

JONAS HEITOR KONDAGESKI

**CALIBRAÇÃO DE MODELO DE QUALIDADE DA ÁGUA PARA RIO
UTILIZANDO ALGORITMO GENÉTICO**

Dissertação apresentada ao curso de Pós-Graduação em Engenharia de Recursos Hídricos e Ambiental, da Universidade Federal do Paraná, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Engenharia de Recursos Hídricos e Ambiental.

Orientador: Prof. Cristóvão Vicente S. Fernandes, PhD.

CURITIBA
2008

DEDICATÓRIA

**À minha amada esposa Raquel,
a minha grande companheira.**

AGRADECIMENTOS

Ao Professor Cristóvão Fernandes, pela confiança depositada e por sua orientação acadêmica, desde o tempo de iniciação científica, além de seu suporte extra-acadêmico, fatores que tornaram possível o desenvolvimento deste trabalho.

Ao Sérgio Braga, por ser sempre prestativo, pronto para ajudar e aconselhar, inclusive em questões extra-acadêmicas; pelas conversas agradáveis, onde ele compartilhou algumas de suas experiências, e através das quais eu muito aprendi.

Ao curso de Pós Graduação em Engenharia de Recursos Hídricos e Ambientais, por ter me acolhido como aluno.

Ao “pessoal do Projeto de Enquadramento”, por sua importante contribuição, fornecendo os dados e informações que foram utilizadas neste trabalho.

À Heloíse, por ser sempre prestativa em me auxiliar esclarecendo dúvidas, e fornecendo informações importantes para o trabalho.

À professora Maria Cristina e à Cristiane, pelo apoio laboratorial.

Ao Luis e a Isaura, por prestarem um importante apoio operacional, resolvendo as várias questões e problemas burocráticos que apareciam no meio do caminho.

Ao Michael, por sua prontidão em prestar auxílio, e ajudar no esclarecimento das dúvidas que apareciam, baseado no seu vasto conhecimento acadêmico.

Aos colegas do mestrado, por seu apoio nas várias questões concernentes às disciplinas cursadas.

Ao professor Eloy, pela transmissão de seus valiosos conhecimentos.

Ao professor Gilberto Bobko, por ter sido simplesmente o professor mais didático que eu já tive em minha vida acadêmica.

Aos professores da pós em geral, pela disposição em ensinar os seus alunos.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), pelo apoio financeiro através da concessão da bolsa de estudo.

Aos meus pais, Waldemar e Reni, por seu apoio enquanto eu era solteiro, e mesmo depois de casado.

À minha esposa, Raquel, por seu apoio aos meus estudos, desde o tempo da graduação, e pela sua compreensão, aceitando a minha ausência em certos momentos, quando eu tinha que me dedicar aos estudos e pesquisa.

EPÍGRAFE

**“Obstáculos são aquelas coisas assustadoras
que você vê quando tira os olhos da sua meta.”
(Henry Ford)**

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS.....	IX
LISTA DE TABELAS.....	XII
LISTA DE SIGLAS E SÍMBOLOS.....	XIV
RESUMO.....	XVI
ABSTRACT	XVII
1 INTRODUÇÃO.....	1
1.1 JUSTIFICATIVA.....	2
1.2 OBJETIVOS	3
1.2.1 Objetivo Geral	3
1.2.2 Objetivos Específicos.....	3
1.3 ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO.....	3
2 TEORIA DE ALGORITMO GENÉTICO.....	5
2.1 ASPECTOS CONCEITUAIS DE OTIMIZAÇÃO	5
2.2 TEORIA DA EVOLUÇÃO E ALGORITMO GENÉTICO.....	7
2.3 PRINCÍPIOS BÁSICOS DE UM ALGORITMO GENÉTICO	10
2.4 REPRESENTAÇÃO BINÁRIA	12
2.5 REPRESENTAÇÃO REAL	13
2.6 OPERADORES GENÉTICOS	13
2.6.1 Seleção.....	14
2.6.2 Cruzamento.....	14
2.6.3 Mutação	16
2.7 PARÂMETROS GENÉTICOS	17
2.7.1 Tamanho da População	17
2.7.2 Probabilidade de Cruzamento	18
2.7.3 Probabilidade de Mutação.....	18
2.7.4 Intervalo de Geração e Tipo de Substituição dos Indivíduos.....	18
2.7.4.1 Substituição Geracional	19
2.7.4.2 Substituição “Steady-State”	19
2.7.5 Critérios de Parada	19
2.8 PROBLEMAS DE CONVERGÊNCIA.....	20
2.9 EXPLORATION E EXPLOITATION.....	20
2.10 APLICAÇÕES DE ALGORITMO GENÉTICO.....	20
2.10.1 Aplicações Gerais.....	21
2.10.2 Aplicações de AG em Modelos de Qualidade de Água	24
2.11 SUMÁRIO DO CAPÍTULO 2.....	25
3 MODELOS MATEMÁTICOS DE QUALIDADE DA ÁGUA	27
3.1 MÓDULO HIDRODINÂMICO	27
3.1.1 Equações de Saint Venant	28
3.1.2 Equação de Manning.....	29
3.2 MÓDULO DE TRANSPORTE.....	30
3.2.1 Modelo para concentração de DBO	31
3.2.2 Modelo para concentração de OD.....	33
3.3 SUMÁRIO DO CAPÍTULO 3.....	37

4	ROTINAS COMPUTACIONAIS DE ALGORITMO GENÉTICO - DESENVOLVIMENTO.....	39
4.1	DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL DO RIO	39
4.2	PROGRAMA PARA A CALIBRAÇÃO DO MODELO DE QUALIDADE DA ÁGUA.....	40
4.2.1	Cálculo da profundidade e velocidade	41
4.3	ESQUEMA DE ALGORITMO GENÉTICO UTILIZADO	44
4.3.1	Números aleatórios e a evolução da população	45
4.3.2	Representação dos cromossomos	46
4.3.3	Formação da população inicial.....	47
4.3.4	Tamanho da população.....	48
4.3.5	Função Aptidão	49
4.3.5.1	Algoritmo AG1	49
4.3.5.2	Algoritmo AG2	50
4.3.6	Seleção.....	51
4.3.7	Cruzamento e probabilidade de cruzamento	52
4.3.8	Mutação e probabilidade de Mutação	54
4.3.9	Calcular a aptidão dos novos indivíduos.....	54
4.3.10	Selecionar e eliminar os menos aptos.....	54
4.4	COMPARAÇÃO ENTRE OS OPERADORES E PARÂMETROS GENÉTICOS	55
4.5	SUMÁRIO DO CAPÍTULO 4.....	57
5	ESTUDOS DE CASO HIPOTÉTICOS	58
5.1	TESTE DE PROBABILIDADE DE MUTAÇÃO	58
5.2	ESTUDO DE CASO 1: RIO HIPOTÉTICO 1	65
5.2.1	Avaliação do Impacto de Informações Conhecidas	68
5.2.1.1	Cenário 1	69
5.2.1.2	Cenário 2	70
5.2.1.3	Cenário 3	71
5.2.1.4	Cenário 4	72
5.2.2	Conclusões do Estudo de Caso 1.....	72
5.3	ESTUDO DE CASO 2: RIO HIPOTÉTICO 2	73
5.3.1	Testes do Algoritmo Genético em Relação à Probabilidade de Mutação	75
5.3.2	Avaliação do Impacto de Informações Conhecidas	79
5.3.2.1	Cenário 1	79
5.3.2.2	Cenário 2	81
5.3.2.3	Cenário 3	82
5.3.2.4	Cenário 4	82
5.3.3	Conclusões do Estudo de Caso 2.....	83
5.4	ESTUDO DE CASO 3: RIO HIPOTÉTICO 3	84
5.4.1	Resultados Gerais do Rio Hipotético 3	87
5.4.2	Comparação Com a Solução Analítica.....	92
5.4.3	Critério Representativo dos Parâmetros do Modelo de Qualidade da Água.....	94
5.4.4	Curvas Relacionando os Parâmetros do Modelo de Qualidade da Água.....	96
5.4.5	Conclusões do Estudo de Caso 3.....	100

5.5	SUMÁRIO DO CAPÍTULO 5.....	101
6	ESTUDO DE CASO DOS RIOS PALMITAL E IGUAÇU NA REGIÃO METROPOLITANA DE CURITIBA (RMC).....	102
6.1	ESTUDO DE CASO 4: RIO PALMITAL.....	104
6.1.1	Construção dos Cenários de Calibração.....	106
6.1.2	Resultados e Análises.....	107
6.1.3	Conclusões e Discussões do Estudo de Caso 4.....	118
6.2	ESTUDO DE CASO 5: RIO IGUAÇU NA RMC.....	119
6.2.1	Conclusões do estudo de caso 5.....	128
6.3	SUMÁRIO DO CAPÍTULO 6.....	129
7	CONSIDERAÇÕES FINAIS E RECOMENDAÇÕES.....	130
	REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA.....	132
	ANEXO 1 – MATRIZ DE FONTE DE POLUIÇÃO, CARACTERÍSTICAS HIDRÁULICAS E VAZÕES INCREMENTAIS DO RIO PALMITAL.....	136
	ANEXO 2 - MATRIZ DE FONTES DE POLUIÇÃO PARA A BACIA DO ALTO IGUAÇU.....	138
	ANEXO 3 - DADOS HIDRÁULICOS DO RIO ALTO IGUAÇU.....	142
	ANEXO 4 – VAZÕES INCREMENTAIS DO ALTO IGUAÇU UTILIZADAS NA SIMULAÇÃO DE QUALIDADE DA ÁGUA.....	144

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 2.1 - ESQUEMA DE UM ALGORITMO GENÉTICO TÍPICO.....	11
FIGURA 3.1 - MECANISMOS INTEGRANTES DO BALANÇO DE OD NO RIO.....	35
FIGURA 4.1 - FLUXOGRAMA DO PROGRAMA DE CALIBRAÇÃO DESENVOLVIDO.....	40
FIGURA 4.2 - SEÇÃO TRANSVERSAL TRAPEZOIDAL DO CANAL.....	42
FIGURA 4.3 - ESQUEMA DE ALGORITMO GENÉTICO PROGRAMADO.....	44
FIGURA 4.4 - ALGORITMO DO PROCESSO DE SELEÇÃO.....	52
FIGURA 5.1 - MÍNIMO DA FUNÇÃO G (2, 3 E 4 VARIÁVEIS) PARA DIFERENTES COMBINAÇÕES DE NG E P _{MUT}	60
FIGURA 5.2 - MÍNIMO DA FUNÇÃO G (5, 6 E 7 VARIÁVEIS) PARA DIFERENTES COMBINAÇÕES DE NG E P _{MUT}	61
FIGURA 5.3 - MÍNIMO DA FUNÇÃO G (8, 9 E 10 VARIÁVEIS) PARA DIFERENTES COMBINAÇÕES DE NG E P _{MUT}	62
FIGURA 5.4 - MÍNIMO DA FUNÇÃO G (11, 12 E 13 VARIÁVEIS) PARA DIFERENTES COMBINAÇÕES DE NG E P _{MUT}	63
FIGURA 5.5 - MÍNIMO DA FUNÇÃO G (14 E 15 VARIÁVEIS) PARA DIFERENTES COMBINAÇÕES DE NG E P _{MUT}	64
FIGURA 5.6 - DIAGRAMA TOPOLÓGICO DO RIO HIPOTÉTICO 1.....	66
FIGURA 5.7 - COMPARAÇÃO ENTRE DBO MEDIDO A CALCULADO PARA O RIO HIPOTÉTICO 1.....	67
FIGURA 5.8 - PERFIS DE DBO PARA O CENÁRIO 1 (RIO HIPOTÉTICO 1).....	69
FIGURA 5.9 - PERFIS DE DBO PARA O CENÁRIO 2 (RIO HIPOTÉTICO 1).....	70
FIGURA 5.10 - PERFIS DE DBO PARA O CENÁRIO 3 (RIO HIPOTÉTICO 1).....	71
FIGURA 5.11 - PERFIS DE DBO PARA O CENÁRIO 4 (RIO HIPOTÉTICO 1).....	72
FIGURA 5.12 - DIAGRAMA TOPOLÓGICO DO RIO HIPOTÉTICO 2.....	74
FIGURA 5.13 - COMPARAÇÃO ENTRE OS PERFIS DE DBO E D TEÓRICOS E CALCULADOS PELO MODELO CALIBRADO (RIO HIPOTÉTICO 2).....	75
FIGURA 5.14 - MAIOR RESÍDUO ENCONTRADO PARA DIFERENTES COMBINAÇÕES DE NG E P _{MUT} (RIO HIPOTÉTICO 2).....	76
FIGURA 5.15 - CURVAS DE DENSIDADE DE PROBABILIDADE ACUMULADA PARA DIFERENTES COMBINAÇÕES DE P _{MUT} E NG (RIO HIPOTÉTICO 2).....	78
FIGURA 5.16 - FRENTES DE PARETO PARA O CENÁRIO 1 (RIO HIPOTÉTICO 2).....	80
FIGURA 5.17 - DIAGRAMA TOPOLÓGICO DO RIO HIPOTÉTICO 3.....	84
FIGURA 5.18 - BOXPLOTS DOS PARÂMETROS DO MODELO DE QUALIDADE DE ÁGUA (RIO HIPOTÉTICO 3).....	90
FIGURA 5.19 - PERFIS DE DBO E OD PARA OS CENÁRIOS 1 A 5 (RIO HIPOTÉTICO 3).....	93

FIGURA 5.20 - PERFIL DE DBO E OD OBTIDO COM A MÉDIA DOS PARÂMETROS, PARA OS CENÁRIOS 1 A 5 (RIO HIPOTÉTICO 3).	95
FIGURA 5.21 - RELAÇÃO ENTRE OS PARÂMETROS DO MODELO DE QUALIDADE DE ÁGUA PARA O CENÁRIO DE CALIBRAÇÃO 1.	96
FIGURA 5.22 - RELAÇÃO ENTRE OS PARÂMETROS DO MODELO DE QUALIDADE DE ÁGUA PARA O CENÁRIO DE CALIBRAÇÃO 2.	97
FIGURA 5.23 - RELAÇÃO ENTRE OS PARÂMETROS DO MODELO DE QUALIDADE DE ÁGUA PARA O CENÁRIO DE CALIBRAÇÃO 3.	97
FIGURA 5.24 - RELAÇÃO ENTRE OS PARÂMETROS DO MODELO DE QUALIDADE DE ÁGUA PARA O CENÁRIO DE CALIBRAÇÃO 4.	98
FIGURA 5.25 - RELAÇÃO ENTRE OS PARÂMETROS DO MODELO DE QUALIDADE DE ÁGUA PARA O CENÁRIO DE CALIBRAÇÃO 5.	98
FIGURA 6.1 - BACIA DO ALTO IGUAÇU.	103
FIGURA 6.2 - BACIA DO RIO PALMITAL.	102
FIGURA 6.3 - DISTRIBUIÇÃO DOS KD'S CALCULADOS PARA OS CENÁRIOS 1 A 5 (RIO PALMITAL).	108
FIGURA 6.4 - CURVA DE PERMANÊNCIA DO NÚMERO DE GERAÇÕES PARA OS CENÁRIOS 1 A 5 (RIO PALMITAL).	109
FIGURA 6.5 - PERFIL DE DBO E OD PARA OS CENÁRIOS 1 A 5 (RIO PALMITAL).	110
FIGURA 6.6 - PERFIS DE DBO E OD PARA OS CENÁRIOS 6 A 10 (RIO PALMITAL).	111
FIGURA 6.7 - COMPARAÇÃO DO PERFIL DE DBO OD ENTRE OS CENÁRIOS 1 E 6 (RIO PALMITAL).	112
FIGURA 6.8 - COMPARAÇÃO DO PERFIL DE DBO E OD ENTRE OS CENÁRIOS 2 E 7 (RIO PALMITAL).	112
FIGURA 6.9 - COMPARAÇÃO DO PERFIL DE DBO E OD ENTRE OS CENÁRIO 3 E 8 (RIO PALMITAL).	112
FIGURA 6.10 - COMPARAÇÃO DO PERFIL DE DBO E OD ENTRE OS CENÁRIOS 4 E 9 (RIO PALMITAL).	113
FIGURA 6.11 - COMPARAÇÃO DO PERFIL DE DBO E OD ENTRE OS CENÁRIOS 5 E 10 (RIO PALMITAL).	113
FIGURA 6.12 - COMPARAÇÃO DAS DISTRIBUIÇÕES DOS K_D CALCULADOS PARA OS CENÁRIOS 3 E 11 (RIO PALMITAL).	114
FIGURA 6.13 - CURVA DE PERMANÊNCIA DA DISTRIBUIÇÃO DO NÚMERO DE GERAÇÕES PARA OS CENÁRIOS 3 E 11 (RIO PALMITAL).	115

FIGURA 6.14 - CURVA DE PERMANÊNCIA DO NÚMERO DE GERAÇÕES PARA O CENÁRIO 12 (RIO PALMITAL).....	116
FIGURA 6.15 - DISTRIBUIÇÃO DOS K_D 'S E K_A 'S CALCULADOS PARA O CENÁRIO 12 (RIO PALMITAL).....	117
FIGURA 6.16 - COMPARAÇÃO DOS PERFIS DE DBO E OD ENTRE OS CENÁRIOS 3 E 12 (RIO PALMITAL).....	117
FIGURA 6.17 - DIAGRAMA TOPOLÓGICO DA BACIA DO ALTO IGUAÇU...120	
FIGURA 6.18 - PERFIL MEDIANO DA VAZÃO MONITORADA PARA O RIO IGUAÇU.....	122
FIGURA 6.19 - PERFIL DE OD PARA AS 400 SIMULAÇÕES (RIO ALTO IGUAÇU).	123
FIGURA 6.20 - PERFIL DE DBO PARA AS 400 SIMULAÇÕES (RIO ALTO IGUAÇU).	124
FIGURA 6.21 - DIMINUIÇÃO DO RESÍDUO EM FUNÇÃO DO NÚMERO DE GERAÇÕES.....	125
FIGURA 6.22 - CURVA DE PERMANÊNCIA DO NG (ESTUDO DE CASO 5). .126	
FIGURA 6.23 - PERFIL DE OD OBTIDO COM A MÉDIA DOS PARÂMETROS DO MODELO DE QUALIDADE DA ÁGUA (RIO ALTO IGUAÇU).	127
FIGURA 6.24 - PERFIL DE DBO OBTIDO COM A MÉDIA DOS PARÂMETROS DO MODELO DE QUALIDADE DA ÁGUA (RIO ALTO IGUAÇU).	127

LISTA DE TABELAS

TABELA 3.1 - FÓRMULAS PARA CÁLCULO DE REAERAÇÃO.....	36
TABELA 4.1 - COMPARAÇÃO ENTRE OPERADORES E PARÂMETROS GENÉTICOS.....	56
TABELA 5.1 - VARIÇÃO DE P_{MUT} ÓTIMA EM FUNÇÃO DO NÚMERO DE VARIÁVEIS, PARA NG IGUAL A 10.000.....	65
TABELA 5.2 - COMPARAÇÃO ENTRE DBO MEDIDO E CALCULADO PARA O RIO HIPOTÉTICO 1.....	66
TABELA 5.3 - VALORES DE F_{AG2} PARA DIFERENTES NG (RIO HIPOTÉTICO 1).....	67
TABELA 5.4 - VALORES DE K_D PARA O CENÁRIO 1 (RIO HIPOTÉTICO 1).....	69
TABELA 5.5 - VALORES DE K_D PARA O CENÁRIO 2 (RIO HIPOTÉTICO 1).....	70
TABELA 5.6 - VALORES DE K_D PARA O CENÁRIO 3 (RIO HIPOTÉTICO 1).....	71
TABELA 5.7 - VALORES DE K_D PARA O CENÁRIO 4 (RIO HIPOTÉTICO 1).....	72
TABELA 5.8 - PERFIL TEÓRICO DE DBO E DO (RIO HIPOTÉTICO 2).....	74
TABELA 5.9 - PARÂMETROS DO MODELO DE QUALIDADE DA ÁGUA CALIBRADO (RIO HIPOTÉTICO 2).....	75
TABELA 5.10 -MAIOR E MENOR RESÍDUO ENCONTRADO PARA AS DIFERENTES COMBINAÇÕES DE P_{MUT} E NG (RIO HIPOTÉTICO 2).....	76
TABELA 5.11 -PONTOS DE MONITORAMENTO UTILIZADOS NA CALIBRAÇÃO DO MODELO DE QUALIDADE DA ÁGUA PARA O CENÁRIO 1 (RIO HIPOTÉTICO 2).....	80
TABELA 5.12 -CONFIGURAÇÕES E RESULTADOS PARA O CENÁRIO 2 (RIO HIPOTÉTICO 2).....	81
TABELA 5.13 -CONFIGURAÇÕES E RESULTADOS PARA O CENÁRIO 3 (RIO HIPOTÉTICO 2).....	82
TABELA 5.14 -CONFIGURAÇÕES E RESULTADOS PARA O CENÁRIO 4 (RIO HIPOTÉTICO 2).....	83
TABELA 5.15 -CARACTERÍSTICAS DO ESCOAMENTO PARA O RIO HIPOTÉTICO 3.....	84
TABELA 5.16 -PERFIL DE CONCENTRAÇÃO DE DBO, OD E D AO LONGO DO RIO HIPOTÉTICO 3.....	86
TABELA 5.17 -CENÁRIOS DE CALIBRAÇÃO PARA O RIO HIPOTÉTICO 3.....	87
TABELA 5.18 -RESULTADOS DE CALIBRAÇÃO PARA O CENÁRIO 1 (RIO HIPOTÉTICO 3).....	88
TABELA 5.19 -RESULTADOS DE CALIBRAÇÃO PARA O CENÁRIO 2 (RIO HIPOTÉTICO 3).....	88
TABELA 5.20 -RESULTADOS DE CALIBRAÇÃO PARA O CENÁRIO 3 (RIO HIPOTÉTICO 3).....	88
TABELA 5.21 -RESULTADOS DE CALIBRAÇÃO PARA O CENÁRIO 4 (RIO HIPOTÉTICO 3).....	89
TABELA 5.22 -RESULTADOS DE CALIBRAÇÃO PARA O CENÁRIO 5 (RIO HIPOTÉTICO 3).....	89

TABELA 5.23 -EQUAÇÕES RELACIONANDO OS PARÂMETROS DO MODELO DE QUALIDADE DA ÁGUA.....	99
TABELA 6.1 -VALORES MONITORADOS NO PONTO DE CONTROLE NO RIO PALMITAL.....	104
TABELA 6.2 -COEFICIENTES DE REAERAÇÃO CALCULADOS PARA O RIO PALMITAL.....	106
TABELA 6.3 -RESULTADOS DE CALIBRAÇÃO, CENÁRIO 6 A 10 (RIO PALMITAL).....	110
TABELA 6.4 - RESULTADOS DE CALIBRAÇÃO PARA O CENÁRIO 11 (RIO PALMITAL).....	114
TABELA 6.5 - VALORES CALIBRADOS DE KD PARA O CENÁRIO 12 (RIO PALMITAL).....	115
TABELA 6.6 - VALORES CALIBRADOS DE KA PARA O CENÁRIO 12 (RIO PALMITAL).....	116
TABELA 6.7 - PONTOS DE MONITORAMENTO AO LONGO DO TRECHO DO RIO.....	121
TABELA 6.8 -VALORES MEDIANOS DAS SÉRIES DE MONITORAMENTO DE VAZÃO.....	121
TABELA 6.9 - VALORES MEDIANOS DAS CONCENTRAÇÕES USADAS NA CALIBRAÇÃO DO MODELO PARA O RIO ALTO IGUAÇU. ...	122

LISTA DE SIGLAS E SÍMBOLOS

A	Área da seção transversal do rio
a	Número aleatório uniformemente distribuído no intervalo [0,1)
AG	Algoritmo genético
AG1	Algoritmo para cálculo de profundidade
AG2	Algoritmo para a calibração
bin	Algarismo binário
B	Largura da base do canal
DBO	Demanda bioquímica de oxigênio
DBO _c	DBO carbonácea
DBO _N	DBO nitrogenada
C	Concentração de oxigênio dissolvido
\hat{C}	Concentração medida de oxigênio
C _s	Concentração de saturação de oxigênio
dec _D	Declividade do talude direito
dec _E	Declividade do talude esquerdo
D	Déficit de oxigênio dissolvido
D ₀	Concentração inicial de déficit de oxigênio
DP	Desvio padrão
dx	Comprimento do elemento computacional
D _x	Coefficiente de dispersão na direção x
D _y	Coefficiente de dispersão na direção y
D _z	Coefficiente de dispersão na direção z
ER(k _a)	Erro relativo entre k _a calculada e k _a teórica
ER(k _d)	Erro relativo entre k _d calculada e k _d teórica
F	Função-objetivo de um problema de otimização genérico
f _{AG1}	Função aptidão para o algoritmo AG1
f _{AG2}	Função aptidão para o algoritmo AG2
H	Profundidade do rio
H _f	Indivíduo filho, dentro do algoritmo AG1
H _p	Indivíduo pai, dentro do algoritmo AG1
K	Vetor com os parâmetros do modelo de qualidade da água
K_f	Indivíduo filho dentro do algoritmo AG2
K_p	Indivíduo pai dentro do algoritmo AG2
k _a	Taxa de reaeração atmosférica
k _d	Taxa de degradação de matéria orgânica
K _r	Taxa de remoção total de matéria orgânica
k _s	Taxa de sedimentação de sedimentação de matéria orgânica
l	Comprimento da cadeia binária

L	Concentração de DBO
\hat{L}	Concentração medida de DBO
L_0	Concentração última de DBO no ponto inicial do rio
m	Número de bits necessários, numa codificação binária, para se alcançar a precisão desejada
M	Número de trechos em que um rio está dividido
\mathbf{MAX}_k	Vetor com os limites superiores dos espaços de busca dos parâmetros de qualidade da água
\max_H	Limite superior do espaço de busca da profundidade H
\max_y	Limite superior do espaço de busca da variável real genérica y_j
\mathbf{MIN}_k	Vetor com os limites inferiores dos espaços de busca dos parâmetros de qualidade da água
\min_H	Limite inferior do espaço de busca da profundidade H
\min_y	Limite inferior do espaço de busca da variável real genérica y_j
MO	Matéria orgânica
n	Coefficiente de Manning
MQA	Modelo de Qualidade da Água
n_s	Número de indivíduos da população
NG	Número de gerações
OD	Oxigênio Dissolvido
P	Perímetro molhado
P_c	Probabilidade de cruzamento
\mathbf{P}_{AG1}	População para o algoritmo AG1
\mathbf{P}_{AG2}	População para o algoritmo AG2
P_{mut}	Probabilidade de mutação
Q_{calc}	Vazão calculada
Q_{obs}	Vazão observada
r	Número de pontos de monitoramento
R	Número real decodificado
RMC	Região Metropolitana de Curitiba
S_0	Declividade longitudinal do canal
S_b	Demanda bentônica de oxigênio dissolvido
S_L	Carga difusa de DBO
t	Precisão desejada, em número de casa decimais, de um número real decodificado
\bar{u}	Velocidade média do rio na direção x
\bar{v}	Velocidade média do rio na direção y
x	Distância longitudinal
y	Variável real genérica
w_1	Peso da concentração de OD na calibração do modelo
w_2	Peso da concentração de DBO na calibração do modelo

RESUMO

No presente trabalho foram desenvolvidas, em linguagem de programação FORTRAN, rotinas de algoritmo genético para a calibração de um modelo de qualidade da água que considera geometria unidimensional e movimento permanente, onde estão inseridos, para o cálculo da concentração de DBO (Demanda Bioquímica de Oxigênio) e OD (Oxigênio Dissolvido), termos referentes à degradação e sedimentação da MO, demanda bentônica de oxigênio, além de reaeração atmosférica. Em relação à configuração do algoritmo genético, optou-se por utilizar a representação real; seleção por torneio; cruzamento aritmético; e mutação uniforme. Com esta configuração foram realizados estudos de caso visando analisar o potencial do algoritmo desenvolvido. Inicialmente, atenção foi dada para avaliar a probabilidade de mutação ótima em função do número de variáveis de uma função a ser otimizada. Em uma segunda fase, o modelo de qualidade da água foi calibrado para 3 rios hipotéticos, para os quais se conheciam as soluções analíticas. Os testes indicaram a estabilidade, consistência e robustez das soluções produzidas pelo algoritmo de calibração. Adicionalmente, utilizou-se o mesmo modelo para casos reais, com dados de monitoramento de DBO e OD para os rios Palmital e Iguaçu, ambos na Região Metropolitana de Curitiba. Os resultados novamente destacam o potencial da metodologia proposta, com a calibração dos parâmetros do modelo que ajustaram a concentração calculada à monitorada. Cabe destacar que esta aplicação a casos reais consiste na principal contribuição desta pesquisa, em especial no contexto da literatura nacional.

ABSTRACT

In this research genetic algorithm (GA) routines were developed to be employed on water quality model calibration for rivers. This one-dimensional steady state model, used to calculate biochemical oxygen demand (BOD), and dissolved oxygen (DO), is composed by terms related to degradation and sedimentation of organic matter, including atmospheric reaeration. The genetic algorithm configuration considered: real parameter representation; tournament selection; arithmetic crossover; uniform mutation. At first, was carried out a study to verify the best mutation probability related to the number of decision variables. After that, the method was applied to calibrate 3 hypothetical rivers, for which analytical solutions were known. The results indicated stability and robustness of the calibration algorithm. Additionally, the same algorithm was used on calibration model for Palmital and Iguaçu Rivers, both located on Metropolitan Region of Curitiba. The model parameters that fitted the calculated BOD and DO concentration to the monitored ones were found, indicating, one more time, the potential of the proposed calibration method. It is important to state that real rivers applications are the main contribution of this research, especially on the national literature context.

1 INTRODUÇÃO

Os modelos de qualidade de água constituem uma ferramenta que apresenta papel muito importante na gestão de recursos hídricos. Pode ser aplicada, por exemplo, no auxílio à tomada de decisão de outorga de direitos de uso da água, na avaliação do enquadramento com metas progressivas, além da outorga de lançamento de efluentes por indústrias. Esta importância se destaca na medida que modelos de base matemática possibilitam a previsão dos impactos causados em um sistema aquático, através, por exemplo, do lançamento de efluentes industriais ou domésticos, pela descarga acidental de algum contaminante, ou mesmo o impacto relacionado a uma situação crítica de vazão sobre a qualidade da água (NAHON, 2006).

Para que se aproveite todo o potencial de aplicação destes modelos, é necessário que eles descrevam da forma mais fiel possível a realidade física, química e biológica do corpo d'água que está sendo estudado, e que é representada pelos parâmetros do modelo. Eles podem estar relacionados, por exemplo, à capacidade de autodepuração, ou seja, o restabelecimento do equilíbrio no rio, por mecanismos essencialmente naturais, após as alterações induzidas pelo despejo de efluentes (Von SPERLING, 1996). Entretanto, é necessário que estes parâmetros sejam ajustados de forma a representar a realidade do rio estudado; a este processo de ajuste dá-se o nome de calibração. Existem alguns métodos para a calibração como, por exemplo, a calibração manual, que representa um método pouco prático e que consome muito tempo, principalmente se o modelo a ser calibrado apresentar grande número de parâmetros, pois, segundo CHAU (2006), torna-se difícil alterá-los e ainda assim manter um domínio ou controle sobre a resposta do modelo. Neste caso, é interessante o uso de rotinas computacionais de otimização como, por exemplo, o Algoritmo Genético (AG), que representa uma técnica de inteligência artificial passível de ser aplicada na calibração de modelos, e que, segundo RAUCH e HARREMOËS (1999), apresenta grandes vantagens sobre os métodos de otimização tradicionais. O AG baseia o seu funcionamento numa analogia da Teoria da evolução das espécies, declarada pelo fisiologista inglês Charles Darwin. Neste algoritmo os indivíduos (possíveis soluções

do problema de otimização) evoluem através da aplicação dos operadores genéticos. Se o algoritmo for bem elaborado, esta evolução conduzirá à formação de um indivíduo ótimo, ou seja, à resposta ótima do problema de otimização. Apesar do algoritmo genético representar uma técnica relativamente nova, vários autores já empregaram-no em problemas de otimização. Por exemplo, CHO *et al.* (1999) utilizou o algoritmo num modelo de gerenciamento de recursos hídricos; WARDLAW e SHARIF (1999) aplicaram o método na otimização de operação de reservatórios; WANG (1991) aplicou o algoritmo na calibração de um modelo conceitual chuva-vazão.

O potencial de aplicação do Algoritmo Genético na calibração de modelos se deve ao fato da calibração poder ser tratada como um problema de otimização, pois se deseja minimizar a função soma dos resíduos quadráticos, ou seja, a soma das diferenças quadráticas entre a concentração observada de um poluente qualquer e aquela calculada pelo modelo, cujos parâmetros se deseja determinar.

1.1 JUSTIFICATIVA

Geralmente a calibração dos modelos de qualidade de água é realizada manualmente e de forma iterativa, demandando tempo, paciência, além de experiência do modelador e nem sempre produz resultados satisfatórios. Por este motivo, é interessante a aplicação de uma técnica computacional de otimização, pois, neste caso, o computador será encarregado pelo processo iterativo da calibração. Assim, espera-se que o processo de calibração computacional seja mais rápido e preciso do que o manual. No presente trabalho, utilizou-se o algoritmo genético como a técnica computacional destinada a tal fim, e através da qual foi possível encontrar a combinação ótima dos parâmetros do modelo de qualidade da água com boa precisão e eficiência, além de ser facilmente acoplada ao modelo. Destaca-se, ainda, que na literatura nacional não se encontram exemplos de aplicações dos algoritmos genéticos para a calibração de modelos para rios.

1.2 OBJETIVOS

1.2.1 Objetivo Geral

O objetivo geral deste trabalho consiste no desenvolvimento de um método para a calibração de modelo de qualidade da água para rios, utilizando o algoritmo genético.

1.2.2 Objetivos Específicos

Considerando que o desenvolvimento de rotinas computacionais permite um melhor detalhamento de aspectos conceituais relacionados a esta técnica, pretende-se:

- Desenvolver e programar as rotinas computacionais de algoritmo genético, para a calibração;
- Programar as rotinas referentes ao modelo de qualidade da água;
- Estudar quais os melhores parâmetros genéticos a serem empregados no problema de calibração, com atenção especial à probabilidade de mutação;
- Empregar o programa desenvolvido na calibração de rios hipotéticos, onde os parâmetros do modelo de qualidade da água são conhecidos, para testar a eficiência e robustez das rotinas computacionais desenvolvidas;
- Empregar o programa na calibração do modelo para os rios Palmital e Iguaçu, na Região Metropolitana de Curitiba.

1.3 ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO

Esta dissertação está organizada em 7 capítulos. Além desta Introdução, o segundo capítulo deste trabalho apresenta os aspectos conceituais e gerais do algoritmo genético, bem como a forma de aplicação deste método. No terceiro capítulo são apresentados os modelos matemáticos de qualidade da água, tanto para a concentração de DBO quanto de OD. Além disso, reforça-se a importância da integração de módulos hidráulicos e de qualidade da água. No capítulo 4 apresenta-se a metodologia de pesquisa desenvolvida, ou seja, o desenvolvimento das rotinas de algoritmo genético para a calibração do modelo de qualidade da água apresentado no

capítulo 3. No capítulo 5 são apresentados os resultados dos estudos de caso, entre os quais se encontram: o teste de probabilidade de mutação; os rios hipotéticos 1, 2 e 3; No capítulo 6 ênfase é dada para as aplicações nos rios Palmital e Iguaçu na Região Metropolitana de Curitiba. Finalmente, no capítulo 7 são apresentadas as considerações finais e recomendações.

2 TEORIA DE ALGORITMO GENÉTICO

Nos tópicos seguintes serão descritos aspectos conceituais de um problema de otimização, e apresentada a teoria referente ao método do algoritmo genético utilizado para a sua resolução.

2.1 ASPECTOS CONCEITUAIS DE OTIMIZAÇÃO

Como o algoritmo genético representa um método de otimização por busca direta, é necessário descrever brevemente do que se trata este problema. Conceitualmente, a otimização constitui um processo de busca da melhor solução para um dado problema; dito de outra forma, ela consiste em achar a solução que corresponda ao ponto de mínimo ou de máximo de uma função objetivo. Em termos matemáticos, um problema de otimização pode ser representado por (GONZAGA, 2004):

$$\underset{x \in \Omega}{\text{minimizar}} \quad f(x)$$

Com $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ e $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$.

A função f representa a função-objetivo do problema de otimização. O espaço Ω representa um subconjunto do espaço real (\mathbb{R}^n) onde está contida a solução do problema; este espaço geralmente é denominado espaço de busca. Um ponto $\bar{\mathbf{x}} \in \Omega$ é solução ótima do problema, ou minimizador global da função f se e somente se a função aplicada neste ponto for menor do que a função aplicada a qualquer outro ponto \mathbf{x} , ou seja:

$$(\forall \mathbf{x} \in \Omega) f(\mathbf{x}) \geq f(\bar{\mathbf{x}})$$

De forma análoga, o ponto $\bar{\mathbf{x}} \in \Omega$ é um ótimo local ou minimizador local do problema se e somente se existe uma vizinhança V do ponto $\bar{\mathbf{x}}$ tal que o valor da função aplicada neste ponto seja menor do que o valor da função aplicado em qualquer outro ponto suficientemente próximo de $\bar{\mathbf{x}}$, ou seja:

$$(\forall \mathbf{x} \in V) f(\mathbf{x}) \geq f(\bar{\mathbf{x}})$$

Rigorosamente, um problema de otimização pode corresponder à minimização ou maximização de uma função-objetivo; porém, sem perda de generalidade, o problema pode ser sempre tratado como um problema de minimização, uma vez que é possível converter um problema de maximização em um problema de minimização multiplicando a função-objetivo por (-1) .

Quando o espaço de busca, Ω , for igual ao espaço dos números reais, \mathbb{R}^n , é dito que se trata de um problema de otimização irrestrito. Por outro lado, quando o espaço de busca representa um subespaço de \mathbb{R}^n , trata-se de um problema de otimização restrito.

Segundo TANOMARU (1995), existem basicamente, 3 correntes de métodos gerais para a resolução de problemas de otimização: Métodos numéricos, probabilísticos e enumerativos. Os métodos numéricos são divididos em métodos analíticos ou baseados em cálculo numérico. Os métodos analíticos consistem em usar a derivada da função para otimizá-la. Apresentam a desvantagem de somente serem aplicáveis quando a função-objetivo é explicitamente conhecida e derivável; além disso, não distinguem o ponto encontrado entre mínimo local ou global. Quando a função apresenta grande número de variáveis torna-se difícil encontrar, analiticamente, todos os pontos de mínimo. Por outro lado, os métodos baseados no cálculo numérico, que são métodos iterativos, investigam os pontos adjacentes do espaço de busca e caminham na direção que diminui o valor da função a ser minimizada. Segundo LACERDA e CARVALHO (1999), estes métodos apresentam dificuldade em otimizar funções multimodais - ou seja, funções que apresentam muitos pontos de mínimo locais. Apesar disso, apresentam a vantagem de serem relativamente rápidos na convergência, além de existirem provas matemáticas da convergência destes métodos. No caso de métodos numéricos, usam-se técnicas iterativas como método de Cauchy, Newton, Quase-Newton, entre outros.

Os métodos enumerativos de otimização, também chamados de busca exaustiva, examinam cada ponto do espaço de busca procurando o ponto ótimo. Neste método, as possíveis soluções podem ser enumeradas sistematicamente ou

aleatoriamente. Obviamente esta técnica é impraticável quando existe um número muito grande de pontos para se analisar.

Os métodos probabilísticos empregam a idéia de busca probabilística, o que não significa que sejam métodos completamente aleatórios. Apesar destes métodos serem aplicáveis em muitas situações de otimização, geralmente não existem provas matemáticas de sua convergência. Segundo TANOMARU (1995), o AG se encaixa nesta classe de métodos.

Os métodos probabilísticos não precisam de muitas informações sobre a função-objetivo; por exemplo, não é preciso conhecer a derivada desta função. Por este motivo, torna-se interessante a sua aplicação a problemas muito complexos, para os quais é difícil obter a derivada. Assim, pode ser aplicado a uma grande variedade de problemas, apesar de apresentar a desvantagem, em alguns casos, de usar muita memória de computador e consumir muito tempo de processamento (RAUCH E HARREMÕES, 1999).

2.2 TEORIA DA EVOLUÇÃO E ALGORITMO GENÉTICO

Cientistas e pesquisadores observam na natureza alguns comportamentos e padrões que possam ser aplicados na resolução de problemas reais de física, química ou da engenharia em geral. Desta forma surgiram, por exemplo, métodos computacionais baseados na enorme capacidade de processamento do sistema nervoso central: as redes neurais artificiais; outros métodos baseados no mecanismo interno de defesa dos organismos contra a invasão de patológicos: o sistema imunológico artificial; ou, ainda, métodos baseados na simulação do resfriamento natural de ligas metálicas derretidas: “Simulated Annealing”.

Outra classe de métodos computacionais de otimização importante está baseada no processo de evolução natural das espécies: a computação evolutiva. Através das gerações as populações se desenvolvem de acordo com os princípios da seleção natural e da sobrevivência do mais apto, declarado por Charles Darwin em seu livro: *A Origem das Espécies*. Utilizando este mesmo princípio, estes métodos são capazes de encontrar soluções para problemas reais se forem apropriadamente codificados.

Segundo TANOMARU (1995), a computação evolutiva encara a adaptação darwiniana como um processo adaptativo de otimização, sugerindo um modelo em que populações evoluam de modo a melhorar, na média, o desempenho geral da população com respeito a um dado problema.

Segundo RIBEIRO (2005), John Holland, e posteriormente um de seus alunos, David Goldberg, foram os primeiros a incorporar os princípios de evolução natural a um programa de computador, para a resolução de um problema complexo.

A computação evolutiva engloba uma grande quantidade de métodos como os algoritmos genéticos (AG), programação evolucionária, programação genética, estratégias evolucionárias, entre outros (TANOMARU, 1995). O Algoritmo genético representa o método mais difundido e conhecido no universo da computação evolutiva; isto se deve ao fato de ser relativamente simples, flexível e de fácil implementação computacional (LACERDA e CARVALHO, 1999).

Na natureza, indivíduos de uma população competem por recursos como alimentos, água e abrigo; também competem por um companheiro para o acasalamento. Aqueles indivíduos que possuem as melhores características para a sobrevivência, e para a atração do companheiro, provavelmente produzirão um maior número de descendentes. Por outro lado, indivíduos com características inferiores produzirão poucos (ou mesmo nenhum) descendentes. Isto significa que os genes daqueles indivíduos mais bem adaptados ao meio espalhar-se-ão por um número crescente de descendentes a cada geração. A combinação de excelentes características de diferentes pais pode resultar em indivíduos cuja aptidão é maior do que a dos pais. Desta forma, as espécies tornam-se cada vez mais adaptadas ao seu ambiente. Um algoritmo genético usa uma analogia deste comportamento natural; assim, as possíveis soluções do problema de otimização são denominadas de indivíduos, que podem ser agrupados, formando uma população. A aptidão de um indivíduo representa o grau de otimalidade da resposta produzida por ele, ou seja, o quão próximo ele está do ponto ótimo. Esta aptidão é calculada pela função-aptidão que, em alguns casos, pode ser a própria função que se deseja otimizar.

Além dos termos apresentados acima, encontram-se, na literatura, outros termos originados da biologia, e relacionados aos AG's (LACERDA e CARVALHO, 1999):

Cromossomo - Nos AG's, um cromossomo representa a estrutura de dados que codifica uma solução para um problema, ou seja, um simples ponto no espaço de busca. Pode ser uma cadeia de bits, ou um vetor contendo as variáveis de decisão do problema de otimização;

Indivíduo - Um simples membro da população. Nos AG's, um indivíduo é formado pelo cromossomo e sua aptidão;

População – representa um conjunto de indivíduos da mesma espécie. Na linguagem dos AG's, representa um conjunto de pontos candidatos a solução do problema de otimização.

Gene - Na biologia é a unidade de hereditariedade que é transmitida pelo cromossomo e que controla as características do organismo. Nos AG's, é um parâmetro codificado no cromossomo, ou seja, um elemento do vetor que representa o cromossomo;

Genótipo - Na biologia representa a composição genética contida no Genoma, ou seja, o conjunto de genes de 1 indivíduo. Nos AG's, representa a informação contida no cromossomo;

Fenótipo - Nos Algoritmos Genéticos representa o objeto, estrutura ou organismo construído a partir das informações do genótipo; é o cromossomo decodificado;

Alelo - Na biologia representa uma das formas alternativas de um gene. Nos AG's, representa os valores que o gene pode assumir. Por exemplo, um gene que representa o parâmetro cor de um objeto poderia ter os alelos azul, preto, verde, etc;

Empregar o AG para o cálculo de pontos de máximo ou mínimo de uma função é especialmente útil quando esta não é suave do ponto de vista analítico, ou seja, não é derivável ou é complicada de derivar, inclusive podendo ser descontínua. Nestas situações, a maioria das técnicas, principalmente de otimização numérica, não podem ser aplicadas. Além disso, esta técnica apresenta uma vantagem mais evidente quando se trabalha com otimização de funções mais complexas, como funções não lineares, e que apresentem grande número de variáveis (RAUCH e HARREMÕES, 1999; MULLIGAN e BROWN, 1998; WANG, 1997). Outro ponto a favor dos AG's

consiste no fato de que a solução obtida por tal método, ou mesmo a convergência dele, não é excessivamente dependente do ponto inicial (GUPTA, GUPTA e KHANNA, 1998).

