PREVISÃO DA DISTRIBUIÇÃO DE TAMANHO DE GOTAS EM DISPERSÃO SUBMARINA DE ÓLEO UTILIZANDO REDES NEURAIS ARTIFICIAIS

Nathan Wilhelms, Vinicius Czarnobay, Luiz Adolfo Hegele Junior

INTRODUÇÃO

Em vazamentos submarinos de óleo, técnicas de dispersão vêm sendo estudadas para reduzir o tamanho das gotículas liberadas e aumentar seu tempo de chegada à superfície, favorecendo processos de degradação natural do óleo e possibilitando operações de contingência com mais segurança. Na injeção submarina de dispersante (SSDI, do inglês *subsea dispersant injection*), dispersantes químicos são aplicados, enquanto na dispersão mecânica submarina (SSMD, de *subsea mechanical dispersion*) a fragmentação ocorre pelo jateamento de água sobre a liberação. Qual das técnicas funciona melhor depende do óleo. No entanto, essa avaliação exige ensaios experimentais, lentos e custosos. Para contornar a limitação, este trabalho desenvolve, otimiza e valida um modelo de rede neural que, com dados de um ensaio laboratorial de rotina e da configuração de liberação, prevê a distribuição completa de tamanho de gotículas de cada técnica e as ordena por eficácia.

DESENVOLVIMENTO

Os dados utilizados no treinamento vêm de ensaios realizados no tanque de ondas (*Wave Basin*) do SINTEF Ocean: 10 óleos, cada um testado em 3 configurações de vazamento e 6 condições de tratamento (sem tratamento e variações de SSDI e SSMD), somando 180 experimentos. Posteriormente, a base foi ampliada com mais 5 óleos cedidos pelos autores de Brandvik et al. (2023), conferidos contra os valores publicados (diferença abaixo de 0,8%). O resultado de cada experimento é uma distribuição do volume de óleo em 52 classes de tamanho de gotículas, da qual se extrai o d_{50}, diâmetro abaixo do qual está metade do volume de óleo. Cada óleo em cada configuração forma um cenário de comparação entre técnicas, somando 35 cenários e 216 amostras para treinamento no total.

Na modelagem, foram usados 13 atributos de entrada: propriedades do óleo (densidade, ponto de fluidez, teores de cera e asfaltenos, viscosidade a 13°C) e a configuração do ensaio (técnica aplicada, diâmetro do bocal, presença de gás e tensão interfacial). O modelo é uma rede neural *feedforward*, implementada na biblioteca PyTorch (Paszke et al., 2019), com duas camadas ocultas de 64 neurônios cada, função de ativação ReLU e *dropout* após a primeira camada, que desliga neurônios aleatoriamente no treino para evitar memorização. A camada de saída (*softmax*) produz 52 valores não negativos que somam 1 (uma distribuição válida). A função de perda é a divergência de Kullback–Leibler, que compara a distribuição prevista com a medida. O otimizador é o Adam (taxa de aprendizado de 10^{-3}), com decaimento de pesos L2 de 10^{-4}, lotes de 16 amostras e 400 épocas. Esses hiperparâmetros foram selecionados por busca em grade (64 ou 128 neurônios, *dropout* de 0,20 ou 0,35, decaimento L2 ligado ou desligado), com cada combinação avaliada pela validação descrita a seguir. Como cada treino parte de pesos iniciais sorteados, a previsão final é a média de cinco treinos, o que a torna mais estável.

A avaliação foi por validação cruzada *leave-one-out*: cada um dos 15 óleos é deixado de fora do treino e previsto por um modelo que nunca o viu, como aconteceria com um óleo novo. A métrica é o log R^2 do d_{50}, calculado sobre o logaritmo do diâmetro, que vale 1 para uma previsão perfeita e 0 para uma que apenas repete a média. Por usar o logaritmo, mede o erro em proporção: errar 20 µm em uma gotícula de 100 µm pesa o mesmo que errar 200 µm em uma

de 1 mm. Outras abordagens, como redes mais profundas, outras funções de perda e atributos adicionais, foram testadas, porém não superaram o modelo final, e arquiteturas especializadas, como redes informadas pela física (PINN) e operadores neurais, não se aplicam a estes dados. O modelo foi ainda comparado, sob a mesma validação, a cinco métodos de referência: a média global; a média de cada técnica, que ignora as propriedades do óleo; regressão *ridge*; floresta aleatória; e *gradient boosting* (Tabela 1).

