

METAMODELO DE UM SISTEMA DE DISTRIBUIÇÃO DE ÁGUA BASEADO EM REDES NEURAIS FISICAMENTE INFORMADAS

Pedro Diaz¹; Jordana Alaggio², & Bruno Brentan³ & Gustavo Meirelles⁴

Abstract: Given the increasing complexity of Water Distribution Networks (WDNs) and the limitations presented in conceptual models, such as computational cost and limited network knowledge, alternative computational modeling approaches emerge, aiming to monitor this resource in a timely manner. This work presents a metamodel based on Physics-Informed Neural Networks (PINNs) developed for this purpose, generalizing the network's behavior through patterns encapsulated in the data, like a common metamodel, but also enhancing its pressure and flow estimation capabilities by internalizing the physical concepts that govern these phenomena, based on the mass and energy conservation equations. The optimal model configuration was studied by comparing the results of different database sizes, sensor configurations, and the influence of the physics-informed portion, using the Modena – Italy network for tests. Once the optimal configuration was defined, a failure simulation study was also conducted on the sensors that provide the model's inputs, mapping the impact on its functionality. Results proved to be more satisfactory when both learning approaches work equally, demonstrating the benefits of the adopted physical approach. The model's pressure predictions were very sensitive to sensor failure scenarios, considerably decreasing their accuracy. In contrast, this same behavior was not repeated for the flow predictions

Resumo: Frente ao aumento da complexidade das Redes de distribuição de água (RDAs) e as limitações apresentadas em modelos conceituais, como custo computacional e conhecimento limitado da rede, modelagens computacionais alternativas surgem, objetivando monitorar em tempo hábil esse recurso. O trabalho apresenta um metamodelo baseado em Redes Neurais Fisicamente Informadas (PINNs) desenvolvido para esse fim, generalizando o comportamento da rede por meio dos padrões encapsulados nos dados, como um metamodelo comum, mas também aumentando suas capacidades de estimativa de pressão e vazão internalizando os conceitos físicos que regem esses fenômenos, com base nas equações de conservação de massa e energia. A configuração ótima do modelo foi estudada comparando os resultados de diferentes tamanhos de banco de dados, configurações de sensores e influência da porção fisicamente informada utilizando a rede Modena – Itália em testes. Definida a configuração ótima, realiza-se também um estudo de simulação de falhas nos sensores que fornecem as entradas do modelo, mapeando o impacto no funcionamento do modelo. Resultados demonstram-se mais satisfatórios quando ambos os aprendizados trabalham igualmente, demonstrando os benefícios da abordagem física adotada. As previsões de pressão do modelo apresentaram-se muito sensíveis a cenários de falha nos sensores, diminuindo consideravelmente a sua precisão. Em contraponto, esse mesmo comportamento não se repetiu para as previsões de vazão.

Palavras-Chave – Redes de distribuição de água, Metamodelagem fisicamente informada, Redes Neurais.

¹ Afiliação: Departamento de Engenharia Hidráulica e Recursos Hídricos (EHR), Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG), pedrov.diaz03@gmail.com

² Afiliação: Departamento de Engenharia Hidráulica e Recursos Hídricos (EHR), Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG), jordana.alaggio@gmail.com.

Afiliação: Departamento de Engenharia Hidráulica e Recursos Hídricos (EHR), Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG), brentan@ehr.ufmg.br.

INTRODUÇÃO

Redes de distribuição de água (RDAs) são infraestruturas fundamentais no meio urbano que objetivam fornecer uma distribuição eficiente e segura de água para a população. Visto a importância da água para a vida e que o crescimento das redes de distribuição acompanha o desenvolvimento urbano, resultando em redes cada vez maiores e mais complexas, tornou-se desafiador monitorar esse recurso de maneira mais precisa e em tempo hábil.

Até o presente, a utilização de modelos conceituais para estimar o estado das RDAs continua sendo predominante e apresentando avanços. Porém, limitações quanto ao recurso computacional necessário para a execução [Broad (2012)], à calibração de parâmetros da rede [Lima (2018)], em conjunto com o conhecimento limitado das redes estudadas, estimularam modelos alternativos a serem desenvolvidos.

