

Calibração de Modelo Matemático de Qualidade da Água Utilizando Algoritmo Genético: Estudo de Caso do Rio Palmital, PR

Jonas Heitor Kondageski, Cristóvão Vicente Scapulatempo Fernandes

Universidade Federal do Paraná

jonasheitor@yahoo.com.br, cris.dhs@ufpr.br

Recebido: 08/08/07 – revisado: 05/06/08 – aceito: 02/03/09

RESUMO

A calibração de modelos matemáticos de qualidade da água tem por objetivo aperfeiçoar a representação da realidade física, química e biológica com uma consistente avaliação de parâmetros cinéticos de reações relativos à variável de qualidade da água em estudo. Esta atividade requer não apenas uma série de observações de campo e laboratoriais consistentes para o parâmetro em análise, mas muita experiência do modelador que, tradicionalmente, se utiliza de procedimentos de tentativa-erro para avaliar as constantes cinéticas e parâmetros necessários para se reproduzir dados de qualidade da água do rio sendo modelado. Este artigo compila os resultados do desenvolvimento de rotina computacional baseada na técnica de algoritmo genético – procedimento computacional de otimização que está baseado no princípio da seleção natural e evolução - para realizar a calibração de modelo de qualidade da água de Demanda Bioquímica de Oxigênio (DBO) e Oxigênio Dissolvido (OD) para o rio Palmital, que está localizado na bacia do Alto Iguaçu, na Região Metropolitana de Curitiba, considerando informações quali-quantitativas de apenas 1 (um) ponto de monitoramento. Os resultados obtidos, para distintos experimentos de calibração, permitem demonstrar o potencial da rotina computacional desenvolvida neste contexto de utilização de poucas informações de monitoramento de qualidade de água.

Palavras-chave: algoritmo genético, calibração, Modelo Matemático, Qualidade da Água.

INTRODUÇÃO

A perspectiva de utilização do algoritmo genético como ferramenta para a avaliação de parâmetros, de forma mais consistente e robusta, é a principal motivação para se aplicar esta técnica de otimização à calibração de modelos de qualidade de água em rios. Esta motivação se explica pela ausência de informações na literatura brasileira corrente de experiências com casos reais de modelagem matemática de qualidade da água de bacias hidrográficas com poucas informações de monitoramento quali-quantitativas.

Os princípios básicos do Algoritmo Genético (AG), utilizados para a resolução de problemas de busca e otimização, foram primeiramente enunciados por John Holland e popularizados por David Goldberg, como descrito em Lacerda e Carvalho (1999). Este método se baseia no processo genético e evolutivo das espécies.

Na natureza, indivíduos de uma população competem por recursos como alimentos, água e abrigo; também competem por um companheiro

para o acasalamento. Aqueles que possuem as melhores características para a sobrevivência, e para a atração do companheiro, provavelmente produzirão um maior número de descendentes. Indivíduos com características piores, por sua vez, produzirão poucos (ou mesmo nenhum) descendentes. Isto significa que os genes daqueles melhores adaptados ao meio se espalharão 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 para resolver problemas práticos de engenharia, como por exemplo, em recursos hídricos.

O presente artigo apresenta os resultados do desenvolvimento de rotinas computacionais de operadores genéticos para a calibração de modelo matemático de qualidade da água para Demanda Bioquímica de Oxigênio (DBO) e Oxigênio Dissolvido (OD), tendo como estudo de caso a Bacia do rio Palmital na Região Metropolitana de Curitiba. A implementação destas rotinas tem por objetivo a

automatização do processo de calibração com uma melhor estimativa de parâmetros, em especial, em bacias com poucos dados de monitoramento.

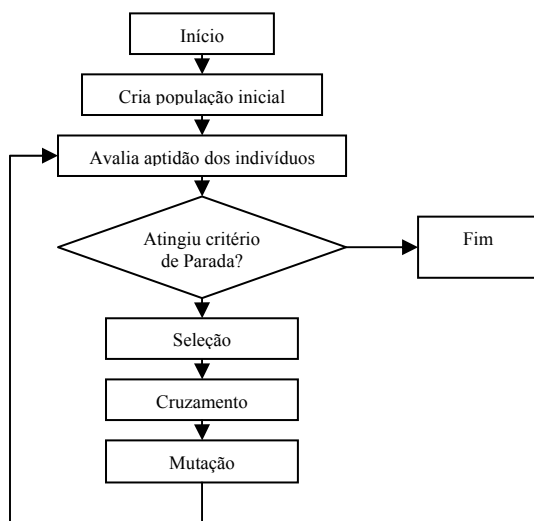


Figura 1 - Esquema de um Algoritmo Genético. (Fonte: Adaptado de Rodrigues, 2002).

PRINCÍPIOS BÁSICOS DE UM ALGORITMO GENÉTICO

A implementação de um algoritmo genético começa com a geração de uma população inicial, que é formada por um conjunto aleatório de cromossomos que representam possíveis soluções do problema a ser resolvido (Mulligan e Brown, 1998). Estes cromossomos, nesta pesquisa um vetor com os parâmetros de qualidade da água a serem estimados, são avaliados durante o processo evolutivo e recebem uma nota, reproduzindo a qualidade da solução que eles representam, relativamente aos valores monitorados de uma determinada variável de estado (concentração de variável de qualidade da água, nesta pesquisa, DBO e OD). Em geral, os mais aptos são selecionados, e os menos aptos são descartados. Aqueles selecionados podem sofrer modificações em suas características fundamentais através de operadores de "crossover" (cruzamento) e mutação, gerando descendentes para a próxima geração. Estes indivíduos gerados possuem algumas características herdadas dos cromossomos pais. Esta nova população de possíveis soluções produzida contém uma maior proporção das características dos melhores indivíduos da geração anterior. Desta forma, características ótimas são espalhadas por muitas ge-

rações 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 1 apresenta a configuração de um algoritmo genético típico e adotado para o desenvolvimento das rotinas computacionais desta pesquisa como detalhado em Kondageski e Fernandes (2005). Nesta referência, demonstram-se os aspectos computacionais de convergência e robustez das soluções de definição de parâmetros de qualidade da água para problemas com solução analítica conhecida.

