósio Brasileiro de Recursos Hídricos*, Foz do Iguaçu-PR, Nov 2019.

WIELICZKO, A. R.; CROSSETTI, L. O.; CAVALCANTI, J. R.; HESSEL, M. S.; MARQUES, D. M.; RODRIGUES, L. R. (2021). "Meteorological drivers and ENSO influence on phytoplankton biomass dynamics in a shallow subtropical lake". *Springer - Environmental Monitoring and Assessment*, 193, 536p.