Tendo esse contexto em mente, emerge a metamodelagem hidráulica como uma abordagem aplicável na solução das limitações apresentadas. Um metamodelo é uma técnica de modelagem computacional em que algoritmos de mapeamento de espaços hiper-dimensionais aproximam padrões encapsulados nos dados de medição e metadados fornecidos, assim sendo capaz de generalizar o comportamento de uma RDA. Essa abordagem já vem sendo aplicada, como é o caso [Broad (2012)], que utiliza essa técnica para estimar vazão e decaimento de cloro em um sistema de distribuição de água (SDA).

O Metamodelo apresentado neste trabalho baseia-se em uma MLP (Multi-Layer Perceptrons) que objetiva estimar os valores de pressão e vazão nos nós e tubulações de uma RDA, respectivamente, utilizando como as entradas do modelo valores de vazões e pressões obtidas em sensores que monitoram determinados elementos da rede. Além disso, como forma de melhorar ainda mais as previsões, introduz-se a abordagem de redes neurais fisicamente informadas (PINNs, do inglês Physics-Informed Neural Network), que adicionam os princípios físicos ao processo de aprendizado, permitindo que o modelo também internalize os fenômenos físicos que envolvem os padrões identificados pelo metamodelo.

Uma vez que o modelo é completamente dependente das informações monitoradas para o seu funcionamento, espera-se que a falta de acesso a um ou mais sensores acarrete perda de precisão, uma vez que o metamodelo não funcionará em suas condições estabelecidas no desenvolvimento. Tendo esse cenário em mente, é conduzido também um estudo de simulação de falhas nos sensores utilizados como entradas do modelo, sendo possível definir o comportamento do modelo e seus impactos frente a um cenário onde nem todos os sensores fornecem as informações necessárias. O estudo é conduzido informando como 0 o valor no sensor a ser falhado, realizando esse procedimento para todos os sensores individualmente com a finalidade de determinar se há sensores que causam maior impacto na precisão dos resultados e seus motivos para tal.

METODOLOGIA

A PINN desenvolvida funciona em duas etapas, a primeira consiste no processo de treinamento, onde a rede neural assimila o comportamento da RDA através dos padrões encontrados no banco de dados e, através das equações de conservação de massa e energia, as quais captam os fenômenos físicos envolvidos no processo. A partir desse treinamento, a segunda etapa é o momento em que o modelo realiza as estimativas, com base em informações de nós e tubulações monitoradas por sensores. Os códigos desenvolvidos neste trabalho foram escritos na linguagem Python, com o auxílio da biblioteca PyTorch [Rozemberczki (2021)] para o algoritmo de aprendizado de máquina.

Na etapa de treinamento, uma função de perda acerca dos padrões identificados e dos fenômenos físicos são definidos pelas equações (1) e (2) respectivamente:

$$l_{dados} = \left(\sum_{n \in N} \frac{P_n - \hat{P}_n}{\mu_p} \right)^2 + \left(\sum_{e \in E} \frac{Q_n - \hat{Q}_n}{\mu_Q} \right)^2 \quad (1)$$

$$l_{físico} = \left(\sum_{n \in N} \frac{r_{1n}}{\mu_Q} \right)^2 + \left(\sum_{e \in E} \frac{r_{2e}}{\mu_P} \right)^2 \quad (2)$$

sendo N o número de nós não-monitorados, P_n a pressão estimada pelo modelo, \hat{P}_n a pressão simulada conhecida para o mesmo nó n e μ_p a pressão média das pressões não-monitoradas. O mesmo raciocínio é aplicado para a vazão Q na mesma equação.

O treinamento da rede neural funciona como um modelo baseado em dados comum, otimizando os pesos das conexões entre os neurônios da rede neural para melhor assimilação dos padrões encapsulados nos dados pela rede neural, assim tornando possível estimar as saídas de acordo com as entradas. A adição da abordagem física nessa etapa garante a conformidade com a realidade nas previsões do modelo, evitando que estimativas sem sentido físico sejam retornadas. A função perda do aprendizado físico é mensurada através dos pesos r_1 e r_2 , que adaptam as equações de conservação de energia e massa, respectivamente para o contexto do modelo.