APLICAÇÕES DE AG PARA PROBLEMAS EM RECURSOS HÍDRICOS

A revisão bibliográfica realizada identificou algumas aplicações gerais de algoritmo genético em Recursos Hídricos. Wang (1991) e Rauch e Herremoes (1999) calibraram um modelo de transformação chuva-vazão com resultados consistentes; Gupta *et al.* (1998) utilizaram o método para otimização de parâmetros hidráulicos de redes de distribuição de água; Wardlaw e Sharif (1999) propuseram um modelo para a otimização da operação de reservatórios; Cho *et al.* (2004), avançaram na área de planejamento de recursos hídricos com a solução de um problema de otimização para a localização de estações de tratamento de água. Para problemas em rios pode-se destacar o trabalho de Park *et al.* (2006) com o desenvolvimento de soluções para a localização de estações de monitoramento de qualidade da água. Adicionalmente os trabalhos de Mulligan e Brown (1998) e Perera e NG (2003) tiveram significativa influência nesta pesquisa. Em ambos os casos destacam-se esforços para a calibração de parâmetros de modelos qualidade da água para rios, com a utilização do *software* comercial GENESIS. Mais recentemente, Pelletier *et al.* (2006) incorporaram a rotina de algoritmo genético PIKAIA no modelo de qualidade da água QUAL2K (Chapra e Pelletier, 2003), dando origem a um novo modelo denominado QUAL2Kw, com a utilização do *software* EXCEL da Microsoft.

A diferença destas três últimas referências está nas características dos operadores e parâmetros genéticos utilizados. No entanto, a leitura destas referências não permite uma reprodução trivial de resultados pelo fato dos códigos fonte não estarem

disponíveis. Nesta pesquisa, optou-se por desenvolver as rotinas computacionais em linguagem FORTRAN e que estão descritas em Kondageski (2008).

O Modelo de Qualidade da Água

O modelo de qualidade da água escolhido descreve a combinação de efeitos físicos e de reação de 1ª ordem para a DBO e OD (representado em termos de déficit de oxigênio dissolvido relativamente à condição de saturação) considerando escoamento permanente e unidimensional, conforme representado pelas equações (1) e (2) ao longo do comprimento x (km) de um rio (Chapra, 1997).

$$L(x) = L_0 e^{-\frac{(k_d+k_s)x}{\bar{u}}} \quad (1)$$

onde: L representa a concentração de DBO em uma posição qualquer (mg/L); L₀ a concentração inicial de DBO (mg/L); k_d o coeficiente de desoxigenação (dia⁻¹); k_s a taxa de remoção de DBO por sedimentação (dia⁻¹); \bar{u} - velocidade média na seção de monitoramento (m/dia).

$$D(x) = D_0 e^{-\frac{k_a x}{\bar{u}}} + \left[1 - e^{-\frac{k_a x}{\bar{u}}} \right] \frac{S_b}{hk_a} + \frac{L_0 k_d}{k_a - k_r} \left[e^{-\frac{k_r x}{\bar{u}}} - e^{-\frac{k_a x}{\bar{u}}} \right] \quad (2)$$

onde: D representa o déficit de oxigênio dissolvido (mg/L), ou seja, a concentração de saturação menos a concentração de oxigênio dissolvido (OD); D₀ o déficit inicial de oxigênio (mg/L); k_a a taxa de reaeração (dia⁻¹); S_b a demanda de oxigênio pelo sedimento (SOD) (g/m².dia); e h a profundidade do rio (m).

A estratégia de se utilizar o modelo de qualidade da água de Streeter-Phelps reflete a opção de se concentrar na avaliação das condições de consistência e robustez das soluções de otimização, resultado das rotinas de AG desenvolvidas, para os parâmetros cinéticos indicados anteriormente. Cabe salientar que estas peculiaridades de consistência e robustez foram confirmadas por Kondageski e Fernandes (2005), para problemas de qualidade da água com soluções analíticas conhecidas. Nesta pesquisa explorou-se a definição dos parâmetros k_d e k_a, utilizando as rotinas computacionais de AG conforme metodologia a ser apresentada na seqüência. Cumpre destacar que, foram utilizados va-

lores fixos para k_s e S_b, para se ganhar maior sensibilidade com a estimativa de parâmetros. Tradicionalmente, os valores k_s e S_b requerem uma avaliação laboratorial mais detalhada (Chapra, 1997) ainda não disponível com a estrutura atual de pesquisa existente na UFPR.

Estudo de Caso do Rio Palmital

A bacia hidrográfica do rio Palmital está inserida na bacia do Alto Iguaçu, na Região Metropolitana de Curitiba, conforme apresentado na Figura 2. Este afluente do rio Iguaçu possui uma área de aproximadamente 95 km², com 21 km de extensão. Do ponto de vista da estruturação computacional o rio está dividido em 6 trechos onde as características em termos de seção transversal, declividade e rugosidade do canal podem ser consideradas homogêneas, conforme Porto *et al.* (2007). Adicionalmente, a matriz de fontes de poluição que identifica e quantifica pontos de lançamentos pontuais de esgotos, retiradas de água e cargas difusas são as mesmas definidas em Porto *et al.* (2007). Neste estudo a discretização espacial proposta é de 1 km, para melhor representar o sistema de informações e o perfil de poluição do rio.