RESULTADOS

Em óleos que nunca viu, o modelo prevê o d_{50} com log R^2 de 0,85, e metade das previsões erra menos de 21%. Além do diâmetro, prevê a distribuição inteira e o efeito de cada tratamento: na Figura 1a, reproduz o deslocamento para diâmetros menores quando o óleo é tratado, com o d_{50} medido caindo de 2,2 mm sem tratamento para 170 µm com SSDI e 110 µm com SSMD, contra 1,7 mm, 200 µm e 150 µm previstos.

A comparação mais justa é com a correlação de Weber modificada (Johansen; Brandvik; Farooq, 2013), equação semiempírica usada na engenharia para estimar o d_{50} e disponível apenas para os 180 ensaios dos 10 óleos originais. Nesses ensaios, a correlação atinge log R^2 de 0,66, mesmo com coeficientes ajustados aos próprios dados, enquanto o modelo atinge 0,86 sem nunca ter visto o óleo previsto (Figura 1b). Além disso, na escolha do tratamento, o modelo indica a família correta (SSDI ou SSMD) em 31 dos 35 cenários e a técnica exata em 25, e foi o melhor dos seis métodos nas quatro métricas avaliadas (Tabela 1). Nessa tarefa a vantagem é menor, pois uma família costuma vencer na maioria dos óleos: a média de cada técnica, que ignora o óleo, já acerta 29 cenários, mas fica para trás no tamanho das gotículas (log R^2 de 0,79). Incorporar a correlação ao modelo, como atributo de entrada adicional ou como estimativa inicial a ser corrigida pela rede, reduziu o log R^2 em 0,03 e 0,16, respectivamente, e por isso o modelo final não a utiliza.

O principal limite do modelo são os dados. Com a ampliação de 10 para 15 óleos, o óleo mais difícil de prever, o único da base original com alto teor de cera, característica que reduz a eficácia do dispersante, teve o log R^2 elevado de 0,47 para 0,65. Já a escala do bocal, a qual difere entre as bases (2–3 mm e 5 mm), pesa mais: nos óleos ensaiados com 2 e 3 mm, prever um bocal ausente do treino reduz o log R^2 de 0,89 para 0,72. Como a ampliação já trouxe ganho, incorporar novos óleos e bocais é o caminho mais promissor para aprimorar o modelo, que já gera, em segundos, previsões completas para óleos novos.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Em suma, o objetivo foi atingido: o modelo prevê a distribuição completa de tamanho de gotículas de óleos que nunca viu, superando a correlação de referência e todos os métodos comparados, e ordena as técnicas para cada óleo.

O trabalho já resulta em uma ferramenta que, a partir de dados de um ensaio laboratorial de rotina, gera em poucos segundos e a baixo custo um relatório com as técnicas ordenadas por eficácia, as distribuições de gotículas previstas e um alerta quando o óleo está fora da faixa de treino. Treinada com dados experimentais reais, é útil para análises preliminares e decisões rápidas em cenários de emergência, reduzindo a dependência de ensaios lentos e custosos. Os próximos passos são ampliar a base com mais óleos e bocais e integrar o modelo a uma interface que reúne outros dados.

Este estudo faz parte do projeto “Modelagem física e numérica de jato submarino de óleo baseada em experimentos”, um acordo de cooperação entre UDESC e Petrobras (número

0050.0125248.23.9), regulamentado pelas cláusulas de investimento em P, D&I da Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP, Resolução 918/2023).

Palavras-chave: aprendizado de máquina; engenharia de petróleo; injeção de dispersante; jateamento de água; validação cruzada.

ILUSTRAÇÕES

Tabela 1. *Desempenho em óleos não vistos no treino (15 óleos, 35 cenários, validação cruzada leave-one-out). Log R^2 e erro mediano avaliam o tamanho das gotículas; família e técnica exata avaliam a escolha do tratamento. A média por técnica ignora as propriedades do óleo.*

Modelo	log R^2 (d_{50})	Erro mediano	Família correta	Técnica exata
Média global	−0,08	52%	10/35	8/35
Média por técnica	0,79	25%	29/35	24/35
Regressão *ridge*	0,77	30%	20/35	17/35
Floresta aleatória	0,84	23%	28/35	22/35
Gradient boosting	0,82	24%	27/35	22/35
Rede neural	**0,85**	**21%**	**31/35**	**25/35**