Para controlar a influência do erro associado aos dados e à porção fisicamente informada, define-se então uma função de perda global (3), que realiza a soma de ambas as funções-perda multiplicada aos respectivos pesos associados a cada função.

$$l_{global} = l_{dados} \cdot w_1 + l_{física} \cdot w_2 \quad (3)$$

A avaliação do modelo é realizada em termos do coeficiente de determinação (R^2) (6) e o erro absoluto médio (7):

$$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^{N_s} (y_{i,x} - \hat{y}_{i,x})^2}{\sum_{i=1}^n (y_{i,x} - \bar{y})^2} \quad (4)$$

$$MAE = \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^n \frac{|y_{i,x} - \hat{y}_{i,x}|}{\mu_Y} \quad (5)$$

sendo $y_{i,x}$ o valor real de pressão ou vazão na amostra i no elemento x, $\hat{y}_{i,x}$ o valor estimado e \bar{y} a média dos valores conhecidos.

Essas métricas são utilizadas na definição das características do modelo, como número de camadas e número de neurônios. Além disso, guiam também um estudo de falhas nos sensores, sendo possível avaliar os impactos no modelo em caso de falha em um dos sensores que fornece as entradas para o seu funcionamento.

O metamodelo utiliza tanto em seu treinamento quanto em sua validação um banco de dados composto de simulações hidráulicas realizados pelo software EPANET, fornecendo valores horários em um período de dois anos, sendo o primeiro ano utilizado na validação do modelo e o segundo em seu treinamento. A demanda em cada nó varia aleatoriamente entre 50% e 150%, [Andrea (2025)] conferindo uma incerteza que melhora a assimilação do modelo quanto ao comportamento da RDA.

RESULTADOS

A RDA de referência deste estudo foi a de Modena – Itália, uma rede já utilizada anteriormente em aplicações de metamodelagem composta por 268 nós e 317 tubulações. As configurações de sensores utilizadas nos testes do modelo, onde P indica o número de sensores de pressão e F de vazão, foram: 5P+4F, 10P+6F, 15P+8F, 20P+10F, aliados a um banco de dados composto por 50.000 amostras geradas por simulações hidráulicas. O objetivo do estudo é definir uma configuração ótima

de sensores e um tamanho ideal para esse banco de dados onde o modelo atinja os melhores resultados, indicados pelas métricas de erro (4) e (5).

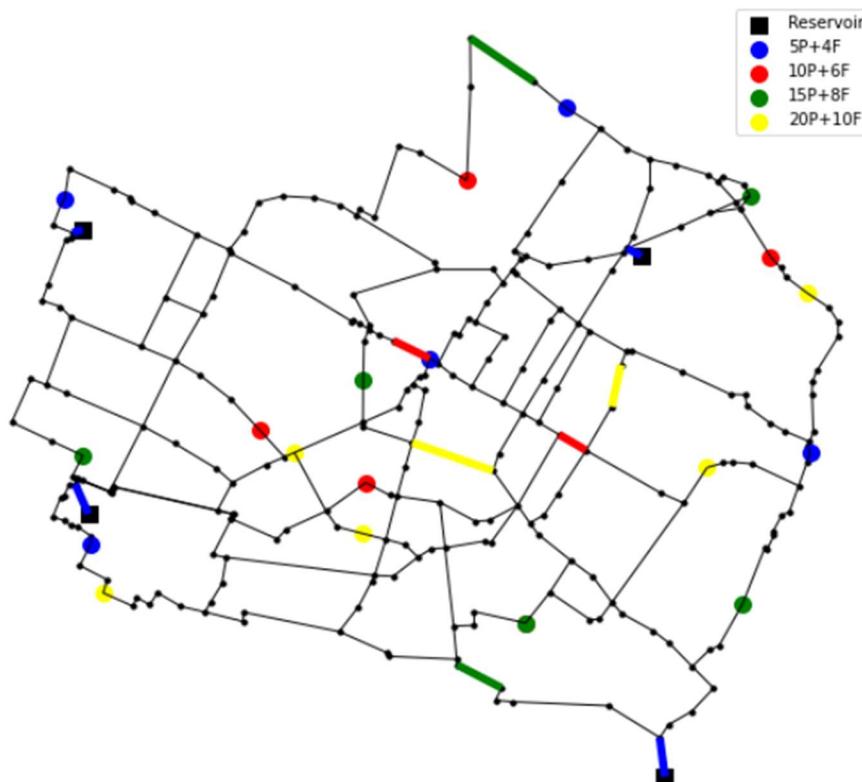
Primeiramente, estudou-se a influência do tamanho do banco de dados na performance do modelo. Os resultados obtidos para diferentes tamanhos estão dispostos na tabela 1, considerando neste estudo a configuração 5P+4F. Os erros são calculados separadamente para pressão (P), vazão (Q) e ambos, assim podendo se ter uma análise mais abrangente da distribuição dos erros.