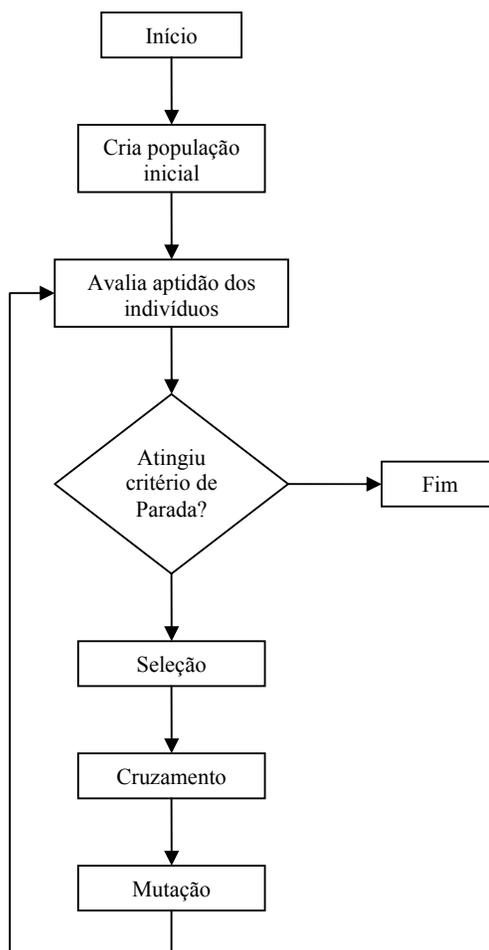
Além disso, segundo LACERDA e CARVALHO (1999), os algoritmos genéticos apresentam algumas outras vantagens, pois funcionam tanto com parâmetros contínuos como discretos, ou uma combinação deles; realizam buscas simultâneas em várias regiões do espaço de busca, pois trabalham com uma população, e não com um único ponto, e desta forma reduzem consideravelmente a probabilidade de ocorrência de um mínimo local; fornecem uma lista de parâmetros ótimos e não uma simples solução; são fáceis de serem implementados em computadores; são modulares e portáteis, no sentido de que o mecanismo de evolução é separado da representação particular do problema considerado, assim, eles podem ser transferidos de um problema para outro; são flexíveis para trabalhar com restrições arbitrárias e otimizar múltiplas funções com objetivos conflitantes; são também facilmente hibridizados com outras técnicas de otimização.

2.3 PRINCÍPIOS BÁSICOS DE UM ALGORITMO GENÉTICO

A implementação de um algoritmo genético começa com a geração aleatória de uma quantidade de cromossomos, ou seja, de vetores contendo as variáveis de decisão do problema de otimização; ao conjunto destes dá-se o nome de população inicial. Estes vetores são avaliados durante o processo evolutivo e recebem uma nota que reproduz a qualidade da solução que eles representam. Aos mais aptos, ou seja, àqueles que produzirem as melhores soluções, é atribuída maior probabilidade de serem selecionados, de forma que eles geralmente são mantidos no processo do AG. Quanto aos menos aptos, esta probabilidade é menor, de forma que estes geralmente são descartados do processo. Aqueles vetores selecionados podem ser combinados para a formação de outros, os quais integrarão a população; este processo representa o chamado operador de “crossover” ou cruzamento. Além disso, os cromossomos formados no processo de cruzamento podem sofrer modificações em suas características fundamentais, através do operador de mutação. Desta forma, estes

indivíduos gerados possuem algumas características herdadas dos cromossomos “pais”. Esta nova população de possíveis soluções produzidas contém uma maior proporção das características dos melhores indivíduos da geração anterior. Desta forma, características ótimas são espalhadas por muitas gerações na população, sendo misturadas e permutadas com outras boas características. Através do favorecimento do cruzamento dos melhores indivíduos da população, as áreas mais promissoras do espaço de busca são exploradas. Se o algoritmo foi bem elaborado, a população convergirá para uma solução ótima do problema. A Figura 2.1 apresenta a configuração de um algoritmo genético típico.

FIGURA 2.1 - ESQUEMA DE UM ALGORITMO GENÉTICO TÍPICO.



Fonte: Adaptado de PEIXOTO (2006).

Cada ciclo completo do algoritmo da Figura 2.1, desde a avaliação da aptidão, ou “fitness”, dos indivíduos, até a aplicação do operador de mutação, representa 1 geração, na linguagem dos algoritmos genéticos.

Os algoritmos genéticos costumam trabalhar com os valores codificados. As codificações, ou representações dos valores, mais utilizadas são a binária e a real.

2.4 REPRESENTAÇÃO BINÁRIA

Na representação binária, isto é, na base dois, cada posição na cadeia binária representa uma potência de dois, da mesma forma que nos números decimais cada posição representa uma potência de dez.

De forma geral, quando se tem um número binário é possível decodificá-lo em um número decimal, R, através da Equação (2.1) (ARAÚJO, 2003).

$$R = \sum_{i=1}^l \text{bin}_i 2^{i-1} \quad (2.1)$$

Onde bin representa um algarismo (0 ou 1) dentro da cadeia de bits; i é a posição desta variável na cadeia; l é o tamanho da cadeia de bits.

Na representação binária das variáveis de decisão, o número de bits, que depende da precisão desejada, pode ser calculado pela Equação (2.2) (ARAÚJO, 2003).

$$2^{m-1} < 10^t (\max_y - \min_y) < 2^m - 1 \quad (2.2)$$

Onde m é o número de bits necessários para se alcançar certa precisão; \min_y e \max_y são os limites inferior e superior do espaço de busca da variável considerada; t é a precisão desejada, em número de casas decimais.

A variável R, que representa um número convertido da base binária para a decimal, está contida no intervalo $[0 \dots 2^l - 1]$; portanto é necessário mapeá-lo para o intervalo de domínio de uma variável real genérica y, $[\min_y - \max_y]$. Isto pode ser feito pela Equação (2.3) (ARAÚJO, 2003).

$$y = \min_y + (\max_y - \min_y) \frac{R}{2^l - 1} \quad (2.3)$$

Segundo LACERDA E CARVALHO (1999), a representação binária é historicamente importante, sendo fácil de utilizar e manusear, também é simples de analisar teoricamente. Porém, se um problema de otimização tem parâmetros contínuos, e o usuário quer trabalhar com boa precisão numérica, ele precisará armazenar longas cadeias binárias na memória. Quando, além de precisar trabalhar com alta precisão, deseja-se otimizar funções de muitas variáveis, a cadeia de bits torna-se ainda maior, o que pode fazer o algoritmo convergir vagorosamente. Além disso, empregando-se a representação binária não se tem uniformidade nos operadores. Por exemplo, a mutação nos primeiros bits da cadeia afeta mais a aptidão do que a mutação nos últimos bits (LACERDA E CARVALHO, 1999).

2.5 REPRESENTAÇÃO REAL

A representação real gera cromossomos menores, uma vez que cada variável ocupa apenas uma posição. Por exemplo, um vetor \mathbf{p} , candidato a solução de um problema de minimização de uma função de 3 variáveis (x_1, x_2, x_3) seria representado da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \mathbf{p} &= (x_1, x_2, x_3) \\ \mathbf{p} &\in \mathbb{R}^3 \end{aligned} \quad (2.4)$$

Ou seja, o cromossomo é composto por 3 variáveis. Por outro lado, se fosse adotada a codificação binária, cada variável seria representada por uma cadeia de bits, de forma que se teria uma enorme cadeia de 0's e 1's. A representação real também é mais vantajosa pela facilidade que ela oferece de se criarem novos operadores genéticos para o algoritmo (LACERDA e CARVALHO, 1999).

2.6 OPERADORES GENÉTICOS

Os operadores genéticos são os responsáveis por transformar a população, através das sucessivas gerações. Eles são necessários para que a população se

diversifique, e alcance as regiões mais promissoras do espaço de busca. Os operadores mais importantes são: seleção, cruzamento e mutação.

2.6.1 Seleção

A seleção constitui o mecanismo de escolha dos indivíduos (pontos candidatos a solução) de acordo com os valores da função-objetivo, ou função-aptidão, na linguagem dos algoritmos genéticos. Aqueles com alto valor de aptidão têm maior probabilidade de contribuir com um ou mais descendentes para a próxima geração. Em populações naturais, a aptidão constitui a habilidade do indivíduo de sobreviver aos predadores, doenças e outros obstáculos para chegar à idade adulta e posterior reprodução. Existem diversas maneiras de selecionar os mais aptos, porém as duas principais são: seleção por torneio e seleção proporcional à aptidão, ou seleção roda da roleta (LACERDA e CARVALHO, 1999).

Na seleção por torneio são escolhidos aleatoriamente, e com probabilidades iguais, alguns indivíduos da população. Entre estes indivíduos escolhidos, aquele que apresentar maior aptidão é selecionado, ou seja, é dito que ele venceu o torneio. Na seleção proporcional à aptidão é criada uma “roleta”, onde cada indivíduo da população possui uma fração proporcional a sua aptidão. Após isto, “gira-se esta roleta” e, devido ao fato dos indivíduos com maiores aptidões possuírem uma área maior da roleta, eles têm maiores possibilidades de serem selecionados (LACERDA e CARVALHO, 1999).

2.6.2 Cruzamento

O operador de cruzamento (ou crossover) é aplicado a um par de indivíduos selecionado da população - os chamados indivíduos pais - gerando dois indivíduos filhos. É este operador que possibilita a introdução de novos indivíduos na população. Segundo LACERDA e CARVALHO (1999), ele é considerado, juntamente com a mutação, o principal mecanismo dos AG's, pois explora as regiões desconhecidas do espaço de busca. Existem vários tipos de operadores de cruzamento, tanto para

representação binária, quanto para representação real dos cromossomos. São apresentados os principais:

i) Cruzamento de um ponto (LACERDA e CARVALHO, 1999) – Sejam dois cromossomos de codificação binária selecionados para o cruzamento, os chamados cromossomos pais:

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_p &= (a_1, a_2 \dots a_N) \\ \mathbf{b}_p &= (b_1, b_2 \dots b_N) \end{aligned} \quad (2.5)$$

onde N representa o número de genes do cromossomo, ou seja, o número de bits que formam a cadeia binária; a_i e b_i , para $i = 1, 2 \dots N$, representam os bits desta cadeia, e assumem os valores 0 ou 1.

Um número inteiro J_x , entre 1 e N-1, é gerado aleatoriamente, e as cadeias de bits dos cromossomos pais são separadas nesta posição:

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_p &= (a_1, a_2, \dots, a_{j_x} \mid a_{j_x+1}, \dots, a_N) \\ \mathbf{b}_p &= (b_1, b_2, \dots, b_{j_x} \mid b_{j_x+1}, \dots, b_N) \end{aligned} \quad (2.6)$$

Produzindo, pela troca de material genético, ou permutação da cadeia, dois cromossomos filhos:

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_f &= (a_1, a_2, \dots, a_{j_x} \mid b_{j_x+1}, \dots, b_N) \\ \mathbf{b}_f &= (b_1, b_2, \dots, b_{j_x} \mid a_{j_x+1}, \dots, a_N) \end{aligned} \quad (2.7)$$

ii) Cruzamento de dois pontos (LACERDA E CARVALHO, 1999) – Dois números inteiros J_x e K_x , entre 1 e N-1, são gerados aleatoriamente. Estes números definirão os pontos de corte dos cromossomos pais:

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_p &= (a_1, a_2, \dots, a_{j_x} \mid a_{j_x+1}, \dots, a_{k_x} \mid a_{k_x+1}, \dots, a_N) \\ \mathbf{b}_p &= (b_1, b_2, \dots, b_{j_x} \mid b_{j_x+1}, \dots, b_{k_x} \mid b_{k_x+1}, \dots, b_N) \end{aligned} \quad (2.8)$$

Pela troca do material genético entre os pais serão produzidos os cromossomos filhos:

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_f &= (a_1, a_2, \dots, a_{j_x} | b_{j_{x+1}}, \dots, b_{k_x} | a_{k_{x+1}}, \dots, a_N) \\ \mathbf{b}_f &= (b_1, b_2, \dots, b_{j_x} | a_{j_{x+1}}, \dots, a_{k_x} | b_{k_{x+1}}, \dots, b_N) \end{aligned} \quad (2.9)$$

A escolha dos pontos de corte não é constante em toda a população, ou seja, para cada par de cromossomos pais um novo número inteiro, J_x ou K_x , é gerado aleatoriamente.

iii) Cruzamento Aritmético (ARAÚJO, 2003) – É empregado quando se está utilizando a representação real. Realiza um tipo de combinação linear entre os cromossomos pais, para gerar os cromossomos filhos.

Considere dois cromossomos pais, de codificação real, selecionados para o cruzamento:

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_1 &= (p_{1,1}, p_{1,2}, \dots, p_{1,n}) \\ \mathbf{p}_2 &= (p_{2,1}, p_{2,2}, \dots, p_{2,n}) \\ \mathbf{p}_1; \mathbf{p}_2 &\in \mathbb{R}^n \end{aligned} \quad (2.10)$$

onde n representa o número de variáveis da função a ser otimizada.

Os cromossomos pais se combinam para gerar 2 cromossomos filhos, s_1 e s_2 , da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \mathbf{s}_1 &= \beta \mathbf{p}_1 + (1 - \beta) \mathbf{p}_2 \\ \mathbf{s}_2 &= \beta \mathbf{p}_2 + (1 - \beta) \mathbf{p}_1 \end{aligned} \quad (2.11)$$

onde β é um número aleatório, uniformemente distribuído no intervalo $[0,1)$.

2.6.3 Mutação

Os operadores de mutação são necessários para a introdução e manutenção da diversidade genética da população. Este operador altera, arbitrariamente, um ou mais componentes de um cromossomo filho escolhido; fornecendo, assim, meios para a introdução de novos elementos na população. Desta forma, a mutação assegura que a probabilidade de se chegar a qualquer ponto do espaço de busca nunca será zero (LACERDA E CARVALHO, 1999). O operador de mutação é aplicado aos cromossomos filhos com uma probabilidade de mutação igual a P_{mut} .

A seguir são apresentados alguns esquemas de mutação, tanto para a representação binária, quanto para a representação real.

i) Mutação Simples (ARAÚJO, 2003) – Em cromossomos com codificação binária, este esquema de mutação inverte, com uma probabilidade P_{mut} , os valores de alguns bits de uma cadeia. Ou seja, muda o valor de 1 para 0 ou de 0 para 1.

ii) Mutação Uniforme (ARAÚJO, 2003) – Este tipo de mutação é utilizada quando se está trabalhando com cromossomos de codificação real. Esta mutação consiste na simples substituição de um gene do cromossomo filho por um número gerado aleatoriamente. Ou seja, dado um cromossomo s , com o j -ésimo gene, s_j , selecionado para a mutação, é produzido um cromossomo s' , com a substituição do gene s_j pelo gene s'_j , dado pela Equação (2.12).

$$s'_j = (b_j - a_j)\beta + a_j \quad (2.12)$$

onde a_j e b_j representam o intervalo inferior e superior, respectivamente, do espaço de busca da variável, ou gene, s_j ; e β é um número aleatório, uniformemente distribuído entre 0 e 1.

2.7 PARÂMETROS GENÉTICOS

Para a simulação do algoritmo genético é necessário informar alguns parâmetros que controlam algumas características do algoritmo, os chamados parâmetros genéticos. Estes parâmetros definirão, por exemplo, com qual frequência serão empregados os operadores cruzamento ou mutação e, por este motivo, é importante analisar de que maneira eles influenciam no comportamento do Algoritmo Genético, para que se possa estabelecê-los conforme as necessidades do problema e dos recursos computacionais disponíveis.

2.7.1 Tamanho da População

O tamanho da população afeta o desempenho global e a eficiência dos AG's. Uma população pequena oferece uma pequena cobertura do espaço de busca, causando uma queda no desempenho. Por outro lado, uma grande população fornece uma

melhor cobertura do espaço de busca do problema, prevenindo a convergência prematura para soluções locais. Entretanto, com uma grande população tornam-se necessários recursos computacionais maiores, ou um tempo maior de processamento do problema (LACERDA E CARVALHO, 1999). Desta forma, o tamanho da população a ser utilizada deve ser equilibrado, para que não se incorra em nenhum dos problemas citados.

2.7.2 Probabilidade de Cruzamento

Também denominada probabilidade de “crossover” (P_c), representa a frequência ou probabilidade com que ocorrerá cruzamento entre os indivíduos selecionados da população. Não ocorrendo o cruzamento, os filhos serão iguais aos pais, o permite que algumas soluções sejam preservadas.

Quanto maior for esta taxa, mais rapidamente novas estruturas serão introduzidas na população. Entretanto, isto pode gerar um efeito indesejado, pois a maior parte da população será substituída podendo ocorrer perda de cromossomos de alta aptidão. Com um valor baixo, o algoritmo pode tornar-se muito lento, uma vez que não serão exploradas regiões novas dentro do espaço de busca.

2.7.3 Probabilidade de Mutação

A probabilidade de mutação, P_{mut} , representa a frequência com que ocorrerá o processo de mutação na população. Uma baixa taxa de mutação previne que uma dada posição fique estagnada em um valor, além de possibilitar que se chegue em qualquer ponto do espaço de busca. Com uma taxa muito alta a busca se torna essencialmente aleatória.

2.7.4 Intervalo de Geração e Tipo de Substituição dos Indivíduos

Controla a porcentagem da população que será substituída durante a geração seguinte. Normalmente, para que se mantenha uma população com tamanho constante durante a simulação, elimina-se da população o mesmo número de indivíduos que

foram criados através do processo de cruzamento. Pode haver casos para os quais todos os indivíduos da população são substituídos de uma geração para a outra.

Basicamente, existem dois tipos de substituição dos indivíduos: substituição geracional e substituição “Steady-State”.

2.7.4.1 Substituição Geracional

Na substituição geracional toda a população é substituída em cada geração; ou seja, são gerados N filhos para substituir os N pais. Alternativamente, podem ser criados N filhos, e os N melhores indivíduos da composição de pais e filhos substituem a população atual. Na substituição geracional com elitismo os m melhores pais nunca são substituídos por filhos piores. Geralmente é utilizado um valor de m igual a 1, pois ao se aumentar muito o seu valor, corre-se o risco de convergência prematura (LACERDA E CARVALHO, 1999).

2.7.4.2 Substituição “Steady-State”

Na substituição “Steady-State” são criados alguns indivíduos em cada geração, que substituem os piores indivíduos da população. Alternativamente, os filhos podem substituir os pais ou os indivíduos mais velhos da população, baseado na suposição de que estes já transmitiram os seus genes à população (LACERDA e CARVALHO, 1999). Na forma geral da substituição “Steady-State”, são criados n filhos que substituem os n piores pais. Em geral, a taxa de cruzamento é maior no algoritmo genético em Steady-State do que no geracional (LACERDA E CARVALHO, 1999).

2.7.5 Critérios de Parada

Existem alguns critérios de parada que informam ao algoritmo quando a execução deve ser encerrada. O encerramento da execução pode ocorrer, por exemplo, quando o AG atingir um dado número de gerações ou avaliações; quando se chegou ao valor ótimo da função objetivo, se este é conhecido, ou um valor que se considere ótimo; ou quando não ocorrer um melhoramento significativo no cromossomo de maior aptidão por um dado número de gerações.

2.8 PROBLEMAS DE CONVERGÊNCIA

Segundo LACERDA E CARVALHO (1999), a convergência prematura, um conhecido problema dos AG's, ocorre quando surgem indivíduos de alta aptidão (mas não aptidão ótima), e aqueles realmente ótimos ainda não estão presentes na população. Tais indivíduos, os chamados superindivíduos, geram um número excessivo de filhos que dominam a população. Eles espalham seus genes por toda a população, enquanto os outros genes desaparecem (tal desaparecimento de genes é denominado "genetic drift"). Como consequência, o algoritmo converge para um mínimo local.

A manutenção da diversidade dos cromossomos na população combate a convergência prematura, visto que esta é causada pela perda de diversidade. O aumento da probabilidade de mutação representa uma ação que melhora a diversidade, pois maior número de genes é criado. Outra atitude que pode combater a convergência prematura é a limitação do número de indivíduos filhos por indivíduos pais.

2.9 EXPLORATION E EXPLOITATION

Os métodos de busca exaustiva possuem a característica de explorar pontos inteiramente novos do espaço de busca. Os que usam gradiente (como o método de Cauchy ou Newton), por outro lado, caracterizam-se por utilizar a informação oriunda de pontos anteriormente visitados para encontrar os melhores. Um algoritmo de otimização eficiente deve usar estas duas técnicas, denominadas de "Exploration" e "Exploitation", respectivamente, para encontrar o ótimo global da função-objetivo (LACERDA e CARVALHO, 1999). O "crossover" e a mutação são dois mecanismos de busca dos AG's que levam à exploração de pontos inteiramente novos do espaço de busca ("exploration"), enquanto a seleção dirige a busca em direção aos melhores pontos do espaço de busca ("exploitation").

2.10 APLICAÇÕES DE ALGORITMO GENÉTICO

Por ser uma técnica de otimização, o algoritmo genético apresenta um potencial de aplicação muito amplo em várias áreas da ciência e da engenharia, pois vários são

os casos onde se busca otimizar alguma variável, como, por exemplo, minimizar o custo econômico ou a degradação ambiental. A seguir, são apresentados alguns casos encontrados na literatura, para os quais se utilizou esta técnica.

2.10.1 Aplicações Gerais

Um dos trabalhos desenvolvidos nesta linha de pesquisa foi o de WANG (1991), que aplicou o algoritmo genético na calibração de um modelo conceitual chuva-vazão, denominado Xinanjiang, para os dados da represa Bird Creek, localizada em Oklahoma, Japão. Havia 7 parâmetros no modelo que deveriam ser encontrados através da calibração, os quais descreviam a capacidade de armazenamento de água pelo solo, conversão de água evaporada em evaporação potencial, e altura de armazenamento. A calibração foi realizada através da minimização, pelo algoritmo genético, do somatório dos resíduos quadrados. Para a calibração foram empregados 6 anos de dados de evaporação total, precipitação e vazão. O autor concluiu que o algoritmo genético representou um método eficiente e robusto na calibração do modelo.

GUPTA, GUPTA e KHANNA (1998) desenvolveram um método baseado em algoritmo genético para minimizar o custo de uma rede de distribuição de água. Neste processo de minimização havia algumas restrições quanto à vazão mínima que deveria passar pelas tubulações e diâmetro mínimo destas. Os autores rodaram o algoritmo genético para alguns estudos de caso e compararam com a solução obtida por programação não linear. O custo total da rede calculado através do algoritmo genético foi menor do que aquele calculado por programação não linear, apesar desta técnica ter apresentado convergência mais rápida em relação àquela.

RAUCH e HARREMOËS (1999) também aplicaram o algoritmo genético na calibração de um modelo chuva-vazão para um caso hipotético, com solução conhecida, para que assim fosse possível comparar esta solução com aquela obtida através do algoritmo genético. Neste modelo havia 14 parâmetros. Apesar dos parâmetros calibrados terem sido diferentes dos teóricos, eles produziram uma vazão que se ajustou razoavelmente bem à teórica. Além disso, os autores perceberam que o

algoritmo genético convergiu rapidamente no início, mas à medida que se aproximava do ponto ótimo a convergência se tornava mais lenta, o que, segundo os autores, corresponde a uma característica geral dos métodos evolutivos.

Em outro exemplo de aplicação, apresentado por WARDLAW e SHARIF (1999), procurou-se otimizar a operação de reservatórios em tempo real, com previsão estocástica de vazões, considerando que se utilizava água para irrigação e geração de energia elétrica destes reservatórios. Neste estudo foram avaliadas configurações alternativas do algoritmo genético, através de análises de sensibilidade em relação aos parâmetros genéticos. Foi resolvido “o problema dos 4 reservatórios”, que apresenta solução analítica conhecida, obtida através da programação linear; desta forma, pôde-se comparar os resultados obtidos através dos dois métodos. O objetivo consiste em otimizar a operação de um sistema de reservatórios com períodos de operação de 12 horas, atendendo a algumas restrições, como armazenamento mínimo em cada reservatório, e quantidade mínima e máxima de água a ser liberada em cada reservatório. Na configuração do AG, empregou-se a seleção por torneio com 2 indivíduos escolhidos aleatoriamente; elitismo; cruzamento uniforme e mutação uniforme; população com 100 ou 200 indivíduos; além disso, testou-se as codificações real e binária dos cromossomos. Também foram avaliadas taxas de cruzamento e mutação diferentes. Os autores concluíram que a codificação real produziu melhores resultados, e a taxa de cruzamento correspondente foi de 70%-75%, com 0,6-2 mutações por cromossomo. Além disso, para a representação real, a convergência do algoritmo foi 2 vezes mais rápida do que para a codificação binária.

O problema foi modificado, incluindo termos não lineares. Neste caso o problema foi resolvido, também, através da programação dinâmica. Observou-se que o algoritmo genético não apresentou nenhuma dificuldade adicional ao trabalhar com problema não linear, além disso, ele convergiu 3 vezes mais rápido do que o algoritmo de programação dinâmica. O problema foi modificado novamente, formulando-se um sistema com 12 reservatórios, para se aumentar o número de variáveis a serem otimizadas e, conseqüentemente, a dificuldade do problema. A configuração de AG utilizada não foi modificada. Este problema também foi resolvido por técnicas de

programação linear, para efeito de comparação. O resultado final obtido pelo algoritmo genético foi praticamente igual ao teórico (obtido pela programação linear), porém o AG convergiu 8 vezes mais lentamente do que a PL. Apesar disso, segundo os autores, o algoritmo genético apresenta a vantagem de aceitar termos não lineares, sem que isso aumente a complexidade do problema, ou a velocidade de convergência.

CHO *et al.* (2004) empregaram o algoritmo genético no desenvolvimento de um modelo de gerenciamento de qualidade da água, com o objetivo de maximizar a qualidade de água, adicionalmente à minimização dos custos de tratamento do esgoto lançado no rio Youngsan, um dos mais poluídos da Coréia do Sul, para uma bacia hidrográfica com área total de 3374 km², que comporta uma população de 1,7 milhões.

Para este estudo, os autores utilizaram um modelo de gerenciamento de qualidade da água, composto por um módulo de qualidade da água (QUAL2E) responsável pelo cálculo da concentração de poluentes ao longo do rio. Um outro módulo estava relacionado ao cálculo do custo de tratamento do esgoto lançado ao rio, para o qual se desenvolveram rotinas de algoritmo genético com o objetivo de otimizar os custos de operação de cada uma das 13 estações de tratamento existentes na bacia, além de otimizar a localização e os custos de 13 novas estações de tratamento que eventualmente seriam construídas.

Após aplicarem o modelo para a bacia do rio Youngsan, concluíram que, para atender os parâmetros de qualidade da água, deveriam ser construídas 7 novas estações de tratamento, sendo que destas, 5 deveriam apresentar um tratamento avançado; e das existentes, 9 deveriam melhorar o tipo de tratamento. Em comparação com algumas outras metodologias aplicadas nesta otimização, o algoritmo genético apresentou vantagens, principalmente em relação ao custo do tratamento, que se apresentou 45% menor em relação às outras metodologias, além de atender aos padrões de qualidade da água estabelecidos.

SOARES e REIS (2004) utilizaram o algoritmo genético e procedimentos híbridos (AG e simplex), para a calibração dos parâmetros de rugosidade absoluta e do modelo de vazamento para uma rede de distribuição de água hipotética. Os autores constataram que o AG apresentou dificuldade quanto à precisão dos valores das

variáveis de decisão, principalmente quando o número destas variáveis era elevado. Por este motivo, o AG foi combinado com o método Simplex, o que poupou esforço computacional, além de melhorar a solução.

PARK *et al.* (2006) integraram o algoritmo genético a um sistema de informações geográficas (SIG) para estabelecer a alocação ótima de estações de monitoramento de qualidade da água na bacia do rio Nakdong, Coréia. A função-objetivo empregada era composta por termos que descreviam a representatividade da estação em relação à bacia, a proximidade de pontos de lançamento de esgoto industrial e de estações de tratamento de esgoto. Os resultados encontrados mostraram que a configuração atual das estações está aquém da configuração otimizada pelo algoritmo genético. Além disso, o autor percebeu que no início do processo evolucionário do algoritmo genético, a aptidão da população cresce rapidamente, porém, quando esta população se aproxima do ponto ótimo, ocorre pouca melhoria no valor da função-objetivo.

2.10.2 Aplicações de AG em Modelos de Qualidade de Água

Alguns pesquisadores também têm aplicado o algoritmo genético para problemas de calibração de modelos de qualidade de água. Entre eles estão MULLIGAN e BROWN (1998), que empregaram o algoritmo genético para calibrar a equação de Streeter-Phelps primeiramente para um rio hipotético, para verificar a aplicabilidade do método em calibração de um modelo de qualidade da água que incluía a DBO carbonácea, nitrogenada e oxigênio dissolvido. Em seguida, foram utilizados dados reais de campo na calibração. Os autores obtiveram vários conjuntos de valores para os parâmetros, sendo que todos calibraram o modelo de qualidade da água.

NG e PERERA (2003) realizaram um estudo detalhado sobre a importância dos parâmetros genéticos na calibração de modelos de qualidade da água, otimizando estes parâmetros. Para a realização deste estudo foi assumida a hipótese de que a sensibilidade do modelo em relação aos parâmetros de qualidade de água tinha efeito na escolha dos parâmetros genéticos apropriados. Para cumprir este propósito, o

modelo de qualidade da água QUAL2E foi ligado ao software de algoritmo genético denominado GENESIS. Devido às limitações deste software, somente foi realizada a otimização dos parâmetros probabilidade de cruzamento e de mutação. A população inicial foi gerada aleatoriamente, o cruzamento foi de 2 pontos, e a função aptidão foi representada pela função de mínimos quadrados.

Os autores aplicaram o algoritmo genético na calibração do rio Yarra, localizado na parte leste de Victoria, Austrália. Eles realizaram uma otimização dos parâmetros genéticos, e utilizaram tanto estes quanto aqueles encontrados na literatura para a calibração do modelo de qualidade de água para o rio em questão. A diferença dos resultados entre um e outro caso ficou entre 4% e 35%. Apesar disso, as concentrações ficaram próximas, e se ajustaram bem aos valores de concentração monitorados ao longo do rio. Isto deve à baixa sensibilidade do modelo.

PELLETIER et. al. (2006), desenvolveram, a partir do modelo de qualidade da água QUAL2E, outro modelo denominado QUAL2Kw, implementado no Microsoft Excel, e que simula o transporte e decaimento de alguns constituintes, como DBO, OD, fitoplâncton, pH, alcalinidade, sólidos suspensos inorgânicos, bactérias, alga do leito do rio, além de outras formas de nutrientes. Além disso, neste modelo está acoplada uma rotina de algoritmo genético denominada PIKAIA GA, a qual é utilizada na calibração dos parâmetros do modelo de qualidade da água.

2.11 SUMÁRIO DO CAPÍTULO 2

No presente capítulo apresentou-se a teoria geral da técnica denominada algoritmo genético, um método probabilístico que utiliza uma analogia da evolução das espécies acoplada à teoria genética para resolver problemas de otimização, considerando que as possíveis soluções do problema são representadas por indivíduos. Esta técnica é composta por operadores genéticos como a seleção, cruzamento e mutação, os quais conduzem a população a evoluir sucessivamente, conforme decorrem as gerações, para um ponto de ótimo global.

Uma vez que esta técnica resolve problemas de otimização, ela apresenta grande aplicabilidade em várias áreas da engenharia. Na literatura, foram encontrados

exemplos de aplicação na otimização da operação de reservatórios, na alocação ótima de estações de monitoramento de água, além da calibração de modelos chuva-vazão. Além disso, foram encontrados exemplos de calibração de modelos de qualidade da água na literatura internacional, mas não na nacional. Em todos estes casos, percebeu-se que estratégias diferentes em relação ao algoritmo genético foram utilizadas: enquanto uns autores utilizaram rotinas prontas, outros as programaram, e entre estes, diferentes configurações de AG foram utilizadas.

3 MODELOS MATEMÁTICOS DE QUALIDADE DA ÁGUA

Segundo CHAPRA (1997), um modelo matemático de qualidade da água pode ser definido como uma representação idealizada da realidade, que fornece a resposta de um corpo hídrico a um estímulo externo, ou seja, a concentração de um poluente num ponto qualquer do rio devido ao lançamento de cargas ao longo deste rio. Desta forma, os modelos de qualidade de água apresentam potencial de aplicação, por exemplo, em estudos de alocação de descargas de estações de tratamento de esgoto, além de investigações de impactos ambientais e sanitários causados pela descarga de contaminantes (MULLIGAN e BROWN, 1998).

Um modelo de qualidade da água é composto, basicamente, por dois módulos integrados computacionalmente: hidrodinâmico e de transporte. O módulo hidrodinâmico fornece o termo advectivo (campo de velocidade), que será utilizado no módulo de transporte, enquanto que no de transporte estão inseridos os termos relacionados às perdas ou ganhos de massa do poluente que ocorre através das reações químicas ou de mecanismos de transporte, como a advecção e dispersão. Neste capítulo faz-se uma breve revisão identificando os aspectos físicos relevantes para este estudo.

3.1 MÓDULO HIDRODINÂMICO

Ao se modelar a qualidade da água em corpos d'água onde as três dimensões espaciais são relevantes, caso de reservatórios e lagos por exemplo, torna-se necessário conhecer todo o campo de velocidades. A determinação deste campo se dá através da resolução das equações da hidrodinâmica clássica, envolvendo basicamente, as equações de conservação de massa e da conservação da quantidade de movimento nas 3 direções x, y e z a seguir identificadas (Equações 3.1 a 3.4):

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (3.1)$$

$$\left[\frac{\partial u}{\partial t} \right] + \left[u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right] = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \rho g_x + \nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) \quad (3.2)$$

$$\left[\frac{\partial v}{\partial t} \right] + \left[u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} \right] = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \rho g_y + \nu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) \quad (3.3)$$

$$\left[\frac{\partial w}{\partial t} \right] + \left[u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} \right] = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \rho g_z + \nu \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) \quad (3.4)$$

onde ρ representa a densidade da água; ν é a viscosidade cinemática da água (unidade); g_x , g_y e g_z representam a força da gravidade agindo nestas direções; u , v e w representam as velocidades nas direções x , y e z , respectivamente; .

Na equação de conservação da massa (Equação (3.1)), foi considerado que a densidade da água não varia no tempo, nem no espaço.

As Equações (3.2), (3.3) e (3.4) representam as equações de Navier – Stokes (equação da conservação de quantidade de movimento). O lado esquerdo da equação representa a aceleração total de uma partícula fluida. Esta aceleração é composta pelo termo advectivo (2º termo entre colchetes), que está relacionado à aceleração adquirida por uma partícula através do seu transporte para uma região de velocidade diferente; além do termo da aceleração local (1º termo entre colchetes), que ocorre quando esta partícula fluida sofre uma variação da velocidade em relação ao tempo. O primeiro termo do lado direito da equação da equação de Navier – Stokes representa as forças de pressão; o segundo termo representa as forças de gravidade; finalmente, o terceiro termo representa as forças viscosas.

Desta forma, as equações de Navier – Stokes, quando combinadas com a equação de conservação da massa, possibilitam uma descrição matemática completa do campo de velocidade de fluidos newtonianos incompressíveis, como a água (MUNSON *et al.*, 2002).

3.1.1 Equações de Saint Venant

As equações da hidrodinâmica apresentadas anteriormente podem ser simplificadas para serem aplicadas em canais. Primeiramente, considera-se um escoamento unidimensional no canal com uma distribuição hidrostática de pressão na direção vertical. Após estas simplificações, as equações da continuidade e da

quantidade de movimento podem ser reescritas, levando o nome de equações de Saint – Venant (HENDERSON, 1966):

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial Q}{\partial x} = 0 \quad (3.5)$$

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{Q^2}{A} \right) + gA \left(\frac{\partial y}{\partial x} - S_0 \right) + gAS_f = 0 \quad (3.6)$$

onde: A é a área da seção transversal do escoamento; y é o nível da superfície de água do canal; S₀ é a declividade do fundo do canal; S_f é a declividade da linha de energia.

Desta forma, para o caso particularizado de escoamento num canal, podem-se empregar as equações de Saint – Venant para o cálculo do campo de velocidade.

3.1.2 Equação de Manning

Uma outra forma de se obter a velocidade que será empregada nos modelos de qualidade da água, consiste em medi-la diretamente no rio. Porém, quando esta velocidade não é conhecida diretamente, é possível obtê-la através da equação de Manning (Equação (3.7)), a partir dos valores de vazão, que são obtidos mais facilmente. Porém, esta equação somente é válida para o caso em que se tenha escoamento uniforme, ou seja, sem aceleração, e escoamento unidimensional, seção transversal do canal constante, além de regime permanente.

$$Q = \frac{1}{n} \frac{A^{5/3}}{p^{2/3}} S_0^{1/2} \quad (3.7)$$

onde n representa o coeficiente de Manning (L^{-1/3}T); A, a área da seção transversal do canal (L²); S₀, a declividade do canal (LL⁻¹); Q, a vazão (L³T⁻¹); p, o perímetro molhado (L).

O coeficiente de Manning constitui um parâmetro que representa as características físicas do canal, como a rugosidade superficial e irregularidades do canal, vegetação de fundo, alinhamento do canal ou sinuosidade, erosão e sedimentação que provoque alterações nas características da seção transversal,

obstruções como pilares de ponte ou lixo, material em suspensão e carga de fundo (HENDERSON, 1966).

Sendo conhecida a vazão, a Equação (3.7) é utilizada para o cálculo da profundidade de escoamento uniforme, que será empregada no cálculo da área da seção transversal, que, por sua vez, será usada para calcular a velocidade do escoamento uniforme. Segundo HENDERSON (1966), o escoamento uniforme representa uma simplificação do escoamento real, pois raramente ocorre na natureza, uma vez que os canais reais apresentam seção transversal irregular. Apesar disso, para se alcançar o objetivo de modelar a qualidade de água ao longo de um canal, esta simplificação é considerada aceitável.

3.2 MÓDULO DE TRANSPORTE

O módulo de transporte do modelo de qualidade de água é desenvolvido baseado no princípio da conservação de massa. Desta forma, admite-se que a massa de um poluente lançada num corpo hídrico não pode ser destruída, porem é transformado, através de reações químicas, em outras substâncias; ou então transportada para outros pontos do corpo hídrico através do processo de advecção ou difusão. Para se iniciar a apresentação do modelo de qualidade de água utilizado, apresenta-se a forma geral da equação de conservação da massa ou de transporte (Equação (3.8)), uma equação diferencial parcial hiperbólica de 2º ordem com termo de reação.

$$\frac{\partial M}{\partial t} + \left[\bar{u} \frac{\partial M}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial M}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial M}{\partial z} \right] = \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial M}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial M}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z \frac{\partial M}{\partial z} \right) \right] \pm \text{reações} \quad (3.8)$$

onde as variáveis \bar{u} , \bar{v} e \bar{w} da Equação (3.8) representam as velocidades médias (LT^{-1}) nas direções x, y e z, respectivamente; M é a concentração do elemento que está sendo modelado (ML^{-3}); D_x , D_y e D_z são os coeficientes de dispersão (L^2T^{-1}) nas direções x, y e z, respectivamente. Como o efeito da difusão turbulenta normalmente é muito superior ao efeito da difusão molecular, estes coeficientes são quase que totalmente constituídos pelo termo da difusão turbulenta.

Nesta equação são consideradas as três dimensões espaciais. O primeiro termo do lado esquerdo da equação constitui a variação temporal da concentração de um elemento qualquer. O termo entre colchetes, do lado esquerdo desta equação, representa o transporte advectivo, ou seja, o transporte ocasionado pelo campo de velocidade, a saber: \bar{u} , \bar{v} e \bar{w} , nas direções x , y e z . O termo entre colchetes do lado direito representa o transporte difusivo, ou seja, o transporte devido ao movimento aleatório das moléculas do elemento, no caso de difusão molecular, ou o movimento aleatório de porções macroscópicas de água, no caso da difusão turbulenta. Finalmente, também está incluído na equação o termo correspondente às reações que ocorrem no corpo hídrico, tanto aquelas que formam o poluente que está sendo modelado, quanto as que degradam este poluente.

Em sistemas aquáticos, como os rios, geralmente os valores das variáveis na direção longitudinal (x) são muito superiores às outras direções (y e z). Desta forma, considera-se um rio como um sistema unidimensional. Além disso, outra simplificação consiste em considerar que o coeficiente de dispersão longitudinal (D_x) não varia ao longo da direção x . Após estas simplificações, a equação de transporte de massa de um poluente será:

$$\frac{\partial M}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial M}{\partial x} = D_x \frac{\partial^2 M}{\partial x^2} \pm \text{reações} \quad (3.9)$$

3.2.1 Modelo para concentração de DBO

A demanda bioquímica de oxigênio (DBO) é considerada um importante parâmetro de qualidade de água em rios, pois representa uma medida da quantidade de oxigênio dissolvido (OD) que será consumida no processo metabólico dos microorganismos.

A demanda bioquímica de oxigênio pode ser dividida em demanda carbonácea (DBO_c) e nitrogenada (DBO_n). A DBO_n representa a quantidade de OD demandada por microorganismos para a oxidação da amônia em nitrito e este em nitrato, ou seja, para a nitrificação.

Por outro lado, a DBO_c representa a quantidade de OD necessária para a oxidação bioquímica da matéria orgânica por microorganismos decompositores, principalmente as bactérias heterotróficas aeróbias (VON SPERLING, 1996). Por este motivo, a DBO carbonácea também pode ser interpretada como a quantidade de matéria orgânica presente no rio. A reação química simplificada da oxidação da matéria orgânica pelas bactérias é apresentada na Equação (3.3) (VON SPERLING, 1996).



Assumindo que a degradação de matéria orgânica possa ser modelada como uma reação de primeira ordem, a variação de DBO_c pode ser calculada pela Equação (3.11).

$$\text{reação1} = -k_d L \quad (3.11)$$

onde k_d (T^{-1}) representa a taxa de remoção de matéria orgânica devido à decomposição pelos microorganismos; L representa a concentração de DBO carbonácea (ML^{-3}).

Além disso, é conhecido que a matéria orgânica se apresenta basicamente em duas formas: em suspensão e dissolvida. A matéria orgânica em suspensão tende a sedimentar no corpo de água, acumulando-se no fundo deste, misturada ao lodo. Por outro lado, a matéria orgânica depositada no fundo do corpo hídrico pode ser ressuspensa pela energia mecânica do escoamento, e incorporada novamente à coluna de água, retornando ao estado de matéria orgânica suspensa. Dependendo das condições do escoamento a matéria orgânica pode sofrer novamente o processo de sedimentação. Segundo CHAPRA (1997), o efeito da sedimentação da matéria orgânica é mais importante em situações onde ocorre grande quantidade de sólidos orgânicos na água, e também em rios rasos, com profundidade menor do que 1 m.

Este processo de sedimentação da matéria orgânica, e a sua eventual ressuspensão, também pode ser modelado como uma reação de decaimento de primeira ordem, representada pela Equação (3.12).

$$\text{reação2} = -k_s L \quad (3.12)$$

onde k_s (T^{-1}) representa a taxa de remoção de matéria orgânica devido ao efeito da sedimentação, ou taxa de deposição. Segundo CHAPRA (1997), esta taxa está relacionada aos parâmetros fundamentais, como velocidade de deposição da matéria orgânica (v_s) e profundidade do rio (H) (Equação (3.13)).

$$k_s = \frac{v_s}{H} \quad (3.13)$$

Para completar o balanço de massa, considera-se que pode haver uma carga difusa de DBO ao longo do rio: S_L [$ML^{-3}T^{-1}$].

As reações de consumo de DBO, bem como a carga difusa, são substituídas na equação de transporte unidimensional (Equação (3.9)). Considerando a hipótese de regime permanente ou de equilíbrio dinâmico, e desprezando o termo de dispersão longitudinal ($D_x=0$), tem-se:

$$\bar{u} \frac{dL}{dx} + (k_d + k_s)L = S_L \quad (3.14)$$

Esta é uma equação diferencial ordinária de primeira ordem. Além disso, considerando que a velocidade, as taxas de remoção e a carga difusa não variam com x , ela se torna uma equação diferencial ordinária com coeficientes constantes, e pode ser resolvida analiticamente. Para a solução analítica, aplica-se a seguinte condição de contorno: $L(x=0)=L_0$; ou seja, num ponto inicial do rio ($x = 0$) é conhecida uma concentração inicial de DBO (L_0). Resolvendo a Equação (3.14), e aplicando a referida condição de contorno, obtém-se a Equação (3.15), que relaciona a concentração de DBO com a distância longitudinal (CHAPRA, 1997).

$$L = L_0 \exp\left(-k_r \frac{x}{\bar{u}}\right) + \frac{S_L}{k_r} \left(1 - \exp\left(-k_r \frac{x}{\bar{u}}\right)\right) \quad (3.15)$$

onde: $k_r = k_d + k_s$, com k_r (T^{-1}) representando a taxa total de remoção de DBO.