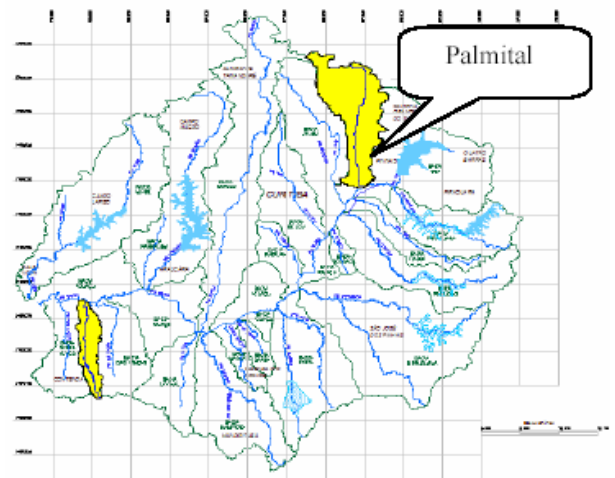


Figura 2 - Bacia do rio Palmital. (Fonte: Przybysz, 2007)

Cabe destacar que, sendo esta a 1ª experiência de aplicação de rotinas de AG para um rio com poucos dados de monitoramento, como a bacia do rio Palmital, atenção foi dada às condições de definição da função aptidão e para avaliação do coeficiente de reaeração possível de ser avaliado com dados existentes, a serem descritos na seqüência.

Dados de Monitoramento e Função aptidão

Para a calibração do modelo define-se uma função objetivo (f), ou função aptidão na linguagem dos algoritmos genéticos, que é uma combinação entre os erros médios quadráticos referentes às concentrações de DBO e OD entre os valores medidos e calculados pelo modelo, conforme indicado na equação 3, a seguir:

$$f = \sum_{i=1}^n \left(w(i) [\hat{C}(i) - C(i)]^2 + [1 - w(i)] [\hat{L}(i) - L(i)]^2 \right) \quad (3)$$

onde: $\hat{C}(i)$ a concentração medida de OD; $C(i)$ a concentração calculada de OD; $w(i)$ o peso relativo da concentração de OD na função aptidão; $\hat{L}(i)$ representa a concentração medida de DBO; $L(i)$ a concentração calculada de DBO; e n o número de estações de monitoramento no rio em análise. No rio Palmital só existe uma estação de monitoramento, ou seja, n é igual a 1 para o presente estudo.

A aptidão do indivíduo é tanto melhor quanto mais próximo de zero for o valor de f na equação (3). Com este enfoque então, as rotinas de AG são empregadas para encontrar o ponto de mínimo desta função.

Cabe adicionar que as características hidrológicas do rio Palmital são monitoradas através da estação SUDERHSA – Vargem Grande, localizada a 1 km da foz com o rio Iguaçu, com uma série histórica de vazões consistidas no período 1960-2005. Para este estudo optou-se por definir a condição de calibração correspondente a uma vazão de estiagem de 95% calculadas em acordo com Porto *et al.* (2007). Os parâmetros de qualidade da água equivalente a este cenário, foram obtidos com base na série histórica anual de qualidade da água (1995-2005) existente para esta bacia. Mesmo com esta inconsistência de informações quali-quantitativas, Porto *et al.* (2007) propõem um modelo de regionalização de parâmetros de qualidade da água baseado em análise de curva de permanência de vazão versus parâmetro de qualidade da água que produziu os seguintes dados para a calibração de todo o rio Palmital.

Tabela 1 – Valores medidos no Ponto de Controle

L (mg/L)	160
OD (mg/L)	1,5
$Q_{95\%}$ (m^3s^{-1})	0,4
Saturação de OD	18

Os valores de concentração de matéria orgânica (L) e de oxigênio dissolvido (OD), apresentados na Tabela 1, foram definidos como dados de entrada do modelo, juntamente com a concentração de saturação de oxigênio, equivalente a uma concentração de 8,33 mg/L.

Ao longo do rio ocorrem lançamentos de cargas de matéria orgânica, conforme Porto *et al.* (2007), destacando-se: Km 11 do início do rio (vazão de esgoto de 57 L/s com concentração de DBO igual a 337.5 mg/L); Km 12 (vazão de esgoto de 48 L/s com concentração de DBO igual a 94.5 mg/L); Km 13 e 14 (vazão de esgoto de 38 L/s com concentração de DBO igual a 337.5 mg/L); entre outros de menor magnitude.

Coefficiente de Reaeração

As condições de reaeração são fundamentalmente dependentes das condições hidráulicas da seção transversal em especial da velocidade média e da profundidade. Uma forma de se avaliar as taxas de reaeração (k_a) é utilizando a fórmula empírica de Churchill (Chapra, 1997) e apresentada na equação 4, a seguir.

$$k_a(20) = 5.026 \frac{\bar{u}}{H^{1.67}} \quad (4)$$

onde \bar{u} é a velocidade média (m/s); H é a profundidade média (m). Em cada elemento computacional do domínio de cálculo é adicionada uma vazão incremental à vazão total do rio. Desta forma, a cada elemento computacional a vazão do rio aumenta, e por isso o nível de água e a velocidade média também variam, ou seja, a taxa de reaeração calculada pela equação 4 é diferente para cada elemento computacional que constitui o rio.

Na análise dos coeficientes de reaeração baseado em informações da curva de descarga da estação Vargem Grande, descritas em Kondageski (2008) permitiu a definição de valores médios para cada um dos trechos definidos, conforme a Tabela 2 a seguir.

Outros parâmetros de entrada empregados nas simulações foram a demanda de oxigênio pelo sedimento (S_b), e a taxa de remoção de matéria orgânica relacionada ao efeito de sedimentação (k_s). Os valores utilizados para estes parâmetros foram mantidos constantes em todo o rio, sendo igual a 0,8 dia⁻¹ para k_s , e 1,5 g/m².dia⁻¹ para S_b (Chapra, 1997).