Tabela 1 – Efeito do tamanho do banco de dados na performance do modelo.

Quantidade	Camadas	Neurônios	MAPE (P)	NSE (P)	MAPE (Q)	NSE (Q)	MAPE (P,Q)
10.000	4	512	2,48%	0,828	3,41%	0,994	2,95%
20.000	2	384	2,98%	0,859	3,20%	0,992	2,99%
30.000	3	512	2,80%	0,753	3,25%	0,994	3,02%
40.000	5	256	3,16%	0,764	3,64%	0,993	3,40%

Analisando os dados dispostos na tabela, define-se 10.000 como o melhor tamanho, tendo em vista a melhor métrica geral de erro MAPE(P, Q) (2,95%). A performance mais adequada ser do menor tamanho se deve a diferentes fontes de erros que bancos de dados maiores podem oferecer, como redundância em dados, que não necessariamente melhora a capacidade do modelo e sua habilidade de generalizar o comportamento da RDA, e um aumento na complexidade da etapa de treinamento, tornando insuficiente a capacidade do modelo para o fim desejado.

Imagem 1 – Topologia da RDA Modena e posicionamento dos sensores em diferentes configurações.



Os resultados para as diferentes configurações de sensores estão dispostos na tabela 2 e suas respectivas posições estão representadas na imagem 1. Em geral, a mudança nas configurações de

sensores pouco alterou as estimativas de vazão. Porém, as estimativas de pressão apresentaram maior dispersão nos erros ao utilizar-se de mais sensores. Sendo assim, novamente a menor configuração (5P+4F) se mostrou a mais eficiente, valendo ressaltar que ainda sim diferentes configurações de sensores obtiveram resultados parecidos

Tabela 2 – Efeito de diferentes configurações de sensores na performance do modelo.

Config. Sensores	Camadas	Neurônios	MAPE (P)	NSE (P)	MAPE (Q)	NSE (Q)	MAPE (P,Q)
5P+4F	4	512	2,48%	0,828	3,41%	0,994	2,95%
10P+6F	5	512	2,63%	0,832	3,62%	0,990	3,13%
15P+8F	2	32	2,87%	0,689	3,19%	0,994	3,03%
20P+10F	5	384	3,10%	0,642	3,62%	0,990	3,36%

Finalizando a etapa de parametrização do modelo, analisa-se então a efetividade da porção fisicamente informada, atribuindo arbitrariamente diferentes pesos para a equação (3). Os pesos atribuídos e seus respectivos efeitos estão dispostos na tabela 3.

Tabela 3 – Influência do aprendizado físico frente a assimilação de dados.

Pesos				MAPE	NSE	MAPE	NSE	Médio		
W1	W2	Camadas	Neurônios	P	P	Q	Q	MAPE	R1	R2
1	0	5	512	5,47%	0,768	4,17%	0,988	4,82%	3,03	0,84
1	0,5	6	256	2,63%	0,829	11,58%	0,993	7,11%	3,01	0,12
1	1	4	512	2,48%	0,828	3,41%	0,994	2,95%	2,88	0,08
1	2	4	512	2,64%	0,829	13,07%	0,990	7,85%	3,03	0,15
1	4	3	256	2,68%	0,828	13,07%	0,990	7,87%	3,04	0,19
1	16	4	512	2,78%	0,816	13,07%	0,990	7,92%	3,05	0,22
0	1	6	512	8,40%	0,001	59,60%	0,761	33,99%	3,08	0,39

Observando os resultados da tabela 3, percebe-se que o modelo atua melhor quando ambos os pesos são iguais, uma vez que não há desbalanceamento nos pesos e as escalas estão normalizadas. Além disso, aumentar o peso físico em relação ao dos dados não resulta em uma melhora nas previsões, demonstrando como ambos os treinamentos são igualmente cruciais para o modelo funcionar.

Definida a configuração ótima do modelo através dos estudos descritos anteriormente, realiza-se também simulações de falha nos sensores, simulando individualmente uma falha nos nove sensores definidos. A tabela 4 contém os resultados obtidos, indicando o sensor defeituoso e os resultados obtidos pelo modelo. Os sensores de 0 a 4 são sensores de pressão e de 5 a 8 vazão.