3.2.2 Modelo para concentração de OD

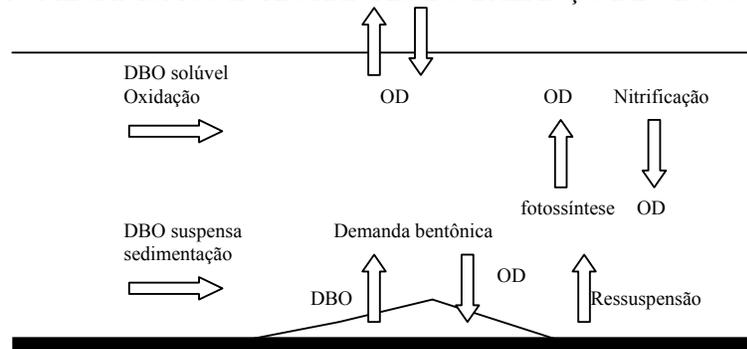
Em termos ecológicos, a repercussão mais nociva da poluição de um corpo de água por matéria orgânica é a queda dos níveis de oxigênio dissolvido, causada pela

respiração dos microorganismos envolvidos na degradação da matéria orgânica (Von SPERLING, 1996). O baixo nível de OD na água pode restringir a sobrevivência das espécies aquáticas superiores, como os peixes, que necessitam deste gás para realizar o processo metabólico. Além disso, pode ter implicações sanitárias negativas, como a formação de odor e sabor indesejáveis na água. Desta forma, é importante o reconhecimento dos mecanismos que estão envolvidos no balanço de oxigênio dissolvido num corpo hídrico, ou seja, no processo de entrada e saída de oxigênio do sistema. Isto porque um modelo a ser utilizado para representar satisfatoriamente a evolução da concentração de OD ao longo de um rio deve considerar estes processos de forma integrada, como um sistema, além de apresentar uma boa descrição e representação de cada processo em particular.

O consumo de oxigênio dissolvido da água ocorre devido a degradação da matéria orgânica (DBO carbonácea) e a nitrificação (DBO nitrogenada). Além disso, a matéria orgânica suspensa que se sedimentou no fundo do canal e ali se acumulou, ainda é passível de sofrer degradação. Desta forma, mesmo no fundo do corpo hídrico os microorganismos continuarão oxidando a matéria orgânica e consumindo oxigênio. Essa demanda de oxigênio constitui a demanda bentônica (S_b). Por outro lado, a matéria orgânica dissolvida, juntamente com a de pequena dimensão (dificilmente sedimentável), permanece na massa líquida, ou seja, não sofre o processo de sedimentação. Segundo Von SPERLING (1996), a oxidação desta matéria orgânica corresponde ao principal fator de consumo de oxigênio.

Os mecanismos naturais que ocorrem nos corpos hídricos, conforme descritos acima, representam os mecanismos de consumo do oxigênio dissolvido na água. Porém não existem apenas mecanismos de depleção de oxigênio, mas também ocorrem acréscimos na concentração de oxigênio dissolvido por processos naturais. Entre estes mecanismos, os dois principais são representados pela reaeração atmosférica e a fotossíntese. A Figura 3.1 apresenta um esquema dos mecanismos que compõe o balanço de OD.

FIGURA 3.1 - MECANISMOS INTEGRANTES DO BALANÇO DE OD NO RIO.



FONTE: ADAPTADO DE VON SPERLING (1996).

A reaeração atmosférica constitui um processo físico no qual ocorre intercâmbio de moléculas de oxigênio na interface ar-água. A intensidade desta troca do gás é dirigida pela diferença entre a concentração de oxigênio presente na água e a concentração de saturação de oxigênio, ou seja, a máxima concentração possível do gás na água para uma dada temperatura. Como a magnitude da concentração de saturação depende de condições atmosféricas como a temperatura e pressão, a velocidade do processo de reaeração dependerá também destes fatores. Segundo Von SPERLING (1996), canais com maior turbulência apresentam reaeração mais eficiente, pois a turbulência cria uma maior “interface” ar-água, onde ocorrem as trocas gasosas. Além disso, esta turbulência proporciona a renovação das “interfaces”, e conduz o gás para várias profundidades da massa líquida devido à maior eficiência do processo de mistura. O processo de reaeração atmosférica pode ser modelado como uma reação de primeira ordem, de acordo com a Equação (3.16).

$$\text{reação} = k_a D \quad (3.16)$$

onde: k_a representa a taxa de reaeração atmosférica do rio; D representa o déficit de oxigênio no rio, ou seja, a concentração de saturação (C_s) – máxima concentração possível de oxigênio dissolvido - menos a concentração de oxigênio dissolvido na água (C) (Equação (3.17)).

$$D = C_s - C \quad (3.17)$$

Alguns autores desenvolveram equações semi-empíricas para o cálculo da taxa de reaeração atmosférica. Estas equações relacionam k_a com alguns parâmetros do canal, como profundidade (H) e velocidade média (\bar{u}) do rio; estes parâmetros, por sua vez, limitam a aplicabilidade das equações, uma vez que diferentes equações são aplicáveis para diferentes faixas de profundidade e velocidade, como pode ser visualizado na Tabela 3.1.

TABELA 3.1 – FÓRMULAS PARA CÁLCULO DE REAERAÇÃO.

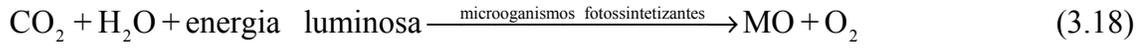
Autor	K_a (dia ⁻¹ , 20° C)	FAIXA DE APLICAÇÃO
Churchill <i>et al.</i> (1962)	$k_a = 5,03 \frac{\bar{u}^{-0,969}}{H^{1,673}}$	$0,65 \leq H \leq 3,48$ $0,56 \leq \bar{u} \leq 1,52$ $1,26 \times 10^{-4} \leq S_0 \leq 32,35 \times 10^{-3}$
O'Connor e Dobbins (1958)	$k_a = 3,95 \frac{\bar{u}^{-0,5}}{H^{1,53}}$	$0,27 \leq H \leq 7,38$ $0,1 \leq \bar{u} \leq 1,28$ $2,7 \times 10^{-5} \leq S_0 \leq 3,36 \times 10^{-3}$
Owens <i>et al.</i> (1964)	$k_a = 5,34 \frac{\bar{u}^{-0,67}}{H^{1,85}}$	$0,12 \leq H \leq 3,35$ $0,03 \leq \bar{u} \leq 1,52$
Langbien e Durum (1967)	$k_a = 5,13 \frac{\bar{u}}{H^{1,33}}$	
Thackston e Krenkel (1966)	$k_a = 24,9 \frac{(1 + \sqrt{F})u^*}{H}$ $F = u^* / \sqrt{gH}$; $u^* = \sqrt{HS_0g}$	$0,01 \leq H \leq 7,38$ $0,06 \leq \bar{u} \leq 1,52$ $2,7 \times 10^{-5} \leq S_0 \leq 2,04 \times 10^{-2}$

FONTE: BROWN & BARNELL (1987).

[H]=m; [\bar{u}]m/s

onde: F é o número de Froude; u^* é a velocidade de atrito; S_0 é a declividade longitudinal do canal (m/m).

Outro processo que eleva a concentração de OD na água é representado pela fotossíntese, um mecanismo utilizado pelos seres autotróficos para a síntese de matéria orgânica. Neste caso, o oxigênio é adicionado à água através de reações fotossintéticas realizadas por organismos clorofilados. Esta reação é oposta à da respiração (VON SPERLING, 1996), e pode ser visualizada na Equação (3.18).



De forma geral, os microorganismos autotróficos realizam mais síntese do que oxidação, gerando um saldo de compostos orgânicos que constituem a reserva de energia para os seres heterotróficos, além de um “superávit” de oxigênio que permite a respiração dos outros organismos (VON SPERLING, 1996).

Estas reações de consumo e de produção de OD, com exceção da fotossíntese, são substituídas na equação de transporte unidimensional, considerando-se regime estacionário, e desconsiderando o termo de dispersão longitudinal. Além disso, pode-se fazer uma mudança de variáveis, e inserir o déficit de OD (D), obtendo a Equação (3.19).

$$\bar{u} \frac{dD}{dx} + k_a D = k_d L + \frac{S_b}{H} \quad (3.19)$$

Neste caso também se tem uma equação diferencial ordinária de primeira ordem, com coeficientes constantes. É possível encontrar uma expressão analítica para o déficit através da resolução desta equação diferencial, e da aplicação da condição de contorno: $D(x=0)=D_0$; onde D_0 representa o déficit de oxigênio no ponto inicial do rio. A solução analítica da Equação (3.19) é apresentada na Equação (3.20) (CHAPRA, 1997).

$$\begin{aligned} D(x) = & D_0 \exp\left(-k_a \frac{x}{\bar{u}}\right) + \frac{k_d L_0}{k_a - k_r} \left[\exp\left(-k_r \frac{x}{\bar{u}}\right) - \exp\left(-k_a \frac{x}{\bar{u}}\right) \right] + \\ & \frac{S_b}{k_a H} \left[1 - \exp\left(-k_a \frac{x}{\bar{u}}\right) \right] + \frac{k_d S_L}{k_r k_a} \left[1 - \exp\left(-k_a \frac{x}{\bar{u}}\right) \right] - \\ & \frac{k_d S_L}{k_r (k_a - k_r)} \left[\exp\left(-k_r \frac{x}{\bar{u}}\right) - \exp\left(-k_a \frac{x}{\bar{u}}\right) \right] \end{aligned} \quad (3.20)$$

3.3 SUMÁRIO DO CAPÍTULO 3

Neste capítulo foram apresentadas as equações para o cálculo das concentrações de DBO e OD ao longo de um rio qualquer. Uma simplificação do modelo consistiu

em se considerar somente a DBO carbonácea. Além disso, considerou-se apenas a direção longitudinal, assumindo-se que as propriedades eram homogêneas ao longo de uma seção transversal, hipótese esta aceitável, uma vez que em rios a direção longitudinal se destaca em relação às outras. Também se considerou regime permanente, ou seja, as propriedades não variavam no tempo; além de se assumir que a advecção é muito superior à dispersão, ou seja, desconsiderou-se o termo de dispersão longitudinal.

Na equação para o cálculo da concentração de DBO estão inseridos termos de degradação e sedimentação de MO, representados pelos parâmetros k_d e k_s , respectivamente, além de um termo de aporte de matéria orgânica, representado pela carga difusa, S_L . Para a equação referente à concentração de OD, foram considerados os principais mecanismos que retiram oxigênio dissolvido da água, como a degradação microbiológica da MO na massa de água e no leito do rio; além da reaeração atmosférica - representada pelo parâmetro k_a - que eleva a concentração de OD.

Apesar de ser possível calcular a velocidade média do escoamento através das equações de Saint-Venant, no presente trabalho utilizou-se equação de Manning, na qual considera-se que o escoamento é uniforme, ou seja, não apresenta aceleração, a seção transversal é constante, além de prevalecer o regime permanente.

4 ROTINAS COMPUTACIONAIS DE ALGORITMO GENÉTICO - DESENVOLVIMENTO

Esta pesquisa aplica uma técnica de otimização na calibração de modelos de qualidade da água, cujo enfoque ainda não foi utilizado e desenvolvido na literatura especializada nacional.

Neste capítulo será dada ênfase na apresentação da estratégia de desenvolvimento das rotinas computacionais utilizadas nesta dissertação, incluindo a análise da discretização espacial, detalhes computacionais e esquemas de AG desenvolvidos em linguagem de programação Fortran.

O modelo de qualidade de água representado pelas Equações (3.15) e (3.20) foi programado (módulo de qualidade da água) de forma a funcionar acoplado às rotinas de algoritmo genético (módulo de calibração), que também foram programadas. Através deste acoplamento, o módulo de qualidade da água fornece dados calculados de concentração, tanto de DBO quanto de OD, para o módulo de calibração, no qual se realiza o processo de busca, através do algoritmo genético, dos parâmetros do modelo de qualidade da água, de forma a ajustar as concentrações monitoradas às calculadas ao longo do rio.

4.1 DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL DO RIO

Conceitualmente, um rio qualquer a ser calibrado deve estar dividido em tramos na direção longitudinal, para os quais há uniformidade hidráulica e de qualidade da água. Assim, dentro de um mesmo tramo os valores dos parâmetros do modelo de qualidade da água, usados no cálculo das concentrações, são mantidos inalterados. Da mesma forma, características hidráulicas do canal, como a largura da base, a declividade dos taludes esquerdo e direito, a declividade longitudinal e o coeficiente de Manning, podem variar para diferentes tramos ao longo do mesmo rio. Apesar das referidas considerações, estas condições simplificadas não se encontram, necessariamente, em rios reais. Além desta forma de divisão do rio, empregou-se o critério de separação dos tramos em elementos computacionais. Diferentemente dos

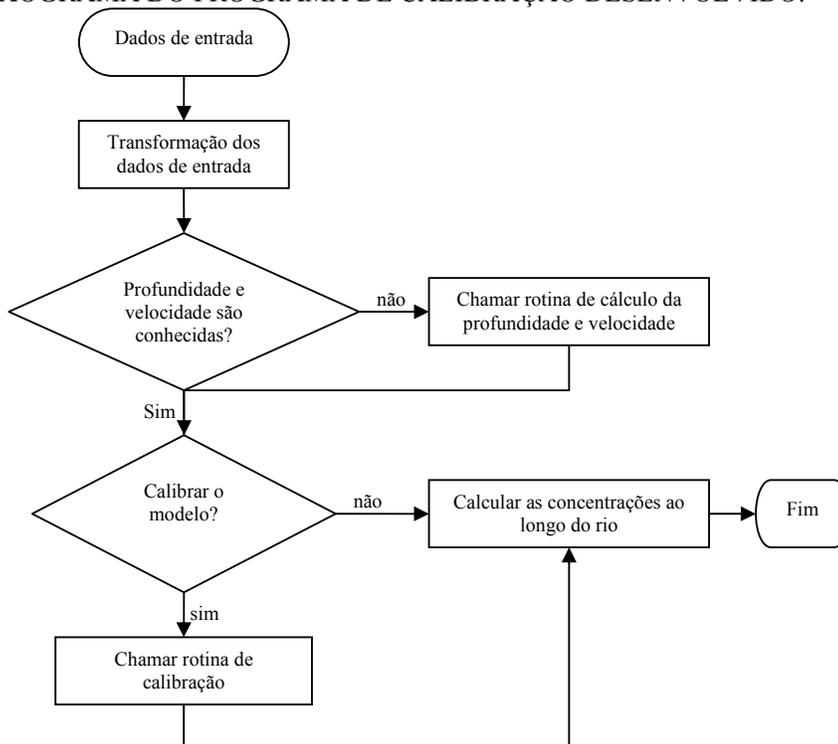
tramos, o comprimento destes elementos (dx) é mantido constante ao longo do rio. Além disso, a vazão, velocidade, ou profundidade podem variar para diferentes elementos computacionais.

Desta forma, as concentrações de DBO e OD são calculadas, nos elementos computacionais, através das equações (3.15) e (3.20). Este cálculo é realizado ao longo do rio, e na direção de montante para jusante, de forma que as concentrações calculadas no elemento computacional anterior passam a ser condições de contorno para o elemento seguinte.

4.2 PROGRAMA PARA A CALIBRAÇÃO DO MODELO DE QUALIDADE DA ÁGUA

Um programa foi desenvolvido, em linguagem de programação FORTRAN, para possibilitar a calibração do modelo matemático de qualidade da água para um rio qualquer. Neste programa estavam inseridas as rotinas de algoritmo genético, juntamente com as rotinas do modelo de qualidade da água. A Figura 4.1 apresenta um esquema geral do algoritmo de calibração implementado.

FIGURA 4.1 - FLUXOGRAMA DO PROGRAMA DE CALIBRAÇÃO DESENVOLVIDO.



O primeiro módulo, conforme indicado na Figura 4.1, está relacionado ao fornecimento, pelo usuário, das informações de entrada necessárias à calibração do modelo. Estas informações são compostas pelas características hidráulicas, como a declividade longitudinal do canal, a declividade dos taludes direito e esquerdo (no caso de se considerar um canal trapezoidal), a largura da base do canal, e o coeficiente de Manning. Como estas características hidráulicas podem variar para diferentes tramos do rio, elas devem ser informadas para cada um destes tramos. Além disso, é preciso informar quais os parâmetros de qualidade da água devem ser calibrados; o comprimento e o número de elementos computacionais; as concentrações iniciais de DBO e OD; o perfil de vazão do rio; as eventuais descargas de efluentes ao longo do rio e a concentração de DBO e OD nestes efluentes, além da localização destas descargas; o perfil de velocidade do rio, se conhecido. Os parâmetros genéticos e de calibração também devem ser informados: o espaço de busca dos parâmetros de qualidade da água; o peso da concentração de OD e DBO na função objetivo; a probabilidade de mutação. Finalmente, as concentrações de DBO e OD medidas nos pontos de monitoramento devem ser fornecidas, juntamente com a localização destes pontos.

O passo seguinte, dentro do fluxograma representado na Figura 4.1, está relacionado à transformação dos dados de entrada, ou seja, a transformações das unidades de velocidade, vazão, de cargas de matéria orgânica, etc. Os próximos passos constituiram rotinas secundárias dentro do programa principal de calibração, e serão descritas nos itens subseqüentes.

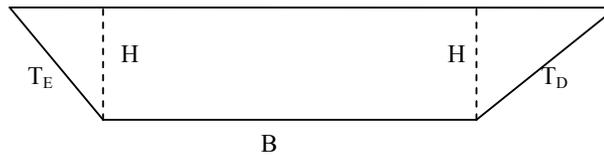
4.2.1 Cálculo da profundidade e velocidade

Nas Equações (3.15) e (3.20) necessita-se conhecer a velocidade média do rio para que se possam calcular as concentrações de DBO e OD. Mais especificamente, esta velocidade deve ser conhecida para todos os elementos computacionais que compõe todos os tramos do rio. Porém, geralmente estes dados de velocidade não estão disponíveis de forma explícita, devido ao fato de sua medição demandar grande esforço e custo. Por outro lado, os dados de vazão do rio podem ser facilmente obtidos

através de uma simples leitura de régua de nível se, para o rio em questão, se dispuser de uma curva de descarga. Desta forma, é conveniente medir o nível de água no rio, e utilizar este dado para calcular a velocidade média, através da equação de Manning (Equação (3.7)).

Para utilizar esta equação, são feitas algumas aproximações. Além das simplificações apresentadas no capítulo 3, outra simplificação consiste em considerar que um elemento computacional qualquer que compõe o canal possui uma seção transversal constante, e aproximada por uma forma trapezoidal. A Figura 4.2 ilustra a seção transversal do canal para um trecho qualquer do rio.

FIGURA 4.2 - SEÇÃO TRANSVERSAL TRAPEZOIDAL DO CANAL.



onde: B representa a largura da base do canal (m), H o nível de água (m), T_E e T_D representam o comprimento dos taludes esquerdo e direito, respectivamente (m).

Conhecendo-se a declividade dos taludes esquerdo (dec_E) e direito (dec_D), é possível calcular T_E e T_D através das Equações (4.1) e (4.2).

$$T_E = \sqrt{H^2 + \left(\frac{H}{dec_E}\right)^2} \quad (4.1)$$

$$T_D = \sqrt{H^2 + \left(\frac{H}{dec_D}\right)^2} \quad (4.2)$$

A área da seção transversal do canal trapezoidal pode ser calculada pela Equação (4.3).

$$A = \frac{H^2}{2dec_E} + \frac{H^2}{2dec_D} + BH \quad (4.3)$$

O perímetro molhado é calculado pela Equação (4.4).

$$p = B + T_E + T_D \quad (4.4)$$

Inserindo as Equações (4.1), (4.2), (4.3) e (4.4) na Equação (3.7), a equação de Manning, obtém-se uma fórmula que relaciona vazão e nível de água no rio, a equação (4.5).

$$Q = \frac{S_0^{1/2}}{n} \frac{\left(\frac{H^2}{2\text{dec}_E} + \frac{H^2}{2\text{dec}_D} + BH \right)}{\left(B + \sqrt{H^2 + \left(\frac{H}{\text{dec}_E} \right)^2} + \sqrt{H^2 + \left(\frac{H}{\text{dec}_D} \right)^2} \right)} \quad (4.5)$$

Através desta equação obtém-se, para cada elemento computacional, o nível de água no rio (H), pois todas as outras variáveis são conhecidas. Então se calcula a área da seção transversal e, por fim, de posse do valor numérico da área e da vazão, calcula-se a velocidade média através da equação de continuidade.

$$\bar{u} = \frac{Q}{A} \quad (4.6)$$

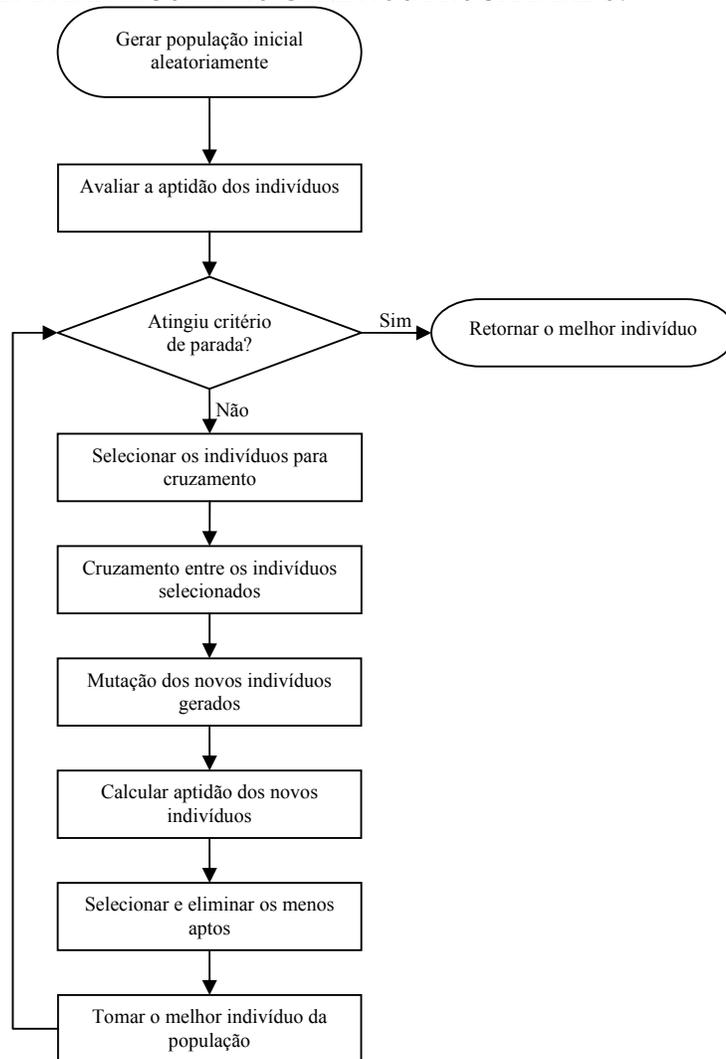
Pode-se observar que esta equação representa uma função transcendental, ou seja, não é possível isolar a variável profundidade em função das outras variáveis, de forma que ela não pode ser calculada diretamente por esta equação. Por este motivo, a profundidade deve ser calculada de alguma outra forma, como, por exemplo, utilizando o método de Newton-Raphson. Nesta dissertação, porém, o próprio algoritmo genético foi a ferramenta utilizada para este fim.

Desta forma, tanto a profundidade nos elementos computacionais do rio, quanto os parâmetros do modelo de qualidade da água para cada tramo, serão calculados empregando-se os mesmos operadores genéticos. O ponto que diferencia um ou outro algoritmo consiste na configuração do cromossomo, função-objetivo, e alguns parâmetros genéticos, como critério de parada e probabilidade de mutação. Assim, para facilitar a identificação, e evitar confusões, definem-se dois algoritmos: o AG1 e AG2. O algoritmo AG1 constitui a aplicação do AG no cálculo da profundidade através da Equação (4.5), e o algoritmo AG2 constitui a aplicação do AG na calibração do modelo de qualidade da água.

4.3 ESQUEMA DE ALGORITMO GENÉTICO UTILIZADO

A Figura 2.1, apresentada na revisão bibliográfica, constitui uma configuração conceitual de um algoritmo genético típico utilizado nesta dissertação, e detalhado na Figura 4.3. Este mesmo esquema foi empregado tanto para o cálculo das velocidades e profundidades (AG1), quanto para a calibração (AG2).

FIGURA 4.3 - ESQUEMA DE ALGORITMO GENÉTICO PROGRAMADO.



Algumas informações adicionais sobre o processo de evolução das populações são necessárias. Primeiramente, é importante definir o que se chamou de geração, que é representada pelo ciclo que se inicia na atividade de seleção dos cromossomos para o cruzamento, e termina na atividade de seleção e eliminação da população dos

cromossomos menos aptos. Este ciclo - ou geração - repete-se quantas vezes forem necessárias para que o algoritmo atinja um critério de parada, que pode ser definido como o número mínimo de gerações que devem ser simuladas, ou um erro mínimo que deve ser atingido. Além disso, tem-se outra definição importante: a simulação, que representa o ciclo que vai da geração aleatória de uma população inicial até a convergência do algoritmo. Quando se inicia uma nova simulação gera-se uma nova população inicial, que evolui através de sucessivas gerações até atingir o critério de convergência definido, retornando com a melhor solução encontrada.

Como foi observado na revisão bibliográfica, o algoritmo genético apresenta uma variedade de configurações que podem ser utilizadas. Esta variedade se deve à grande quantidade de operadores e parâmetros genéticos que estão disponíveis na literatura. Assim, é possível escolher entre as formas de codificação do cromossomo (real, binária, etc.), o tipo de seleção (por torneio, proporcional à aptidão, etc.), formas de cruzamento (1 ponto, 2 pontos, uniforme, etc.), mutação (simples, uniforme, etc), número de indivíduos, número de gerações, probabilidades de cruzamento e mutação, etc. (LACERDA e CARVALHO, 1999). Desta forma, no presente trabalho, optou-se por alguns tipos particulares de operadores e parâmetros, compondo uma configuração característica que foi empregada nos algoritmos AG1 e AG2. Nos tópicos seguintes será apresentada a configuração genética utilizada no cálculo da profundidade e na calibração do modelo, além de uma descrição da importância dos números aleatórios dentro do algoritmo genético.

4.3.1 Números aleatórios e a evolução da população

Inicialmente, antes de descrever os operadores e parâmetros genéticos, é importante destacar a importância da geração dos números aleatórios na utilização da técnica do algoritmo genético, em virtude da grande quantidade de processos aleatórios envolvidos. Por exemplo, a geração da população inicial, a escolha dos indivíduos para o cruzamento e morte, e a escolha dos genes que sofrerão mutação. Estes processos, por sua vez, dependem dos números aleatórios uniformemente distribuídos que são gerados, no computador, por métodos determinísticos: os

chamados números pseudo-aleatórios. A geração destes números depende de uma semente inicial que é passada como parâmetro de entrada para a função de geração dos números pseudo-aleatórios; assim, ao empregar-se a mesma semente, obtém-se a mesma seqüência de números pseudo-aleatórios uniformemente distribuídos. Para se evitar esta repetição, neste trabalho, a semente utilizada é igual ao número de segundos, com precisão de duas casas decimais, decorridos desde zero hora do dia até o momento em que o programa é executado. Assim, garante-se, com bom grau de certeza, que conjuntos diferentes de números pseudo-aleatórios serão gerados em cada simulação, assegurando que as populações iniciais, os cromossomos selecionados para o cruzamento, mutação e morte não serão, necessariamente, os mesmos. O que implica em afirmar que para simulações diferentes as populações evoluirão por caminhos diferentes que devem levar, porém, ao mesmo resultado final, ou seja, a solução do problema de otimização. Com isso, pode-se verificar a robustez do algoritmo, uma vez que partindo de populações iniciais diferentes, e apresentando diferentes cromossomos selecionados, espera-se a convergência para a solução do problema. Cabe destacar que, apesar do algoritmo genético convergir para qualquer simulação ou, de forma equivalente, para qualquer semente inicial, esta convergência não necessita ocorrer, obrigatoriamente, após o mesmo número de gerações, ou com a mesma velocidade.

Dentro do programa apresentado no presente trabalho, a geração dos números aleatórios foi realizada por uma função interna do FORTRAN denominada “ran”, a qual gera estes números através de um algoritmo denominado “Prime Modulus M Multiplicative Linear Congrential Generator”, uma versão modificada do gerador de números aleatórios desenvolvido por Park e Miller (1988).

4.3.2 Representação dos cromossomos

No presente trabalho utilizou-se, tanto para o algoritmo AG1, quanto para o AG2, a codificação real. No caso do AG1, como existe apenas 1 variável a ser determinada, o cromossomo é composto por apenas 1 gene (variável de decisão), que representa a profundidade H , em um elemento computacional qualquer do rio. Assim, o cromossomo é representado por: $H \in \mathbb{R}$.

No caso do algoritmo AG2, estes cromossomos são representados por vetores, cujas componentes constituem os parâmetros do modelo de qualidade da água para os tramos do rio. Neste vetor são alocados, nas 4 primeiras posições, os parâmetros k_d , k_a , k_s , S_b , referentes ao primeiro tramo do rio, nas próximas 4 posições são alocadas os mesmos parâmetros referentes ao segundo tramo, e assim consecutivamente, até se atingir o m -ésimo tramo do rio. Um cromossomo qualquer da população, por exemplo, pode ser representado por um vetor (\mathbf{K}), conforme Equação (4.7).

$$\mathbf{K}^T = \left(\underbrace{k_{d1}, k_{a1}, k_{s1}, S_{b1}}_{1^\circ \text{ tramo}}, \underbrace{k_{d2}, k_{a2}, k_{s2}, S_{b2}}_{2^\circ \text{ tramo}}, \dots, \underbrace{k_{dm}, k_{am}, k_{sm}, S_{bm}}_{m\text{-ésimo tramo}} \right) \quad (4.7)$$

$\mathbf{K} \in \mathbb{R}^{4m}$

onde m representa o número de tramos que compõem o rio.

Cada parâmetro do modelo dentro deste vetor, ou cromossomo, é denominado gene (variável de decisão). Desta forma, o número de genes que compõe o vetor, ou seja, a dimensão do mesmo é igual ao número de parâmetros (4) multiplicado pelo número de tramos do rio para o qual se deseja calibrar o modelo de qualidade da água.

4.3.3 Formação da população inicial

Para o algoritmo AG1, um cromossomo da população inicial é gerado aleatoriamente através da Equação (4.8).

$$H = \min_H + (\max_H - \min_H) a \quad (4.8)$$

onde H é um indivíduo da população, ou seja, um valor de profundidade; \min_H e \max_H é o limite inferior e superior do espaço de busca, respectivamente, ou seja, o valor máximo e mínimo da profundidade; a é um número aleatório, uniformemente distribuído no intervalo $[0,1)$.

No caso do algoritmo AG2, um cromossomo qualquer (\mathbf{K}) da população inicial, também gerado aleatoriamente, é representado por um vetor, e apresenta a seguinte forma:

$$\mathbf{K} = \text{MIN}_{\mathbf{K}} + (\text{MAX}_{\mathbf{K}} - \text{MIN}_{\mathbf{K}}) A \quad (4.9)$$

O vetor $\mathbf{MIN}_K \in \mathbb{R}^{4m}$ contém os limites inferiores (min) do espaço de busca dos parâmetros do modelo de qualidade da água, enquanto o vetor $\mathbf{MAX}_K \in \mathbb{R}^{4m}$ contém os limites superiores (max) do espaço de busca destes parâmetros. Eles podem ser visualizados na Equação (4.10) e (4.11).

$$\mathbf{MIN}_K^T = \left(\underbrace{\min_{kd1}, \min_{ka1}, \min_{ks1}, \min_{Sb1}}_{1^\circ \text{trecho}}, \dots, \underbrace{\min_{kdm}, \min_{kam}, \min_{ksm}, \min_{Sbm}}_{m\text{-ésimo trecho}} \right) \quad (4.10)$$

$$\mathbf{MAX}_K^T = \left(\underbrace{\max_{kd1}, \max_{ka1}, \max_{ks1}, \max_{Sb1}}_{1^\circ \text{trecho}}, \dots, \underbrace{\max_{kdm}, \max_{kam}, \max_{ksm}, \max_{Sbm}}_{m\text{-ésimo trecho}} \right) \quad (4.11)$$

A matriz A contém, em sua diagonal principal, os números aleatórios uniformemente distribuídos, a_i .

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & a_{4m} \end{pmatrix} \quad (4.12)$$

Desta forma, para a geração de cada um dos genes que compõem o cromossomo, usa-se um número aleatório diferente.

4.3.4 Tamanho da população

O número de indivíduos da população, ou possíveis soluções do problema de calibração, n_s , deve ser razoavelmente grande, de forma a proporcionar boa cobertura do espaço de busca. Por outro lado, uma população composta por muitos indivíduos pode tornar mais lenta a convergência do algoritmo genético. Desta forma, optou-se por utilizar, nos dois algoritmos, uma população com 30 indivíduos ($n_s=30$). Assim, a população inicial, no caso do algoritmo AG1, pode ser representada por um vetor, $\mathbf{P}_{AG1} \in \mathbb{R}^{n_s}$, que contém 30 valores de profundidade:

$$\mathbf{P}_{AG1}^T = (H_1, H_2, \dots, H_{n_s}) \quad (4.13)$$

No caso do algoritmo AG2, a população inicial será representada pela matriz

$$\mathbf{P}_{AG2} \in \mathbb{R}^{4 \times n_s}.$$

$$\mathbf{P}_{AG2} = (\mathbf{K}_1, \mathbf{K}_2, \dots, \mathbf{K}_{n_s}) \quad (4.14)$$

Esta matriz contém n_s colunas, correspondente aos 30 indivíduos, e 4m linhas, correspondente ao número de genes de cada indivíduo.

4.3.5 Função Aptidão

A aptidão de um indivíduo é a “qualidade da resposta” que este indivíduo representa. Esta aptidão é avaliada através da função-objetivo, ou da função aptidão, na linguagem dos algoritmos genéticos. Segundo RAUCH e HARREMOËS (1999), a escolha de uma função-objetivo apropriada representa um ponto crítico na calibração automática de modelos de qualidade da água, por este motivo, elas devem ser escolhidas com bastante cuidado. A seguir são apresentadas as funções-objetivo empregadas para cada um dos algoritmos: AG1 e AG2.

4.3.5.1 Algoritmo AG1

Um método para calcular a profundidade consiste em definir uma função-objetivo, como apresentada na Equação (4.15).

$$f_{AG1} = |Q_{calc} - Q_{obs}| \quad (4.15)$$

onde: Q_{calc} representa a vazão calculada inserindo-se o valor de H na Equação (4.5); Q_{obs} é a vazão medida em campo. O objetivo agora consiste em minimizar esta função, ou seja, encontrar um valor para H que produza um Q_{calc} mais próximo possível de Q_{obs} . Portanto, no caso do algoritmo AG1, a aptidão dos indivíduos da população é avaliada através desta função, ou seja, um indivíduo qualquer será mais apto quanto menor for o valor da função f_{AG1} produzida por ele.

Deve-se perceber, entretanto, que esta profundidade precisa ser encontrada para cada elemento computacional que compõe o rio, uma vez que a vazão pode variar de elemento para elemento.

4.3.5.2 Algoritmo AG2

Observa-se nas Equações (3.15) e (3.20) que a concentração de DBO e OD depende de alguns parâmetros, como a taxa de sedimentação de matéria orgânica, taxa de reaeração atmosférica, entre outros. Porém, estes parâmetros são dependentes das características físicas, químicas, biológicas do rio estudado; além de dependerem do tipo de poluente lançado e das condições atmosféricas locais. Desta forma, cada rio apresenta um conjunto particular de valores para estes parâmetros que o diferencia dos demais. Portanto, quando se pretende modelar algum rio, é necessário determiná-las, de alguma forma. O processo de determinação destes parâmetros, denominado calibração, representa uma importante etapa no desenvolvimento e implementação de um modelo de qualidade de água para um rio qualquer.

Como as características podem variar no tempo para um mesmo rio, o processo de calibração deve ser realizado com certa frequência, mantendo atualizado, desta forma, os parâmetros do modelo que descrevem o comportamento do rio em relação à qualidade da água.

Existem algumas maneiras de se calibrar o modelo. Uma das formas mais conhecidas consiste no método da tentativa e erro, na qual o modelador estima um valor que ele considera aceitável para o parâmetro, roda o modelo, e compara a resposta obtida com algum valor monitorado. Caso os valores calculados e monitorados estejam suficientemente próximos, considera-se o modelo calibrado; caso contrário, se estipula outro valor para o parâmetro e novamente testa-se a sua adequação, rodando o modelo e comparando os valores calculados e medidos. Este processo iterativo prossegue até que o modelo produza valores de concentração que se aproximem daqueles monitorados. Obviamente, este método apresenta dificuldade quando se deseja calibrar um modelo com muitos parâmetros. Nestas situações, o número de combinações possíveis entre os parâmetros cresce demasiadamente, o que torna o processo de calibração prolongado e cansativo.

Por outro lado, a matemática pode auxiliar neste processo de calibração, pois a calibração de um modelo de qualidade de água pode ser tratada como um problema de otimização. Desta forma, defini-se uma função-objetivo que é constituída pela

combinação linear de dois termos: o resíduo quadrático em relação à concentração de DBO e OD; onde o resíduo é definido como a diferença entre as concentrações monitoradas em campo e as calculadas pelo modelo de qualidade da água. A função-objetivo, neste caso, é representada pela Equação (4.16).

$$f_{AG2} = \sum_{i=1}^r \left[w_1^i \left(\hat{C}^i(\mathbf{K}) - C^i(\mathbf{K}) \right)^2 + w_2^i \left(\hat{L}^i(\mathbf{K}) - L^i(\mathbf{K}) \right)^2 \right] \quad (4.16)$$

onde: \hat{L} representa a concentração medida de DBO; L a concentração calculada de DBO (equação (3.15)); \hat{C} representa a concentração medida de oxigênio dissolvido; C a concentração calculada (equação (3.17)); w_1 e w_2 são os pesos relativos da concentração de OD e DBO na função-objetivo, seus valores são tais que a soma deles é igual a 1; r é o número de pontos de concentrações conhecidas; e \mathbf{K} é o vetor com os parâmetros do modelo de qualidade de água.

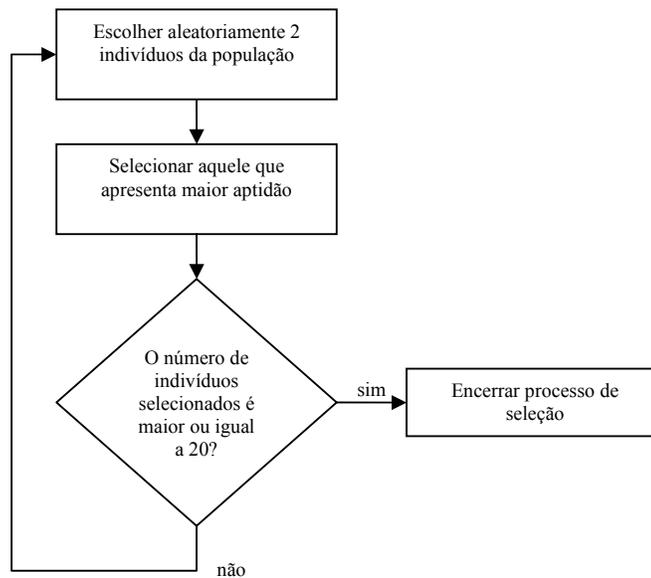
Definida a função-aptidão, deseja-se minimizá-la, ou seja, encontrar os valores dos parâmetros do modelo de qualidade de água, tais que a concentração calculada torne-se mais próxima possível da concentração medida. Assim, a aptidão do indivíduo é tanto melhor quanto mais próximo de zero for sua função-aptidão, pois mais próximas estarão as concentrações calculadas das medidas em campo.

4.3.6 Seleção

O critério de seleção foi igual para ambos os algoritmos AG1 e AG2; ou seja, de todos os 30 indivíduos que compõe a população, seleciona-se, a cada geração, 20 para realizarem o cruzamento. Esta seleção é realizada por torneio, onde se escolhe aleatoriamente da população 2 indivíduos quaisquer para a disputa de um torneio. Aquele que apresentar maior aptidão, ou seja, produzir um menor valor da função f_{AG1} , para o caso do AG1, ou da função f_{AG2} , no caso do AG2, vence o torneio, sendo selecionado para o cruzamento. Desta forma, são disputados 20 torneios, para se atingir o número de 20 indivíduos selecionados. A Figura 4.4 apresenta um algoritmo esquemático que representa o processo de seleção que foi utilizado para AG1 e AG2.

Dentro deste algoritmo de seleção, um indivíduo não pode disputar o torneio contra ele mesmo. Além disso, um indivíduo que tenha vencido um torneio anterior dentro da mesma geração, não pode disputar outro torneio; ou seja, um indivíduo não pode ser selecionado mais de uma vez para o cruzamento, dentro da mesma geração. Desta forma, evita-se que as características boas (mas não ótimas) de um “superindivíduo” espalhem-se rapidamente para a população, provocando a convergência prematura para um ponto de ótimo local. Uma característica importante desta estrutura de seleção está ligada ao fato de que o pior indivíduo da população não será, de forma alguma, selecionado para o cruzamento, uma vez que ele jamais vencerá o torneio, qualquer que seja seu concorrente.

FIGURA 4.4 - ALGORITMO DO PROCESSO DE SELEÇÃO.



Este tipo de seleção foi escolhido devido ao fato de não necessitar que se realize ranqueamento das soluções, o que reduz significativamente o tempo de processamento computacional.

4.3.7 Cruzamento e probabilidade de cruzamento

Os indivíduos selecionados para o cruzamento são denominados indivíduos pais, pois eles darão origem, através do cruzamento, a novos indivíduos, os chamados filhos.

Como foi empregada a representação real dos cromossomos, utilizou-se o cruzamento aritmético, que consiste numa combinação linear entre os indivíduos pais, ou vetores. Assim, para o algoritmo AG1, o cruzamento entre dois indivíduos pais quaisquer, H_{p1} e H_{p2} , selecionados da população, dará origem a dois novos indivíduos filhos, H_{f1} e H_{f2} , através da combinação linear apresentada na Equação (4.17).

$$\begin{aligned} H_{f1} &= aH_{p1} + (1-a)H_{p2} \\ H_{f2} &= aH_{p2} + (1-a)H_{p1} \end{aligned} \quad (4.17)$$

Onde a é um número aleatório, uniformemente distribuído no intervalo $[0,1[$.

No caso do algoritmo AG2, os 2 novos indivíduos formados terão a forma da Equação (4.18).

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{f1} &= a\mathbf{K}_{p1} + (1-a)\mathbf{K}_{p2} \\ \mathbf{K}_{f2} &= a\mathbf{K}_{p2} + (1-a)\mathbf{K}_{p1} \end{aligned} \quad (4.18)$$

Pode ser observado que o cruzamento entre os indivíduos pais trata-se, na verdade, de uma combinação linear aleatória, pois o escalar “ a ” representa um número aleatório, uniformemente distribuído. Além disso, como este número aleatório está no intervalo $[0,1)$, e considerando que os indivíduos pais estão confinados aos limites do espaço de busca, os indivíduos filhos, produzidos através das Equações (4.17) e (4.18), sempre estarão limitados dentro do mesmo espaço de busca.

Utilizou-se, em ambos os algoritmos, uma probabilidade de cruzamento fixa, igual a 100%. Isto significa que todos aqueles indivíduos que foram selecionados para o cruzamento, efetivamente serão combinados linearmente, produzindo os indivíduos filhos. Desta forma, é garantida uma maior entrada de novos indivíduos na população, permitindo que esta se renove com mais frequência.

O cruzamento entre os indivíduos pais é realizado na seguinte ordem: primeiramente realiza-se esta combinação linear entre o primeiro e o último indivíduo selecionado, em seguida, entre o segundo e penúltimo indivíduo selecionado, e assim por diante, até que todos os 20 indivíduos tenham cruzado, gerando 20 novos indivíduos.

4.3.8 Mutação e probabilidade de Mutação

Aos 20 indivíduos filhos, gerados através do cruzamento dos indivíduos pais, aplica-se o operador mutação uniforme, utilizado quando se trabalha com codificação real dos cromossomos. Este operador é aplicado individualmente sobre os genes que compõem um cromossomo. Para cada gene dos indivíduos filho atribui-se uma probabilidade de mutação, igual a P_{mut} . Assim, a mutação consiste em substituir um gene (G_p), que no caso da representação real representa um número, por outro gene (G_f), ou número, gerado aleatoriamente, conforme a Equação (4.19).

$$G_f = \min + (\max - \min)a \quad (4.19)$$

Onde min e max representam o limite superior e inferior do espaço de busca, respectivamente.

Um cromossomo pode sofrer mutação em um ou mais genes, ou até mesmo em nenhum dos genes. No caso do algoritmo AG1, onde o cromossomo é composto por apenas um gene, a aplicação de mutação implica na substituição do indivíduo por outro.

4.3.9 Calcular a aptidão dos novos indivíduos

Após o operador genético mutação ter sido aplicado aos cromossomos filhos, a aptidão destes novos cromossomos é avaliada pela Equação (4.15), para o algoritmo AG1, e pela Equação (4.16), para o algoritmo AG2.

4.3.10 Selecionar e eliminar os menos aptos

O número de novos indivíduos criados a cada geração, em ambos os algoritmos, é igual a 20, o que corresponde 66% da população. Assim, estes novos indivíduos gerados juntam-se àqueles da população anterior, formando uma nova população composta por 50 indivíduos. Porém, para que o tamanho da população se mantenha constante, são selecionados e eliminados a cada geração - através do algoritmo de seleção apresentado anteriormente - 20 indivíduos, o que corresponde à substituição “steady state”.