Tabela 3 – Parâmetros estatísticos dos k_d 's- cenário 1

	MÉDIA	MEDIANA	MÍN	MÁX	DP
k_{d1}	0,565	0,287	-3,588	4,968	1,963
k_{d2}	0,611	0,462	-4,584	4,990	2,359
k_{d3}	0,514	0,385	-4,131	4,992	1,804
k_{d4}	0,460	0,311	-3,769	4,982	2,019
k_{d5}	0,522	0,463	-0,351	2,527	0,485
k_{d6}	0,299	0,287	0,283	0,311	0,008

Tabela 4 – Parâmetros estatísticos dos k_d 's- cenário 2

	MÉDIA	MEDIANA	MÍN	MÁX	DP
k_{d1}	1,120	0,883	-4,175	4,988	2,129
k_{d2}	0,602	0,347	-4,461	4,994	2,310
k_{d3}	0,892	0,700	-4,761	4,998	2,006
k_{d4}	0,696	0,365	-3,338	4,997	2,011
k_{d5}	0,440	0,443	-0,312	2,414	0,436
k_{d6}	0,298	0,883	0,289	0,306	0,005

Tabela 5 – Parâmetros estatísticos dos k_d 's- cenário 3

	MÉDIA	MEDIAN	MÍN	MÁX	DP
k_{d1}	0,550	0,316	-4,229	4,984	2,040
k_{d2}	0,337	0,195	-4,566	4,986	2,173
k_{d3}	0,534	0,334	-3,618	4,995	1,812
k_{d4}	0,398	0,190	-4,849	4,988	1,960
k_{d5}	0,529	0,469	-0,301	2,907	0,452
k_{d6}	0,298	0,316	0,290	0,304	0,003

Tabela 6 – Parâmetros estatísticos dos k_d 's- cenário 4

	MÉDIA	MEDIAN	MÍN	MÁX	DP
k_{d1}	0,600	0,334	-3,417	4,978	2,078
k_{d2}	0,683	0,430	-4,728	4,973	2,154
k_{d3}	0,568	0,252	-4,067	4,997	1,888
k_{d4}	0,483	0,441	-3,736	4,994	1,942
k_{d5}	0,512	0,489	-0,290	2,489	0,440
k_{d6}	0,298	0,334	0,291	0,304	0,003

Tabela 7 – Parâmetros estatísticos dos k_d 's- cenário 5

	MÉDIA	MEDIAN	MÍN	MÁX	DP
k_{d1}	0,107	0,058	-4,136	4,722	1,611
k_{d2}	0,082	0,049	-4,316	4,915	1,653
k_{d3}	0,081	0,007	-3,711	4,960	1,572
k_{d4}	0,092	0,034	-4,774	4,910	1,722
k_{d5}	0,606	0,606	-0,273	2,162	0,351
k_{d6}	0,298	0,058	0,291	0,303	0,002

Observa-se, nestes 5 cenários de calibração, uma dispersão significativa dos valores de k_d para aqueles trechos que não tinham informação de parâmetros de qualidade da água. No caso do trecho 6, onde está localizado o ponto de monitoramento, esta dispersão não existe. Observa-se que a dispersão dos parâmetros k_d não variou significativamente entre os cenários de calibração, ou seja, não se identificou influência significativa do peso w da equação (3) na resposta da função de aptidão.

Percebe-se, também, que no cenário 5, onde o peso da concentração de OD na calibração é igual a 90%, a mediana dos k_d 's para os 4 primeiros trechos foi aproximadamente igual a zero. Além disso, os valores da média dos k_d 's calculados para os 4 primeiros trechos do rio apresentam diferenças entre os 5 cenários analisados. Por outro lado, os valores médios dos k_d 's para o quinto e sexto trechos do rio apresentam grande semelhança entre os 5 primeiros cenários.

Adicionalmente, um resultado interessante, é relativo ao número de gerações necessário para a convergência do modelo de AG para os cenários 1 a 5 em destaque e visualizados através da curva de permanência apresentada na Figura 3.

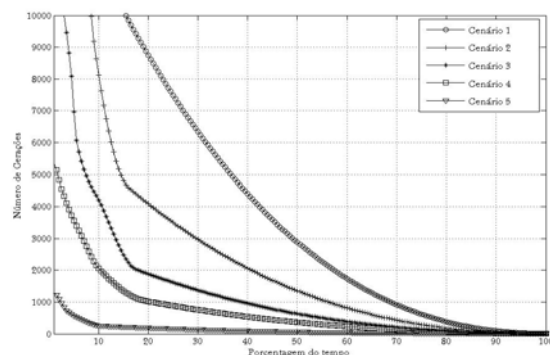


Figura 3 - Curva de permanência da distribuição do número de gerações para os cenários 1 a 5.

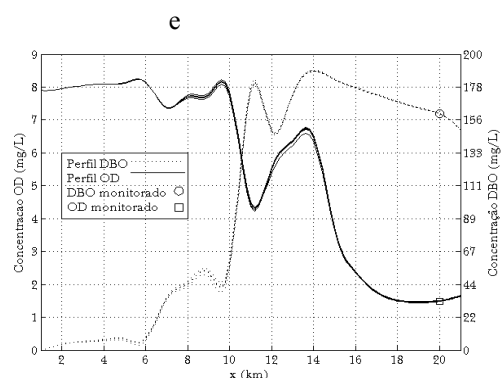


Figura 4 – Perfil de DBO e OD para os cenários 1 a 5.

Tabela 2 - Coeficientes de reaeração calculados.

TRECHO	ELEMENTO COMPUTACIONAL	k_A	
		CHURCHILL	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	

CONSTRUÇÃO DOS CENÁRIOS DE CALIBRAÇÃO

Foram estabelecidos 3 grupos de cenários de calibração dos parâmetros de qualidade da água conforme indicado nas equações (1) e (2) e apresentado a seguir.