Tabela 4 – Simulação de falhas nos sensores.

sensor	0	1	2	3	4	5	6	7	8
R ² pressão (m)	-18,95	-11,01	-10,64	-6,46	-5,11	-4,76	-36,47	-0,03	0,01
R ² vazão (L/s)	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99	0,31	0,99	0,99
MAE pressão (m)	18,11	14,03	13,83	11,03	9,98	8,96	19,88	3,72	2,95

MAE vazão (L/s)	0,32	0,28	0,29	0,27	0,33	0,33	3,67	0,23	0,46
--------------------	------	------	------	------	------	------	------	------	------

Observa-se que a falha em sensores de pressão resultou em um aumento significativo nas métricas de pressão, o que por outro lado gerou pouca alteração nas previsões de vazão, que permanecem estáveis a valores próximos de 0,99, indicando resultados extremamente precisos ao passo que o R2 indica maior precisão quando tende a 1. Esses resultados são consistentes com os obtidos nas diferentes configurações de sensores, uma vez que a mudança na configuração dos sensores acarreta perda de precisão na capacidade de estimar pressão, no caso do preenchimento de falhas uma perda bem expressiva, enquanto para vazão esse comportamento não é observado. Além disso, vale ressaltar que esse comportamento é muito similar ao que ocorreu no estudo da configuração de sensores, onde diferentes configurações alteravam muito a pressão e pouco a vazão. As falhas em sensores de vazão não geraram grandes alterações, exceto para a falha no sensor 6.

CONCLUSÕES

O modelo desenvolvido neste trabalho apresenta uma nova perspectiva quanto a modelagem computacional para monitoramento de RDAs, diferenciando-se dos amplamente utilizados modelos conceituais e de metamodelos completamente embasados em dados. A adição do entendimento físico no processo de treinamento garante que a máquina internalize precisamente o comportamento da RDA, entendendo relações hidráulicas complexas por meio de simulações. Esse fato oferece uma melhora significativa na eficiência computacional, interpretabilidade dos resultados, menor dependência da quantidade de dados e ausenta-se da necessidade de calibração frequente, uma vez que após treinado o modelo não realiza simulações hidráulicas, apenas utiliza-se dos dados de sensores monitorados em tempo real. Além disso, essa adição do aprendizado físico no treinamento do modelo também se demonstrou crucial na precisão do modelo, uma vez que os resultados apresentados para o modelo puramente embasado em dados ($w_2 = 0$) são consideravelmente menos precisos do que os fisicamente informados.

Quanto aos sensores, observa-se que independente da configuração ou da presença de falhas em alguns sensores de pressão o modelo permanece dispersando muito pouco quanto aos resultados de vazão, algo que não se repete nas previsões de pressão.

REFERÊNCIAS

- ROZEMBERCZKI, B.; SCHERER, P.; HE, Y.; PANAGOPOULOS, G.; RIEDEL, A.; ASTEFANOAEI, M.; KISS, O.; BERES, F.; LÓPEZ, G.; COLLIGNON, N.; SARKAR, R. (2021) "PyTorch Geometric Temporal: Spatiotemporal Signal Processing with Neural Machine Learning Models".
- BROAD, D.; DANDY, G.; MAIER, H. (2012). "A Metamodeling Approach to Water Distribution System Optimization".
- BROAD, D.; DANDY, G.; MAIER, H. (2005). "Water Distribution System Optimization Using Metamodels".
- ZANFREI, A.; MENAPACE, A.; BRENTAN, B.; SITZENFREI, R.; HERRERA, M. (2023). "Shall we always use hydraulic models? A graph neural network metamodel for water system calibration

"an uncertainty assessment".

LIMA, G.; BRENTAN, B.; MANZI, D.; LUVIZOTTO, E. (2017). *"Metamodel utilizing artificial neural networks for near real-time estimation of nodal pressure in water distribution systems"*.

MENAPACE, A.; ZANFREI, A.; CAETANO, J.; COVAS, D.; BRENTAN, B. (2025). *"Opening the Black Box of metamodeling for Water Distribution Systems: A Physics-Informed Approach"*.

AGRADECIMENTO à Fapemig pelo financiamento à participação no congresso sob processo número PCE-00429-25.