Tanto no algoritmo AG1 quanto AG2, a seleção dos indivíduos que seriam eliminados se deu, semelhantemente à seleção para o cruzamento, através do torneio, como apresentado no algoritmo da Figura 4.4. A diferença fundamental consiste em, neste caso, o indivíduo que apresentar a menor aptidão “vence” o torneio, sendo eliminado da população.

4.4 COMPARAÇÃO ENTRE OS OPERADORES E PARÂMETROS GENÉTICOS

O algoritmo genético caracteriza-se por ser um método relativamente flexível quanto a sua programação, ou seja, existem diferentes tipos de operadores genéticos que podem ser combinados, dando origem a um algoritmo particular. Por este motivo, as características peculiares do AG podem variar substancialmente, dependendo do programador. Os trabalhos descritos na revisão bibliográfica reforçam esta constatação, uma vez que a configuração do AG apresentou variações entre os mesmos. A Tabela 4.1 apresenta uma comparação entre os operadores, além dos parâmetros genéticos utilizados por estes autores, bem como os relativos ao presente trabalho.

TABELA 4.1 – COMPARAÇÃO ENTRE OPERADORES E PARÂMETROS GENÉTICOS.

AUTOR/ BIBLIOTECA	REPRESENTAÇÃO DO CROMOSSOMO	SELEÇÃO	TIPO DE CRUZAMENTO	P_c	TIPO DE MUTAÇÃO	P_{mut}	TAMANHO DA POPULAÇÃO	TIPO DE SUBSTITUIÇÃO
Wang (1991)	Binária	Roda da roleta	2 pontos	-	Mutação simples	1	10	Geracional
Gupta <i>et al.</i> (1998)	-	-	-	-	-	-	-	-
Mulligan (Genesis) (1998)	Binária	Roda da roleta	2 pontos	60	Simples	0.3	25; 100	-
CHO <i>et al.</i> (1999)	Binária	-	1 ponto	-	Simples	-	-	-
Wardlaw e Sharif (1999)	Binária e real	Por torneio	1, 2 pontos; aritmético	70; 75	Simples; uniforme	2; 3	100; 200	-
Rauch e Herremoes (1999)	Binária	-	-	100	-	-	300	-
NG e Perera (Genesis) (2003)	Binária	Roda da roleta	2 pontos	69	Simples	0.5	125	-
Soares e Reis (Biblioteca C++) (2004)	Real	-	aritmético	70	Gausiana	1	100	Geracional
Park <i>et al.</i> (Biblioteca C++) (2006)	-	-	-	80	-	1	300	-
AG1 e AG2	Real	Por torneio	aritmético	100	Uniforme	Variável	30	“Steady State”

4.5 SUMÁRIO DO CAPÍTULO 4

Neste capítulo foi apresentado o esquema de algoritmo genético utilizado tanto no cálculo das profundidades, através da equação de Manning, quanto na calibração do modelo de qualidade da água. Devido à flexibilidade de utilização de diferentes tipos de operadores genéticos, o esquema programado no presente trabalho diferiu de outros trabalhos encontrados na literatura. Assim utilizou-se, por exemplo, a representação real dos cromossomos, seleção por torneio, cruzamento aritmético, mutação uniforme, além de substituição “Steady State” dos cromossomos. O tipo de cruzamento utilizado garante que os indivíduos filhos sempre estejam dentro do espaço de busca definido no início da simulação. Por outro lado, o tipo de seleção empregado dispensa a realização de ranqueamento da população a cada nova geração, o que economiza tempo de processamento; além de garantir que o melhor indivíduo da próxima geração sempre será melhor ou, na pior das hipóteses, igual ao da geração anterior.

Por outro lado, para que a calibração pudesse ser tratada como um problema de otimização, lançou-se mão de uma função objetivo que representava uma combinação dos resíduos quadráticos referentes à concentração de DBO e OD; a qual, por sua vez, deseja-se minimizar através do algoritmo genético.

5 ESTUDOS DE CASO HIPOTÉTICOS

Os estudos de caso desta pesquisa foram construídos de forma a explorar o potencial, a robustez e a eficácia das rotinas desenvolvidas. A estratégia inicial, a ser destacada neste capítulo, consiste em se avaliar os resultados utilizando casos hipotéticos com solução analítica conhecida.

Primeiramente, apresentam-se os resultados de um estudo onde se procurou avaliar a probabilidade de mutação ótima, uma vez que ela representa um importante parâmetro genético, que influencia significativamente o desempenho do algoritmo.

Em seguida, o programa desenvolvido foi empregado na calibração de rios hipotéticos, com solução analítica conhecida; o que tornou possível a comparação dos perfis de concentração - além dos parâmetros do modelo-, calculados através do algoritmo genético com a solução teórica do problema. Assim, pode-se avaliar o potencial deste método para calibrar o modelo matemático de qualidade da água.

5.1 TESTE DE PROBABILIDADE DE MUTAÇÃO

A probabilidade de mutação, utilizada nas simulações, deve ser grande o suficiente para inserir variabilidade genética ao método, buscando novos pontos ótimos potenciais; ao mesmo tempo, não pode ser tão elevada a ponto de transformar o algoritmo genético num processo puramente aleatório. Assim, deve existir um valor ótimo para esta probabilidade, que faça com que o processo de convergência seja otimizado, no sentido de que ocorra com um menor número de gerações possível. Por outro lado, este valor ótimo pode ser dependente das características particulares do problema que está sendo resolvido, como o número de variáveis da função objetivo que se deseja otimizar, ou seja, o comprimento do cromossomo. Por este motivo, foram realizados alguns testes com o objetivo de se perceber a dependência da probabilidade de mutação ótima em função do comprimento do cromossomo.

Para realizar tal tarefa, definiu-se uma função de teste, $g(i)$, conforme apresentada na Equação (5.1).

$$g(i) = \sum_{i=1}^N (x_i + i)^2 \quad (5.1)$$

onde: o valor de N pode variar entre 2 e 15, ou seja, esta equação representa, na verdade, 15 funções quadráticas, com número de variáveis variando entre 2 e 15. O objetivo consistiu em minimizar, através do algoritmo genético, estas funções, cujos pontos de mínimo são conhecidos, e iguais a zero. Os valores de x_i que minimizam as funções são: $x_i = -i$, para $i=2,3...15$. A minimização de cada função foi realizada com diferentes combinações dos parâmetros genéticos probabilidade de mutação (P_{mut}) e número de gerações (NG). Além disso, como foi utilizada a representação real, o tamanho do vetor com as variáveis de decisão foi igual ao número de variáveis da função a ser otimizada, a Equação (5.1); ou seja, o comprimento do cromossomo variou entre 2, para a primeira função, e 15, para a última função; e o espaço de busca da variável x_i foi o seguinte: $-25 \leq x_i \leq 1$. Assim, foi possível verificar, em relação ao comprimento do cromossomo, qual a melhor combinação dos parâmetros genéticos, ou seja, qual a combinação que proporcionou uma convergência mais rápida, e um menor erro da solução obtida pelo AG em relação à solução analítica.

Para cada combinação de NG e P_{mut} o algoritmo genético foi executado 200 vezes, em seguida retirou-se, dentre os 200 resultados, o pior deles, ou seja, aquele que mais se afastou do ponto de mínimo da função. Estes valores foram apresentados em forma de curvas de nível, as quais apresentam a qualidade da resposta obtida em função das várias combinações entre o número de gerações e probabilidade de mutação, conforme a Figura 5.1 à Figura 5.5. Nesta figura a qualidade da resposta está associada à escala de cor, onde os menores erros estão relacionados às cores mais escuras, enquanto os maiores erros estão relacionados às cores mais claras.

FIGURA 5.1 – MÍNIMO DA FUNÇÃO g (2, 3 E 4 VARIÁVEIS) PARA DIFERENTES COMBINAÇÕES DE NG E P_{mut} .

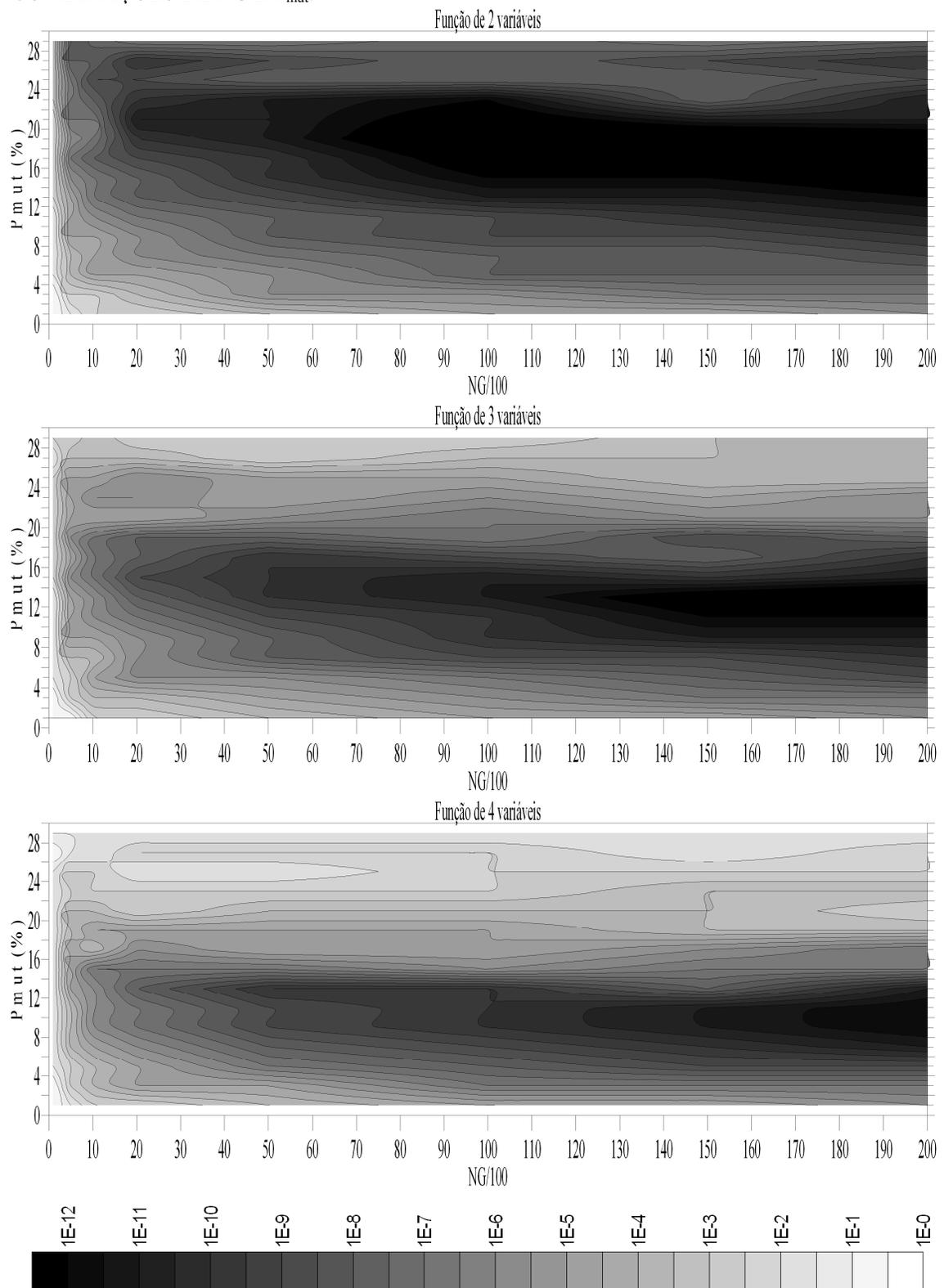


FIGURA 5.2 - MÍNIMO DA FUNÇÃO g (5, 6 E 7 VARIÁVEIS) PARA DIFERENTES COMBINAÇÕES DE NG E P_{mut} .

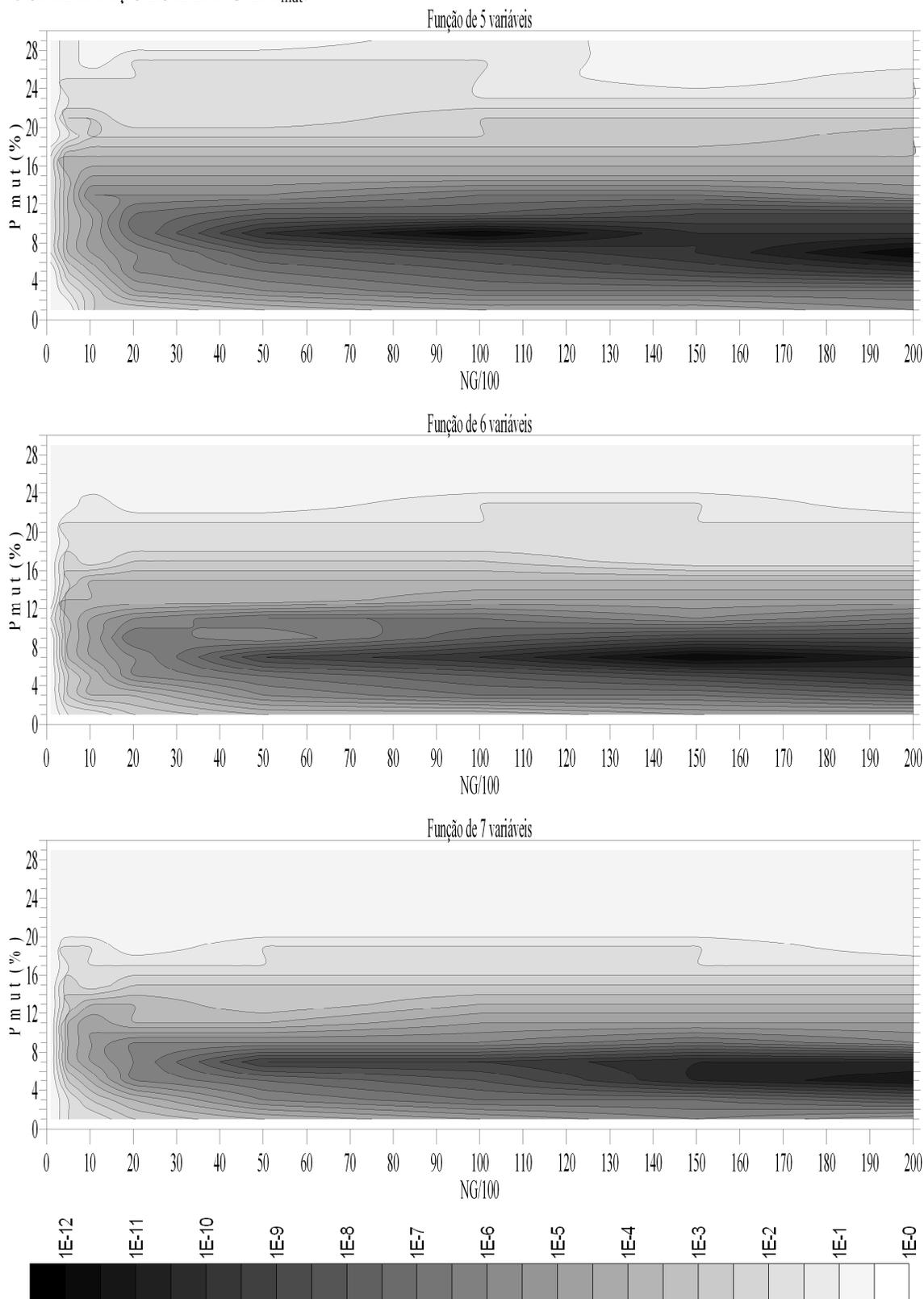


FIGURA 5.3 - MÍNIMO DA FUNÇÃO g (8, 9 E 10 VARIÁVEIS) PARA DIFERENTES COMBINAÇÕES DE NG E P_{mut} .

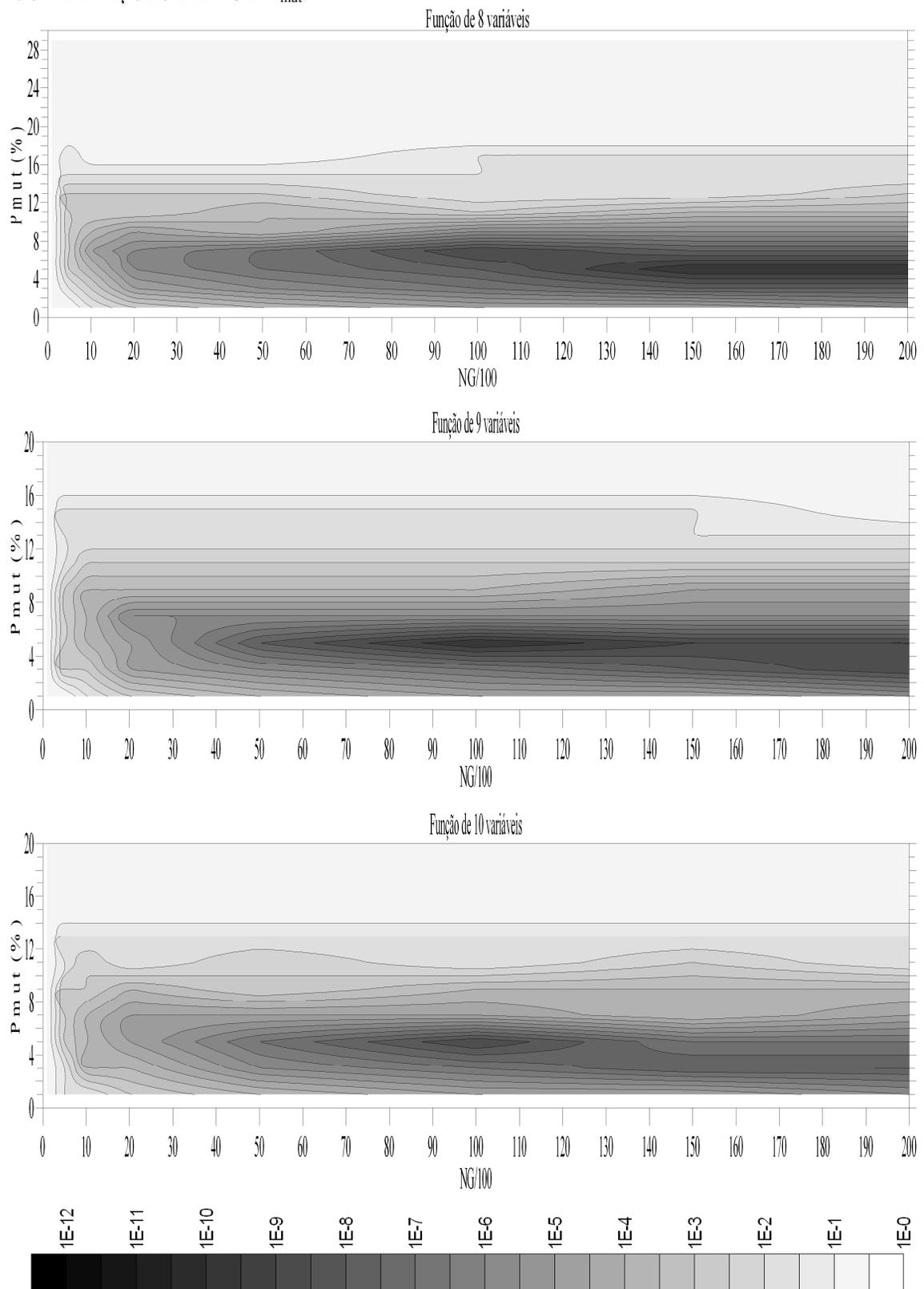


FIGURA 5.4 - MÍNIMO DA FUNÇÃO g (11, 12 E 13 VARIÁVEIS) PARA DIFERENTES COMBINAÇÕES DE NG E P_{mut} .

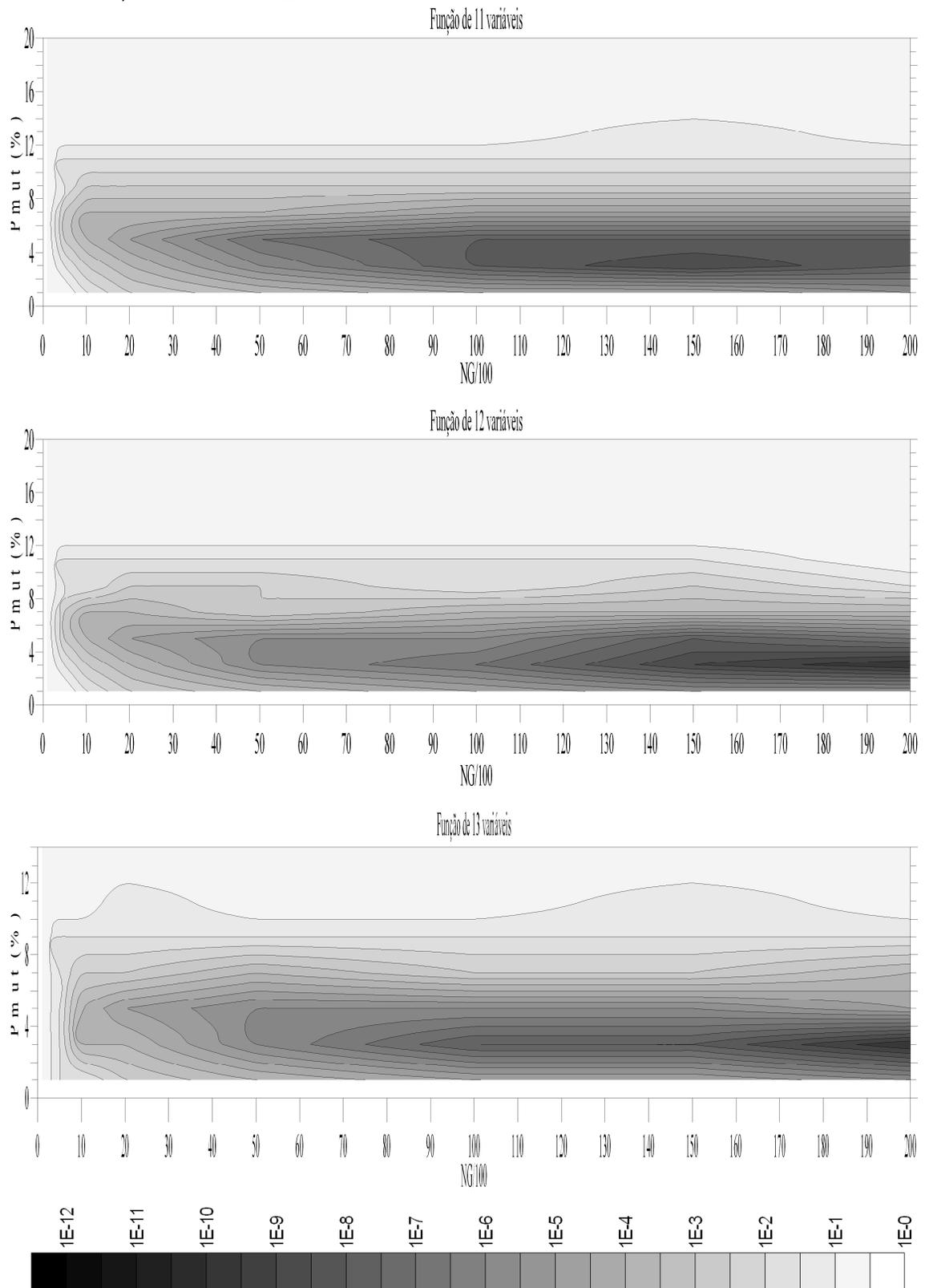
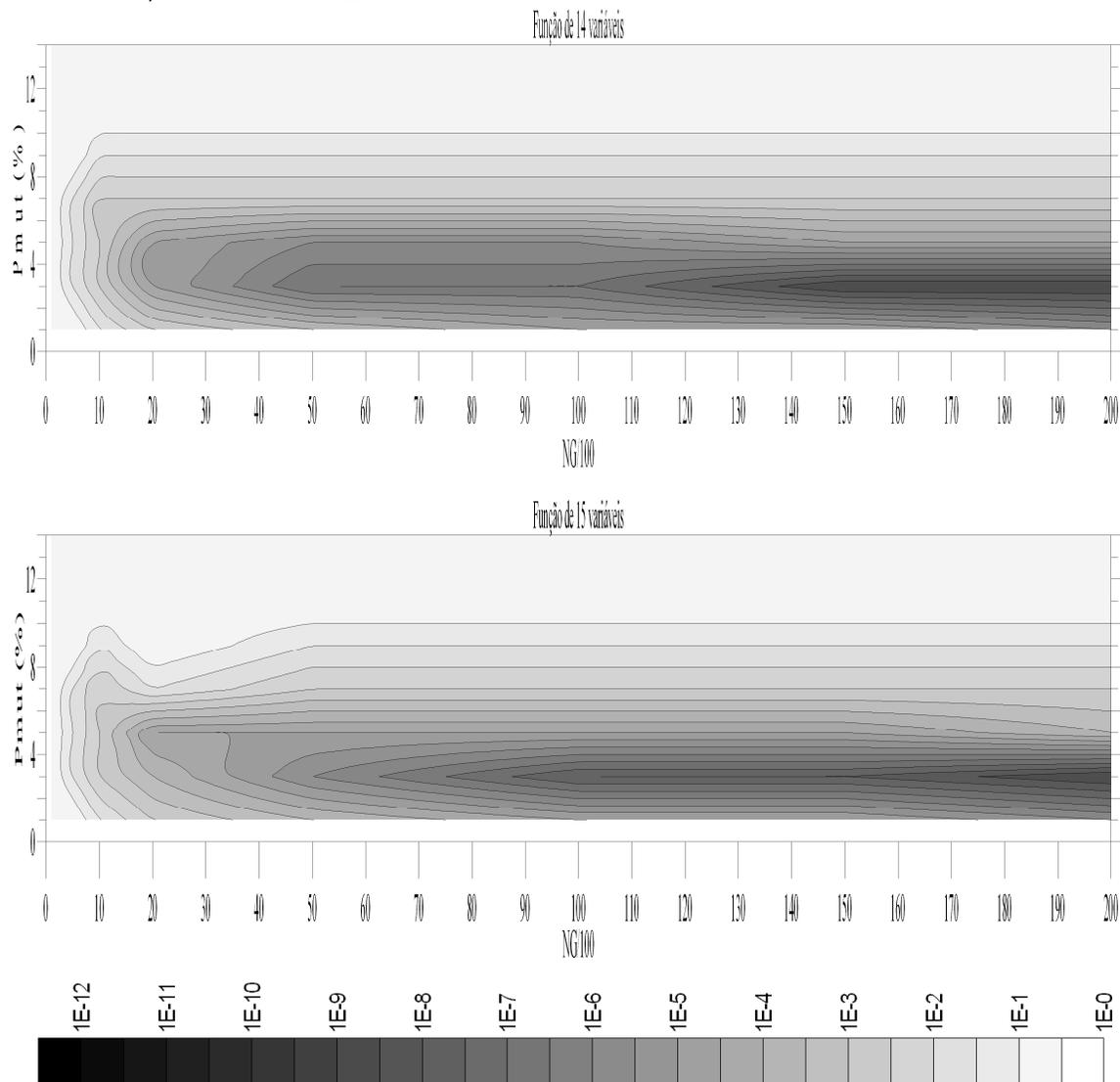


FIGURA 5.5 - MÍNIMO DA FUNÇÃO g (14 E 15 VARIÁVEIS) PARA DIFERENTES COMBINAÇÕES DE NG E P_{mut} .



Observa-se que, à medida que se eleva o número de variáveis da função a ser otimizada, ou seja, o comprimento do cromossomo, a probabilidade de mutação ótima (aquela que produz os menores erros na resposta, com um menor número de gerações) diminui. Como exemplo, a Tabela 5.1 apresenta o intervalo de P_{mut} ótimo relacionado ao número de variáveis da função objetivo, para NG igual a 10.000.

TABELA 5.1 – VARIAÇÃO DE P_{mut} ÓTIMA EM FUNÇÃO DO NÚMERO DE VARIÁVEIS, PARA NG IGUAL A 10.000.

NÚMERO DE VARIÁVEIS	INTERVALO DE PMUT (%)	ORDEM DO ERRO
2	16 – 21	E^{-12}
3	9 – 15	E^{-11}
4	7 – 13	E^{-10}
5	8 – 9	E^{-12}
6	6 – 8	E^{-10}
7	5 – 7	E^{-9}
8	5 – 7	E^{-9}
9	4 – 6	E^{-10}
10	3 – 5	E^{-9}
11	3 – 5	E^{-8}
12	3 – 5	E^{-7}
13	3 – 4	E^{-8}
14	3 – 4	E^{-7}
15	2 – 4	E^{-8}

É importante ressaltar que as probabilidades de mutação ótimas, apresentadas acima, se referem ao algoritmo genético programado no presente trabalho, que apresenta uma combinação particular de operadores genéticos. Assim, não se espera que estes resultados sejam aplicáveis a quaisquer outros AG's desenvolvidos por diferentes programadores; nestes casos, seria necessário o desenvolvimento de um novo estudo.

As probabilidades de mutação a serem utilizadas nos estudos de caso que se seguem são retiradas das figuras apresentadas acima, dado o número de variáveis da função-aptidão.

5.2 ESTUDO DE CASO 1: RIO HIPOTÉTICO 1

Neste primeiro estudo de caso de um rio hipotético, extraído de SCHNOOR (1996), é conhecida a concentração de DBO no início do rio (posição $x = 0$), e também em alguns pontos ao longo deste. A taxa de remoção de MO pela sedimentação (k_s) é desconsiderada; a velocidade média do rio é igual a 0.4 ms^{-1} ; não há descargas, difusas ou pontuais, de efluentes, nem rios afluentes, como apresentado na Figura 5.6.

FIGURA 5.6 - DIAGRAMA TOPOLÓGICO DO RIO HIPOTÉTICO 1



De posse destas informações, deseja-se calibrar apenas o modelo de concentração de DBO (Equação (3.15)) para este rio, ou seja, encontrar um valor para a taxa de remoção de MO, k_d , que represente todo este rio. Assim, esta calibração corresponde a um problema de otimização de uma função de 1 variável.

SCHNOOR (1996) calibrou o mesmo modelo de DBO através da linearização da Equação (3.15), e obteve um valor para k_d igual a $0,3 \text{ dia}^{-1}$; com o qual calculou o perfil de DBO (3º coluna da Tabela 5.2).

Por outro lado, o algoritmo genético (AG2) foi empregado na calibração do mesmo modelo, com o seguinte espaço de busca: $-1 < k_d < 10$; além disso, a probabilidade de mutação foi igual a 30%. Em relação ao critério de parada, a simulação era encerrada quando o valor do resíduo fosse menor que 0,08, o que correspondeu ao valor que o AG foi capaz de encontrar. Para a linearização aplicada por SCHNOOR (1996), este resíduo apresentou o valor de 0,0722.

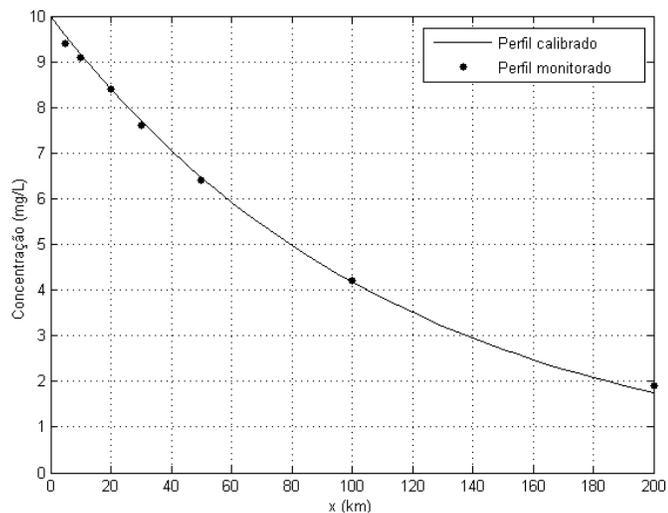
Como resultado desta simulação, encontrou-se um valor para k_d igual a $0,301177 \text{ dia}^{-1}$. Com o modelo calibrado através do algoritmo genético, calculou-se as concentrações de DBO em alguns pontos do rio (4º coluna da Tabela 5.2); estas concentrações foram comparadas com as concentrações medidas, conforme apresentado na Tabela 5.2.

TABELA 5.2 - COMPARAÇÃO ENTRE DBO MEDIDO E CALCULADO PARA O RIO HIPOTÉTICO 1.

x (km) (1)	L_{medida} (mg/L) (2)	$L_{\text{calculada}}$ (mg/L) (3)	L_{AG} (mg/L) (4)
0	10	10	10,0
5	9,4	9,575	9,574
10	9,1	9,169	9,165
20	8,4	8,406	8,401
30	7,6	7,707	7,699
50	6,4	6,479	6,468
100	4,2	4,198	4,184
200	1,9	1,762	1,75

O gráfico da Figura 5.7 apresenta a comparação entre o perfil de DBO monitorado e o calculado através do modelo calibrado pelo algoritmo genético. Observando o gráfico, nota-se que os resultados do modelo obtido com a solução pelo algoritmo genético se ajustou bem aos dados medidos em campo, principalmente para os pontos intermediários do rio, para os quais praticamente não houve diferença entre as concentrações de DBO medidas e calculadas.

FIGURA 5.7 - COMPARAÇÃO ENTRE DBO MEDIDO A CALCULADO PARA O RIO HIPOTÉTICO 1.



Com o objetivo de conhecer o comportamento do algoritmo genético em relação ao número de gerações, verificou-se o valor da função aptidão (f_{AG2}) em função de NG; os resultados estão apresentados na Tabela 5.3.

TABELA 5.3 - VALORES DE f_{AG2} PARA DIFERENTES NG (RIO HIPOTÉTICO 1).

NG	f_{AG2}
10	3,06438
20	0,071690
40	0,071687
60	0,071687
75	0,071679

Os resultados obtidos mostram que, para um pequeno número de geração, o algoritmo genético ainda não produziu um indivíduo ótimo, ou seja, aquele que produz um menor valor da função aptidão. Porém, para 20 gerações, f_{AG2} atinge um valor relativamente baixo, de forma que qualquer aumento do número de gerações não

melhora significativamente o valor da função aptidão. Ou seja, pode-se dizer que a partir deste ponto o processo evolucionário atingiu um estado aproximado de equilíbrio.

Como a técnica do algoritmo genético utiliza intensamente processos aleatórios, em certas simulações é possível que a resposta ótima seja encontrada para NG menor ou maior do que 75. Isto acontece porque as sementes iniciais, usadas para a geração dos números aleatórios, são diferentes entre as simulações. Quando, porém, se aumenta o número de gerações, eleva-se a probabilidade do algoritmo genético encontrar a resposta ótima, para qualquer simulação.

5.2.1 Avaliação do Impacto de Informações Conhecidas

Quando se deseja conhecer o perfil de concentração de DBO ao longo de um rio, ou calibrar os parâmetros do modelo de qualidade da água - k_d , neste caso - é necessário que se realizem coletas de amostras de água em certos pontos deste rio. Após a realização de análises laboratoriais destas amostras, devem-se consolidar dados concretos que serão fundamentais na calibração de modelos matemáticos, e terão a função de auxiliar na descrição qualitativa e quantitativa do comportamento deste rio em relação à característica desejada. Porém, a obtenção destas amostras em campo, e suas análises laboratoriais, podem representar um elevado custo quando muitas delas são necessárias para que um modelo calibrado forneça uma descrição razoável do comportamento do rio.

Assim, um caso próximo da situação ideal seria aquela em que fosse possível obter uma ótima descrição do rio sob estudo com o menor número possível de amostras coletadas e analisadas, reduzindo significativamente os custos do estudo. Com esta idéia, procurou-se testar a calibração do mesmo modelo do problema anterior, porém utilizando um número menor e variado de pontos de concentração de DBO conhecida. Dividiu-se o problema em 4 “cenários”, cada um correspondendo a um número diferente de pontos de medição utilizados na calibração do modelo (de 1 a 4 pontos). Dentro de cada cenário existem algumas “configurações”, para as quais diferentes pontos de medição são empregados na calibração do modelo.

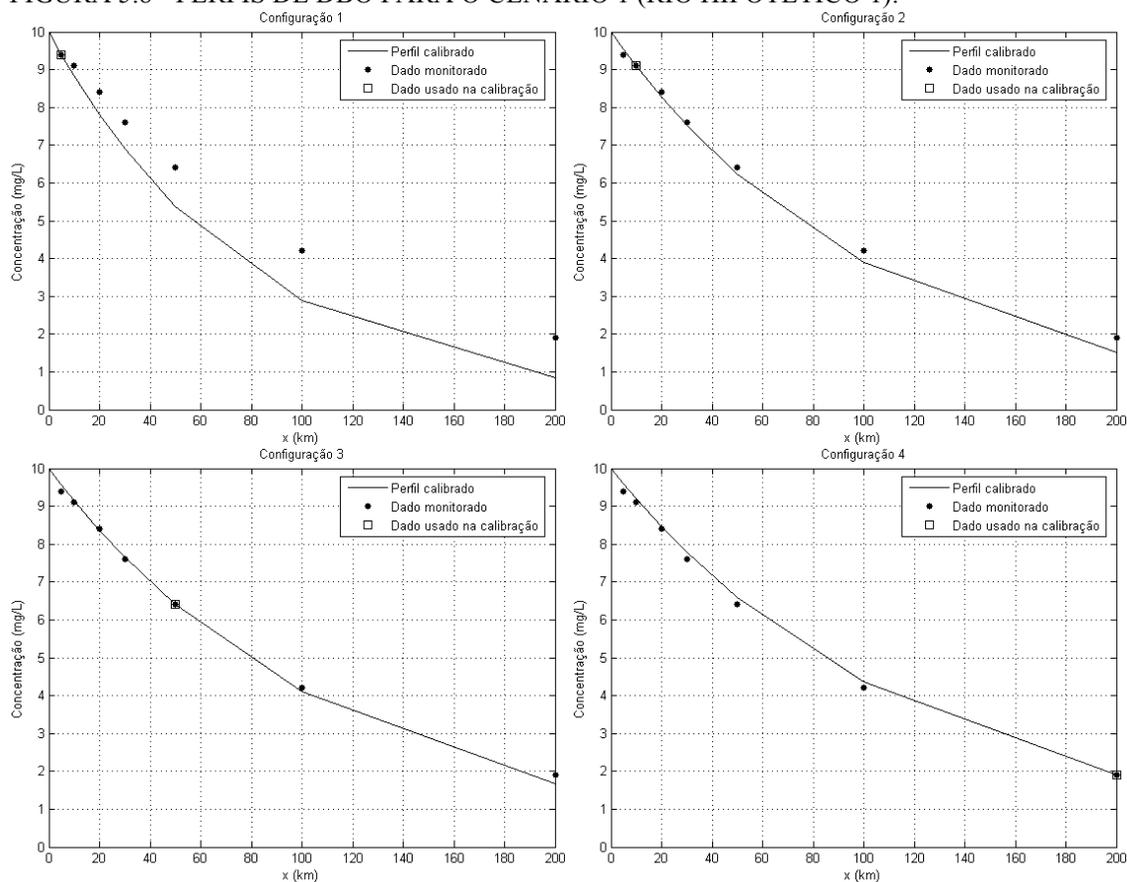
5.2.1.1 Cenário 1

Primeiramente apresenta-se o cenário 1, onde se utilizou o critério de se conhecer apenas 1 ponto de medição de concentração de DBO. Neste cenário foram definidas 4 configurações distintas, onde se conhece a informação de monitoramento. A Tabela 5.4 apresenta estas configurações, com os pontos de monitoramento utilizados na calibração, bem como o valor de k_d obtido, através do AG, para cada uma delas. A Figura 5.8 apresenta os gráficos relativos à simulação realizada, comparando o perfil de concentração de DBO calibrado com os dados de DBO teóricos.

TABELA 5.4 - VALORES DE k_d PARA O CENÁRIO 1 (RIO HIPOTÉTICO 1).

CONFIGURAÇÃO	x (km)	L_{medido} (mg/L)	k_d (dia ⁻¹)
1	5	9,4	0,42768
2	10	9,1	0,32594
3	50	6,4	0,30847
4	200	1,9	0,28697

FIGURA 5.8 - PERFIS DE DBO PARA O CENÁRIO 1 (RIO HIPOTÉTICO 1).



Observa-se nos gráficos da Figura 5.8 que o modelo calibrado com o algoritmo genético conseguiu reproduzir razoavelmente bem o perfil monitorado de DBO, com exceção da configuração 1, onde se utilizou, para a calibração, um ponto de monitoramento relativamente próximo ao ponto inicial do rio. Porém, para as outras configurações, os resultados do algoritmo praticamente reproduzem a solução desejada.

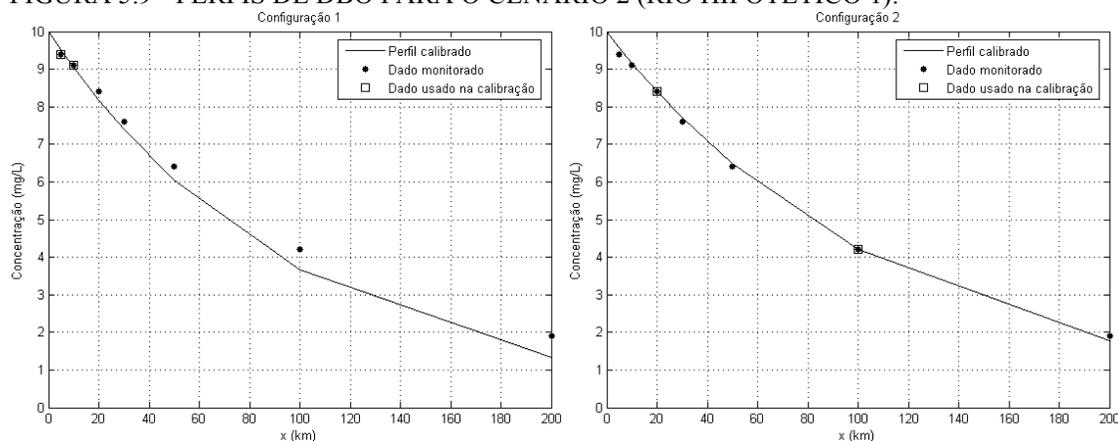
5.2.1.2 Cenário 2

No cenário 2, considerou-se que eram conhecidos 2 pontos de medição de DBO ao longo do rio. Este cenário apresentou 2 configurações diferentes, que estão apresentadas na Tabela 5.3, juntamente com o valor de k_d obtido para cada uma delas. A Figura 5.9 apresenta os perfis de DBO.

TABELA 5.5 - VALORES DE k_d PARA O CENÁRIO 2 (RIO HIPOTÉTICO 1).

CONFIGURAÇÃO	x (km)	L_{medido} (mg/L)	k_d (dia ⁻¹)
1	5	9,4	0,34783
	10	9,1	
2	20	8,4	0,30001
	100	4,2	

FIGURA 5.9 - PERFIS DE DBO PARA O CENÁRIO 2 (RIO HIPOTÉTICO 1).



Observa-se nos gráficos da Figura 5.9 que quanto mais próximo do ponto de lançamento, mais dificuldade o algoritmo demonstrou em reproduzir o perfil monitorado, apresentando a mesma tendência dos resultados do cenário 1. Isto indica

que o modelo necessita de pontos distribuídos ao longo do rio para reproduzir a curva analítica (Tabela 5.5).

5.2.1.3 Cenário 3

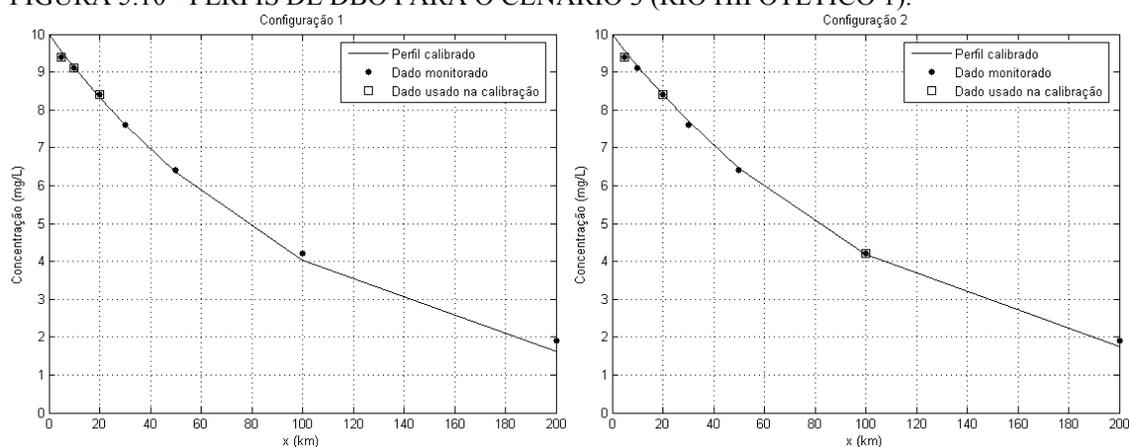
No cenário 3 utilizou-se 3 pontos de concentração conhecida para a calibração do modelo. Neste cenário existem 2 configurações diferentes, conforme indicado na Tabela 5.6. Podem-se destacar, nesta tabela, as 2 configurações, juntamente com o valor da taxa de degradação de DBO obtida para cada uma delas.

TABELA 5.6 - VALORES DE k_d PARA O CENÁRIO 3 (RIO HIPOTÉTICO 1).