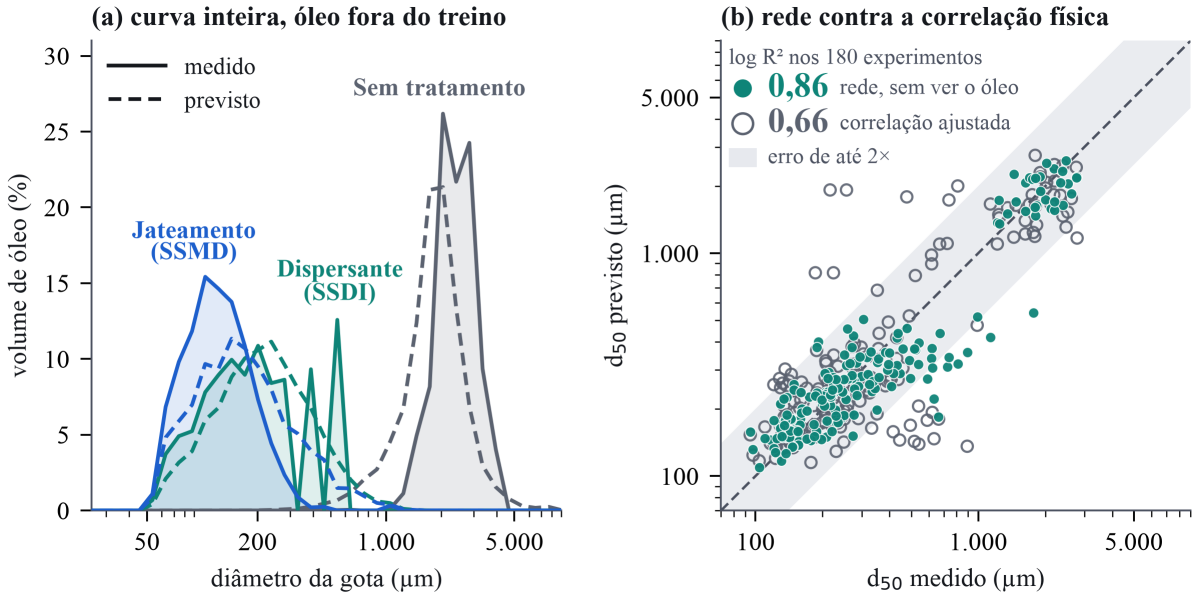


Figura 1. *Previsões para óleos fora do treino. (a) Distribuições medidas (linha cheia) e previstas (tracejado) de um óleo com desempenho próximo da mediana dos 15, sem tratamento, com dispersante (SSDI) e com jateamento (SSMD). (b) d_{50} previsto contra medido nos 180 ensaios dos 10 óleos originais: modelo (pontos cheios) e correlação de Weber modificada ajustada nesses dados (círculos); a faixa cinza marca erro de até duas vezes.*

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BRANDVIK, P. J. et al. Simulating dispersion of oils from a subsea release comparing mechanical and chemically enhanced dispersion. *Marine Pollution Bulletin*, v. 195, art. 115479, 2023.

JOHANSEN, Ø.; BRANDVIK, P. J.; FAROOQ, U. Droplet breakup in subsea oil releases — Part 2: Predictions of droplet size distributions with and without injection of chemical dispersants. *Marine Pollution Bulletin*, v. 73, n. 1, p. 327–335, 2013.
PASZKE, A. et al. PyTorch: an imperative style, high-performance deep learning library. In: *Advances in Neural Information Processing Systems* 32, p. 8024–8035, 2019.

DADOS CADASTRAIS
BOLSISTA: Nathan Wilhelms
CPF: 099.930.049-01
MODALIDADE DE BOLSA: Bolsa de Inovação
VIGÊNCIA: 04/2025 a 12/2026
ORIENTADOR(A): Luiz Adolfo Hegele Junior
CENTRO DE ENSINO: CESFI
DEPARTAMENTO: Departamento de Engenharia de Petróleo — CESFI/UDESC (Balneário Camboriú)
ÁREAS DE CONHECIMENTO: Engenharias / Engenharia Naval e Oceânica
TÍTULO DO PROJETO DE PESQUISA: SUBJET — Modelagem física e numérica de jato submarino de óleo baseada em experimentos
Nº PROTOCOLO DO PROJETO DE PESQUISA: NPP4318-2023