O **Grupo I** compreende a construção de 5 cenários de calibração (cenário 1 a 5), onde se explorou a avaliação das taxas de degradação da matéria orgânica (k_d) para os 6 trechos do rio Palmital, com o objetivo de se verificar o quanto as soluções podem ser robustas controlando-se os demais parâmetros de influenciam processos de degradação de matéria orgânica. Ou seja, 6 valores de k_d devem ser estimados neste processo de calibração, sendo 1 para cada trecho do rio em análise. Os valores de k_a adotados são aqueles definidos na Tabela 2; os valores de k_s e S_b respectivamente iguais a $0,8 \text{ dia}^{-1}$ e $1,5 \text{ g/m}^2.\text{dia}^{-1}$. Adicionalmente, avaliou-se a influência do peso relativo da concentração de OD (w) na função objetivo (equação 3). Assim, para os cenários 1 a 5 foram utilizados valores de w igual a 0,1, 0,3, 0,5, 0,7 e 0,9, respectivamente.

No **Grupo I** foram realizadas 200 simulações para cada cenário, que possibilitassem uma aborda-

gem estatística consistente. Além disso, o espaço de busca adotado foi: $-5,0 \text{ dia}^{-1} < k_d < 5,0 \text{ dia}^{-1}$; o critério de parada adotado respeitou o valor da função objetivo (aptidão) menor ou igual a 0,005; a probabilidade de mutação adotada foi de 7%, em acordo com análise de sensibilidade descrita em Kondageski (2008).

Uma peculiaridade interessante se deve ao fato de haver apenas um ponto de monitoramento que representa todo o rio, em termos de resposta física e química. Devido ao número de parâmetros a serem estimados, não existe solução única para este problema de calibração, ou seja, várias combinações de k_d para os diferentes trechos do rio produziram resultados de calibração consistentes.

O **Grupo II**, por sua vez, compreende a construção de 5 cenários (cenários 6 a 10), assumindo que ao longo de todo o percurso do rio existem características semelhantes no processo de degradação de matéria orgânica. Ou seja, o parâmetro k_d é o mesmo para todo o rio. Os valores de k_a , k_s e S_b são os mesmos adotados para o **Grupo I**. Adicionalmente, assim como no grupo I, os cenários 6 a 10 diferenciam-se em relação ao peso relativo da concentração de OD na função objetivo. O espaço de busca e o critério de parada foram os mesmos adotados para o grupo I.

O **Grupo III** compreende 2 cenários individuais, denominados cenários 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 um valor de w igual 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 trechos do rio e os valores de k_s e S_b foram os mesmos adotados para o Grupo I. Complementarmente foram executadas 200 simulações do algoritmo genético para cada cenário do **Grupo III**. O critério de parada foi o mesmo adotado no **Grupo I**.

RESULTADOS E ANÁLISES

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

Grupo I

As Tabelas 3 a 7 apresentam as principais características estatísticas dos parâmetros do modelo e qualidade da água.

Observa-se que para maiores valores de w (peso de OD) da função aptidão o algoritmo genético convergiu mais rapidamente. Por exemplo, pode ser observado que para o cenário 1, em aproximadamente 60% das simulações são necessárias 2.000 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 2.000 gerações.

Em termos de resposta do perfil de DBO e OD para os valores das medianas de k_d 's calculados em acordo com a metodologia desenvolvida e aplicada nas equações 1 e 2, obtém-se para o rio Palmital os resultados indicados na Figura 4.

Observa-se que os perfis de DBO e OD para os 5 cenários em análise são praticamente iguais, apesar das diferentes combinações de k_d 's (valor mediano) para cada trecho do rio Palmital. Cabe destacar a relevância deste resultado, considerando que a informação de monitoramento está apenas no trecho 6 (km 20). A descrição do perfil de qualidade da água a montante deste ponto retrata não somente os parâmetros de qualidade da água definidos pelo modelo, mas também os efeitos do impacto da matriz de fontes de poluição e efeitos de advecção como era de se esperar. Os resultados das simulações de DBO e OD para os cenários indicados reproduzem as mesmas curvas obtidas por Porto et al (2007) utilizando o modelo QUAL2E.

Novamente, além dos parâmetros de qualidade da água calculados, os perfis retratam os efeitos de advecção e das características da matriz de fontes de poluição adotada, muito próximas dos resultados obtidas por Porto et al (2007) utilizando o modelo QUAL2E.

Tabela 8 - Resultados da calibração: cenários 6 a 10.

	w	k_d (dia ⁻¹)	f	NG
Cenário 6	0,1	0,3158	0,02	10
Cenário 7	0,3	0,3132	0,04	12
Cenário 8	0,5	0,3126	0,06	10
Cenário 9	0,7	0,3114	0,07	9
Cenário	0,9	0,3065	0,06	8

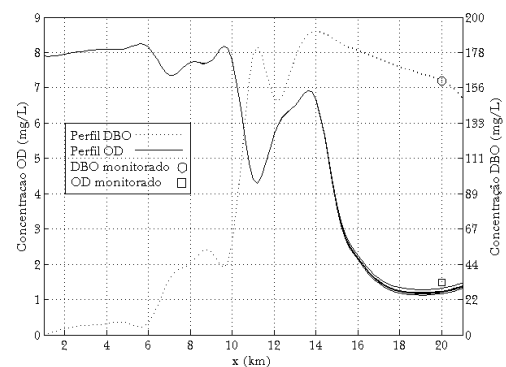


Figura 5 - Perfil de DBO e OD para os cenários 6 a 10.

Grupo II

Os resultados a seguir destacam a identificação de apenas 1 valor da taxa de degradação de matéria orgânica (k_d) para todo o rio, conforme destacados na Tabela 8 para os cenários 6 a 10.