CONFIGURAÇÃO	x (km)	L_{medido} (mg/L)	k_d (dia ⁻¹)
1	5	9,4	0,31407
	10	9,1	
	20	8,4	
2	5	9,4	0,30143
	20	8,4	
	100	4,2	

A Figura 5.10 apresenta uma comparação entre o modelo ajustado e os valores de concentração conhecida. Pode-se observar claramente que, com 3 pontos de monitoramento, os resultados do modelo reproduzem as concentrações de DBO conhecidas.

FIGURA 5.10 - PERFIS DE DBO PARA O CENÁRIO 3 (RIO HIPOTÉTICO 1).



5.2.1.4 Cenário 4

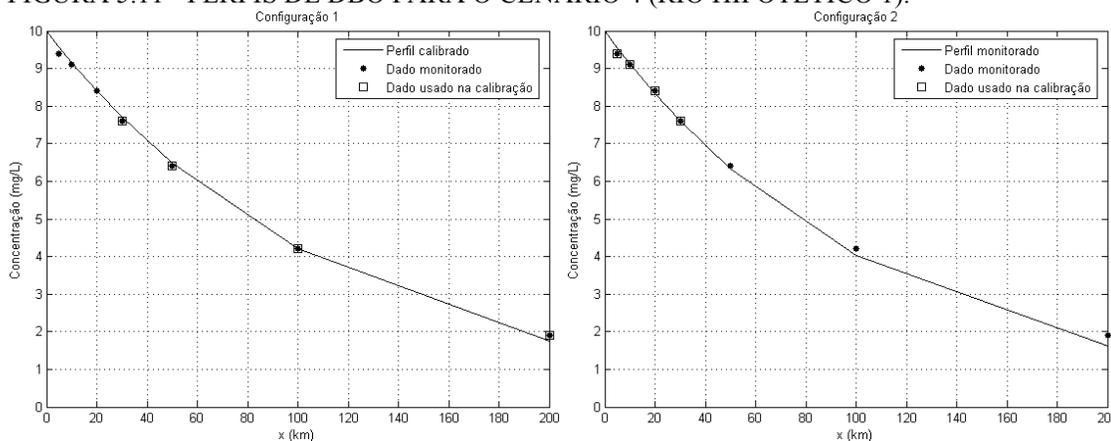
No cenário 4 são considerados, para a calibração do modelo, 4 pontos de concentração conhecida de DBO, com 2 diferentes configurações, que estão apresentadas na Tabela 5.7.

TABELA 5.7 - VALORES DE k_d PARA O CENÁRIO 4 (RIO HIPOTÉTICO 1).

CONFIGURAÇÃO	x (km)	L_{medido} (mg/L)	k_d (dia ⁻¹)
1	30	7,6	0,30005
	50	6,4	
	100	4,2	
	200	1,9	
2	5	9,4	0,31525
	10	9,1	
	20	8,4	
	30	7,6	

Analisando a Figura 5.11, observa-se novamente que o resultado calculado pelo algoritmo genético esteve mais próximo da solução desejada quando foram empregados pontos de concentração conhecida que estavam melhores distribuídos no tramo do rio (configuração 2).

FIGURA 5.11 - PERFIS DE DBO PARA O CENÁRIO 4 (RIO HIPOTÉTICO 1).



5.2.2 Conclusões do Estudo de Caso 1

No primeiro estudo de caso foi resolvido um problema bastante simplificado, pois, como havia apenas 1 parâmetro do modelo de qualidade da água, a calibração consistiu num problema de otimização trivial, de uma variável. Apesar disso, pode-se

perceber, pelos resultados obtidos, o potencial de aplicação do algoritmo genético na calibração de modelos de qualidade da água.

Observou-se que houve um número mínimo de gerações necessárias para que o algoritmo encontrasse o ponto de mínimo da função-objetivo. Assim, ao simular gerações além deste número mínimo, apenas se tem um tempo de processamento computacional adicional, sem uma correspondente melhoria da qualidade da resposta. Porém, deve-se ter cuidado com este parâmetro genético, pois, se o mesmo problema fosse simulado com uma semente inicial diferente, eventualmente seria necessário um número diferente de gerações para se atingir a convergência; fato que se deve à aleatoriedade embutida neste método. Assim, à medida que se eleva o número de gerações utilizadas nas simulações, eleva-se também a probabilidade de convergência do algoritmo genético.

Percebeu-se, ainda, que quando se dispunha de poucos valores conhecidos de concentração de DBO, foi possível obter excelentes curvas calibradas, quando eram utilizados na calibração os pontos que estavam mais afastados do ponto de lançamento de MO. Mesmo utilizando apenas 1 ponto para a calibração do modelo, o modelo calibrado descreveu, de forma razoavelmente precisa, o comportamento teórico da DBO no rio.

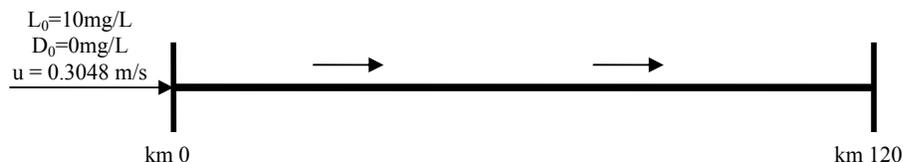
5.3 ESTUDO DE CASO 2: RIO HIPOTÉTICO 2

Esta etapa do trabalho consistiu em aplicar o algoritmo genético para a resolução de um problema cujos parâmetros do modelo de qualidade de água eram conhecidos, trata-se do rio hipotético 2, apresentado por SCHNOOR (1996). Desta forma, foi possível comparar estes parâmetros previamente conhecidos com aqueles encontrados através do processo de calibração utilizando o módulo AG2.

Este rio apresenta as seguintes características, invariáveis ao longo das direções transversal e longitudinal: comprimento de 120 km; velocidade média igual a 0,3048 m/s; $L_0 = 10 \text{ mg/L}$; $D_0 = 0 \text{ mg/L}$. Além disso, os parâmetros k_d e k_a são iguais a $0,6 \text{ dia}^{-1}$ e $2,0 \text{ dia}^{-1}$, respectivamente; enquanto que k_s e S_b não foram considerados nas simulações. Similarmente ao estudo de caso 1, aqui não se considerou descarga,

pontual nem difusa, de matéria orgânica. A Figura 5.12 apresenta um diagrama topológico deste rio.

FIGURA 5.12 – DIAGRAMA TOPOLÓGICO DO RIO HIPOTÉTICO 2.



Aplicando estes dados característicos do rio hipotético 2 nas Equações (3.15) e (3.20), encontra-se o perfil teórico de concentração de DBO e D, como apresentado na Tabela 5.8. Estes perfis foram considerados monitorados para a calibração, através do AG, dos parâmetros k_d e k_a .

TABELA 5.8 – PERFIL TEÓRICO DE DBO E DO (RIO HIPOTÉTICO 2).

x (km)	L (mg/L)	D (mg/L)
0	10	0
8	8,328	1,240
16	6,936	1,707
24	5,777	1,788
32	4,811	1,688
48	3,334	1,320
64	2,314	0,959
80	1,605	0,678
120	0,643	0,275

O espaço de busca dos parâmetros foi: $-1 < k_a(\text{dia}^{-1}) < 5$; $-1 < k_d(\text{dia}^{-1}) < 5$; a execução do AG era encerrada após terem sido avaliadas 1000 gerações. Além disso, o valor de w_1 e w_2 na função aptidão (f_{AG2}), foi igual a 1.0 e 0.0, respectivamente; ou seja, somente foi considerado o resíduo em relação à concentração de OD na calibração. Desta forma, tratou-se de um problema de otimização com apenas 1 objetivo.

Os parâmetros encontrados através do algoritmo genético estão apresentados na Tabela 5.9, e comparadas com os valores teóricos.

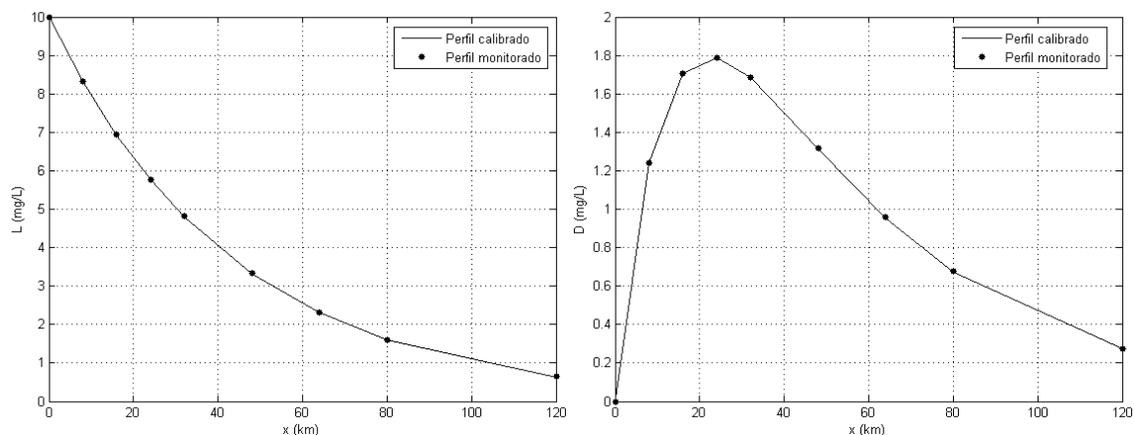
TABELA 5.9 – PARÂMETROS DO MODELO DE QUALIDADE DA ÁGUA CALBRADO (RIO HIPOTÉTICO 2).

	k_a (dia ⁻¹)	k_d (dia ⁻¹)
Teórico	2,0	0,6
Calculado	1,9999998	0,5999999

É possível perceber que os parâmetros calculados se aproximaram muito dos teóricos. Além disso, o valor de f_{AG2} foi igual a $3,6E^{-14}$, o que corrobora a percepção de que o resultado obtido se aproximou bastante do teórico.

Os gráficos da Figura 5.13 comparam as concentrações de DBO e D medidos em campo com aquelas obtidas através do modelo calibrado pelo algoritmo genético.

FIGURA 5.13 - COMPARAÇÃO ENTRE OS PERFIS DE DBO E D TEÓRICOS E CALCULADOS PELO MODELO CALBRADO (RIO HIPOTÉTICO 2).



5.3.1 Testes do Algoritmo Genético em Relação à Probabilidade de Mutação

Uma análise importante consistiu em avaliar a influência da probabilidade de mutação no resíduo da função aptidão. Para isto, foram definidas diferentes combinações de NG e P_{mut} e, para cada uma destas combinações, o AG foi executado 300 vezes. A Tabela 5.10 estas combinações de P_{mut} e NG, bem como o menor e o maior resíduo encontrado, entre as 300 simulações, para cada uma delas.

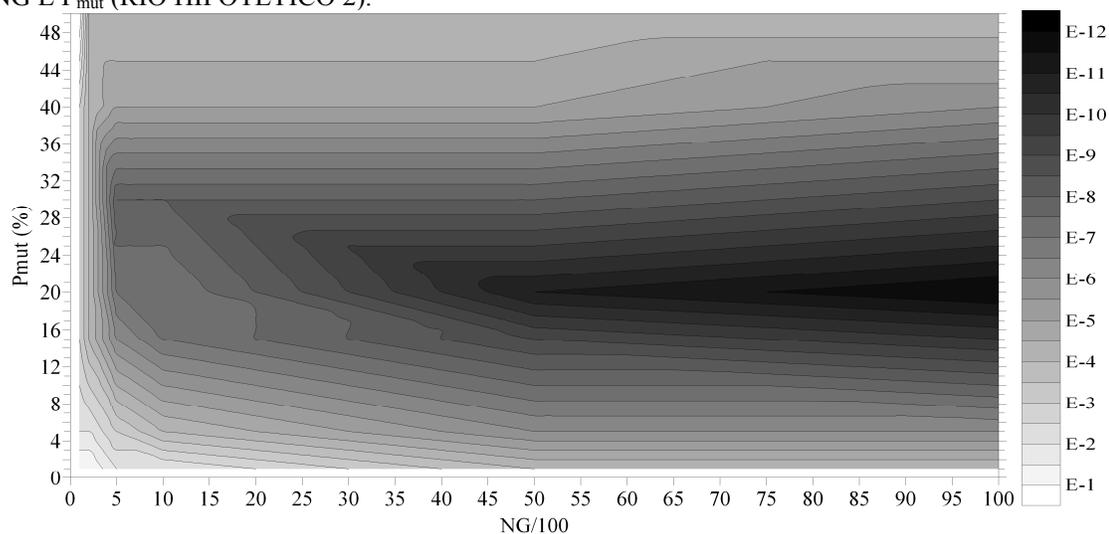
TABELA 5.10 – MAIOR E MENOR RESÍDUO ENCONTRADO PARA AS DIFERENTES COMBINAÇÕES DE P_{mut} E NG (RIO HIPOTÉTICO 2).

P_{mut}		NG					
		100	200	500	1000	5000	10000
1%	Maior f_{AG2}	1,595058	1,086068	0,275853	0,1153732	0,0079768	0,0012788
	Menor f_{AG2}	3,55E-14	3,55E-14	3,55E-14	3,55E-14	3,55E-14	3,55E-14
5%	Maior f_{AG2}	0,381699	0,123511	0,017449	0,0027856	8,57E-05	1,06E-05
	Menor f_{AG2}	3,55E-14	3,55E-14	6,04E-14	3,55E-14	3,55E-14	3,55E-14
15%	Maior f_{AG2}	0,060621	0,006458	4,74E-05	2,56E-06	9,68E-08	2,19E-09
	Menor f_{AG2}	3,55E-14	3,55E-14	3,55E-14	3,55E-14	3,55E-14	3,55E-14
20%	Maior f_{AG2}	0,037088	0,006423	7,20E-06	5,11E-06	7,92E-10	4,19E-11
	Menor f_{AG2}	3,55E-14	3,55E-14	3,55E-14	3,55E-14	3,55E-14	3,55E-14
30%	Maior f_{AG2}	0,021613	0,006123	3,55E-07	9,31E-07	3,82E-07	3,70E-08
	Menor f_{AG2}	3,23E-12	1,64E-13	3,55E-14	3,55E-14	3,55E-14	3,55E-14
40%	Maior f_{AG2}	0,020447	0,050455	0,0001649	0,0001192	0,0001846	6,24E-05
	Menor f_{AG2}	8,54E-10	7,02E-11	6,03E-14	4,38E-13	4,35E-14	4,35E-14
50%	Maior f_{AG2}	1,804693	0,005063	0,0023261	0,0039211	0,0031319	0,0063155
	Menor f_{AG2}	1,62E-07	7,58E-08	1,03E-08	1,92E-09	2,80E-11	2,86E-09

Para a maioria das combinações o menor resíduo encontrado foi igual a $3,55E^{-14}$, ou seja, ao se simular 300 vezes o algoritmo genético, em pelo menos 1 destas simulações o AG encontrou este resíduo mínimo. Este comportamento ocorreu para combinações entre P_{mut} menor ou igual a 30%, e NG qualquer.

Na Figura 5.14 os maiores valores de f_{AG2} , apresentados na Tabela 5.10, podem ser visualizados através de curvas de nível. Observa-se que a escala de cor está relacionada à magnitude do resíduo, de forma que para cores mais escuras, têm-se resíduos menores, e vice-versa.

FIGURA 5.14 - MAIOR RESÍDUO ENCONTRADO PARA DIFERENTES COMBINAÇÕES DE NG E P_{mut} (RIO HIPOTÉTICO 2).



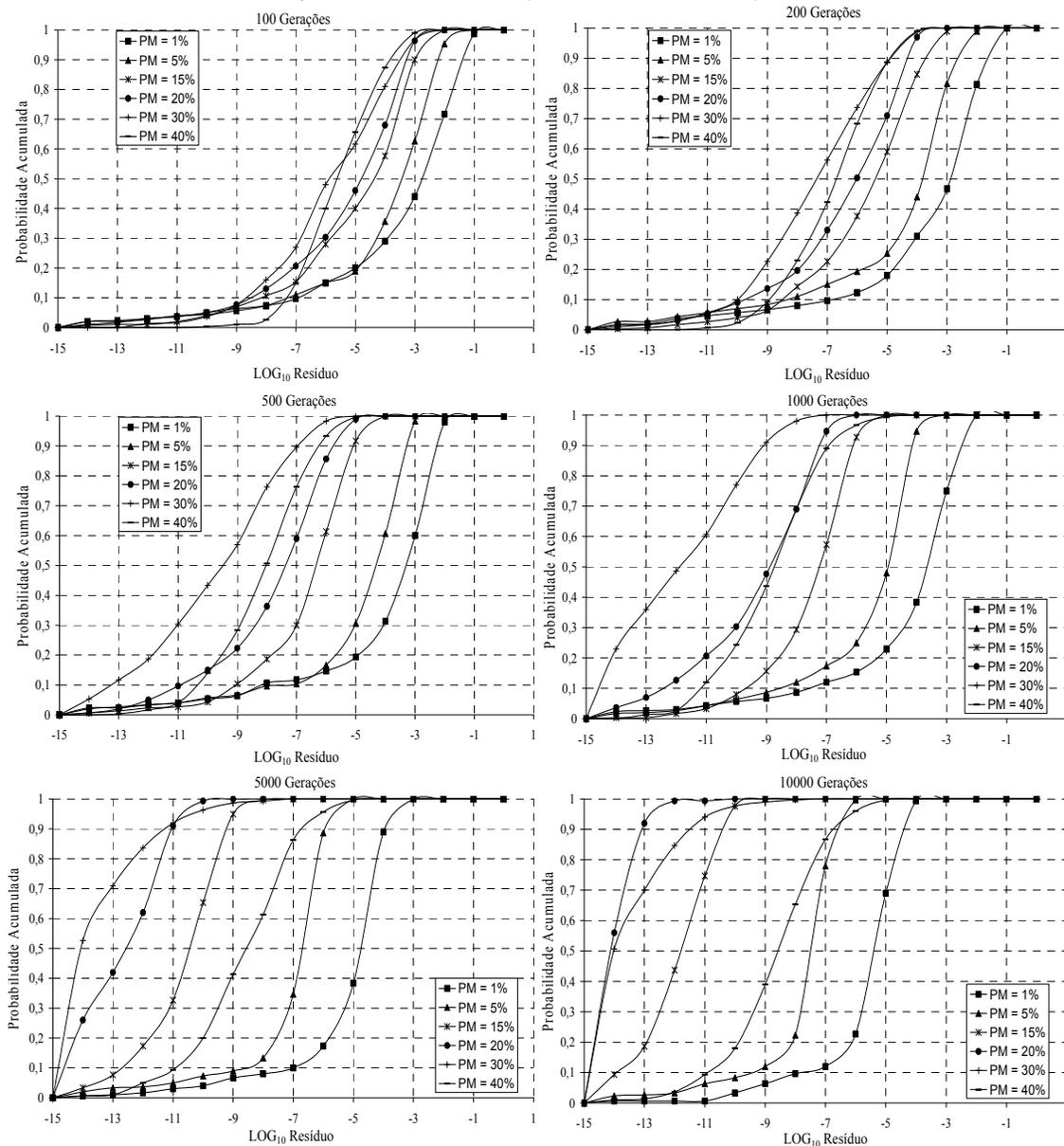
Nota-se, portanto, uma considerável influência tanto da mutação, quanto do número de gerações. De forma geral, para pequenas probabilidades de mutação ($P_{mut} < 5\%$), e para qualquer NG, o desempenho do algoritmo não é satisfatório (resíduos da ordem de E^{-3}), melhorando para probabilidades intermediárias ($15\% < P_{mut} < 35\%$, com resíduos da ordem de E^{-6}), e novamente piorando quando se empregam P_{mut} elevadas ($P_{mut} > 35\%$, e resíduo da ordem de E^{-2}). Da mesma forma, observando-se o pior dos resíduos obtido pelo algoritmo genético em cada simulação, percebe-se que o número de gerações empregado na execução do algoritmo tem influência fundamental sobre a resposta, melhorando a mesma com o aumento do número de gerações. Isto se deve ao fato de um maior número de gerações proporcionar mais “tempo” para que o processo de evolução, presente no AG, produza indivíduos, ou respostas, melhores.

A melhor combinação observada correspondeu àquela em que se empregou, na simulação, uma probabilidade de mutação de 20% e número de gerações igual a 10.000. Para este caso, a pior das respostas obtidas entre as 300 simulações foi da ordem de E^{-11} , o que ainda pode ser considerada um resíduo pequeno. Além disso, observa-se que estes resultados em relação à probabilidade de mutação ótima são coerentes com aqueles apresentados no capítulo 5.1.

Outra forma de avaliação do desempenho do AG em relação ao NG e a P_{mut} se deu através da construção de curvas de distribuição de probabilidade acumulada, $P[X \geq x]$. Estas curvas informam qual a probabilidade de que, para um dado valor de P_{mut} e NG, o valor do resíduo seja menor ou igual a um determinado valor; elas podem ser visualizadas na Figura 5.15.

Como exemplo de interpretação dos gráficos da Figura 5.15, considere uma combinação de NG igual a 5.000, e P_{mut} igual a 30%; a curva densidade de probabilidade acumulada informa que, em 90% das simulações, o resíduo obtido pelo algoritmo foi da ordem de $1E^{-11}$, ou menor. Semelhantemente, para uma combinação de 10.000 gerações e 20% de taxa de mutação, o algoritmo encontrou um resíduo igual ou menor a $1E^{-13}$ em aproximadamente 92% das simulações.

FIGURA 5.15 - CURVAS DE DENSIDADE DE PROBABILIDADE ACUMULADA PARA DIFERENTES COMBINAÇÕES DE P_{mut} E NG (RIO HIPOTÉTICO 2).



Admite-se como sendo o melhor resultado a região definida por um resíduo menor ou igual a 10^{-7} , e para uma probabilidade maior ou igual a 50%. Em conformidade com as informações apresentadas na Tabela 5.10, e também na Figura 5.14, nota-se que melhores resultados são obtidos quando se empregam probabilidades de mutação intermediárias, entre 15% a 30%. Nota-se que, para a combinação destas P_{mut} ótimas com um valor de NG maior ou igual a 5.000, em todas as simulações realizadas o algoritmo genético encontrou um resíduo muito próximo de zero ($\leq 10^{-7}$).

Através dos resultados obtidos, espera-se que a resposta produzida pelo algoritmo, quando se emprega uma combinação ótima parâmetros genéticos, será aquela que corresponde ao melhor resultado possível, ou seja, para a qual o valor do resíduo está o mais próximo possível de zero.

Observando os testes feitos com o algoritmo, apresentados na Figura 5.15, concluiu-se que uma probabilidade de mutação de aproximadamente 30% e número de geração igual a 1.000, representam uma combinação com a qual o algoritmo genético produziu um resíduo menor ou igual a 10^{-7} em 100% das vezes que foi executado, sendo, portanto, a combinação que se empregou nas simulações que se seguem.

5.3.2 Avaliação do Impacto de Informações Conhecidas

O problema de calibração foi dividido em 4 “cenários”, cada um correspondendo a um número diferente de “pontos de medição” utilizados na calibração do modelo de qualidade da água. Dentro de cada cenário existem algumas “configurações”, para as quais diferentes pontos de medição são empregados na calibração do modelo. Para todos os cenários de calibração, exceto o 1 (para o qual se conhecia apenas um ponto de déficit medido), foram executadas 300 simulações com o algoritmo genético, e entre os 300 resíduos gerados nestas simulações, o pior foi escolhido e apresentado, juntamente com os valores de k_a e k_d correspondentes, em tabelas.

5.3.2.1 Cenário 1

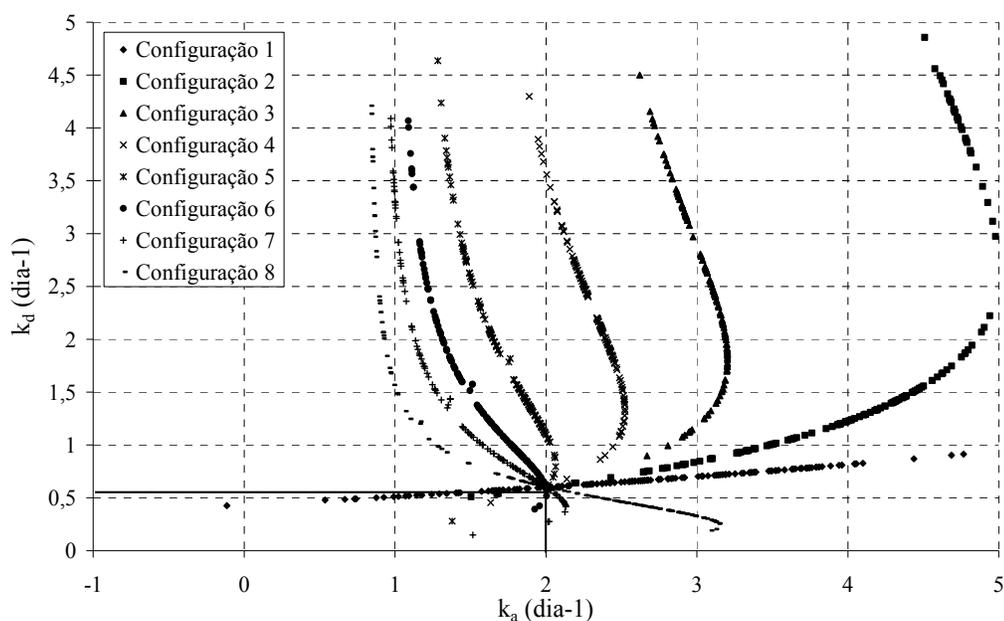
Primeiramente apresenta-se o cenário 1, em que apenas 1 ponto de medição de déficit de oxigênio é conhecido. Para este cenário foram definidas 8 configurações distintas, referentes a diferentes pontos de monitoramento utilizados na calibração. A Tabela 5.11 sumariza as configurações construídas.

TABELA 5.11 - PONTOS DE MONITORAMENTO UTILIZADOS NA CALIBRAÇÃO DO MODELO DE QUALIDADE DA ÁGUA PARA O CENÁRIO 1 (RIO HIPOTÉTICO 2).

CONFIGURAÇÃO	x (km)	D_{medido} (mg/L)
1	8	1,240
2	16	1,707
3	24	1,788
4	32	1,688
5	48	1,320
6	64	0,959
7	80	0,678
8	120	0,275

Como se dispõe de poucas informações de monitoramento para este cenário, não há apenas uma resposta ótima, mas uma série de combinações entre k_a e k_d que satisfazem o problema de calibração, ou seja, que produzem um resíduo (f_{AG2}) próximo de zero. Por este motivo, para cada configuração apresentada acima, foram realizadas 150 simulações com o algoritmo genético, obtendo 150 combinações diferentes de k_a e k_d que produziram um resíduo aproximadamente igual a zero. Estas combinações foram inseridas nos gráficos de k_a versus k_d , como apresentadas na Figura 5.16.

FIGURA 5.16 - FRENTES DE PARETO PARA O CENÁRIO 1 (RIO HIPOTÉTICO 2).



Através da visualização da Figura 5.16 conclui-se que, ao se utilizar apenas 1 ponto de monitoramento na calibração do modelo, não se obtém uma resposta única. Além disso, observa-se que, curiosamente, todas as frentes de Pareto se interceptam no ponto $k_a=2.0$ e $k_d=0.6$, que representa os valores teóricos para os parâmetros do modelo.

5.3.2.2 Cenário 2

Para o cenário e foram utilizados 2 pontos de medição de déficit de oxigênio na calibração. Neste caso foram definidas 7 configurações distintas, para as quais se conhece a informação de monitoramento a partir do ponto de lançamento. A Tabela 5.12 apresenta estas configurações, bem como os resultados das simulações.

TABELA 5.12 - CONFIGURAÇÕES E RESULTADOS PARA O CENÁRIO 2 (RIO HIPOTÉTICO 2).

CONFIGURAÇÃO	x(km)	k_a (dia ⁻¹)	ER k_a (%)	k_d (dia ⁻¹)	ER k_d (%)	f_{AGI}
1	8 16	2,01480	0,734	0,60248	0,411	5,15E-06
2	80 120	1,99869	0,065	0,60061	0,101	1,04E-07
3	8 120	2,00014	0,007	0,60003	0,005	3,61E-09
4	32 48	2,01162	0,578	0,60716	1,179	2,80E-05
5	16 80	2,00079	0,039	0,60037	0,062	5,22E-07
6	8 48	2,00009	0,004	0,60007	0,012	1,40E-08
7	16 32	2,00563	0,281	0,60185	0,307	4,77E-06

Onde: ER representa o erro relativo entre o parâmetro teórico e calculado.

Nesta situação, com apenas 2 pontos de déficit de oxigênio conhecidos, o algoritmo genético já é capaz de encontrar, com um erro pequeno, a resposta do problema de calibração, para qualquer um dos cenários. Porém, quando se utilizam pontos de calibração que tenham uma distribuição razoavelmente uniforme ao longo do rio (configuração 3 e 6), nota-se que o erro percentual entre o parâmetro teórico e o calculado, ou o resíduo, torna-se ainda menor.

5.3.2.3 Cenário 3

No cenário 3 foram utilizados 3 pontos de déficit de oxigênio monitorado para a calibração do modelo. Neste caso definiram-se 6 configurações distintas. A Tabela 5.13 apresenta estas configurações, bem como os resultados das simulações do algoritmo genético.

TABELA 5.13 - CONFIGURAÇÕES E RESULTADOS PARA O CENÁRIO 3 (RIO HIPOTÉTICO 2).

CONFIGURAÇÃO	x (km)	k_a (dia ⁻¹)	ER(k_a)	k_d (dia ⁻¹)	ER(k_d)	f_{AG1}
1	8	2,00834	0,415	0,60205	0,341	8,04E-06
	16					
	24					
2	64	1,99880	0,060	0,60196	0,326	1,28E-06
	80					
	120					
3	8	2,00063	0,032	0,60030	0,050	2,95E-07
	32					
	120					
4	16	2,00107	0,053	0,60030	0,050	6,41E-07
	32					
	64					
5	8	2,00000	0,000	0,60002	0,003	1,16E-09
	80					
	120					
6	24	2,00314	0,157	0,60153	0,254	8,05E-06
	48					
	80					

Os resultados indicam novamente que as configurações com uma distribuição muito próxima de dados de monitoramento (configuração 1 e 6) produziram os maiores erros percentuais. Por outro lado, quando se empregou pontos de DO conhecidos que estavam bem distribuídos ao longo do rio (configuração 5) os parâmetros obtidos se encontram mais próximos dos teóricos.

5.3.2.4 Cenário 4

No cenário 4 utilizou-se 4 pontos monitorados de DO para a calibração do modelo, e 4 configurações distintas foram definidas, relativas aos pontos de monitoramento utilizados na calibração. A Tabela 5.14 apresenta estas configurações, bem como os resultados das simulações do algoritmo genético.

TABELA 5.14 - CONFIGURAÇÕES E RESULTADOS PARA O CENÁRIO 4 (RIO HIPOTÉTICO 2).

CONFIGURAÇÃO	x (km)	k_a (dia ⁻¹)	ER(k_a)	k_d (dia ⁻¹)	ER(k_d)	f_{AG1}
1	8	2,00340	0,170	0,60101	0,168	3,30E-06
	16					
	24					
	32					
2	48	2,00022	0,011	0,60019	0,032	8,84E-08
	64					
	80					
	120					
3	8	2,00029	0,015	0,60012	0,020	1,10E-07
	16					
	80					
	120					
4	8	2,00027	0,013	0,60013	0,021	9,21E-08
	24					
	48					
	80					

Para este cenário, da mesma forma que ocorreu com os anteriores, o algoritmo genético encontrou uma resposta próxima da desejada para todas as configurações, sendo que as melhores foram a 2 e 4.

5.3.3 Conclusões do Estudo de Caso 2

Devido ao fato do algoritmo genético fazer grande uso do mecanismo da aleatoriedade, não necessariamente o algoritmo retornará, em todas as simulações, a mesma resposta. Por exemplo, como a população inicial é gerada aleatoriamente, numa primeira simulação esta população pode conter indivíduos bem adaptados, o que torna possível acelerar o processo de convergência para a resposta ótima. Eventualmente, porém, numa próxima simulação a população inicial não será composta por indivíduos tão bem adaptados, tornando o processo de convergência mais lento do que no caso anterior. Por este motivo, deve-se utilizar uma adequada combinação entre taxa de mutação, número de gerações e número de simulações, no sentido de assegurar que a resposta ótima realmente será produzida com um menor gasto de processamento computacional possível. Através dos resultados obtidos, observou-se que quando parâmetros genéticos adequados foram empregados o algoritmo apresentou, para o caso genérico aqui exposto, grande eficiência e precisão no processo de calibração do modelo de qualidade da água.

	1º Tramo	2º Tramo	3º Tramo
Comprimento (km)	20	20	60
Profundidade (m)	1.24	1.24	1.41
Área (m ²)	15.5	15.5	18.05
Vazão (m ³ /s)	6.25	6.25	7.407
Velocidade (m/s)	0.403	0.403	0.410
Temperatura (°C)	20.59	20.59	19.72
C _s (mg/l)	8.987	8.987	9.143
K _a (dia ⁻¹)	1.842	1.842	1.494
K _s (dia ⁻¹)	0.25	0.0	0.0
K _d (dia ⁻¹)	0.514	0.514	0.494
K _r (dia ⁻¹)	0.764	0.514	0.494
S _b (mg/m ² s)	0.0	0.0	0.0

Considerou-se regime permanente, tanto em relação ao escoamento, quanto em relação à qualidade da água. Esta aproximação não é necessariamente verdade; principalmente em relação aos parâmetros do modelo, que são afetados fortemente pela temperatura que, por sua vez, apresenta variações significativas entre o dia e a noite. Além disso, outras condições atmosféricas podem afetar o valor destes parâmetros. A concentração de saturação de OD, que influencia a capacidade e velocidade da reaeração da água do rio, também é função da temperatura. Verifica-se, também, que a remoção de matéria orgânica por efeito de sedimentação foi considerada importante somente no primeiro tramo do rio, ou seja, k_s é igual à zero no segundo e terceiro tramos. Além disso, a demanda bentônica de oxigênio foi considerada insignificante, neste caso ($S_b = 0$).

De posse desses dados, as Equações (3.15) e (3.20) podem ser utilizadas para se obter os perfis de concentração de matéria orgânica (DBO), déficit de oxigênio (D) e oxigênio dissolvido (OD) ao longo do rio, apresentados na Tabela 5.16.

TABELA 5.16 - PERFIL DE CONCENTRAÇÃO DE DBO, OD E D AO LONGO DO RIO HIPOTÉTICO 3.

x (km)	L (mg/L)	C (mg/L)	D (mg/L)
0	16,667	7,093	1,894
10	13,3833	6,1720	2,8150
20	10,7466	5,9641	3,0229
30	9,2717	6,0682	2,9190
40	7,5308	6,8411	2,3019
50	6,5505	6,8373	2,3057
60	5,6979	6,9384	2,2046
70	4,9562	7,0948	2,0482
80	4,3111	7,2758	1,8672
90	3,7499	7,4627	1,6803
100	3,2618	7,6446	1,4984

Para realizar a calibração foi percorrido o caminho inverso, ou seja, consideram-se as concentrações calculadas de DBO e OD como sendo “monitoradas”. Desta forma, calibra-se o modelo de qualidade da água lançando mão de algumas destas concentrações “monitoradas”. Neste processo de calibração somente os parâmetros k_d , k_a e k_s serão buscados pelo algoritmo, pois foi considerado que a demanda bentônica de oxigênio é previamente conhecida, constituindo um dado de entrada do modelo. Como existem três parâmetros do modelo de qualidade de água a serem calibrados, e eles podem variar para cada um dos três tramos do rio, esta calibração corresponde a um problema de otimização de uma função de 9 variáveis.

O espaço de busca empregado foi: $0.0 < k_d(\text{dia}^{-1}) < 1.6$; $0.0 < k_a(\text{dia}^{-1}) < 5.0$; $0.0 < k_s(\text{dia}^{-1}) < 1.6$. Como critério para o encerramento da execução do algoritmo genético, ou critério de parada, foi definido que o valor da função aptidão (Equação (4.16)) deveria ser menor ou igual a algum valor definido (Tabela 5.16). A probabilidade de mutação foi igual a 5%, de acordo com os resultados do estudo de P_{mut} ótima.

A calibração para este rio hipotético foi dividida em 5 cenários, que se diferenciavam entre si pelo número de pontos de monitoramento utilizados. Além disso, o critério de parada variou entre estes cenários de calibração. Para os cenários onde havia grande número de pontos de monitoramento (1 e 2) o critério de parada foi menos restritivo do para aqueles cenários com poucos pontos. As características da cada cenário de calibração estão apresentadas na Tabela 5.17.

TABELA 5.17 - CENÁRIOS DE CALIBRAÇÃO PARA O RIO HIPOTÉTICO 3.

CENÁRIO	Nº DE PONTOS DE MONITORAMENTO	CRITÉRIO DE PARADA ($F_{AG2} \leq \dots$)
1	20	0,05
2	10	0,005
3	3	0,00001
4	2	0,00001
5	1	0,00001

No **cenário 1** procurou-se simular uma situação teórica onde havia muitas informações de qualidade da água disponíveis: um ponto de monitoramento a cada 5 km do rio. Obviamente, este cenário representa uma situação puramente teórica, tendo o objetivo de avaliar o efeito do número de informações de qualidade de água sobre a calibração do modelo, uma vez que na prática o monitoramento custa caro, o que inviabiliza economicamente a obtenção de um número tão grande de informações. O **cenário 2** também apresentou muitos pontos de monitoramento (10 pontos), que estavam distribuídos entre os 3 tramos do rio. Os **cenários 3, 4 e 5** se apresentaram mais realistas em relação ao número de pontos de monitoramento existentes, ou seja, de informações de qualidade de água disponíveis. Em relação ao **cenário 3**, os 3 pontos de monitoramento foram distribuídos ao longo do rio, um em cada tramo. No **cenário 4** os 2 pontos de monitoramento estavam localizados no segundo e terceiro tramo. Finalmente, em relação ao **cenário 5**, o mais desfavorável em relação à disponibilidade de informação de qualidade de água, o único ponto de monitoramento estava localizado no final do rio. Para os 5 cenários descritos acima, foram executadas 200 simulações com o algoritmo genético.

5.4.1 Resultados Gerais do Rio Hipotético 3

Observou-se que para cada uma das 200 simulações, e para cada cenário de calibração, o AG encontrou uma combinação diferente dos parâmetros que minimizaram a função objetivo (f_{AG2}), ou seja, que calibraram o modelo de qualidade da água. As Tabela 5.18 à Tabela 5.22 apresentam algumas informações estatísticas dos parâmetros do modelo de qualidade da água encontrados pelo algoritmo genético,

separados por tramo do rio e pelo número do cenário. Nesta tabela também se inclui a taxa de remoção total de MO (k_r), igual a soma de k_d e k_s .

TABELA 5.18 - RESULTADOS DE CALIBRAÇÃO PARA O CENÁRIO 1 (RIO HIPOTÉTICO 3).

TRAMO		MÍNIMO	MÉDIA	MEDIANA	MÁXIMO	DP	
Cenário 1	1	k_d	0,1981	0,4187	0,4137	0,6219	0,0881
		k_a	0,1873	1,3572	1,3366	2,3912	0,4503
		k_s	0,1267	0,3339	0,3383	0,5673	0,0908
		k_r	0,7369	0,7526	0,7490	0,7847	0,0111
	2	k_d	0,1685	0,3409	0,3317	0,5367	0,0845
		k_a	0,6125	1,2837	1,2694	1,9503	0,2807
		k_s	0,0172	0,1926	0,1902	0,3651	0,0806
		k_r	0,4626	0,5335	0,54203	0,5663	0,0243
	3	k_d	0,1076	0,3297	0,3352	0,5133	0,0796
		k_a	0,4999	1,0757	1,0824	1,5799	0,2086
		k_s	0,0020	0,1610	0,1539	0,3800	0,0763
		k_r	0,4703	0,49077	0,4881	0,5189	0,0114

TABELA 5.19 - RESULTADOS DE CALIBRAÇÃO PARA O CENÁRIO 2 (RIO HIPOTÉTICO 3).

TRAMO		MÍNIMO	MÉDIA	MEDIANA	MÁXIMO	DP	
Cenário 2	1	k_d	0,3558	0,4477	0,4405	0,6370	0,0632
		k_a	0,9503	1,4701	1,4319	2,5124	0,3527
		k_s	0,1264	0,3138	0,3202	0,4087	0,0646
		k_r	0,7516	0,7615	0,7628	0,7755	0,0046
	2	k_d	0,1411	0,3562	0,3578	0,5290	0,0797
		k_a	0,7110	1,3630	1,3718	1,9445	0,2584
		k_s	0,0009	0,1619	0,1630	0,3709	0,0789
		k_r	0,4953	0,5181	0,5158	0,5347	0,0085
	3	k_d	0,2377	0,3437	0,3405	0,4873	0,0599
		k_a	0,8307	1,1038	1,0935	1,4661	0,1551
		k_s	0,0021	0,1498	0,1518	0,2575	0,0604
		k_r	0,4865	0,4935	0,4944	0,5039	0,0029

TABELA 5.20 - RESULTADOS DE CALIBRAÇÃO PARA O CENÁRIO 3 (RIO HIPOTÉTICO 3).

TRAMO		MÍNIMO	MÉDIA	MEDIANA	MÁXIMO	DP	
Cenário 3	1	k_d	0,2038	0,4325	0,4381	0,6852	0,0943
		k_a	0,1501	1,4044	1,4409	2,7156	0,5044
		k_s	0,0781	0,3310	0,3253	0,5596	0,0943
		k_r	0,7632	0,7635	0,7634	0,7648	0,0004
	2	k_d	0,1401	0,3603	0,3657	0,5147	0,0849
		k_a	0,6851	1,3736	1,3919	1,9302	0,2829
		k_s	0,0008	0,1547	0,1493	0,3746	0,0847
		k_r	0,5125	0,5149	0,5152	0,5156	0,0008
	3	k_d	0,1221	0,3116	0,3241	0,4608	0,0767
		k_a	0,5730	1,0506	1,0810	1,4163	0,1904
		k_s	0,0331	0,1821	0,1697	0,3716	0,0767
		k_r	0,4934	0,4938	0,4938	0,4946	0,0002

TABELA 5.21 - RESULTADOS DE CALIBRAÇÃO PARA O CENÁRIO 4 (RIO HIPOTÉTICO 3).

		TRAMO	MÍNIMO	MÉDIA	MEDIANA	MÁXIMO	DP
Cenário 4	1	k_d	0,03556	0,31199	0,29251	0,696	0,12734
		k_a	0,33564	1,5978	1,50721	4,49234	0,70038
		k_s	0,04378	0,26108	0,25816	0,53582	0,0916
		k_r	0,19211	0,573077	0,57476	0,95837	0,13163
	2	k_d	0,13164	0,46654	0,45422	0,85758	0,146566
		k_a	0,28432	1,44167	1,39937	2,70449	0,46371
		k_s	0,05659	0,30171	0,28877	0,70185	0,12636
		k_r	0,25423	0,76824	0,76582	1,27726	0,17552
	3	k_d	0,09182	0,3032356	0,31453	0,46712	0,08125
		k_a	0,54562	1,0286	1,05012	1,43148	0,198989
		k_s	0,01798	0,17172	0,16226	0,40126	0,080695
		k_r	0,4363	0,47496	0,47497	0,51391	0,013311

TABELA 5.22 - RESULTADOS DE CALIBRAÇÃO PARA O CENÁRIO 5 (RIO HIPOTÉTICO 3).

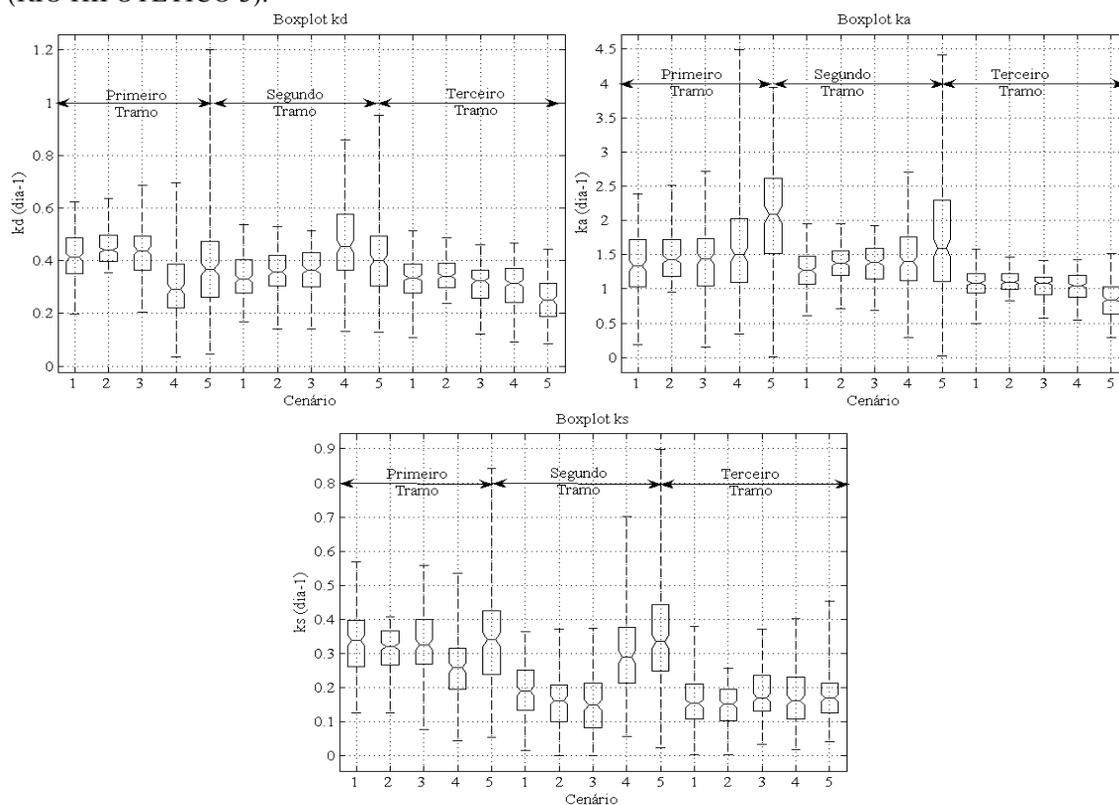
		TRAMO	MÍNIMO	MÉDIA	MEDIANA	MÁXIMO	DP
Cenário 5	1	k_d	0,0457	0,3817	0,3689	1,2011	0,1687
		k_a	0,0097	2,0461	2,0915	3,9385	0,8466
		k_s	0,0532	0,3404	0,3406	0,8425	0,1422
		k_r	0,1320	0,7222	0,7138	1,4088	0,2050
	2	k_d	0,1277	0,4183	0,4006	0,9517	0,1589
		k_a	0,0240	1,6885	1,5973	4,4131	0,8478
		k_s	0,0229	0,3620	0,3351	0,8984	0,1488
		k_r	0,3091	0,7802	0,7668	1,5831	0,2225
	3	k_d	0,0852	0,2523	0,2499	0,4451	0,0813
		k_a	0,2849	0,8284	0,8425	1,5176	0,2592
		k_s	0,0405	0,1747	0,1694	0,4546	0,0710
		k_r	0,1424	0,4270	0,4276	0,5928	0,0804

A média e a mediana são parâmetros que representam a tendência central dos parâmetros de qualidade de água, enquanto o desvio padrão, valores mínimo e máximo representam a dispersão destes parâmetros.

Observa-se que, para os primeiros 3 cenários, os valores de k_r apresentaram dispersão muito baixa em todos os tramos do rio, ou seja, a taxa total de remoção de MO permanece aproximadamente constante. Por outro lado, a dispersão de k_r é relativamente grande nos cenários 4 e 5, principalmente nos 2 primeiros tramos.

Uma alternativa à visualização da tendência central e dispersão dos parâmetros do modelo de qualidade da água é representada pelo gráfico “Boxplot”, onde são apresentados os quartis 25% e 75% da distribuição, os valores máximo e mínimo, além da mediana. A Figura 5.18 apresenta o Boxplot com os parâmetros do modelo de qualidade da água.

FIGURA 5.18 - BOXPLOTS DOS PARÂMETROS DO MODELO DE QUALIDADE DE ÁGUA (RIO HIPOTÉTICO 3).



Como foi mencionado anteriormente, o algoritmo genético robusto deve convergir para a solução do problema de otimização (calibração do modelo de qualidade de água) para qualquer simulação ou semente inicial. Verificou-se que esta convergência ocorreu em todas as simulações e para cada um dos cenários; ou seja, o algoritmo genético encontrou, para cada cenário, 200 conjuntos de parâmetros de qualidade da água que produziram concentrações calculadas de DBO e OD iguais às “monitoradas”. Porém, como pode ser observado na Figura 5.18 e Tabela 5.18 à Tabela 5.22, estes conjuntos de parâmetros são diferentes entre si. Desta forma, este problema de calibração não tem solução única, pois quaisquer dos conjuntos de parâmetros calibram o modelo. Apesar disso, de um ponto de vista físico, deve existir apenas um conjunto de parâmetros que represente a condição real do rio que está sendo modelado, ou seja, que representa as peculiaridades em relação à degradação microbiológica de matéria orgânica, taxa de sedimentação e a reaeração atmosférica. Além disso, não se tem nenhuma garantia de que este único conjunto representativo do

rio esteja entre os 200 conjuntos encontrados. Assim, apesar do algoritmo genético ter identificado vários conjuntos de parâmetros que calibram o modelo de qualidade da água para o rio hipotético, não se conhece aquele conjunto que realmente representa as características física, química e biológica do rio.

Observando as Tabela 5.18 à Tabela 5.22, pode-se notar que, de forma geral, para os cenários com poucas informações de monitoramento, a dispersão dos parâmetros do modelo de qualidade de água foi maior do que para aqueles cenários para os quais havia um número maior informações de monitoramento. Por exemplo, comparando os cenários 2 (10 pontos de monitoramento) e 5 (1 ponto de monitoramento) observa-se que, em média, o desvio padrão dos parâmetros é aproximadamente 2 vezes maior para este cenário em relação àquele. Uma explicação para esta diferença advém do fato de que no processo de calibração as concentrações de DBO e OD calculadas ao longo do rio são ajustadas às monitoradas. Assim, calibrar o modelo utilizando maior número de pontos de monitoramento implica em ajustar as concentrações calculadas às monitoradas para um número maior de pontos, tornando aqueles valores calculados mais restritos. Por sua vez, se as concentrações calculadas estão restritas a um maior número de pontos, os parâmetros do modelo de qualidade de água também apresentarão seus valores mais restritos, ou seja, com menor desvio padrão. Por outro lado, quando se tem apenas 1 ponto de monitoramento (cenário 5), a concentração de DBO e OD calculada deve se ajustar à monitorada neste único ponto, sendo que em outros pontos do rio a concentração calculada pode assumir qualquer valor, desde que no ponto de monitoramento ela se ajuste à concentração monitorada. Assim, como há menor restrição para as concentrações, os parâmetros usados para calcular estas concentrações também apresentarão menor restrição, ou seja, maior desvio padrão.

Pelo mesmo motivo, no cenário 3 os parâmetros de qualidade de água apresentam menor desvio padrão em relação aos cenários 4 e 5. Este comportamento pode ser observado principalmente no segundo e terceiro tramo.

Para confirmar a influência do número de pontos de monitoramento sobre o desvio padrão dos parâmetros, pode ser constatado, dentro do cenário 5, que nos

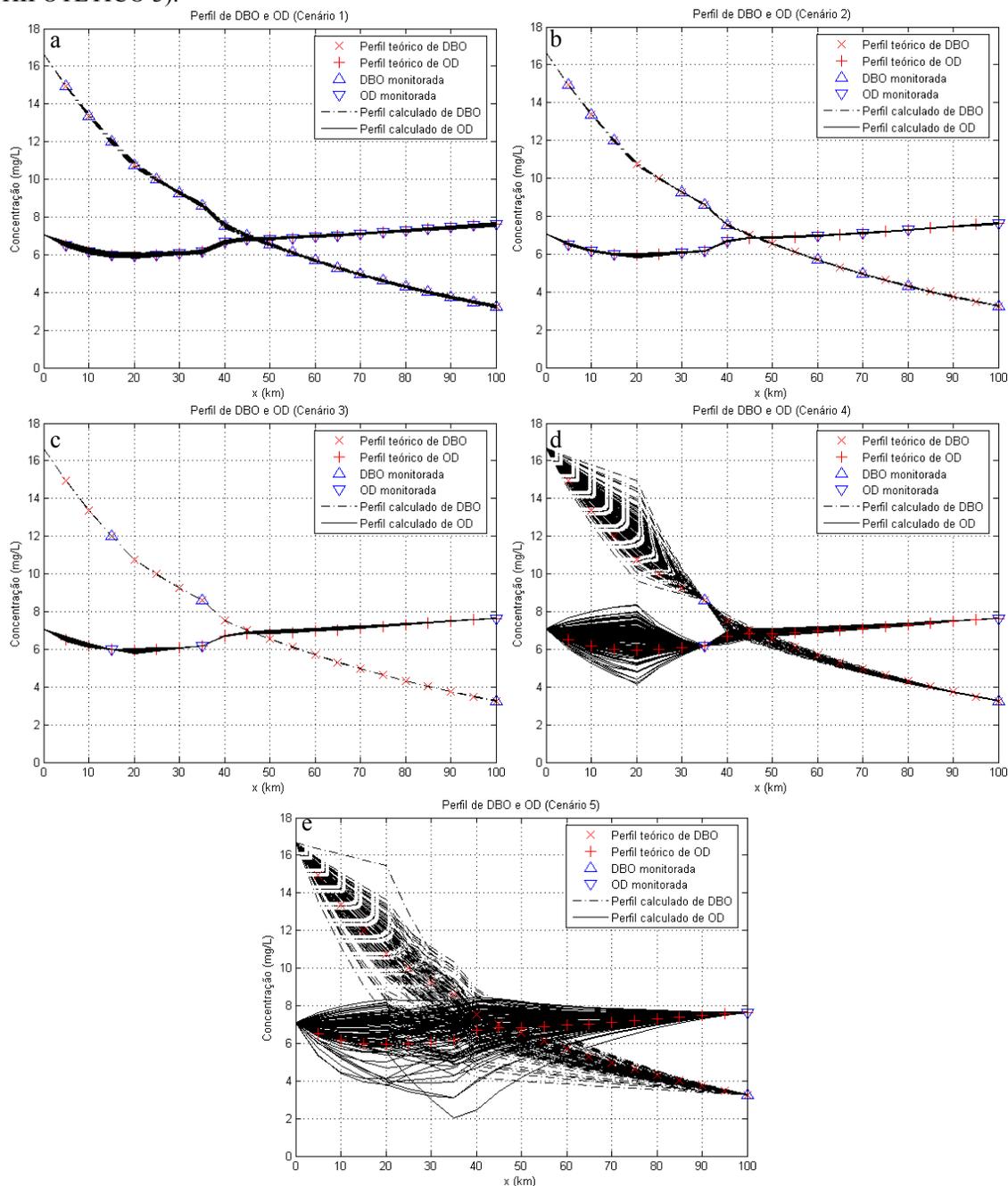
tramos onde não havia pontos de monitoramento (tramo 1 e 2), o desvio padrão foi aproximadamente igual ao dobro do terceiro tramo, onde havia 1 ponto de monitoramento.

Aceitando como verdadeira a explicação de que uma quantidade maior de pontos de monitoramento implica numa restrição mais forte em relação aos parâmetros do modelo de qualidade da água, esperava-se que o desvio padrão destes parâmetros para o cenário 1 fosse menor do que o desvio padrão dos parâmetros para o cenário 2. Porém isso não ocorreu; de fato, em média os desvios padrão para o cenário 1 são maiores. Isto se deve ao fato de que o critério de parada para o cenário 1 ($f_{AG2_{cenário1}} \leq 0.05$) é menos restritivo do que para o cenário 2 ($f_{AG2_{cenário2}} \leq 0.005$). Assim, se por um lado no cenário 1 os parâmetros deveriam ser mais restritos em relação ao cenário 2 devido ao maior número de pontos de monitoramento, por outro lado estes mesmos parâmetros deveriam ser menos restritos no cenário 1 em relação ao cenário 2 devido à menor restrição do critério de parada. Desta forma, percebe-se que o efeito da restrição devido ao critério de parada sobrepujou o efeito da restrição devido ao número de pontos de monitoramento, o que explicaria o fato da dispersão dos parâmetros para o cenário 2 ser ligeiramente inferior à dispersão para o cenário 1.

5.4.2 Comparação Com a Solução Analítica

Das 200 simulações realizadas para cada cenário de calibração, foram tomadas aleatoriamente 20 destas simulações, e então as curvas de concentração de DBO e OD correspondentes foram inseridas num gráfico. O gráfico também apresenta o perfil de DBO e OD teórico, além dos pontos de monitoramento utilizados na calibração. Estes gráficos podem ser visualizados na Figura 5.19.

FIGURA 5.19 - PERFIS DE DBO E OD PARA OS CENÁRIOS 1 (a), 2 (b), 3 (c), 4 (d) E 5 (e) (RIO HIPOTÉTICO 3).



Observa-se que os cenários de calibração para os quais os parâmetros do modelo de qualidade de água apresentaram dispersão mais elevada correspondem àqueles em que a dispersão das concentrações de DBO e OD também é maior. Comparando os perfis de DBO e OD para o cenário 3 e 5 é possível visualizar claramente esta diferença de dispersão. Também é possível observar que, para os cenários 4 e 5, a

dispersão de DBO e OD é alta quando se está longe dos pontos de monitoramento. Porém, todas as curvas de DBO e OD convergem exatamente para o valor monitorado nestes pontos. Por este motivo, para qualquer uma das simulações considera-se que o modelo está calibrado, pois os conjuntos dos parâmetros minimizaram a função-objetivo (Equação (4.16)).

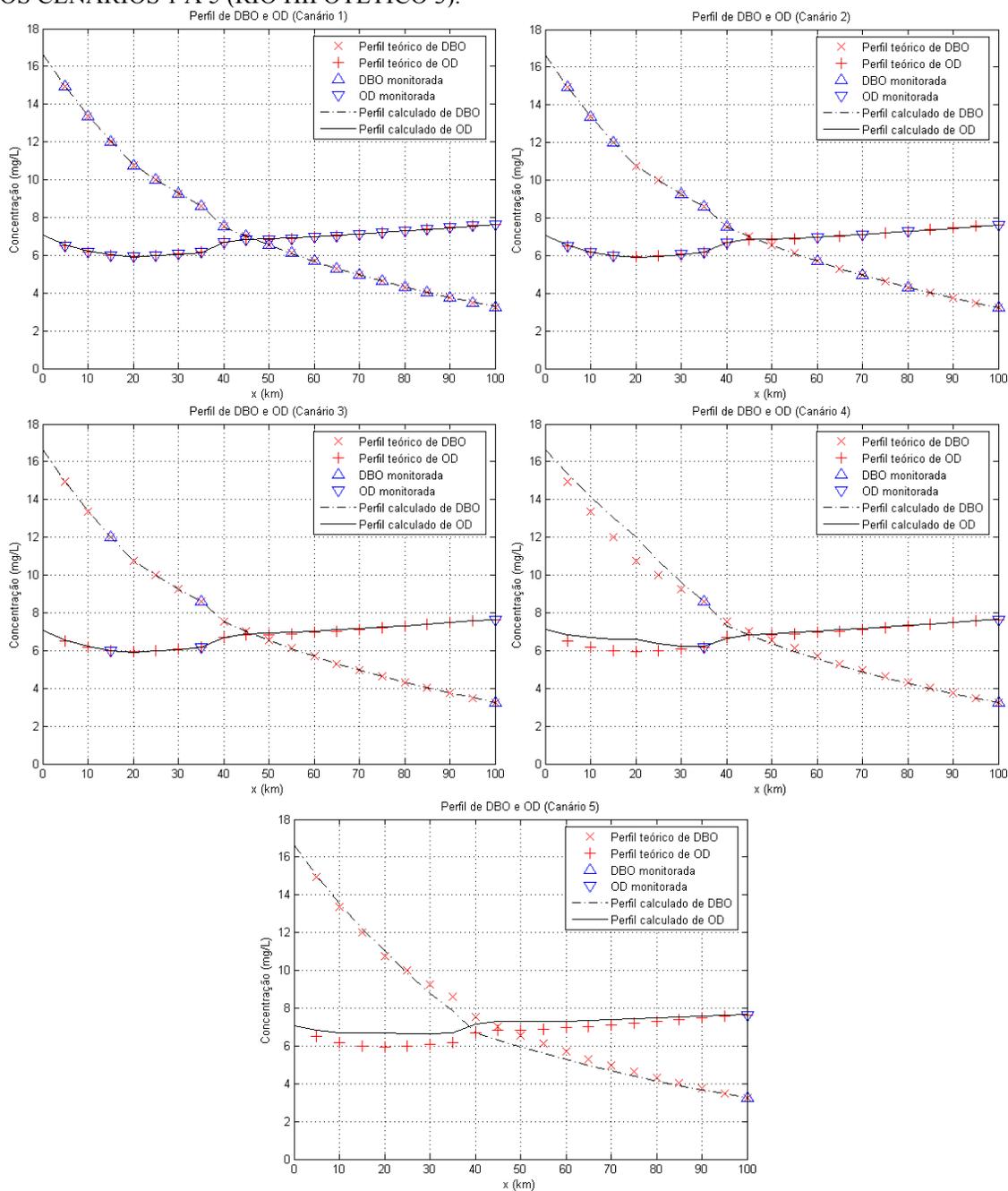
Para o cenário 1, os perfis de DBO e OD apresentados são praticamente iguais; além disso, estes perfis se ajustam bem aos pontos de DBO e OD teóricos, mesmo àqueles que não foram empregados na calibração. Apesar de praticamente não haver diferença entre os perfis apresentados, eles foram gerados a partir de conjuntos diferentes de parâmetros. Da mesma forma, para os cenários 2 e 3, os perfis calculados se ajustam aos valores teóricos de concentração.

Observa-se que, diferentemente do que ocorre nos cenários 1, 2 e 3, para os quais se tem no mínimo um ponto de monitoramento por tramo do rio, nos cenários 4 e 5 os perfis de DBO e OD não são coincidentes para todas as simulações, ou seja, diferentes conjuntos de parâmetros produzem diferentes perfis de DBO e OD.

5.4.3 Critério Representativo dos Parâmetros do Modelo de Qualidade da Água

Em todas as simulações foram obtidos, através do AG, conjuntos de parâmetros que produziram concentrações de DBO e OD que se ajustaram às concentrações monitoradas. Por este motivo, é possível afirmar que qualquer um desses conjuntos calibrou o modelo para o rio que está sendo estudado e, assim, empregá-lo na modelagem de qualidade da água. Porém, outro critério consiste em se utilizar as médias dos parâmetros obtidos nas 200 simulações, e considerá-las representativas do rio. A Figura 5.20 apresenta os perfis de concentração de DBO e OD obtidos com as médias dos parâmetros.

FIGURA 5.20 - PERFIL DE DBO E OD OBTIDO COM A MÉDIA DOS PARÂMETROS, PARA OS CENÁRIOS 1 A 5 (RIO HIPOTÉTICO 3).



Observa-se que para os cenários 1 a 3 a média dos parâmetros produziu perfis de DBO e OD praticamente iguais aos que tinham sido produzidos com cada conjunto particular de parâmetros. Estes perfis médios ajustaram-se bem às concentrações monitoradas que foram utilizadas na calibração e, também, ao perfil de concentração teórico. Para os cenários 4 e 5, o perfil médio também se ajustou bem às concentrações

monitoradas; porém, não com a mesma qualidade. Apesar disso, ao se utilizar a média dos parâmetros do modelo de qualidade da água, resumiu-se todos aqueles perfis da Figura 5.19 em apenas um perfil de DBO e OD que se aproximou razoavelmente bem do perfil teórico (Figura 5.20). Desta forma, percebe-se que o emprego do valor médio representa um critério adequado quando não se tem informação adicional para analisar qual dos conjuntos de parâmetros deve ser utilizado.

5.4.4 Curvas Relacionando os Parâmetros do Modelo de Qualidade da Água

Com os conjuntos de parâmetros encontrados nas 200 simulações, foram plotadas, para cada tramo do rio, curvas que relacionam estes parâmetros entre si. Estas curvas podem ser visualizadas, para cada cenário de calibração, nas Figura 5.21 à Figura 5.25. Na Tabela 5.23 estão apresentados os coeficientes de correlação linear ao quadrado (R^2), além das equações lineares que relacionam os parâmetros.

FIGURA 5.21 - RELAÇÃO ENTRE OS PARÂMETROS DO MODELO DE QUALIDADE DE ÁGUA PARA O CENÁRIO DE CALIBRAÇÃO 1.

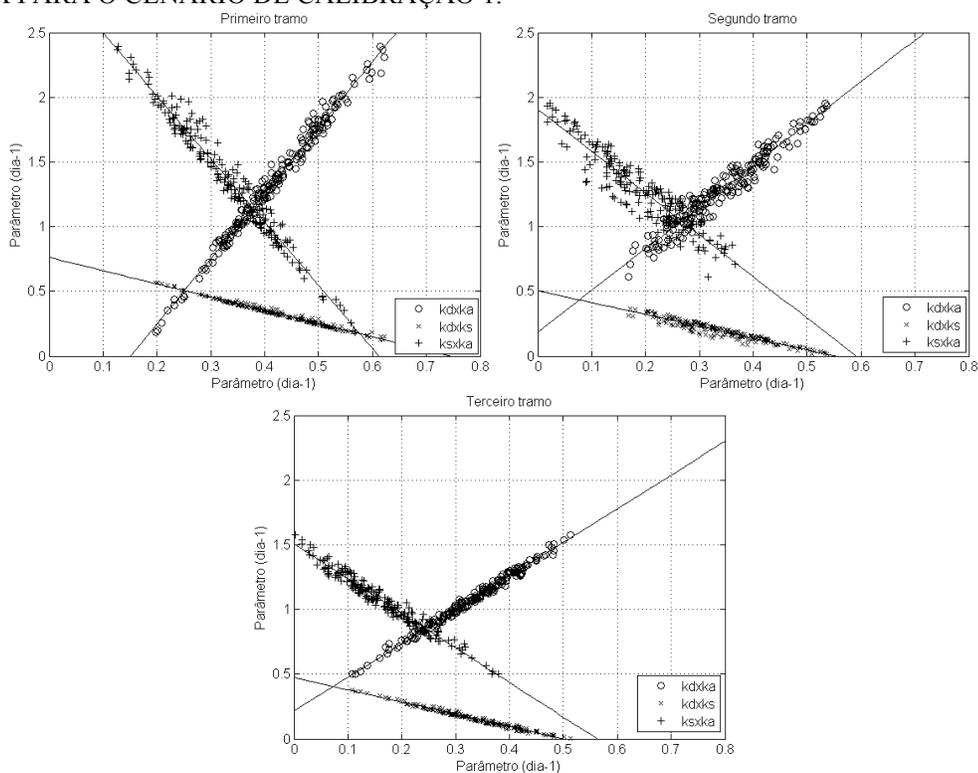


FIGURA 5.22 - RELAÇÃO ENTRE OS PARÂMETROS DO MODELO DE QUALIDADE DE ÁGUA PARA O CENÁRIO DE CALIBRAÇÃO 2.

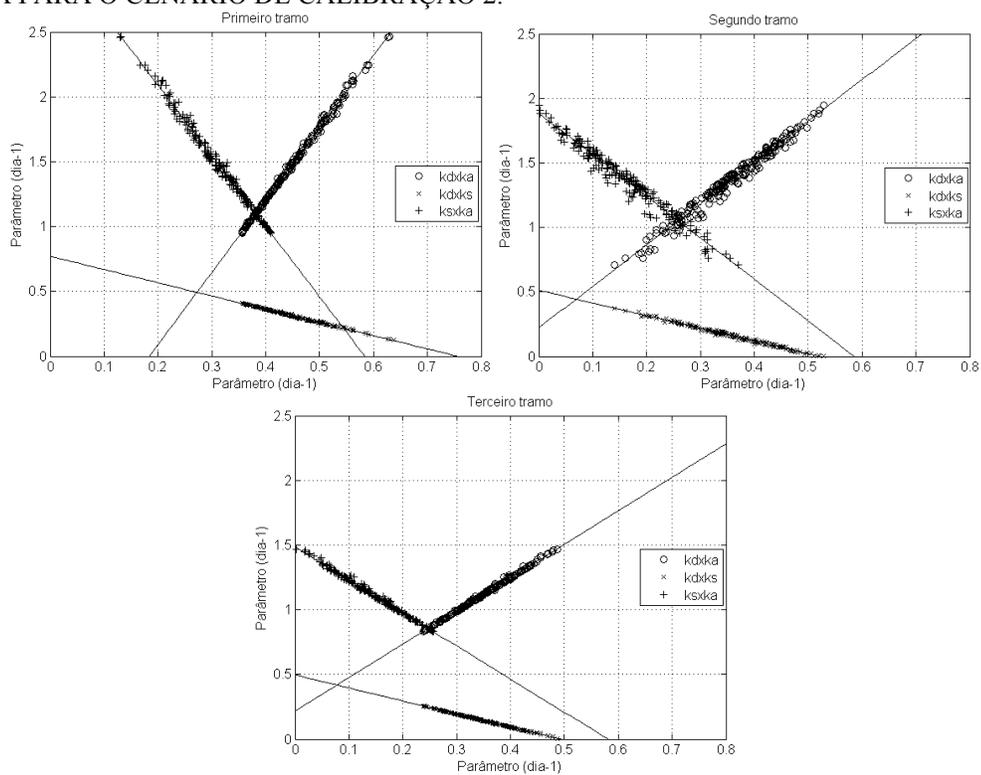


FIGURA 5.23 - RELAÇÃO ENTRE OS PARÂMETROS DO MODELO DE QUALIDADE DE ÁGUA PARA O CENÁRIO DE CALIBRAÇÃO 3.

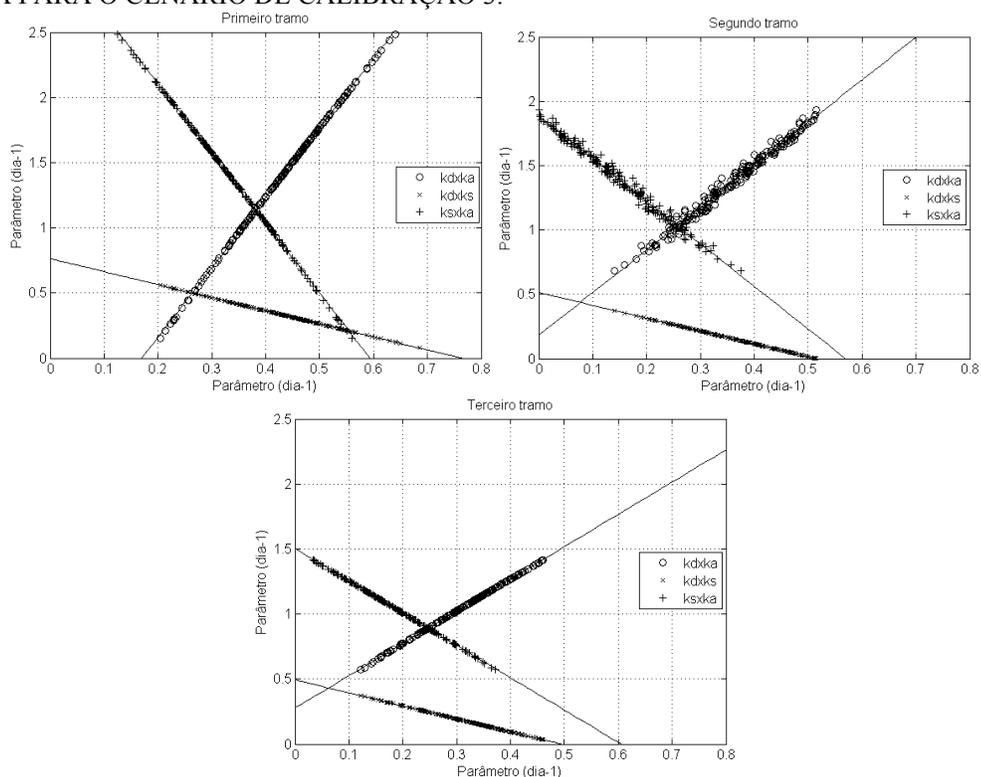


FIGURA 5.24 - RELAÇÃO ENTRE OS PARÂMETROS DO MODELO DE QUALIDADE DE ÁGUA PARA O CENÁRIO DE CALIBRAÇÃO 4.

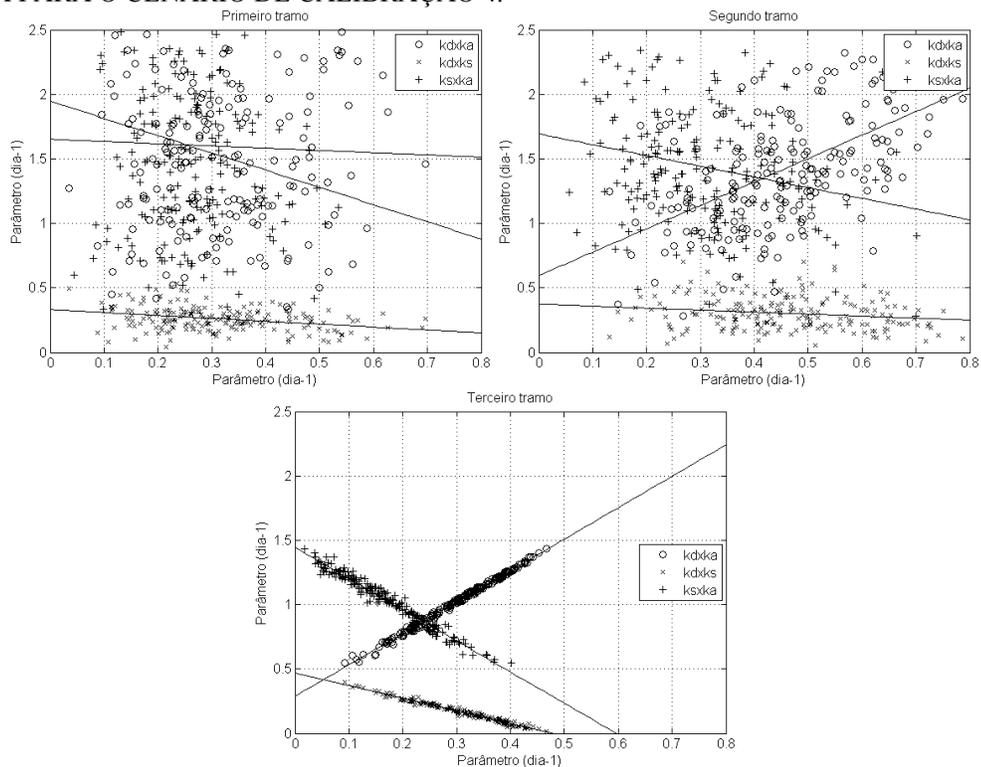


FIGURA 5.25 - RELAÇÃO ENTRE OS PARÂMETROS DO MODELO DE QUALIDADE DE ÁGUA PARA O CENÁRIO DE CALIBRAÇÃO 5.

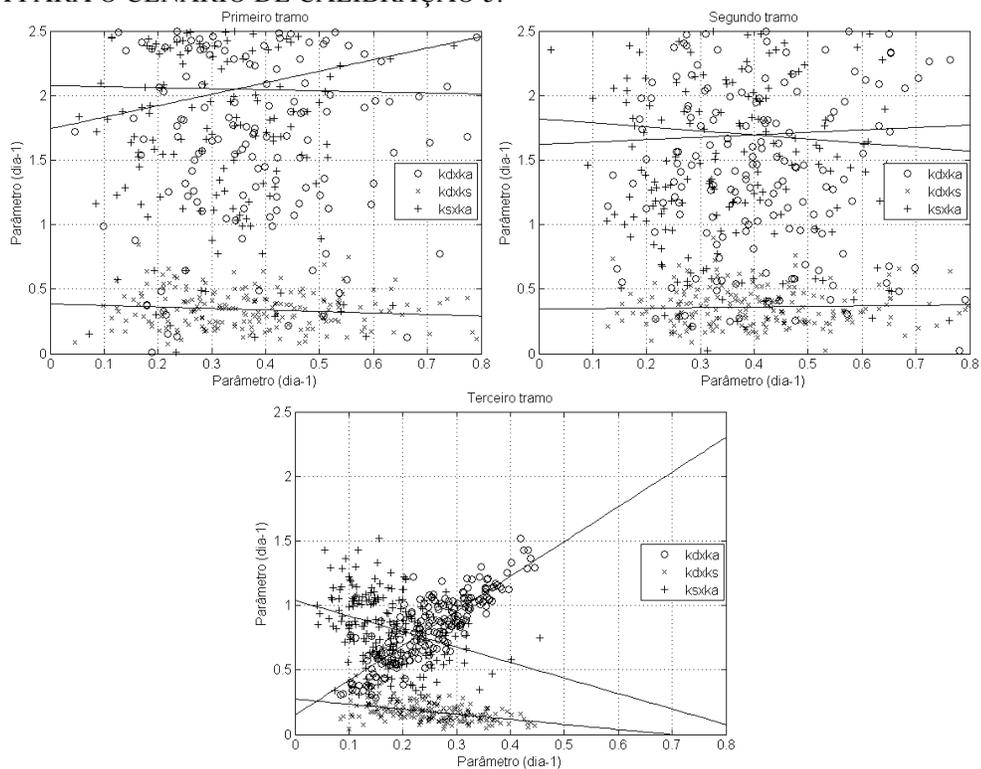


TABELA 5.23 – EQUAÇÕES RELACIONANDO OS PARÂMETROS DO MODELO DE QUALIDADE DA ÁGUA.

Tramo		$k_s = f(k_d)$	$k_a = f(k_s)$	$k_a = f(k_d)$	
Cenário 1	1	Função	$k_s = -1.0228k_d + 0.7621$	$k_a = -4.8792k_s + 2.9866$	$k_a = 5.0708k_d - 0.7657$
		R ²	0.9856	0.9684	0.9855
	2	Função	$k_s = -0.9134k_d + 0.504$	$k_a = -3.2267k_s + 1.9051$	$k_a = 3.2245k_d + 0.1843$
		R ²	0.9176	0.8574	0.9416
	3	Função	$k_s = -0.9487k_d + 0.4738$	$k_a = -2.6798k_s + 1.5072$	$k_a = 2.6029k_d + 0.2174$
		R ²	0.9806	0.9602	0.987
Cenário 2	1	Função	$k_s = -1.0195k_d + 0.7702$	$k_a = -5.4381k_s + 3.1766$	$k_a = 5.5741k_d - 1.0251$
		R ²	0.9954	0.9917	0.9978
	2	Função	$k_s = -0.9839k_d + 0.5124$	$k_a = -3.217k_s + 1.884$	$k_a = 3.2043k_d + 0.2217$
		R ²	0.9888	0.9644	0.9772
	3	Função	$k_s = -1.0069k_d + 0.4959$	$k_a = -2.561k_s + 1.4875$	$k_a = 2.5873k_d + 0.2147$
		R ²	0.9977	0.9937	0.9979
Cenário 3	1	Função	$k_s = -1.0003k_d + 0.7636$	$k_a = -5.3476k_s + 0.3175$	$k_a = 5.3492k_d - 0.909$
		R ²	1	0.9997	0.9997
	2	Função	$k_s = -0.998k_d + 0.5142$	$k_a = -3.3123k_s + 1,8859$	$k_a = 3.3058k_d + 0.1827$
		R ²	0.9999	0.9848	0.9847
	3	Função	$k_s = -k_d + 0.4938$	$k_a = -2.483k_s + 1.5029$	$k_a = 2.4829k_d + 0.2769$
		R ²	1	0.9998	0.9998
Cenário 4	1	Função	-	-	-
		R ²	0.0974	0.0305	0.001
	2	Função	-	-	-
		R ²	0.0301	0.0514	0.3293
	3	Função	$k_s = -0.9798k_d + 0.4688$	$k_a = -2.4218k_s + 1.445$	$k_a = 2.4418k_d + 0.2882$
		R ²	0.9732	0.9645	0.994
Cenário 5	1	Função	-	-	-
		R ²	0.0193	0.0224	0.0003
	2	Função	-	-	-
		R ²	0.002	0.001	0.003
	3	Função	-	-	-
		R ²	0.2013	0.1083	0.7128

Observa-se que para aqueles cenários com ao menos 1 ponto de monitoramento por tramo (cenário 1 a 3), os parâmetros do modelo de qualidade da água apresentaram uma relação linear bastante forte. Esta relação forte pode ser observada, por exemplo, na curva $k_d \times k_a$. Esta curva apresenta inclinação positiva, assim, quando se eleva a taxa de degradação da MO – e conseqüentemente a taxa de consumo de O_2 para a realização desta degradação - a taxa de reaeração atmosférica sofre um aumento proporcional, para que, desta forma, a concentração de oxigênio num ponto qualquer do rio não se altere. Entre k_d e k_s observa-se uma relação diferente; pois à medida que se aumenta a taxa de sedimentação de MO, diminui-se a taxa de degradação da mesma, de forma que a taxa de remoção total não se altera, nem a concentração de

DBO num ponto do rio. Finalmente, ao aumentar o valor de k_s – e conseqüentemente diminuir k_d –, haverá um menor consumo de O_2 e, desta forma, a taxa de reaeração deverá diminuir, mantendo a concentração de OD inalterada.

Por outro lado, para o cenário 4, e nos 2 primeiros tramos do rio, as relações entre os parâmetros apresentam um comportamento completamente aleatório; o que também pode ser observado, para o cenário 5, nos 3 tramos. Este comportamento se deve ao fato de não haver, para estes cenários, pontos de monitoramento em todos os tramos do rio; assim, nos tramos onde não há informação de qualidade da água, as concentrações calculadas de DBO e OD podem assumir qualquer valor, o que equivale aos parâmetros do modelo de qualidade da água também poderem assumir qualquer valor dentro do espaço de busca.

5.4.5 Conclusões do Estudo de Caso 3

Neste estudo de caso, a função objetivo do problema era composta de duas partes: a primeira relacionada ao resíduo referente à concentração de DBO, a outra ao resíduo referente à concentração de OD (Equação (4.16)). Porém existem, para cada tramo, 3 incógnitas a serem determinadas, ou seja, os três parâmetros do modelo de qualidade da água. Por este motivo há, neste problema, um grau de liberdade, o que implica no problema ter infinitas soluções. Assim, para que seja possível obter apenas uma solução para o problema de calibração, ou seja, apenas um conjunto de parâmetros, seria necessário haver mais alguma informação de qualidade da água.

Cada conjunto de parâmetros obtido pelo algoritmo genético ajustou as concentrações de DBO e OD calculadas às medidas. Como não havia informação que fundamentasse o emprego de um conjunto particular de parâmetros, um critério utilizado foi usar a média dos parâmetros obtidos nas 200 simulações. Agindo assim, percebeu-se que o perfil de DBO e OD obtido com esta média ajustou-se bem às concentrações monitoradas. Além disso, para os cenários 1 a 3, o perfil também se ajustou às concentrações teóricas. Ainda em relação ao cenário 3, cabe destacar que havia apenas 1 ponto de monitoramento em cada tramo do rio, o que foi suficiente para que todos os perfis de DBO e OD calculados se ajustassem aos perfis teóricos.

O critério de parada utilizado neste estudo de caso, diferentemente do caso anterior, não estava relacionado a um número mínimo de gerações, mas a um valor mínimo da função aptidão. Assim, definia-se qual era o valor mínimo esperado para a função aptidão, e o AG era executado até que este mínimo fosse atingido. Obviamente, este critério somente pode ser utilizado quando se conhece o valor mínimo da função que se quer otimizar, o que aconteceu neste estudo de caso, pois é sabido que a soma dos resíduos em relação à DBO e OD deve estar próxima de zero.

5.5 SUMÁRIO DO CAPÍTULO 5

Neste capítulo o algoritmo genético foi aplicado para a calibração do modelo de qualidade da água para rios hipotéticos, com solução analítica conhecida. Constatou-se que os resultados obtidos aproximaram-se da solução teórica. Por exemplo, para os rios hipotéticos 1 e 2, o AG conseguiu encontrar os parâmetros do modelo de qualidade da água, além dos perfis de concentração teórico. No caso do rio hipotético 3, apesar do algoritmo não encontrar o conjunto de parâmetros teóricos, ele encontrou aquele que produziu um perfil de DBO e OD aproximadamente igual ao monitorado.

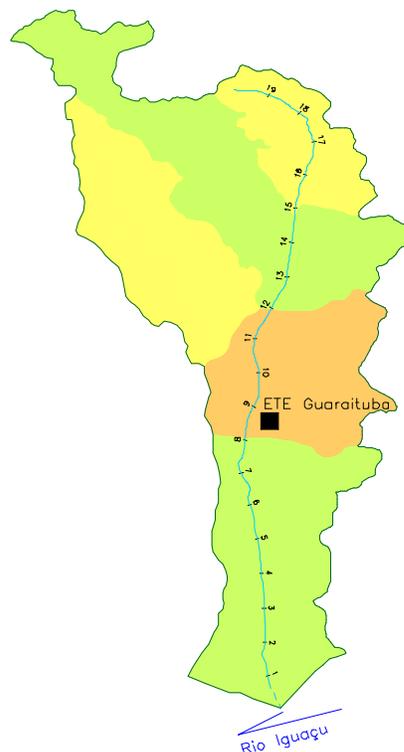
Através destes bons resultados obtidos, foi possível ganhar sensibilidade em relação às rotinas de AG. Além disso, constatou-se que o algoritmo desempenha corretamente sua função na calibração do modelo e, desta forma, espera-se que ele terá o mesmo desempenho quando for aplicado na calibração de rios reais, para os quais não existem soluções teóricas.

6 ESTUDO DE CASO DOS RIOS PALMITAL E IGUAÇU NA REGIÃO METROPOLITANA DE CURITIBA (RMC)

A RMC está inserida dentro da Bacia Hidrográfica do Iguaçu. Segundo PORTO *et al.* (2007), esta Bacia Hidrográfica, que tem suas nascentes junto á Serra do Mar, apresenta uma área de drenagem de aproximadamente 2.800 km², e comporta cerca de 3 milhões de habitantes, distribuídos em 14 municípios. Ainda segundo PORTO *et al.* (2007), esta bacia é altamente urbanizada, com aproximadamente 92% da população total caracterizada como urbana, e vem passando por um processo de ocupação irregular de várzeas e áreas de mananciais, principalmente na margem direita do Rio Iguaçu. A Figura 6.2 apresenta uma visão geral da bacia do rio alto Iguaçu.

Uma sub-bacia interessante do ponto de vista de qualidade da água é a bacia do rio Palmital, que apresenta uma área de drenagem de 95,3 km², e pode ser visualizada tanto na Figura 6.2, quanto na Figura 6.1.

FIGURA 6.1 - BACIA DO RIO PALMITAL.



FONTE: PORTO *et al.* (2007).

Neste capítulo ênfase será dada para a aplicação do método do algoritmo genético desenvolvido para a calibração destes 2 rios, a saber, Palmital e Iguaçu. Esta aplicação é inovadora na literatura nacional, e se destaca como uma das principais contribuições desta dissertação. Os resultados estão apresentados em ordem crescente de complexidade, ou seja, Palmital e Iguaçu, respectivamente.

6.1 ESTUDO DE CASO 4: RIO PALMITAL

Neste estudo de caso, calibrou-se o modelo de qualidade da água, representado pelas Equações (3.15) e (3.20), para um rio localizado na bacia do Alto Iguaçu, o rio Palmital, um afluente do rio Iguaçu, como se pode ver na Figura 6.1.

O rio Palmital possui uma extensão de 21 km. Uma análise de condições hidráulicas homogêneas, realizada por PORTO *et al.* (2007), propôs uma subdivisão do rio em 6 tramos que são, por sua vez, divididos em elementos computacionais (com 1 km de extensão cada), sendo que no final de cada um destes elementos ocorrem eventuais lançamentos de matéria orgânica, ou captações. No anexo 1 está apresentada uma tabela com as cargas lançadas e as características hidráulicas do rio Palmital, quantificados por PORTO *et al.* (2007).

As concentrações de DBO e OD foram monitoradas num ponto de controle que está localizado a aproximadamente 1 km da foz do rio palmital, na estação de monitoramento Vargem Grande. Disponha-se de apenas 1 medição quali-quantitativa para esta estação, conforme indicado na Tabela 6.1, para o dia 16/06/2000.

TABELA 6.1 - VALORES MONITORADOS NO PONTO DE CONTROLE NO RIO PALMITAL.

L (mg/L)	160
C (mg/L)	1,5
Q (m ³ s ⁻¹)	0,29
Saturação de OD (%)	18

Os valores de concentração de matéria orgânica e de oxigênio, apresentados acima, foram definidos como dados de entrada para a calibração. A concentração de saturação de oxigênio foi calculada, apresentando um valor igual a 8,33 mg/L; apesar deste valor se referir ao ponto de monitoramento, ele foi considerado representativo de todo o rio Palmital. Utilizou-se um perfil de vazão incremental para o qual a $Q_{95\%}$

(conforme PORTO *et al.*, 2007), ou seja, a vazão com 95% de permanência, representou a vazão de referência empregada (anexo 1), pois ela foi capaz de reproduzir uma vazão muito próxima à medida no ponto de monitoramento. Ao longo do rio ocorrem lançamentos de cargas de matéria orgânica, destacando-se: Km 11 do início do rio (vazão de 57 L/s com concentração de DBO igual a 337.5 mg/L); Km 12 (vazão de 48 L/s com concentração de DBO igual a 94.5 mg/L); Km 13 e 14 (vazão de 38 L/s com concentração de DBO igual a 337.5 mg/L); entre outros de menor magnitude.

Em algumas das simulações apresentadas a seguir, procurou-se calibrar o modelo de forma a considerar apenas as taxas de degradação de matéria orgânica (k_d) como parâmetros desconhecidos, uma vez que as taxas de reaeração (k_a) foram calculadas através da fórmula empírica de Churchill.

Em cada elemento computacional do domínio de cálculo é adicionada uma vazão incremental, de uma bacia incremental, à vazão total do rio. Desta forma, a vazão do rio aumenta para jusante, e por isso o nível de água e a velocidade média também variam, ou seja, a taxa de reaeração é diferente para cada elemento computacional que constitui o rio. Porém, as rotinas de algoritmo genético desenvolvidas não estão estruturadas, até o presente momento, para aceitar que estes parâmetros de qualidade de água variem de um elemento computacional para outro. Esta variação somente é possível entre os diferentes tramos do rio. Para contornar esta deficiência, procedeu-se da seguinte forma: após os valores das taxas de reaeração serem obtidos pela fórmula empírica de Churchill para cada elemento computacional, foi calculada uma média destas taxas para cada um dos 6 tramos do rio Palmital, e este valor médio foi empregado como o valor representativo de k_a para o respectivo tramo. A Tabela 6.2 apresenta os valores das taxas de reaeração calculadas para cada elemento computacional, além das taxas médias para cada um dos tramos, as quais foram empregadas nas simulações do programa.