Os resultados indicam que os valores de k_d são praticamente os mesmos para os diversos cenários de peso (w) da função aptidão. Da mesma forma, não existe considerável diferença em relação ao número de gerações (coluna NG da Tabela 8) 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 vetor de otimização ter apenas um elemento ao invés de 6 do grupo I.

Os resultados em termos de perfil de DBO e OD ao longo do rio para os cenários 6 a 10 estão indicados na Figura 5, a seguir.

Observa-se que os perfis de DBO e OD para os cenários 6 a 10 ficaram muito próximos entre si.

Complementarmente, cabe destacar a comparação dos perfis de DBO e OD entre os cenários relativos ao grupo I e II, para os mesmos valores de w da função de aptidão. Os resultados compilados nas Figuras 6 a 10 destacam as diferenças de concentração ao longo do rio Palmital.

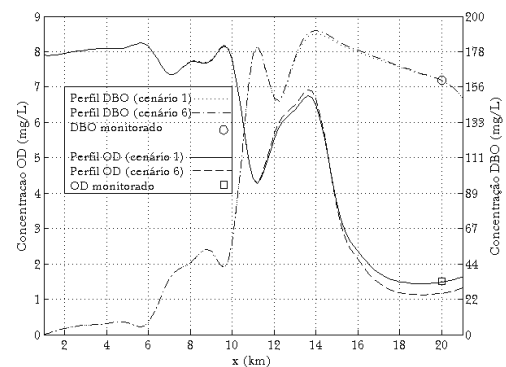


Figura 6 - Comparação do perfil de DBO OD entre os cenário 1 e 6.

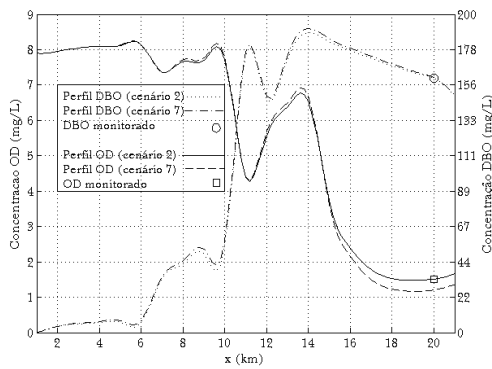


Figura 7 - Comparação do perfil de DBO e OD entre os cenários 2 e 7.

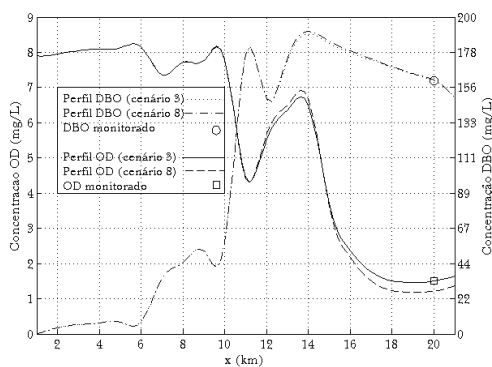


Figura 8 - Comparação do perfil de DBO e OD entre os cenários 3 e 8.

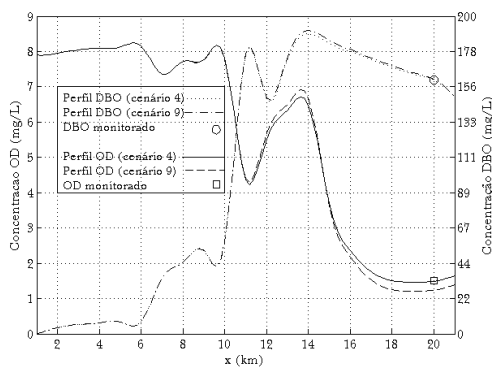


Figura 9 - Comparação do perfil de DBO e OD entre os cenários 4 e 9.

Comparando o perfil de DBO para os grupos I (cenários 1 a 5) e II (cenários 6 a 10), não se observam diferenças significativas entre as curvas. Em relação ao perfil de OD, as curvas coincidiram

razoavelmente bem para a primeira metade do rio Palmital (trecho 0-10 km); porém no trecho 16-21 km observou-se uma diferença significativa. 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. Isto demonstra a importância, no caso de OD, da necessidade de otimização ao longo de trechos do rio Palmital para produzir um melhor ajuste.

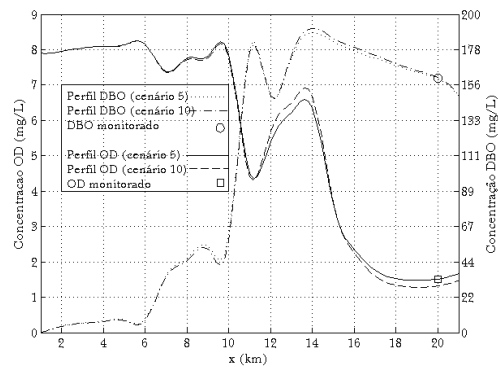


Figura 10 - Comparação do perfil de DBO e OD entre os cenários 5 e 10.

O que é relevante nesta análise é o fato da opção de se considerar o rio Palmital com um único trecho, isto é, as propriedades físicas, químicas e biológicas em termos de quantidade e qualidade da água, homogêneas ao longo de toda sua extensão, não terem produzido diferenças significativas no perfil de DBO. Para o perfil de OD a diferença existente diminui com o peso w de OD da função aptidão. Claramente, em situações com poucas informações ao longo de um rio, isto é uma vantagem significativa em termos de calibração de modelos de qualidade da água. Cabe destacar, para efeito de validação, que a simulação de qualidade da água com os coeficientes K_d aqui obtidos utilizando o modelo QUAL2E (Chapra, 1997) reproduzem as curvas das figuras 6 a 10, conforme apresentado em Porto et al (2007).

Grupo III

A Tabela 9 apresenta os resultados de calibração para o cenário 11 ($w=0,5$), aquele em que o espaço de busca é mais reduzido relativamente aos cenários do Grupo I.