TABELA 6.2 - COEFICIENTES DE REAERAÇÃO CALCULADOS PARA O RIO PALMITAL.

TRAMO	ELEMENTO COMPUTACIONAL	k_a (CHURCHILL)	k_a MÉDIO
1	1	1079,16	596,30
	2	710,53	
	3	554,77	
	4	465,23	
	5	405,41	
	6	362,68	
2	1	196,13	196,13
3	1	227,21	210,98
	2	210,05	
	3	195,67	
4	1	82,67	82,67
5	1	150,03	126,55
	2	122,17	
	3	107,47	
6	1	8,80	7,90
	2	8,41	
	3	8,09	
	4	7,78	
	5	7,50	
	6	7,25	
	7	7,01	

Outros parâmetros de entrada empregados nas simulações foram a demanda de oxigênio pelo sedimento (S_b), e a taxa de remoção de matéria orgânica devido à sedimentação (k_s). Os valores utilizados para estes parâmetros foram mantidos constantes ao longo de todo o rio, e em todas as simulações, sendo igual a $0,8 \text{ dia}^{-1}$ para k_s , e $1,5 \text{ g/m}^2 \cdot \text{dia}^{-1}$ para S_b (CHAPRA, 1997).

6.1.1 Construção dos Cenários de Calibração

Considerando o objetivo principal de se testar a rotina computacional programada, procurou-se consolidar 3 grupos de cenários que pudessem refletir o potencial de calibração em situações complexas de alteração de qualidade da água, possíveis de ocorrer rio Palmital.

O **grupo I** compreende a construção de 5 cenários de calibração (cenário 1 a 5) em que se explorou-se a avaliação das taxas de degradação da matéria orgânica (k_d) para os 6 tramos do rio Palmital; ou seja, 6 valores de k_d devem ser estimados através da calibração. Avaliou-se também a influência dos pesos, w_1 e w_2 , na função objetivo (equação (4.16)). Assim, para os cenários 1 a 5 foram utilizados valores de (w_1, w_2)

iguais a (0.1, 0.9), (0.3, 0.7), (0.5, 0.5), (0.7, 0.3) e (0.9, 0.1), respectivamente. Neste grupo foram realizadas 200 simulações para cada cenário, o que possibilitou uma abordagem estatística consistente. Além disso, o espaço de busca de k_d ficou restrito a $-5.0 < k_d < 5.0$; e o algoritmo genético encerrava a execução quando a função objetivo apresentasse um valor menor ou igual a 0.005.

Cabe destacar que devido ao fato de haver apenas um ponto de monitoramento para todo o rio e um número significativo de parâmetros a serem estimados, não existe solução única, ou seja, várias combinações de k_d produziram resultados de calibração consistentes.

O **grupo II** também compreendeu a construção de 5 cenários (cenário 6 a 10), assumindo que ao longo de todo o percurso do rio existe uma mesma característica no processo de degradação de matéria orgânica. Ou seja, o valor de k_d é o mesmo para todo o rio. Neste grupo, assim como no grupo I, os cenários 6 a 10 se diferenciaram em relação aos pesos (w_1 e w_2) na função objetivo, enquanto que o espaço de busca foi semelhante ao grupo I. Além disso, o critério de parada foi menos restritivo, pois a simulação era encerrada assim que a função-objetivo atingisse um valor menor ou igual a 0.1, isto por que se percebeu, através de simulações preliminares, que o AG não conseguiu obter resíduos menores do que 0.1.

O **grupo III** compreende 2 cenários individuais, denominados cenário 11 e 12. O cenário 11 avalia o impacto de um espaço de busca menor para k_d ($0.0 \leq k_d \leq 3.0$), para valores de w_1 e w_2 iguais a 0.5. No cenário 12 investiga-se a avaliação de k_d e k_a com espaços de busca: $0.0 \leq k_d \leq 3.0$; $0.0 \leq k_a \leq 600.0$. Nestes dois cenários os parâmetros de qualidade da água variaram em diferentes tramos do rio. Da mesma forma que ocorreu no grupo I, foram executadas 200 simulações do algoritmo genético para cada cenário do grupo III. Além disso, a execução encerrava-se quando a função-objetivo atingia um valor menor ou igual a 0.005, como no grupo I.

6.1.2 Resultados e Análises

A forma de apresentação dos resultados segue à de definição dos cenários, ou seja, por grupos, conforme descrito anteriormente.

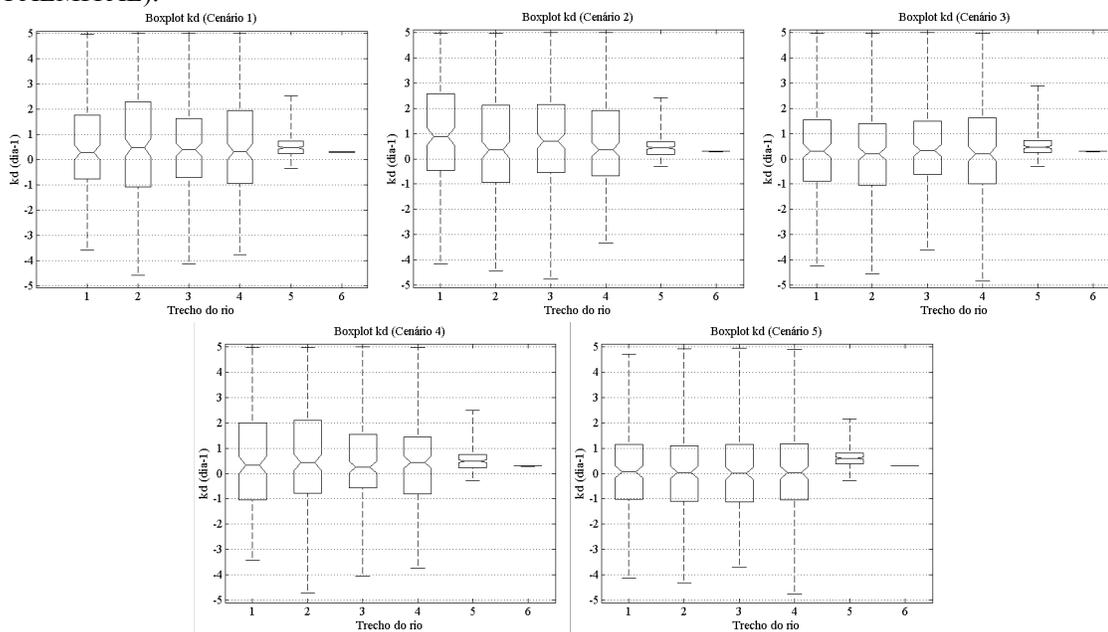
Grupo I

Como forma de facilitar a visualização dos resultados do grupo I, foram construídos “boxplots” apresentando os valores medianos, máximos, mínimos, quartil 25% e quartil 75% dos k_d 's calculados pelo algoritmo genético. Os “boxplots” para os 5 primeiros cenários estão apresentados na Figura 6.3.

Percebe-se, nestes 5 cenários de calibração, uma dispersão significativa dos valores de k_d para aqueles tramos que não tinham informação de monitoramento, diferente do tramo 6, onde está localizada a seção de controle quali-quantitativa. Observa-se que a dispersão dos parâmetros não variou significativamente entre os cenários de calibração, ou seja, os pesos w_1 e w_2 na função objetivo não apresentaram grande influência nos resultados. Percebe-se, também, que no cenário 5, no qual o peso da concentração de OD na calibração (w_1) é igual a 90%, a mediana dos k_d 's para os 4 primeiros tramos foi aproximadamente igual a zero.

Além disso, os valores medianos dos k_d 's calculados para os 4 primeiros tramos do rio apresentam diferenças entre os 5 cenários analisados. Por outro lado, os valores medianos dos k_d 's para o quinto e sexto tramos do rio apresentam grande semelhança entre os 5 primeiros cenários.

FIGURA 6.3 - DISTRIBUIÇÃO DOS k_d 'S CALCULADOS PARA OS CENÁRIOS 1 A 5 (RIO PALMITAL).



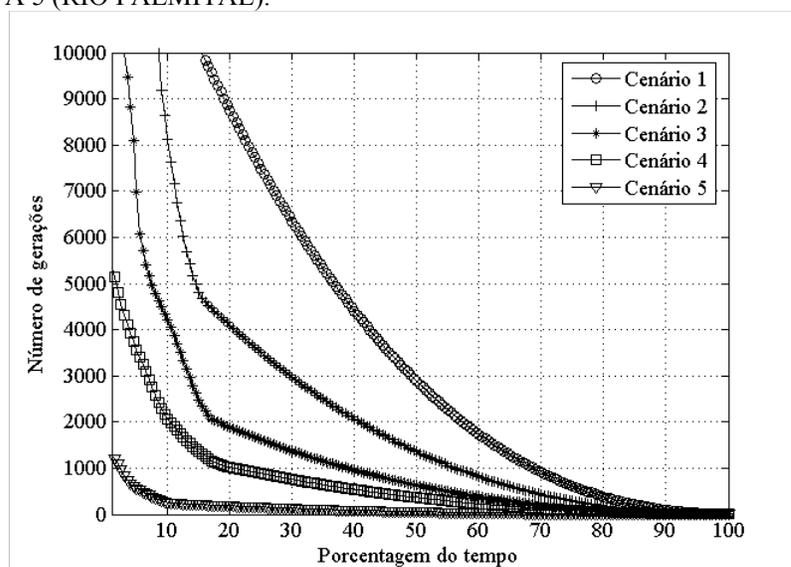
A Tabela 6.3 apresenta os valores medianos dos k_d 's para os 6 tramos, e para os 5 primeiros cenários de calibração.

TABELA 6.3 – MEDIANA DOS k_d 's PARA OS CENÁRIO 1 A 5.

CENÁRIO	TRAMO 1	TRAMO 2	TRAMO 3	TRAMO 4	TRAMO 5	TRAMO 6
1	0,2869	0,4619	0,3848	0,3107	0,4630	0,2993
2	0,8833	0,3466	0,6998	0,3646	0,4427	0,2979
3	0,3164	0,1949	0,3344	0,1901	0,4692	0,2978
4	0,3336	0,4304	0,2516	0,4409	0,4892	0,2999
5	0,0580	0,0495	0,0074	0,0335	0,6062	0,2973

O número de gerações necessário para a convergência do algoritmo genético nas 5 primeiras simulações também pode ser visualizado através da curva de permanência apresentada na Figura 6.4.

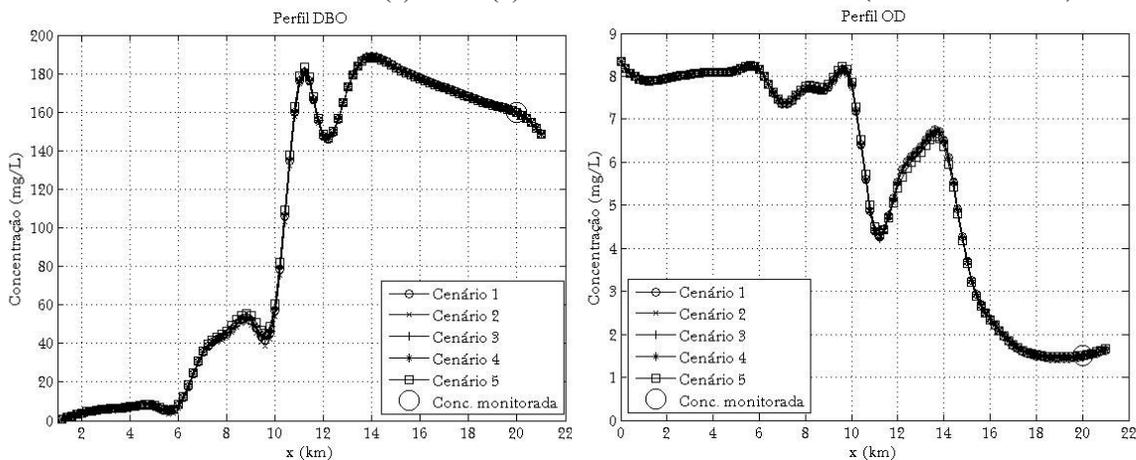
FIGURA 6.4 - CURVA DE PERMANÊNCIA DO NÚMERO DE GERAÇÕES PARA OS CENÁRIOS 1 A 5 (RIO PALMITAL).



Com relação ao número de gerações, observa-se que para maiores valores de w_1 , conseqüentemente menores valores de w_2 , o AG convergiu mais rapidamente. Por exemplo, pode ser observado que para o cenário 1, em aproximadamente 60% das simulações são necessárias 2000 ou mais gerações para o algoritmo convergir; para o cenário 2, 40%; para o cenário 3, 20%; para o cenário 4, 10%; finalmente, para o cenário 5, em todas as simulações a convergência ocorreu com menos de 2000 gerações.

Nas equações 1 e 3 foram inseridos os valores medianos dos k_d 's calibrados, obtendo-se os perfis de OD e DBO ao longo do rio Palmital, que podem ser visualizados na Figura 6.5.

FIGURA 6.5 - PERFIL DE DBO (a) E OD (b) PARA OS CENÁRIOS 1 A 5 (RIO PALMITAL).



Observa-se que os perfis de DBO e OD para os 5 primeiros cenários apresentaram-se relativamente próximos, apesar dos k_d 's (valor mediano dos k_d 's) inseridos nos modelos de qualidade de água apresentarem certa discrepância (conforme Tabela 6.3), principalmente para os quatro primeiros tramos do rio, onde a distância entre as curvas de DBO e OD foi maior. No quinto e sexto tramos, onde existe maior proximidade entre os k_d 's calculados para cada cenário, houve maior proximidade entre os perfis de DBO e OD. Isto destaca o fato de que, apesar das soluções ótimas em termos de k_d para os diversos cenários serem diferentes, os resultados em termos de perfil foi praticamente o mesmo, destacando a consistência e robustez do algoritmo desenvolvido.

Grupo II

A Tabela 6.4 apresenta os resultados de calibração para os cenários 6 a 10, que constituem o grupo II.

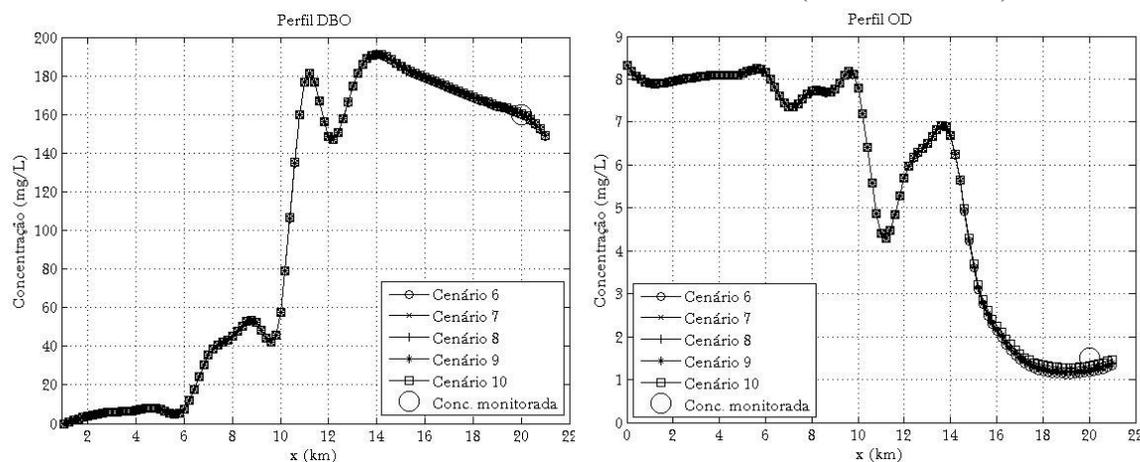
TABELA 6.4 - RESULTADOS DE CALIBRAÇÃO, CENÁRIO 6 A 10 (RIO PALMITAL).

CENÁRIO	w_1	k_d (dia ⁻¹)	f_{AG1}	NG
6	0,1	0,3158	0,02	10
7	0,3	0,3132	0,04	12
8	0,5	0,3126	0,06	10
9	0,7	0,3114	0,07	9
10	0,9	0,3065	0,06	8

Para estes cenários, onde as taxas de degradação de matéria orgânica (k_d) não variam ao longo do rio, existe pequena diferença entre os valores de k_d calculados. Da mesma forma, não existe considerável diferença em relação ao número de gerações necessárias para a convergência do algoritmo genético. Observa-se que, para o grupo II, o número de gerações necessário à convergência é significativamente menor do que para o grupo I. Isto se deve ao fato do critério de parada ser menos restritivo para o grupo II em relação ao grupo I.

A Figura 6.6 apresenta o perfil de DBO e OD ao longo do rio para os cenários 6 a 10.

FIGURA 6.6 - PERFIS DE DBO E OD PARA OS CENÁRIOS 6 A 10 (RIO PALMITAL).



Observa-se que as curvas de DBO para os cenários 6 a 10 ficaram próximas. Por outro lado, em relação ao OD, houve alguma diferença entre os perfis destes 5 cenários, principalmente na parte final do rio.

As Figura 6.7 à Figura 6.11 apresentam comparações dos perfis de DBO e OD entre os cenários relativos ao grupo I e II. Ao se comparar estes 2 grupos de calibração, é possível verificar as diferenças de concentração ao longo do rio quando se considera k_d igual em todos os tramos, ou diferente para cada um.

FIGURA 6.7 - COMPARAÇÃO DO PERFIL DE DBO OD ENTRE OS CENÁRIOS 1 E 6 (RIO PALMITAL).

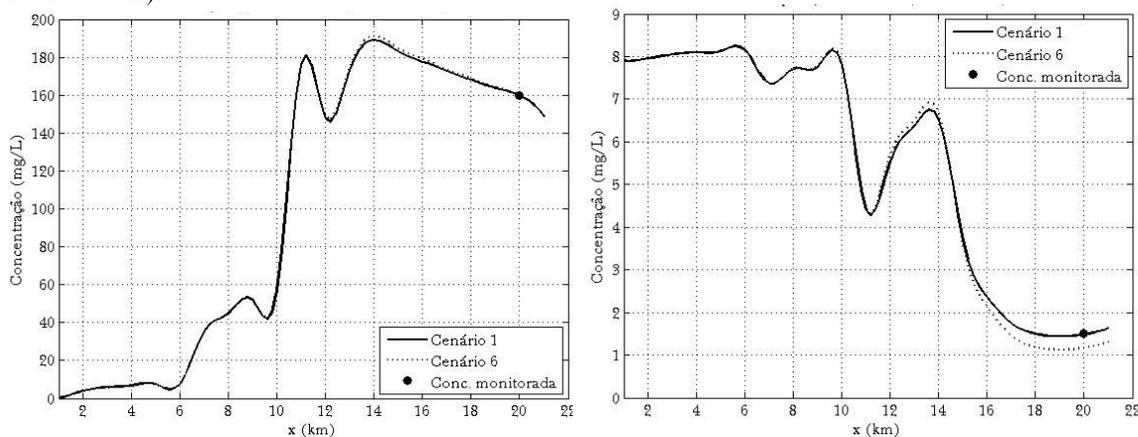


FIGURA 6.8 - COMPARAÇÃO DO PERFIL DE DBO E OD ENTRE OS CENÁRIOS 2 E 7 (RIO PALMITAL).

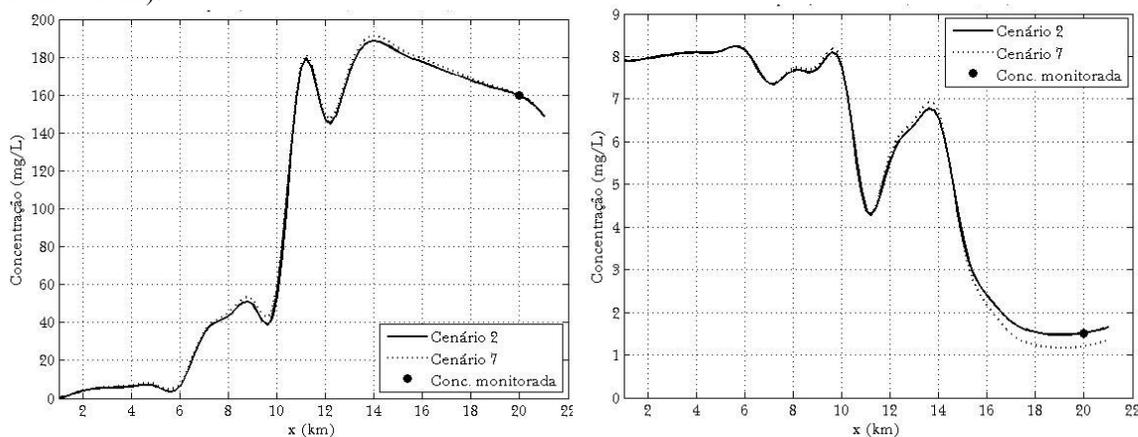


FIGURA 6.9 - COMPARAÇÃO DO PERFIL DE DBO E OD ENTRE OS CENÁRIO 3 E 8 (RIO PALMITAL).

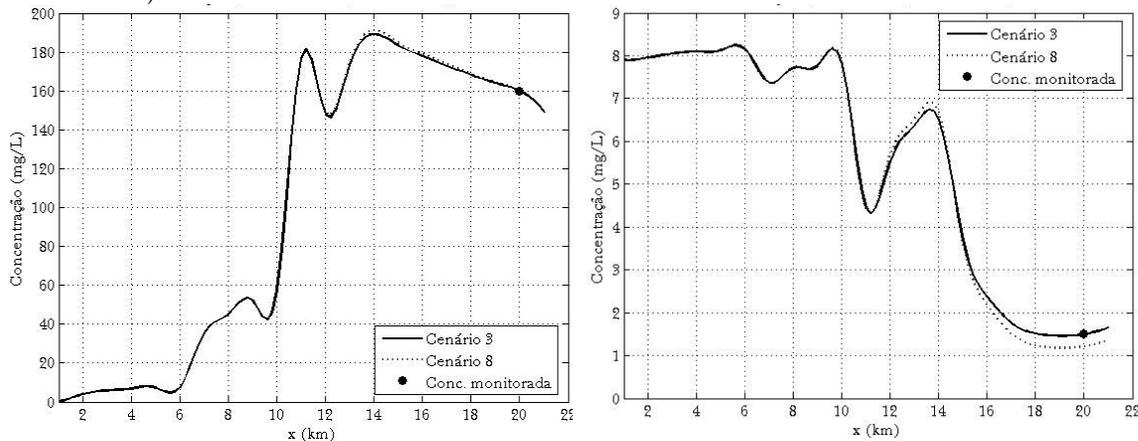


FIGURA 6.10 - COMPARAÇÃO DO PERFIL DE DBO E OD ENTRE OS CENÁRIOS 4 E 9 (RIO PALMITAL).

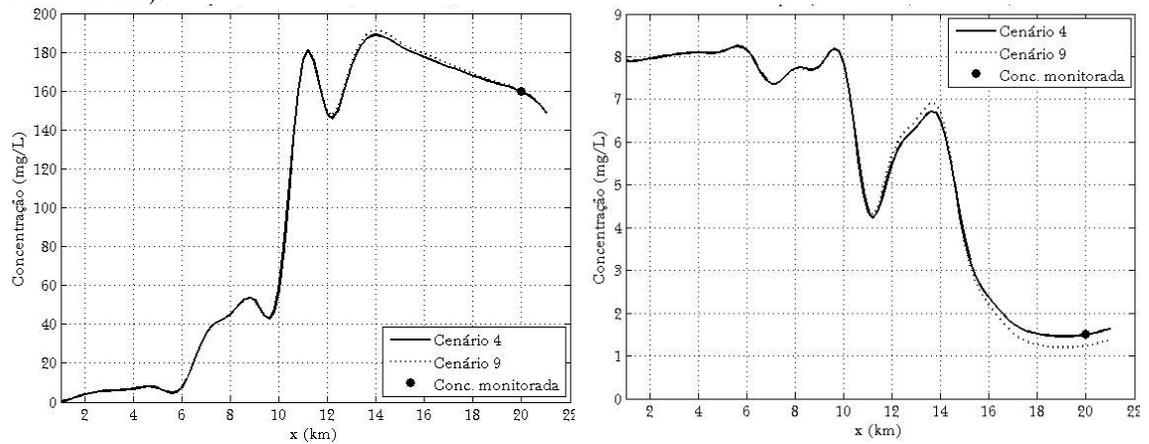
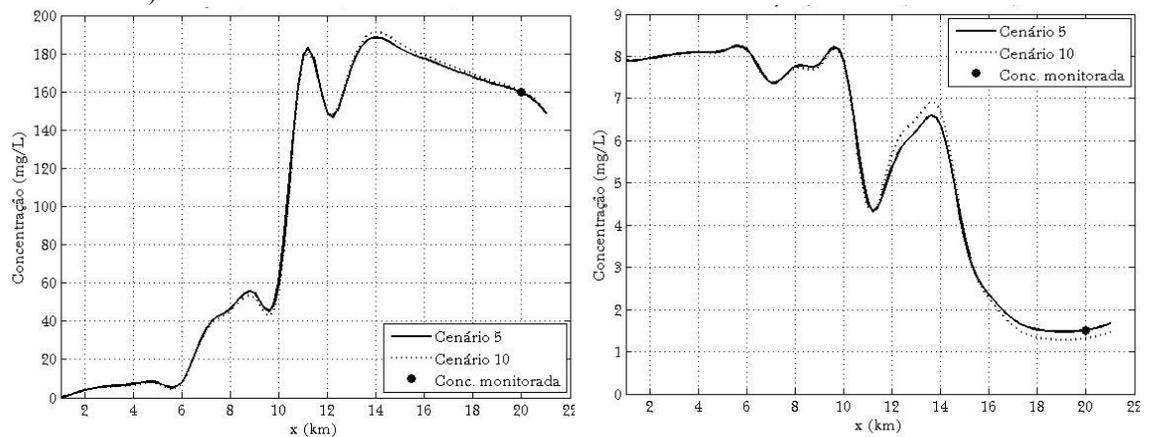


FIGURA 6.11 - COMPARAÇÃO DO PERFIL DE DBO E OD ENTRE OS CENÁRIOS 5 E 10 (RIO PALMITAL).



Comparando o perfil de DBO para os grupos II (cenários 6 a 10), e grupo I (cenários 1 a 5), observou-se haver grande proximidade entre as curvas. Em relação ao perfil de OD, as curvas concordaram razoavelmente bem para a primeira metade do rio (trecho a-10 km); porém na parte final do rio (trecho 16-21 km) observou-se uma diferença significativa entre estas curvas. Além disso, as curvas de OD relativas ao grupo I se aproximaram mais do ponto de monitoramento do que aquelas curvas relativas ao grupo II, o que se deve ao fato do grupo I ser mais restritivo em relação ao critério de parada em relação ao grupo II: $f_{AG2} \leq 0.1$, para este; e $f_{AG2} \leq 0.005$ para aquele. A proximidade observada entre os perfis indicou que o fato de se considerar que k_d tem o mesmo valor em todos os tramos do rio, ou valores diferentes para os mesmos, não influenciou significativamente no perfil de DBO e OD calculado.

Grupo III

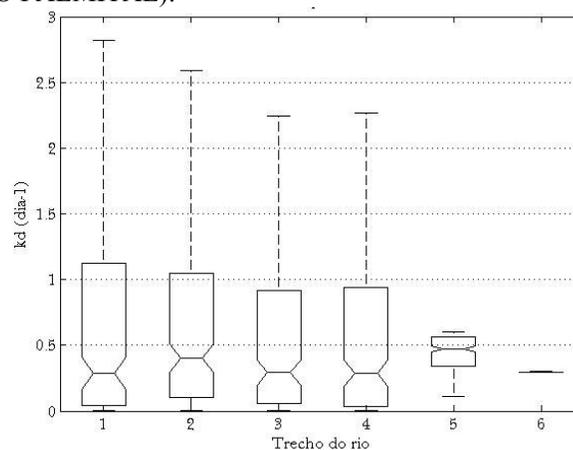
A Tabela 6.5 apresenta os resultados de calibração para o cenário 11, no tocante à influência de um menor espaço de busca.

TABELA 6.5 - RESULTADOS DE CALIBRAÇÃO PARA O CENÁRIO 11 (RIO PALMITAL).

	MÉDIA	MEDIANA	MÍNIMO	MÁXIMO	DP
k_{d1}	0,6013	0,2866	8,82e-05	2,8178	0,6895
k_{d2}	0,6374	0,4028	0,0012	2,5859	0,6381
k_{d3}	0,5185	0,2932	0,0005	2,2471	0,5579
k_{d4}	0,5511	0,2885	0,0006	2,2705	0,6055
k_{d5}	0,4387	0,4713	0,1108	0,5989	0,1350
k_{d6}	0,2947	0,2937	0,2923	0,3032	0,0026

A Figura 6.12 apresenta o boxplot dos valores calculados dos k_d 's para o cenário 11.

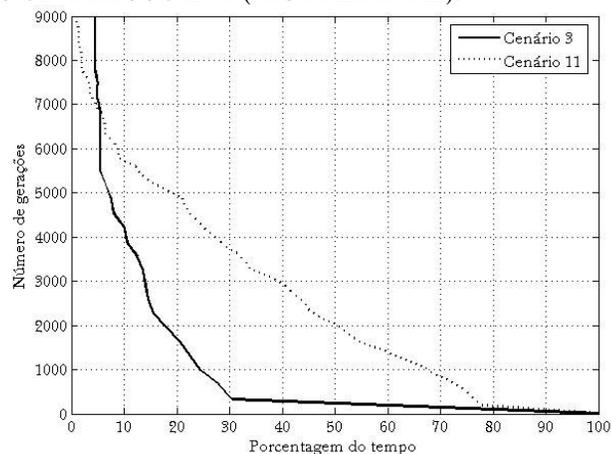
FIGURA 6.12 - COMPARAÇÃO DAS DISTRIBUIÇÕES DOS k_d CALCULADOS PARA OS CENÁRIOS 3 E 11 (RIO PALMITAL).



Observa-se que, de forma geral, os valores calculados de k_d para o cenário 11 apresentam menor dispersão do que os k_d 's calculados para os cenários relativos ao grupo I. Este resultado era esperado, uma vez que o espaço de busca para qualquer cenário do grupo I ($-5.0 < k_d < 5.0$) foi mas amplo do que o espaço de busca para o cenário 11 ($0.0 < k_d < 3.0$).

A Figura 6.13 apresenta a curva de permanência do número de gerações necessárias à convergência do algoritmo genético para o cenário 11, comparada com a do cenário 3.

FIGURA 6.13 - CURVA DE PERMANÊNCIA DA DISTRIBUIÇÃO DO NÚMERO DE GERAÇÕES PARA OS CENÁRIOS 3 E 11 (RIO PALMITAL).



Percebe-se que, para ambos os cenários, são necessárias, em 80% das simulações, mais de 100 gerações para se atingir a convergência. Além disso, em 70% das vezes o algoritmo converge com 300 gerações ou menos no cenário 3, e 3.800 ou menos no cenário 11; apesar disso, todas as simulações convergiram com menos de 9.000 gerações neste cenário, enquanto que naquele, em aproximadamente 5% das simulações foi preciso um número maior de gerações.

OS RESULTADOS DA CALIBRAÇÃO REFERENTES AO CENÁRIO 12 ESTÃO APRESENTADOS NA TABELA 6.6 E

Tabela 6.7, onde é possível observar alguns parâmetros estatísticos dos k_d 's calculados e do número de gerações necessário para a convergência do algoritmo genético, e o valor de w_1 igual a 0.5.

TABELA 6.6 - VALORES CALIBRADOS DE KD PARA O CENÁRIO 12 (RIO PALMITAL).

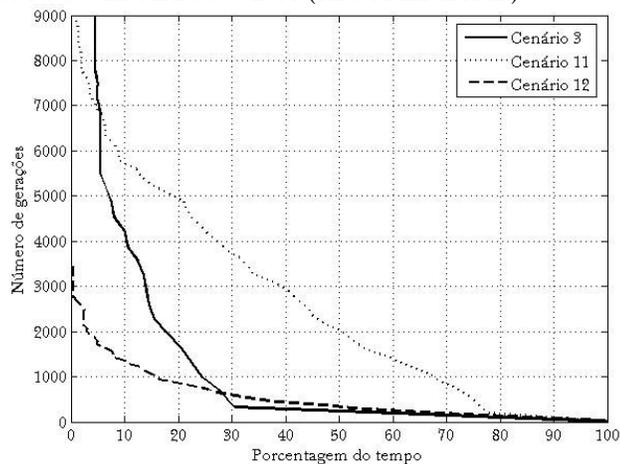
	MÉDIA	MEDIANA	MÍNIMO	MÁXIMO	DP
k_{d1}	0,7451	0,5780	0,0022	2,8578	0,6756
k_{d2}	0,8779	0,8415	0,0059	2,6250	0,6360
k_{d3}	0,8532	0,7545	0,0118	2,4393	0,5912
k_{d4}	0,9303	0,8822	0,0014	2,9078	0,5906
k_{d5}	0,8749	0,8512	0,0442	1,9194	0,4056
k_{d6}	0,2325	0,2325	0,1038	0,3532	0,0502
NG	570	370	26	3706	602

TABELA 6.7 - VALORES CALIBRADOS DE KA PARA O CENÁRIO 12 (RIO PALMITAL).

	MÉDIA	MEDIANA	MÍNIMO	MÁXIMO	DP
k_{a1}	208,217	245,189	0,0835	528,903	157,265
k_{a2}	180,602	200,938	0,0579	504,126	148,689
k_{a3}	152,277	85,696	0,0429	520,127	160,489
k_{a4}	128,235	20,897	0,0221	517,672	150,238
k_{a5}	78,906	4,7207	0,0637	577,865	135,985
k_{a6}	6,877	6,881	2,6363	9,378	1,126
NG	570	370	26	3706	602

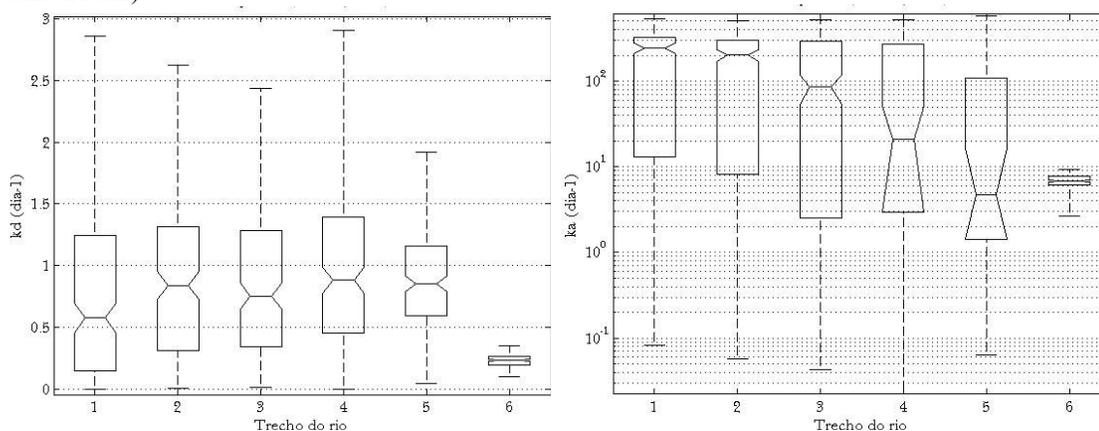
A Figura 6.14 apresenta a curva de permanência do número de gerações necessárias à convergência do algoritmo genético para o cenário 12, comparada com os cenários 3 e 11. Através desta Figura percebe-se que, de forma geral, a convergência do algoritmo genético para cenário 12 ocorre mais rapidamente do que para os cenários 3 e 11, ainda que o número de parâmetros do modelo de qualidade de água a serem calibrados nestes cenários é 2 vezes menor em relação ao cenário 12. Considerando o cenário 11, em 50% das simulações foram necessárias aproximadamente 2.000 gerações para que o algoritmo genético convergisse; enquanto que para o cenário 12 foram necessárias menos de 500 gerações. Este fato se deve, provavelmente, ao maior grau de liberdade que ocorre no cenário 12, pois neste cenário há um maior número variáveis, o que facilita a convergência.

FIGURA 6.14 - CURVA DE PERMANÊNCIA DO NÚMERO DE GERAÇÕES PARA O CENÁRIO 12, COMPARADA COM OS CENÁRIOS 3 E 11 (RIO PALMITAL).



As distribuições dos valores dos parâmetros k_d e k_a podem ser visualizadas através dos boxplot's apresentados na Figura 6.15.

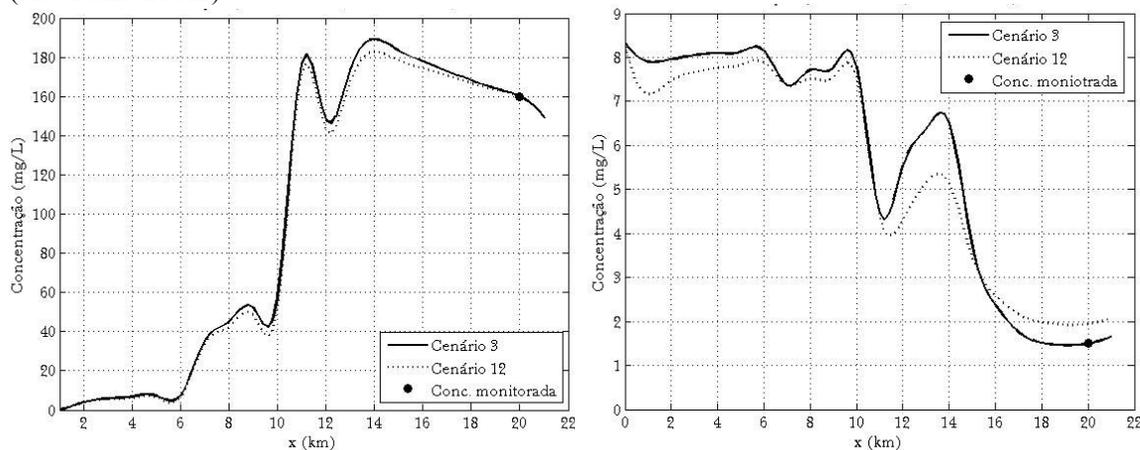
FIGURA 6.15 - BOXPLOT DOS k_d 's E k_a 's CALCULADOS PARA O CENÁRIO 12 (RIO PALMITAL).



Observa-se que, como no caso anterior, a dispersão dos k_d 's calculados diminuiu em relação ao cenário 3, devido ao menor espaço de busca empregado. Além disso, no último tramo, aquele que continha o único ponto de monitoramento, os valores calculados dos parâmetros se apresentaram fortemente concentrados.

As médias dos parâmetros (k_d e k_a) calculados para cada tramo para o cenário 12 foram inseridas no modelo matemático de concentração de DBO e OD. A Figura 6.16 apresenta os perfis de DBO e OD obtidos para este cenário, comparando-os com aqueles perfis relativos ao cenário 3, e indicando também o ponto de monitoramento.

FIGURA 6.16 - COMPARAÇÃO DOS PERFIS DE DBO E OD ENTRE OS CENÁRIOS 3 E 12 (RIO PALMITAL).



Os gráficos acima mostram que o perfil de DBO ao longo do rio não apresentou grande diferença entre os cenários 3 e 12, e para ambos os cenários a concentração de DBO no km 20 do rio está muito próxima ao valor monitorado naquele ponto. Diferente do que ocorre em relação ao perfil de OD, que para o cenário 12 apresenta um valor de aproximadamente 2 mg/L no km 20 do rio, enquanto que para o cenário 3 a concentração neste ponto coincide com a concentração monitorada. Observa-se que o cenário 12, que tem a maior rapidez em termos de número de gerações não produziu os melhores resultados.

6.1.3 Conclusões e Discussões do Estudo de Caso 4

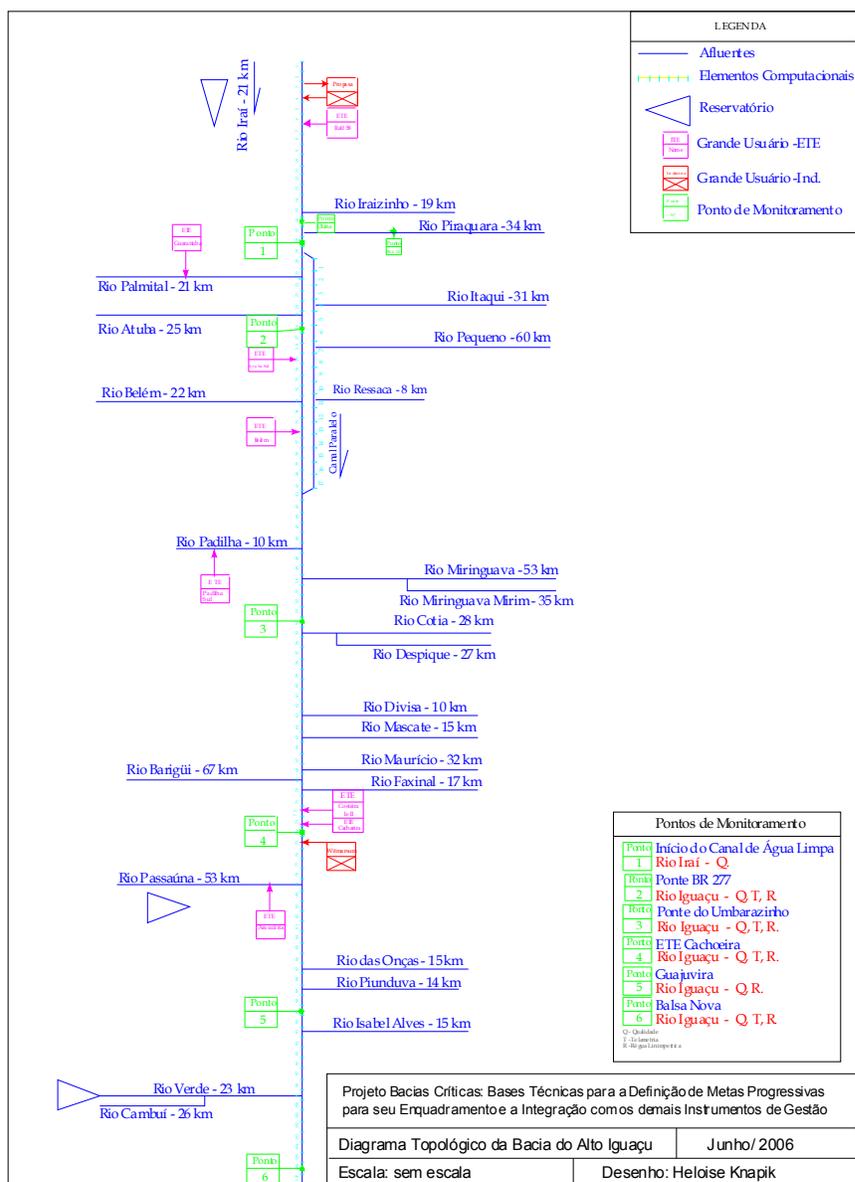
Os Grupos de calibração I e III caracterizam-se pela quantidade de parâmetros do modelo a serem calibrados, e com apenas 1 ponto de monitoramento. Por este motivo, combinações diferentes e variadas destes parâmetros satisfizeram o problema de calibração, ou seja, minimizaram a soma quadrática dos resíduos. A mediana dos parâmetros produziu concentrações de DBO e OD que se apresentaram próximas às concentrações medidas. Além disso, como era esperado, a dispersão dos valores dos k_d 's calculados diminuiu à medida que se restringiu mais o espaço de busca. Por outro lado, o número de gerações necessárias para a convergência do algoritmo genético diminuiu quando se aumentou o número de parâmetros de qualidade de água a serem calibradas. Este resultado, a princípio, pode parecer um contra-senso, pois significa que a convergência aconteceu mais rapidamente quando se aumentou a complexidade do problema, porém, ele pode ser justificado pelo aumento do número de graus de liberdade. Neste trabalho também foram testados diferentes pesos relativos de DBO e OD na função objetivo, sendo que os resultados obtidos mostraram que o processo de calibração é sensível a estes pesos. Claramente, os resultados indicam um potencial de utilização do algoritmo genético para a calibração do modelo matemático de qualidade da água, mesmo neste caso onde existia apenas uma estação de monitoramento, ou seja, pouca informação de qualidade da água. Este resultado é bastante expressivo, pois é uma alternativa consistente e objetiva para o tradicional esquema de tentativa e erro.

6.2 ESTUDO DE CASO 5: RIO IGUAÇU NA RMC

A metodologia do algoritmo genético foi utilizada para calibrar o trecho do rio Iguaçu localizado na Bacia Hidrográfica do Alto Iguaçu, na região metropolitana de Curitiba. O rio estudado correspondeu ao rio Iraí, com 21 km de extensão, adicionado ao trecho do rio Iguaçu que se inicia na junção dos rios Iraí e Palmital e se estende até a foz do rio Verde, com a extensão de 86 km. Assim, o comprimento total do trecho de rio simulado foi igual a 107 km. A discretização espacial empregada foi aquela apresentada em PORTO *et al.* (2007), na qual o rio é composto por 38 tramos que, por sua vez, são formados por elementos computacionais de 1 km de comprimento, o que implica no rio ser composto por 107 elementos computacionais. Esta discretização pode ser visualizada no anexo 2.

Ao longo do rio principal há descarga de 25 afluentes, a saber: Atuba, Belém, Barigüi, Cambuí, Canal Paralelo, Cotia, Despique, Divisa, Faxinal, Iraizinho, Isabel Alves, Itaqui, Mascate, Maurício, Miringuava, Miringuava Mirim, Padilha, Palmital, Passaúna, Pequeno, Pianduva, Piraquara, Ressaca, Rio das Onças e Verde. A Figura 6.17 apresenta um diagrama topológico deste rio, indicando a localização destes afluentes além dos pontos de monitoramento ao longo do rio principal.

FIGURA 6.17 – DIAGRAMA TOPOLÓGICO DA BACIA DO ALTO IGUAÇU.



Fonte: PORTO et. al. (2007).

Também há descargas de efluentes industriais e domésticos, as quais foram obtidas da matriz de fonte de poluição disponibilizada em PORTO *et al.* (2007), para a calibração e simulação da qualidade da água. O anexo 2 apresenta estas descargas, bem como a localização das mesmas; além das descargas dos rios afluentes.

As características hidráulicas deste rio, como declividades dos taludes esquerdo e direito, declividade longitudinal, largura da base do canal e coeficiente de Manning

também foram retiradas de PORTO et. al. (2007), e estão apresentadas, para todos os tramos do rio, no anexo 3.

Durante o desenvolvimento do Projeto Bacias Críticas: Bases técnicas para a definição de Metas Progressivas para seu Enquadramento e a Integração com os demais Instrumentos de Gestão, foram realizadas 20 campanhas de monitoramento, que tiveram início em junho de 2005 e término em julho de 2006, com frequência aproximadamente quinzenal. Nestas campanhas eram visitados 6 pontos ao longo do rio Iguaçu, e monitoradas as vazões, concentrações de DBO e OD, além de outros parâmetros de qualidade da água e com as análises realizadas no Laboratório de Engenharia Ambiental Francisco Borsari Netto do Departamento de Hidráulica e Saneamento da UFPR. A Tabela 6.8 apresenta estes pontos, bem como sua posição ao longo do trecho do rio.

TABELA 6.8 – PONTOS DE MONITORAMENTO AO LONGO DO TRECHO DO RIO.

Nº DO PONTO	POSIÇÃO (KM)	IDENTIFICAÇÃO	LOCALIZAÇÃO
1	18	Início do Canal de Água Limpa	Rio Irai
2	26	Estação Ponte BR 277	Rio Iguaçu
3	54	Estação Ponte do Umbarazinho	Rio Iguaçu
4	74	ETE Cachoeira	Rio Iguaçu
5	91	Estação Ponte do Guajuvira	Rio Iguaçu
6	106	Estação Balsa Nova	Rio Iguaçu

Fonte: Adaptado de PORTO et. al. (2007).

O perfil de vazão utilizado na calibração do modelo e simulação da qualidade da água correspondeu àquele que se ajustou melhor à mediana das séries de vazões observadas nos pontos de monitoramento, conforme apresentado na Tabela 6.9.

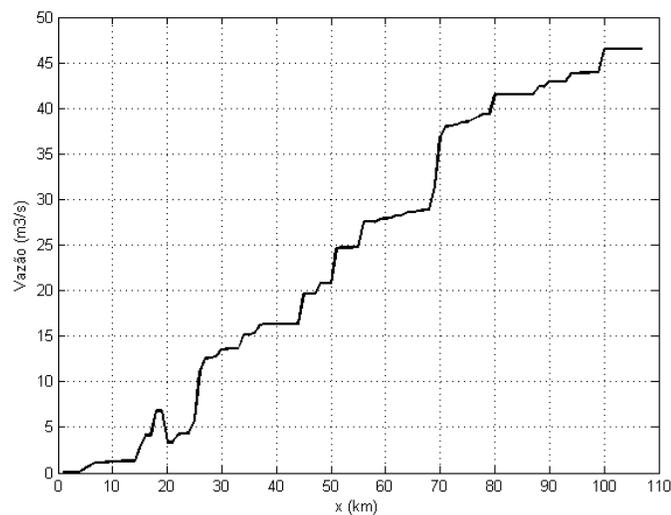
TABELA 6.9 – VALORES MEDIANOS DAS SÉRIES DE MONITORAMENTO DE VAZÃO.

Posição (km)	$Q_{mediana}$ (m^3/s)
18,0	3,73
26,0	11,25
54,0	19,96
74,0	30,16
91,0	38,22
106,0	47,21

KNAPIK et al. (2006) apresentaram as vazões incrementais necessárias para se obter este ajuste, bem como o método empregado na obtenção destas vazões. O anexo

4 apresenta estas vazões incrementais, que foram utilizadas na calibração e simulação do modelo de qualidade da água. A Figura 6.18 apresenta o perfil de vazão monitorada, onde estão inseridos os efeitos de elevação da vazão devido aos efluentes e rios afluentes, bem como de eventuais retiradas.

FIGURA 6.18 – PERFIL MEDIANO DA VAZÃO MONITORADA PARA O RIO IGUAÇU.



Os perfis de profundidade e velocidade média na seção, necessários para o cálculo das concentrações de DBO e OD, foram obtidos, dado o perfil de vazão apresentado na Figura 6.18, através da equação de Manning, lançando-se mão do algoritmo AG1, apresentado na metodologia.

Para a calibração do modelo de qualidade da água, utilizou-se o valor mediano das séries de concentração de DBO e OD monitoradas nos 6 pontos ao longo do rio Iguaçu. As medianas das concentrações monitoradas, juntamente com a localização do ponto de monitoramento, estão apresentadas na Tabela 6.10.

TABELA 6.10 – VALORES MEDIANOS DAS CONCENTRAÇÕES USADAS NA CALIBRAÇÃO DO MODELO PARA O RIO ALTO IGUAÇU.

POSICÃO (km)	DBO _{mediana} (mg/L)	OD _{mediana} (mg/L)
18	6,3	6,05
26	16,32	2,48
54	19,68	1,8
74	17,7	1,34
91	9,6	1,63
106	7,98	2,63

Como existem 38 tramos, e 4 parâmetros do modelo de qualidade da água para cada tramo do rio (k_d , k_a , k_s , S_b), o número total de parâmetros a serem calibrados será

igual a 152. Neste caso, a calibração do modelo de qualidade da água corresponderá, portanto, a um problema de otimização de uma função com 152 variáveis. Os espaços de busca dos parâmetros foram definidos da seguinte forma: $0.0 \leq k_d \leq 6.0$; $0.0 \leq k_a \leq 120.0$, para os primeiros 7 tramos e $0.0 \leq k_a \leq 10.0$, para os tramos restantes; $0.0 \leq k_s \leq 6.0$; $0.0 \leq S_b \leq 6.0$. A taxa de mutação foi igual a 0.5%. Em relação ao critério de parada, a execução do algoritmo genético encerrava-se quando o resíduo atingisse um valor menor ou igual a 0.005. Além disso, os pesos w_1 e w_2 foram mantidos iguais a 0.5.

Cabe destacar que devido ao fato de haver apenas 6 pontos de monitoramento ao longo de todo o rio, e um número significativo de parâmetros a serem estimados (152), não existe uma solução única; assim, várias combinações de k_d , k_a , k_s e S_b produziram resultados de calibração consistentes. Por este motivo, foram realizadas 400 simulações através do AG, sendo que para cada simulação uma semente inicial diferente foi empregada para a geração dos números aleatórios. Destas simulações, obteve-se 400 combinações diferentes de parâmetros de qualidade da água que satisfizeram o problema de calibração. Com cada uma das 400 combinações de parâmetros foram traçadas curvas de DBO e OD, que estão apresentadas na Figura 6.19 e Figura 6.20. Nestas figuras estão, também, inseridos os Boxplot's das séries de concentrações de DBO e OD monitorados ao longo do rio, os quais apresentam, além da mediana, os valores máximos e mínimos, quartil 25% e 75%.

FIGURA 6.19 - PERFIL DE OD PARA AS 400 SIMULAÇÕES (RIO ALTO IGUAÇU).

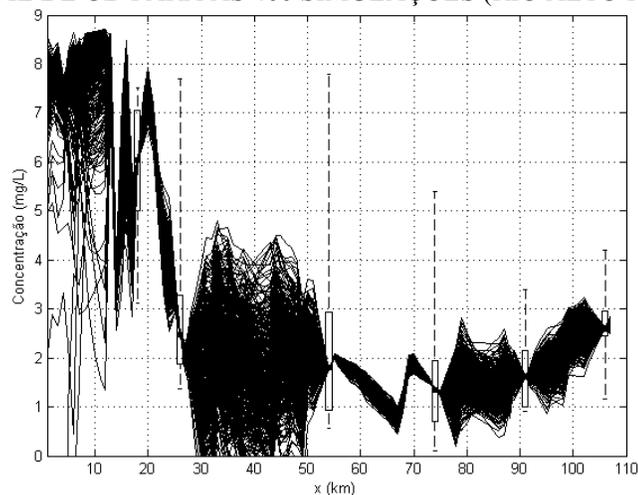
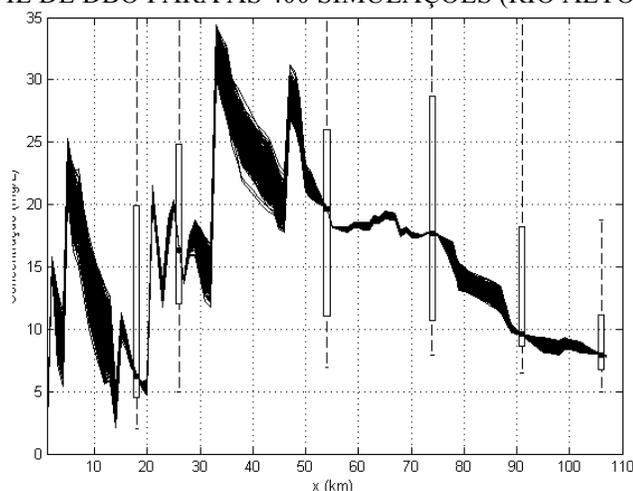


FIGURA 6.20 - PERFIL DE DBO PARA AS 400 SIMULAÇÕES (RIO ALTO IGUAÇU).



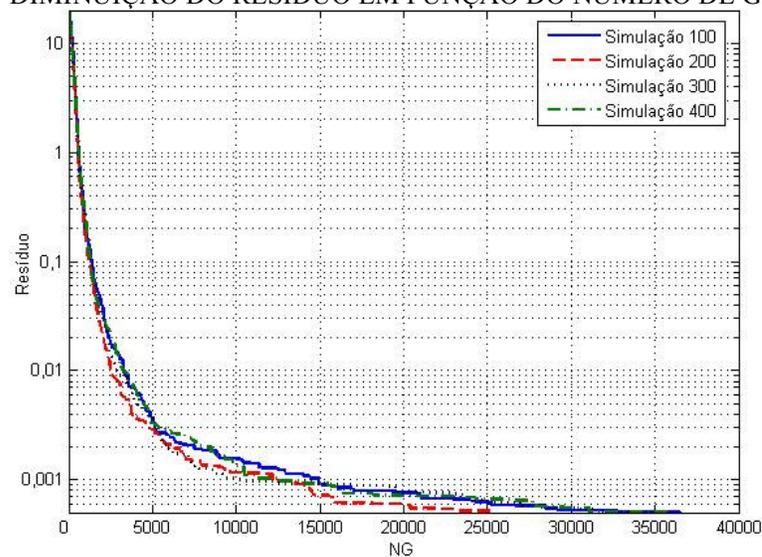
Conforme caracterizado na Figura 6.19, é possível destacar que as curvas não são coincidentes, ao contrário, elas formam uma nuvem de curvas, indicando que em cada simulação um perfil diferente de OD é encontrado. Os perfis calculados de OD entre os quilômetros 26 e 54 apresentaram uma dispersão consideravelmente superior à de outros trechos do rio, indicando a necessidade de uma melhor complementação de dados de monitoramento neste trecho. Apesar destas características, nos pontos de monitoramento todas as curvas coincidem, exatamente, para o valor de concentração de OD utilizado na calibração. Na Figura 6.20 observa-se o mesmo comportamento em relação aos perfis de DBO encontrados nas 400 simulações. Porém, neste caso a nuvem de curva se encontra mais concentrada, ou seja, a dispersão dos perfis de DBO é menor do que a dispersão dos perfis de OD.

No processo de calibração, o algoritmo genético é empregado para encontrar os parâmetros do modelo de qualidade da água que “produzam” uma concentração calculada de DBO, ou OD, igual à concentração medida no ponto de monitoramento. Pode-se observar, através da visualização das figuras acima, que isso ocorre. Assim, o algoritmo genético cumpriu sua função de calibração. Porém, a dispersão que ocorre entre os pontos de monitoramento deve-se ao fato de não haver informações de qualidade da água nestes trechos. Ou seja, como não existe informação de concentração monitorada, para se comparar com a calculada, qualquer perfil de DBO ou OD é aceito, desde que nos pontos de monitoramento a concentração calculada se

ajuste à monitorada. Por este motivo, a cada simulação do algoritmo genético encontra-se um perfil de DBO e OD diferente.

Em relação à convergência do algoritmo, pode-se avaliar a variação do valor da função aptidão (f_{AG2}), que diminui ao longo das gerações do algoritmo genético. A Figura 6.21 apresenta, para 5 das 400 simulações, a diminuição do resíduo em função do número de gerações decorridas.

FIGURA 6.21 – DIMINUIÇÃO DO RESÍDUO EM FUNÇÃO DO NÚMERO DE GERAÇÕES.

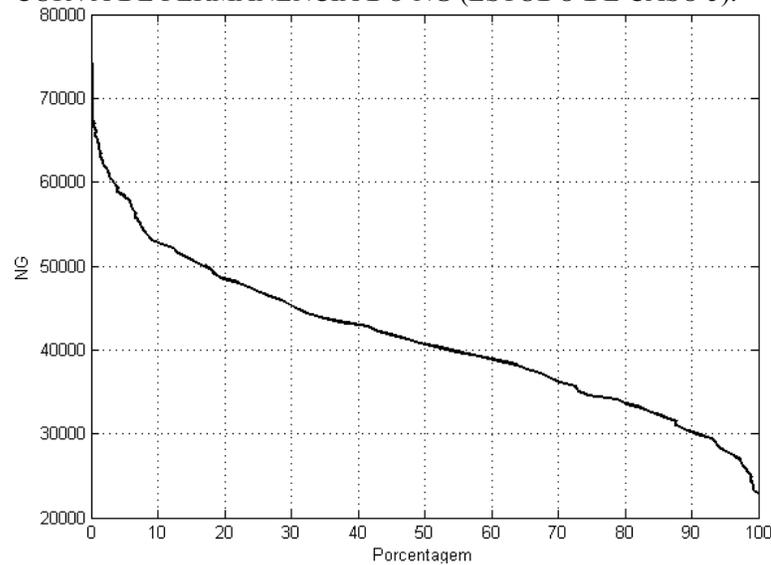


Percebe-se que o resíduo diminui de forma aproximadamente exponencial, ou seja, à medida que a população se desenvolve através de sucessivas gerações, torna-se necessário um número exponencialmente maior de gerações para se obter uma melhoria adicional da resposta, ou diminuição do resíduo.

Pode-se perceber, ainda, que a convergência do algoritmo genético foi atingida mais rapidamente na simulação 200, para a qual foram necessárias 25.000 gerações para que o resíduo atingisse um valor menor ou igual a 0.005.

Outra forma de visualizar a convergência do AG é através da curva de permanência do número de gerações necessário para a convergência. Com as informações do número de gerações de cada uma das 400 simulações, calculou-se uma curva de permanência do NG, que pode ser visualizada na Figura 6.22.

FIGURA 6.22 – CURVA DE PERMANÊNCIA DO NG (ESTUDO DE CASO 5).



Através da visualização desta figura é possível observar que em todas as 400 simulações a convergência foi alcançada com menos de 80000 gerações; porém, em nenhuma destas simulações a convergência foi atingida com menos de 22000 gerações. Como, em média, a cada segundo são simuladas aproximadamente 386 gerações num computador com processador Athlon de 1,8 GHz e 256 MB de RAM, neste mesmo computador o tempo de processamento para o caso mais desfavorável (75000 gerações, de acordo com a Figura 6.22) não ultrapassa 3,5 minutos.

Uma forma de resumir todos os perfis de DBO e OD calculados consiste em calcular o valor médio dos parâmetros calibrados através do algoritmo genético, para cada tramo do rio, e utilizar estes valores médios para se obter apenas um perfil de DBO e OD. Este perfil está apresentado na Figura 6.23 e

Figura **6.24**, que apresenta também os perfis de DBO e OD obtidos através de uma metodologia de calibração convencional (PORTO et. al., 2007).

FIGURA 6.23 - PERFIL DE OD OBTIDO COM A MÉDIA DOS PARÂMETROS DO MODELO DE QUALIDADE DA ÁGUA (RIO ALTO IGUAÇU).

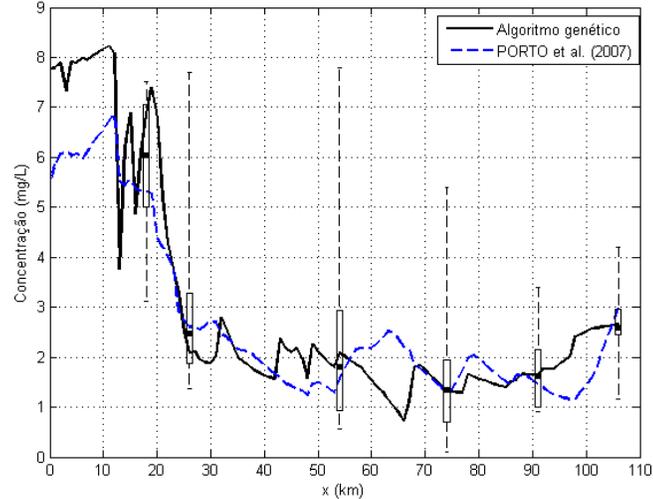
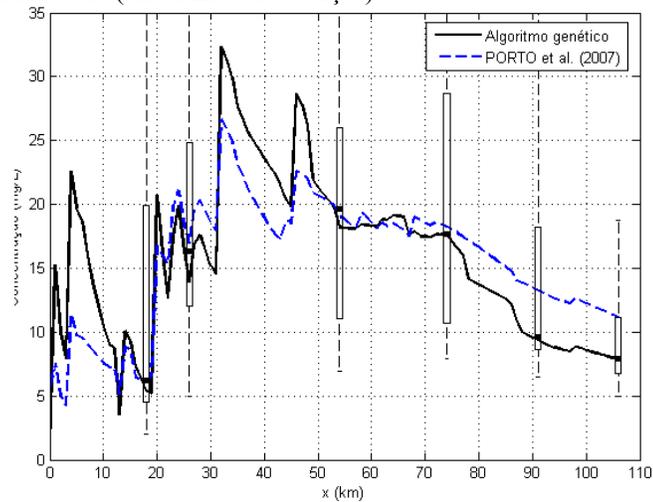


FIGURA 6.24 - PERFIL DE DBO OBTIDO COM A MÉDIA DOS PARÂMETROS DO MODELO DE QUALIDADE DA ÁGUA (RIO ALTO IGUAÇU).



Em relação ao perfil de OD, percebe-se que nos primeiros 3 pontos de monitoramento as concentrações calculadas e monitoradas apresentaram alguma discrepância, porém, para os últimos 3 pontos, estes valores estiveram mais próximos. Apesar disso, a curva de OD obtida através da calibração com o algoritmo genético apresentou grande diferença em relação à curva obtida através da calibração convencional. Em relação ao perfil de DBO, percebe-se que houve um ajuste razoável entre as concentrações medidas e calculadas, mesmo nos primeiros pontos de

monitoramento. Porém, também neste caso, os diferentes métodos de calibração produziram resultados diferentes.

6.2.1 Conclusões do estudo de caso 5

Assim como nos estudos de caso anteriores, o algoritmo genético foi capaz de encontrar os parâmetros do modelo de qualidade da água que ajustaram as concentrações calculadas às monitoradas. Neste caso, porém, o algoritmo apresentou maior dificuldade na calibração, ou seja, a convergência ocorreu de forma mais lenta em relação aos casos anteriores; o que se explica pelo fato de haver, neste caso, um número consideravelmente maior de parâmetros a serem determinados através da calibração. Este elevado número de variáveis também interferiu na dispersão dos conjuntos de parâmetros encontrados nas 400 simulações, uma vez que o grau de liberdade do problema apresentou-se elevado, fazendo com que os perfis de DBO, e principalmente de OD, apresentassem, semelhantemente, elevada dispersão.

Também se pode constatar que os parâmetros obtidos através da calibração apresentaram, em via de regra, valores fora de intervalos admissíveis, de acordo com a literatura, para os mesmos; principalmente em relação à taxa de degradação de MO. Por exemplo, os k_d 's calibrados estão contidos entre os valores [0,11 - 4,79], enquanto na literatura o intervalo indicado para os mesmos é [0.01 – 0.5] (CHAPRA, 1997). Ou seja, apesar destes parâmetros ajustarem as concentrações calculadas às monitoradas, não se pode afirmar que eles sejam representativos do rio Alto Iguaçu.

Neste sentido, pode-se afirmar que através da calibração manual tem-se maior sensibilidade em relação aos parâmetros que representam o rio que está sendo modelado, uma vez que se busca na literatura, ou através do “feeling” valores apropriados para estes parâmetros. Diferentemente ocorre na calibração automática, para a qual o papel do algoritmo genético se resume em apenas encontrar os parâmetros que ajustem concentração calculada à monitorada, mesmo que estes parâmetros apresentem valores discrepantes com a realidade.

6.3 SUMÁRIO DO CAPÍTULO 6

No presente capítulo o algoritmo genético foi aplicado na calibração do modelo de qualidade da água para 2 rios localizados na Bacia Hidrográfica do Alto Iguaçu: Palmital e Iguaçu. A calibração do Palmital reproduziu, aproximadamente, as concentrações monitoradas, apesar de haver apenas 1 dado de monitoramento, o que não pode ser considerado representativo do comportamento do rio.

A calibração do rio Iguaçu se mostrou mais complexa, uma vez que o rio estava dividido em 38 tramos, e havia 4 parâmetros de qualidade da água, totalizando um total de 152 variáveis do problema de otimização. Além disso, havia a descarga de vários efluentes e rios afluentes. Como se conhecia informação de monitoramento em apenas 6 pontos ao longo do rio, foram encontrados vários conjuntos de parâmetros que ajustavam as curvas de DBO e OD aos pontos monitorados.

7 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

Apesar do algoritmo genético representar uma técnica difundida e largamente utilizada em problemas distintos de engenharia e de recursos hídricos, não se conhece, na literatura nacional, aplicações em problemas de qualidade da água, em especial de rios, onde atenção se faz necessária para a calibração de modelos matemáticos, no contexto da implementação dos instrumentos de Gerenciamento de Recursos Hídricos.

Neste trabalho, todas as rotinas computacionais que compõem o algoritmo genético foram programadas para permitir maior sensibilidade em relação ao desenvolvimento do método. Além disso, as rotinas foram desenvolvidas explorando aspectos aleatórios a partir da variabilidade da semente inicial, a qual variou para as diferentes simulações de AG. Em relação à configuração do algoritmo, optou-se por manter a probabilidade de cruzamento fixa, e igual a 100%. Para a probabilidade de mutação, da qual depende tanto a convergência, quanto a velocidade na qual ela ocorre, foram realizados estudos, os quais indicaram o valor ótimo deste parâmetro, relacionado ao número de variáveis da função-objetivo. Cabe ressaltar que este resultado é aplicável ao algoritmo do presente trabalho, que apresenta suas características particulares.

O algoritmo genético desenvolvido nesta pesquisa se apresentou como uma ferramenta robusta para a calibração do modelo de qualidade da água. Através dos estudos de casos de rios hipotéticos foi possível constatar que este método reproduziu satisfatoriamente os resultados teóricos. Em alguns casos, tanto o perfil de concentração de DBO e OD, quanto os parâmetros do modelo foram reproduzidos pelo algoritmo. Porém, para aqueles rios que estavam divididos em tramos, o algoritmo encontrou parâmetros diferentes dos teóricos, mas que produziam, todavia, perfis de concentração que se ajustaram aos pontos monitorados. Desta forma, pode-se concluir que as rotinas são estáveis, robustas, e convergem para a solução, ou soluções, do problema.

Apesar dos bons resultados obtidos com o algoritmo genético, deve-se lembrar que a calibração desenvolvida através deste método representou, nada mais, do que um

processo de ajuste dos parâmetros do modelo que produzissem concentrações calculadas aproximadamente iguais às monitoradas. Assim, poderiam ser obtidos parâmetros que, apesar de realizarem este ajuste, não apresentavam nenhum sentido físico, químico e biológico, ou estavam completamente fora de um limite aceitável. A calibração manual, apesar de apresentar a desvantagem de ser mais onerosa em termos de tempo e esforço do modelador, possibilita que sejam levados em conta aspectos físicos e, desta forma, os parâmetros apresentem maior representatividade do rio que está sendo modelado. O que estas observações suscitam é a premente necessidade de se estudar o impacto dos parâmetros do modelo sob o olhar mais severo da sua realidade física, química e biológica, de tal sorte a se poder aprimorar a definição do espaço de busca.

Um segundo aspecto relevante a ser considerado diz respeito às simplificações do modelo de qualidade da água utilizado no presente trabalho, entre elas a abordagem unidimensional, a solução em movimento permanente. Além disso, o modelo não considerou termos referentes ao nitrogênio, fósforo, algas e a reaeração através da fotossíntese, bem como variações de temperatura que ocorrem durante o dia e a noite, e que influenciam a velocidade de consumo de oxigênio e reaeração. Outra limitação consiste na aproximação da seção transversal, normalmente irregular, por uma forma regular, como um trapézio ou retângulo. Esses são aspectos que merecem ser apreciados, e levados em conta em trabalhos futuros.

A função objetivo utilizada para a calibração correspondeu a uma combinação entre os resíduos quadráticos referentes a concentração de DBO e OD, e que se considerou satisfatória para este caso. Porém, diferentes funções aptidão podem ser testadas, com o objetivo de se procurar alguma que eventualmente apresente melhor resultado. Recomenda-se ainda, para estudos futuros, a avaliação da hibridização do AG com outras técnicas de otimização, com objetivo de aumentar a velocidade do processo de calibração.

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

ARAÚJO, J. K. **Calibração de redes de distribuição de água pelo método inverso aplicado a escoamento transiente**. São Carlos, 2003. 166 f. Tese (Doutorado em Hidráulica e Saneamento) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo.

BROWN, L. C.; BARNWELL, T. O. Jr. **The Enhanced Stream Water Quality Model QUAL2E and QUAL2E-UNCAS: Computer Program Documentation and User Manual**. Athens: United States Environmental Protection Agency, 1987. 189 p.

CHAPRA, C. S. **Surface Water Quality Modeling**. Colorado, USA: McGraw-Hill, 1997.

CHAU, K. A review on integration of artificial intelligence into water quality modelling. **Marine Pollution Bulletin** 52, p. 726-736, 2006.

CHO, J. H.; SUNG, K. S.; HA, S. R. A river water quality management model for optimizing regional wastewater treatment using a genetic algorithm. **Journal of Environmental Management**, v. 20, p. 1-14, jul. 2004.

GONZAGA, C. C. Otimização irrestrita. In: _____. **Um curso de programação não linear**. Florianópolis, 2004. p. 13-49.

GUPTA, I.; GUPTA, A.; KHANNA, P. Genetic algorithm for optimization of water distribution systems. **Environmental Modeling & Software**, v. 14, n. 5, p. 437-446, 1998.

HENDERSON, F. M. **Open Channel Flow**. Chicago, USA: Prentice Hall, 1966.

KNAPIK, H. G.; FRANÇA, M. S.; FERNANDES, C. V. S.; PORTO, M. F. A. Metodologia de Calibração do Modelo QUAL2E para a Bacia do Alto Iguaçu na Região Metropolitana de Curitiba. In: SIMPÓSIO DE RECURSOS HÍDRICOS SUL-SUDESTE, 1, 2006, Curitiba.

KONDAGESKI, J. H.; FERNANDES, C.V.S. Calibração da equação de Streeter – Phelps através do método do algoritmo genético: um estudo de caso hipotético. In: SIMPÓSIO BRASILEIRO DE RECURSOS HÍDRICOS, 15, 2005, João Pessoa.

LACERDA, E. G. M. de; CARVALHO, A. C. P. L. F. de. Introdução aos algoritmos genéticos. In: Galvão, C. de O.; Valença, M.J.S. (orgs.). **Sistemas inteligentes: aplicações a recursos hídricos e ciências ambientais**: Porto Alegre: Ed. Universidade/UFRGS, 1999. p. 99-150.

MULLIGAN, A. E.; BROWN, L. C. Genetic Algorithms for calibrating water quality models. **Journal of Environmental Engineering**, v. 124, n. 3, p. 202-211, mar. 1998.

MUNSON, B. R.; YOUNG, D. F.; OKIISHI, T. H. Differential analysis of fluid flow. In: _____. **Fundamentals of fluid mechanics**: USA: Ed. John Wiley & Sons, 2002. p. 298-383.

NAHON, I. M. **Sistema de apoio à análise de outorga de lançamento de efluentes para a variável demanda bioquímica de oxigênio**: Estudo de caso da bacia do Alto Iguaçu. Curitiba, 2006. 153 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Recursos Hídricos e Ambiental) – Setor de Tecnologia, Universidade Federal do Paraná.

NG A. W. M; PERERA, B. J. C. Selection of genetic algorithm operators for river water quality model calibration. **Engineering Applications of Artificial Intelligence**, v. 16, p. 529-541, set. 2003.

PARK, S. Y.; CHOI, J. H.; WANG, S.; Park, S. S. Design of a water quality monitoring network in a large river system using the genetic algorithm. **Ecological Modelling**, v. 199, n. 3, p. 289 - 297, dez. 2006.

PELLETIER, G. J.; CHAPRA, S. C.; TAO, H. A framework for modeling water quality in streams and rivers using a genetic algorithm for calibration. **Environmental Modelling & Software**, v. 21, n. 3, p. 419 – 425, mar. 2006.

PEIXOTO, L. S. Derivação de regras operacionais de proteção contra déficits de suprimento de sistemas de reservatórios via Algoritmos genéticos. São Carlos, 2006. 209 f. Tese (Doutorado em Hidráulica e Saneamento) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo.

PORTO, M. F. A.; FERNANDES, C. V. S.; FRANÇA, M. S.; KNAPIK, H. G.; KONDAGESKI, J. H.; CHELLA, M.; SÁ, J. F.; MASINI, L.; BRITES, A. P. Bacias Críticas: Bases Técnicas para a Definição de Metas Progressivas para seu Enquadramento. Relatório Final. 820 p. (FINEP/CT-HIDRO), 2007.

RAUCH, W.; HARREMOËS, P. On the potential of genetic algorithms in urban drainage modeling. **Urban Water**, 1, p. 79-89, ago. 1999.

RIBEIRO, G. P. **Operação Otimizada do Sistema Adutor Metropolitano Utilizando Algoritmos Genéticos. Estudo de Caso: SAM Leste da Região Metropolitana de São Paulo (R.M.S.P.)**. São Paulo, 2005. 239 f. Tese (Doutorado em Engenharia Civil) – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo.

SCHNOOR, J. L. **Environmental Modeling: Fate and Transport of Pollutants in water, Air and Soil**. New York, USA, John Wiley e Sons, 1996.

SOARES, A. K.; REIS, L. F. R. Calibração de Modelos de Redes de Distribuição de Água Utilizando Modelo de Simulação Hidráulica Dirigido pela Pressão (MSHDP) e Método Híbrido AG-Simplex. **Revista Brasileira de Recursos Hídricos**, v. 9, n. 2, p. 85 – 96, 2004.

SPERLING, M. Von. Impacto do lançamento de efluentes nos corpos receptores. In: _____. **Introdução à qualidade das águas e ao tratamento de esgotos**. 2. ed. Belo Horizonte: Departamento de Engenharia Sanitária e Ambiental; Universidade Federal de Minas Gerais, 1996. p. 93-140.

TANOMARU, J. Motivação, fundamentos e aplicações de algoritmos genéticos. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE REDES NEURAIIS, 2., 1995, Curitiba.

WANG, Q. J. The genetic algorithm and its application to calibrating conceptual rainfall-runoff models. **Water Resources Research**, v. 27, n. 9, p. 2467-2471, set. 1991.

WANG, Q. J. Using genetic algorithms to optimize model parameters. **Environmental Modeling & Software**, v. 12, n. 1, p. 27-34, 1997.

WARDLAW, R.; SHARIF, M. Evaluation of genetic algorithms for optimal reservoir system operation. **Journal of Water Resources Planning and Management**, v. 125, n. 1, p. 25-33, jan./fev. 1999.

**ANEXO 1 – MATRIZ DE FONTE DE POLUIÇÃO, CARACTERÍSTICAS
HIDRÁULICAS E VAZÕES INCREMENTAIS DO RIO PALMITAL**

Bacia	Tramos				Dados Hidráulicos					Dados de Entrada no Modelo							
	Nº	Elementos Comp.	Início (km)	Fim (km)	Dec. Esquerdo (m/m)	Dec. Direito (m/m)	Larg. Base (m)	Dec. Long. (m/m)	Coef. Manning	Vazão Incr. Q95 (m³/s)	Vazão total Q95 (m³/s)	Cargas difusas		Fontes Pontuais			
												OD (mg/L)	DBO (mg/L)	Vazão (m³/s)	OD (mg/L)	DBO (mg/L)	
Palmital	1	1	21	16	0,629	0,778	7	0,0017	0,033	0,01	0,01	8	5	-	-	-	
		2												4E-05	0	337,5	
		3												4E-05	0	337,5	
		4												4E-05	0	337,5	
		5												4E-05	0	337,5	
		6												4E-05	0	337,5	
	2	1	16	15	0,667	1,429	10	0,0014	0,033	0,021	0,031	5	7,6	0,003	0	337,5	
	3	1	15	12	1,522	0,724	8,500	0,002	0,033	0,011	0,042	7,000	5,000	0,0017	0	337,5	
		2												0,0017	0	337,5	
		3												0,0017	0	337,5	
	4	1	12	11	0,656	0,656	10,0	0,0009	0,033	0,023	0,065	5	6,5	0,057	0	337,5	
	5	1	11	8	1,071	2,200	9,300	0,003	0,033	0,020	0,085	4,000	8,600	0,048	0	94,5	
		2												0,038	0	337,5	
		3												0,038	0	337,5	
	6	1	8	0	0,400	0,700	7,200	0,000	0,033	0,029	0,114	4,000	8,600	0,0162	0	337,5	
		2												0,0162	0	337,5	
		3												0,0162	0	337,5	
		4												0,0162	0	337,5	
		5												0,0162	0	337,5	
		6												0,0162	0	337,5	
		7												-	-	-	
	Total	6	21	21						-	0,114	0,114	-	-	-	-	-

**ANEXO 2 - MATRIZ DE FONTES DE POLUIÇÃO PARA A BACIA DO ALTO
IGUAÇU**

Bacia	Tramos					Fontes Difusas						Carga Pontual	
	Nº tramo	Elementos Comput.	Tipo	Início (km)	Fim (km)	Fontes Difusas		Fontes Pontuais					
						OD (mg/L)	DBO (mg/L)	Grande Usuário	Vazão (m³/s)	OD (mg/L)	DBO (mg/L)		
Irai	1	1	Cabeceira	0	4	5	7,7	Cabeceira					
		2	População					população	0,003	0	337,5	100,6412	
		3	Retirada					Propasa - retirada	-0,017			Captação	
		4	Pontual					Propasa - efluente	0,026	4	13,83	31,06771	
	2	1	População	4	6	6	7,8	população	0,026	0	337,5	762,706	
		2	Pontual					Ete - 58 Ralf	0,004	0	222,532	76,90706	
	3	1	População	6	7	5	7,4	população	0,007		337,5	197,5934	
	4	1		7	12	8	5,65						
		2											
		3											
		4											
		5											
	5	1	População	12	15	8	5,65	população	0,004	0	337,5	107,4717	
		2	Reservatorio					Sanepar	1,500	-	-	Reservatório	
		3	Afluente					Iraizinho	1,31	4,65	25,09	Afluente	
	6	1	Monitoramento	15	17	5,65	5,65	Ponto Olaria					
		2	Afluente					Piraquara	2,71	4,92	0,33	Afluente	
	7	1	Monitoramento	17	21	5,65	5,65	Ponto 1					
		2	Captação					Canal Paralelo	-3,500	-	-	Captação	
		3	População					população	0,008	0	337,5	222,2061	
4		Afluente	Palmital					0,85	3,24	85,17	Afluente		
Iguaçu	8	1		21	24	2,0	11						
		2											
		3	População					população	0,103	0	337,5	3008,029	
	9	1	Afluente	24	27	2,0	10	Atuba	4,13	3,69	28,79	Afluente	
		2	Monitoramento					Ponto 2					
		3	População					população	0,019	0	337,5	561,5608	
	10	1	População	27	31	2	10,2	população	0,156	0	337,5	4549,37	
		2	Pontual					ETE Atuba Sul	0,720	0	227,38	3254,263	
		3											
		4											
	11	1		31	35	0	0						
2		Afluente	Belém					1,59	8,12	189,21	Afluente		

	3												
	4												
12	1	Pontual	35	38	2,0	13	ETE Belém	0,823	0	221,56	472,7566		
	2												
	3												
13	1		38	43	0	0							
	2												
	3												
	4												
	5												
14	1	Afluente	43	45	2,0	13	Canal Paralelo	3,23	7,38	23,89	Afluente		
	2												
15	1		45	48	0	0							
	2	Afluente					Padilha	1,15	4,79	189,46	Afluente		
	3												
16	1		48	49	2,0	22,49							
17	1	Afluente	49	51	0	0	Miringuava	3,84	7,09	4,93	Afluente		
	2												
18	1	População	51	54	8,0	7,47	população	0,002	0	337,5	69,90299		
	2												
	3	Monitoramento					Ponto 3						
19	1	Afluente	54	58	0	0	Cotia	2,8	4,37	4,96	Afluente		
	2												
	3												
	4												
20	1	População	58	59	0,0	62	população	0,034	0	337,5	998,6218		
21	1		59	61	8,0	11							
	2												
22	1	População	61	62	6,0	13	população	0,005	0	337,5	138,2138		
23	1	Afluente	62	64	0	0	Divisa	0,33	6,43	69,45	Afluente		
	2												
24	1	Afluente	64	66	0	0	Mascate	0,18	0,75	87,83	Afluente		
	2												
25	1		66	67	6,0	5							
26	1	Afluente	67	68	0	0	Mauricio	2,67	7,05	3,62	Afluente		
27	1	Afluente	68	69	0	0	Barigui	5,45	6,57	19,87	Afluente		
28	1	Afluente	69	70	0	0	Faxinal	0,99	6,56	3,82	Afluente		
29	1		70	75	2,0	16							
	2	Pontual					Ralf Costeira I e II	0,005	0	122,5	52,92		

		3	Pontual					Ete 65 Cachoeira	0,160	0	83,77	1158,036	
		4	Monitoramento					Ponto 4					
		5	Pontual					Witmarsum	0,002	0	89	15,3792	
	30		1	População	75	78	2,0	13	população	0,007		337,5	210,4548
			2										
			3										
	31	1	Afluente	78	79	0	0	Passaúna	2,13	7,86	9,67	Afluente	
	32	1		79	87	0	0						
		2											
		3											
		4											
		5											
		6											
		8	Afluente					Rio das Onças	1,28	6,14	4,7	Afluente	
	33	1		87	88	6,0	5						
	34	1	Afluente	88	89	0	0	Pianduva	0,56	6,85	9,91	Afluente	
	35	1		89	95	0	0						
		2	Monitoramento					Ponto 5					
		3											
		4	Afluente					Isabel Alves	0,91	7,5	6,71	Afluente	
		5											
		6											
	36	1		95	98	6,0	5						
		2											
		3											
	37	1	Afluente	98	102	0	0	Verde	2,6	8,28	18	Afluente	
		2											
3													
4													
38	1		102	107	0	0							
	2												
	3												
	4	Monitoramento					Ponto 6						
	5	Final					Final						

ANEXO 3 - DADOS HIDRÁULICOS DO RIO ALTO IGUAÇU

Tramo	Início (km)	Fim (km)	Dados Hidráulicos				
			Dec. Esquerdo (m/m)	Dec. Direito (m/m)	Largura Base (m)	Dec. Long. (m/m)	Coefficiente Manning
1	0	4	3	6,7	7,5	0,00046	0,033
2	4	6	3	6,7	7,5	0,00046	0,033
3	6	7	3	6,7	7,5	0,00046	0,033
4	7	12	0,51	1,2	14,5	0,00046	0,033
5	12	15	0,51	1,2	14,5	0,00046	0,033
6	15	17	1,5	2	8	0,00046	0,033
7	17	21	0,51	1,2	14,5	0,00046	0,033
8	21	24	0,306	0,7812	9,3	0,00037	0,033
9	24	27	0,268	0,194	8,4	0,00022	0,033
10	27	31	0,4877	0,5543	22,6	0,0002	0,033
11	31	35	0,306	0,601	11,7	0,00031	0,033
12	35	38	0,839	0,6745	16,5	0,00017	0,033
13	38	43	1,0723	0,1763	6,3	0,00014	0,033
14	43	45	0,4663	0,1763	18,0	0,000084	0,033
15	45	48	0,404	0,2679	8,0	0,000312	0,033
16	48	49	0,364	0,3838	13,3	0,000158	0,033
17	49	51	0,2493	0,141	19,1	0,00021	0,033
18	51	54	0,7002	0,141	4,0	0,000213	0,033
19	54	58	0,2679	0,2493	19,1	0,000564	0,033
20	58	59	0,0699	0,1583	11,4	0,000281	0,033
21	59	61	0,4663	0,2867	24,6	0,00009	0,033
22	61	62	0,1583	0,3443	30,8	0,00012	0,033
23	62	64	0,3639	0,3639	34,9	0,000164	0,033
24	64	66	0,1583	0,4244	30,5	0,000169	0,033
25	66	67	0,4663	0,8097	37,5	0,000124	0,033
26	67	68	0,2867	0,2308	40,6	0,000311	0,033
27	68	69	0,2493	0,2125	28,1	0,000242	0,033
28	69	70	0,3057	0,404	32,3	0,000669	0,033
29	70	75	0,2125	0,1051	34,8	0,0008	0,033
30	75	78	0,4452	0,404	34,4	0,0003	0,033
31	78	79	0,2493	0,6008	39,2	0,00031	0,033
32	79	87	0,2493	0,3639	44,0	0,000218	0,033
33	87	88	0,4244	0,5095	55,6	0,000179	0,033
34	88	89	0,404	0,7812	19,3	0,000131	0,033
35	89	95	0,2679	0,5773	37,9	0,000132	0,033
36	95	98	0,4452	0,404	23,2	0,000249	0,033
37	98	102	0,9004	1,4281	31,5	0,000124	0,033
38	102	107	0,6494	0,839	43,2	0,00029	0,033

**ANEXO 4 – VAZÕES INCREMENTAIS DO ALTO IGUAÇU UTILIZADAS
NA SIMULAÇÃO DE QUALIDADE DA ÁGUA**

N° tramo	Elemento Comput.	Q _{inc} (m ³ /s)	N° tramo	Elemento Comput.	Q _{inc} (m ³ /s)	
1	1	0,03292974	19	1	0	
	2	0,03292974		2	0	
	3	0,03292974		3	0	
	4	0,03292974		4	0	
2	1	0,36222714	20	1	0,27872852	
3	2	0,36222714	21	1	0,06472211	
	1	0,19757844		2	0,06472211	
4	1	0,03951568	22	1	0,27292168	
	2	0,03951568	23	1	0	
	3	0,03951568		2	0	
	4	0,03951568	24	1	0	
	5	0,03951568		2	0	
5	1	0,00109765	25	1	0,03290190	
	2	0,00109765	26	1	0	
	3	0,00109765	27	1	0	
6	1	0,00055980	28	1	0	
	2	0,00055980		1	0,45170325	
7	1	0,00077902	29	2	0,45170325	
	2	0,00077902		3	0,45170325	
	3	0,00077902		4	0,45170325	
	4	0,00077902		5	0,45170325	
	1	0,06752736		30	1	0,82748998
2	0,06752736	2	0,82748998			
3	0,06752736	3	0,82748998			
9	1	1,31103034	31	1	0	
	2	1,31103034	32	1	0	
	3	1,31103034		2	0	
10	1	0,02876595		3	0	
	2	0,02876595		4	0	
	3	0,02876595		5	0	
	4	0,02876595		6	0	
11	1	0		33	7	0
	2	0			8	0
	3	0	1		0,87330418	
	4	0	34		1	0
12	1	0,12249999		35	1	0
	2	0,12249999			2	0
	3	0,12249999			3	0
13	1	0		36	4	0
	2	0			5	0
	3	0			6	0
	4	0			1	0,10223422
	5	0	2		0,10223422	
14	1	0,02613079	37	3	0,10223422	
	2	0,02613079		1	0	
15	1	0	38	2	0	
	2	0		3	0	
	3	0		4	0	
16	1	0,05890735	38	1	0	
17	1	0		2	0	
	2	0		3	0	
18	1	0,01770835		38	4	0
	2	0,01770835			5	0
	3	0,01770835				