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 ce-

nários 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 mais amplo do que o espaço de busca para o cenário 11 ($0.0 < k_d < 3.0$).

A Figura 11 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.

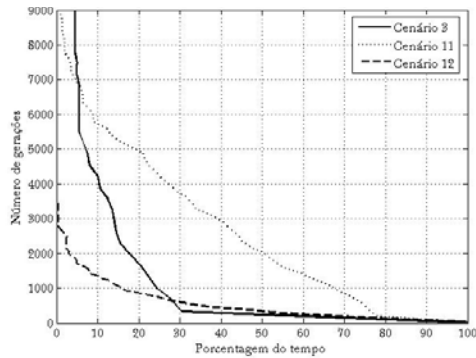


Figura 11 - Curva de permanência da distribuição do número de gerações para os cenários 3 e 11.

Percebe-se que para os cenários 3 e 11 são necessárias, em 80% das simulações, mais de 100 gerações para se atingir a convergência. Além disso, em 70% das simulações o algoritmo converge com 300 simulações ou menos para cenário 3, e 3800 gerações ou menos para o 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 necessário um número maior de gerações computacionais.

Finalmente, o cenário 12, aquele em que o modelo calcula os valores de k_d e k_a , destaca a situação onde se define os resultados para todo o rio baseado apenas nas condições de monitoramento quali-quantitativo e de seus trechos. As Tabelas 10 e 11 compilam estes resultados.

Observa-se que, como no caso anterior, a dispersão dos k_d 's calculados diminuiu em relação ao cenário 3 do Grupo I. Além disso, no último trecho, aquele que continha o único ponto de monitoramento, os valores calculados dos parâmetros se apresentaram fortemente concentrados em torno de um único valor.

Tabela 9 – Resultados de calibração para o cenário 11.

	MÉDIA	MEDIAN	MÍN	MÁX	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

Tabela 10 - Valores calibrados de k_d para o cenário 12.

	MÉDIA	MEDIAN	MÍN	MÁX	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 11 - Valores calibrados de k_a para o cenário 12.

	MÉDIA	MEDIAN	MÍN	MÁX	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 11 destaca 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. De forma geral a convergência do AG para o cenário 12 é mais rápida que para os cenários 3 e 11, ainda que o número de parâmetros do modelo de qualidade de água que devem ser calibrados nestes cenários seja 2 vezes menor do que o número de parâmetros para o 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 de variáveis, facilitando portanto a convergência.

A Figura 12 apresenta os 200 perfis de DBO e OD para o cenário 12.

CONCLUSÕES E DISCUSSÕES

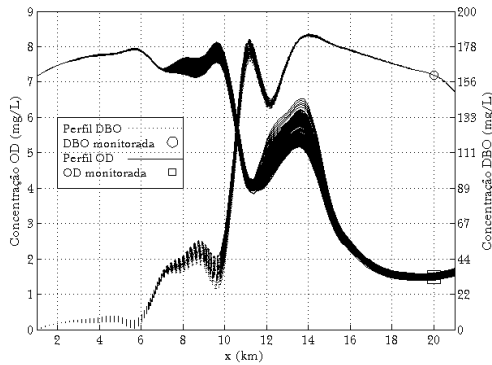


Figura 12 – Perfis de DBO e OD para as 200 simulações do cenário 12.

A mediana dos parâmetros (k_d e k_2) inseridos nas equações 1 e 2 produziram os resultados compilados na Figura 13 para os perfis de DBO e OD. Nesta figura os resultados são comparados com os do cenário 3 do Grupo I.

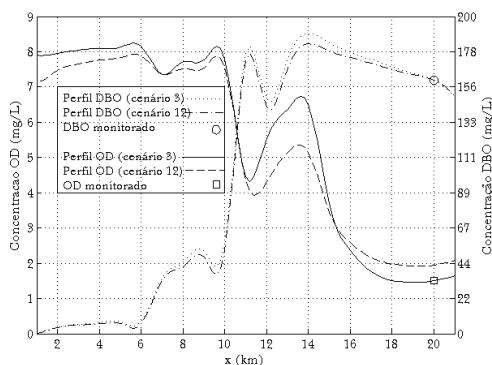


Figura 13 – Comparação dos perfis de DBO e OD entre os cenários 3 e 12.

Estas figuras 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 é exatamente igual ao valor monitorado naquele ponto. Em relação ao perfil de OD, o cenário 12 apresenta um valor de aproximadamente 2 mg/L no km 20 do rio, enquanto que o cenário 3 a concentração neste ponto coincide com a monitorada. No caso de OD a busca de solução para mais parâmetros no cenário 12, relativamente ao cenário 3, não indicou uma convergência da função aptidão com os dados de monitoramento.

Esta pesquisa explora a aplicação de um procedimento computacional para calibração de modelo de qualidade da água baseado na técnica de algoritmo genético e desenvolvido por Kondageski e Fernandes (2005). A principal contribuição deste artigo é generalização das aplicações realizadas para casos com soluções analíticas conhecidas, como apresentado em Kondageski (2008), para um estudo de caso real e com poucas informações quali-quantitativas disponíveis.

Para tanto foram realizados distintos cenários de calibração (grupos I, II e III), que permitiram explorar a capacidade das rotinas desenvolvidas em resolver um problema de otimização (minimização da função aptidão) baseado na comparação com resultados de monitoramento disponível. Pode-se concluir que: O método desenvolvido é consistente e as soluções são convergentes quer na análise por diferentes trechos de rio quer supondo o rio homogêneo em termos de propriedades físicas, químicas e biológicas; nos Grupos de calibração onde haviam várias constantes de qualidade de água a serem calibradas (I e III) o modelo identificou um conjunto de soluções que satisfizeram o problema de otimização e cujos valores medianos reproduziram sempre o mesmo perfil de concentrações de DBO e OD, que reproduziam o único ponto com dados de monitoramento. Neste trabalho também foram testados diferentes pesos relativos de DBO e OD na função objetivo de aptidão, que se mostraram pouco sensíveis sobre os resultados do processo de calibração.

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 quali-quantitativo. Este resultado é bastante expressivo, pois é uma alternativa consistente e objetiva para o tradicional esquema de calibração de modelos de qualidade da água.

No entanto cabe destacar que este procedimento de calibração proposto representa nada mais do que um eficiente processo de ajuste dos parâmetros do modelo. Assim, podem-se obter parâmetros que apesar de realizarem este ajuste não apresentam sentido físico, químico e biológico. Eventualmente estão fora de um limite aceitável. O que esta observação suscita é a premente necessidade de se estudar o impacto dos parâmetros do modelo sob olhar mais severo da sua realidade física, química e biológica de tal sorte a se poder aprimorar a definição do espaço de busca das soluções para o problema de otimização, como, por exemplo, a

inclusão de mais informações de monitoramento e a comparação com dados estimados em laboratório.

REFERÊNCIAS

- CHAPRA, S. C. (1997) *Surface Water Quality Modeling*, McGraw-Hill, Boston.
- CHAPRA, S. C.; PELLETIER, G. (2003) *QUAL2K: a modeling framework for simulating river and stream water quality*, Documentation and Users manual. Civil and Environmental Engineering Dept., Tufts University, Medford, MA.
- CHO, J. H.; SUNG, K. S.; HA, S. R. (2004). A river water quality management model for optimizing regional wastewater treatment using a genetic algorithm, *Journal of Environmental Management*, v. 20, 1-14.
- GUPTA, I.; GUPTA, A.; KHANNA, P. (1998). Genetic algorithm for optimization of water distribution systems. *Environmental Modeling & Software*, v. 14, n. 5, 437-446.
- KONDAGESKI, J. H. (2008). Calibração de modelo de qualidade da água para rio utilizando algoritmo genético. *Dissertação de Mestrado*, UFPR, Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Recursos Hídricos e Ambiental, Curitiba, Brasil.
- KONDAGESKI, J. H.; FERNANDES, C. V. S. (2005). Calibração da Equação de Streeter – Phelps Através do Método do Algoritmo Genético: Um Estudo de Caso Hipotético. In: SIMPÓSIO BRASILEIRO DE RECURSOS HÍDRICOS, 16, João Pessoa.
- LACERDA, E.G.M.; CARVALHO, A.C.P.L. (1999). *Introdução aos algoritmos genéticos*. In: Galvão, C. O., Valença, M. J. S. (orgs.) *Sistemas inteligentes: aplicações a recursos hídricos e ciências ambientais*. Porto Alegre: Ed. Universidade/UFRGS : Associação Brasileira de Recursos Hídricos. pp. 99-150. (Coleção ABRH de Recursos Hídricos; 7.).
- MULLIGAN, A. E.; BROWN, L. C. (1998). Genetic Algorithms for Calibrating Water Quality Models, *ASCE Journal of Environmental Engineering*, 124 (3), 202-211.
- PARK, S. Y.; CHOI, J. H.; WANG, S.; Park, S. S. (2006). Design of a water quality monitoring network in a large river system using the genetic algorithm, *Ecological Modelling*, v. 199, n. 3, 289-297.
- PELLETIER, G. J.; CHAPRA, S. C.; TAO, H. (2006). QUAL2Kw – A framework for modeling water quality in streams and rivers using genetic algorithm for calibration, *Environmental Modeling & Software*, 21, 419-425.
- PERERA, B. J. C.; NG A. W. M. (2003). Selection of genetic algorithm operators for river water quality model calibration, *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, v. 16, 529-541.
- PORTO, M. F. A.; FERNANDES, C. V. S.; FRANÇA, M. S.; KNAPIK, H. G.; KONDAGESKI, J. H.; CHELLA, M.; SÁ, J. F.; MANSINI, L.; BRITES, A. P. (2007) *Bacias Críticas: Bases técnicas para a definição de metas progressivas para seu enquadramento*. Relatório Final. 820 p. (FINEP\CT-HIDRO), 2007.
- PRZYBYSZ, L., C. B. (2007). A Gestão de Recursos Hídricos sob ótica do Usuário - Estudo de Caso da Bacia do Alto Iguaçu. *Dissertação de Mestrado*, UFPR, Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Recursos Hídricos e Ambiental, Curitiba, Brasil.
- RAUCH, W.; HERREMOËS, P. (1999). On the potential of genetic algorithms in urban drainage modeling. *Urban Water*, 1, 79-89.
- RODRIGUES, E. L. M. (2002). Evolução de Funções em Programação Genética Orientada a Gramáticas. *Dissertação de Mestrado*, UFPR, Programa de Pós-Graduação em Informática, Curitiba, Brasil.
- WANG, Q. J. (1997). Using genetic algorithms to optimize model parameters. *Environmental Modeling & Software*, v. 12, n. 1, 27-34.
- WARDLAW, R.; SHARIF, M. (1999). Evaluation of genetic algorithms for optimal reservoir system operation. *Journal of Water Resources Planning and Management*, v. 125, n. 1, 25-33.

Calibration of the Mathematical Water Quality Model Using a Genetic Algorithm: Case Study of Palmital River, Paraná.

ABSTRACT

Water quality modeling is an activity required to improve the representation of the physical, chemical and biological reality of a river system. It requires field data and experienced modelers. This research generalizes the use of a genetic algorithm for BOD and DO calibration for the Palmital river in the metropolitan area of Curitiba, given only one monitoring gauge station. Distinct scenarios were performed to evaluate the GA response for distinct calibration conditions. The results are promising and reproduce field data observations.

Keywords: genetic algorithm, calibration, Mathematical Model, Water Quality.