

DESEMPENHO DE ALGORITMOS EVOLUCIONÁRIOS NA CALIBRAÇÃO DE MODELO DE QUALIDADE DA ÁGUA

Joaquin I. Bonnacarrere Garcia¹, André Schardong² & Rubem La Laina Porto³

RESUMO --- Tendo em vista a importância de utilização dos modelos matemáticos de qualidade da água no processo de gestão de recursos hídricos, observa-se a necessidade da adoção de coeficientes adequados para a calibração destes modelos, para que os fenômenos ocorridos nos corpos de água sejam representados de forma realista. A calibração de um modelo matemático é um processo árduo e dependendo da complexidade da bacia hidrográfica o mesmo pode tornar-se de difícil obtenção manual. Para auxiliar nesse processo os algoritmos de otimização vêm sendo utilizados satisfatoriamente. Este artigo teve como objetivo avaliar o desempenho dos Algoritmos Genéticos (AG) e do Particle Swarm Optimization (PSO) na calibração automática dos coeficientes ka , kd e ks para a simulação dos parâmetros de qualidade da água oxigênio dissolvido (OD) e demanda bioquímica de oxigênio (DBO). Os estudos de caso mostraram que os algoritmos AG e PSO obtiveram bons resultados. O PSO apresentou maior dispersão dos coeficientes otimizados quando comparados com os valores obtidos pelo AG. Este trabalho destacou a necessidade de continuidade de estudos para uma melhor avaliação do comportamento dos coeficientes, em virtude das dispersões observadas, e analisar a possibilidade de aplicar penalidades na função objetivo visando minimizar estas dispersões.

ABSTRACT --- The use of mathematical models of water quality is a very important technique in the water quality management. Therefore, it is necessary to adopt of appropriate coefficients for calibrating of these models. It produces a realistic representation about the process that occurs in bodies of water. The calibration of mathematical models is a hard process and it can become difficult to find the right answer. Optimization algorithms have been used to assist this process with satisfactory results. This paper aims to assess the performance of the Genetic Algorithm (GA) and Particle Swarm Optimization (PSO) in the automatic calibration of the coefficients ka , kd and ks for the simulation of water quality parameters. Case studies showed that GA and PSO algorithms have been successful in simulations performed. The PSO showed higher dispersion for optimized coefficients, when it was compared with GA. This paper made some recommendations for future researches. It includes a study about the behavior of BOD and DO coefficients, and also about the possibility to apply penalties in the objective function in order to minimize the dispersion of coefficients.

Palavras-chave: Algoritmo evolucionário, calibração, modelo de qualidade da água.

1 Doutorando da EPUSP, Departamento de Engenharia Hidráulica e Sanitária. Av. Prof. Almeida Prado, 83 trav. 2, Cidade Universitária, Cep 05508-900, São Paulo/SP. E-mail: joaquinbonne@gmail.com

2 Doutorando da EPUSP, Departamento de Engenharia Hidráulica e Sanitária. E-mail: andreschardong@gmail.com

3 Professor Titular da EPUSP, Departamento de Engenharia Hidráulica e Sanitária. E-mail: rlporto@usp.br

1. INTRODUÇÃO

Os modelos de qualidade d'água são cada vez mais utilizados na gestão de recursos hídricos em estudos de alocação de efluentes, impactos ambientais entre outros. Após a implementação da modelagem da qualidade em uma bacia hidrográfica, é possível avaliar o perfil do parâmetro analisado e verificar o impacto de diferentes cenários de uso.

Dentro do processo de modelagem matemática da qualidade da água a calibração do modelo representa uma importante etapa, a qual será responsável pela obtenção de bons resultados.

A calibração é o processo onde os valores dos parâmetros do modelo são identificados de maneira que forneçam o melhor ajuste entre as concentrações simuladas e as observadas. Uma vez estabelecidos, estes parâmetros possibilitam analisar cenários de carga distintos e desta forma avaliar os possíveis impactos gerados em função de modificações na bacia hidrográfica.

A calibração é um processo árduo, pois o ajuste dos parâmetros é um processo iterativo onde existem diversas soluções possíveis. Em bacias complexas, com grande número de trechos de rio a serem calibrados, o número de parâmetros torna-se elevado, dificultando ou até mesmo impossibilitando a calibração manual. Para auxiliar nesse árduo processo os algoritmos de otimização vêm sendo utilizados de forma satisfatória.

Tendo em vista esta importante etapa na modelagem matemática, este trabalho tem como objetivo avaliar o comportamento e o desempenho dos Algoritmos Genéticos (AG) e do Particle Swarm Optimization (PSO) na calibração automática dos coeficientes de reaeração (k_a), decomposição da matéria orgânica (k_d) e de remoção de matéria orgânica devido ao efeito da sedimentação (k_s) para a simulação dos parâmetros de qualidade da água oxigênio dissolvido (OD) e demanda bioquímica de oxigênio (DBO).

2. ALGORITMOS EVOLUCIONÁRIOS

Os algoritmos evolucionários são utilizados para procurar soluções de problemas complexos ou com espaço de soluções grandes (espaço de busca), Estes são capazes de otimizar problemas que dificilmente seriam otimizados com técnicas convencionais, como programação linear e não-linear. Os algoritmos evolucionários utilizados neste estudo são o Particle Swarm Optimization (PSO) e o Algoritmo Genético (AG). O bom desempenho destes algoritmos na área de recursos hídricos incentiva cada vez mais testar e comparar os resultados obtidos por estas técnicas na otimização de problemas complexos.

2.1 Particle Swarm Optimization

O *Particle Swarm Optimization* (PSO) foi inicialmente proposto por James Kennedy e Russell C. Eberhart em 1995 (Kennedy e Eberhart 1995), e é baseado na analogia com a formação de vôo de um bando de pássaros. Assim como o AG, o PSO é baseado em uma população, que é chamada também de conjunto de partículas, no qual as soluções “ótimas” são procuradas através da combinação do aprendizado individual e comportamento social.

Existem algumas variações do algoritmo PSO, porém a formulação básica proposta por Kennedy e Eberhart 1995 é mostrada na Equação 1 e 2:

$$v_i(t+1) = w * v_i(t) + c_1 * r_1 * (P(t) - x(t)) + c_2 * r_2 * (Pg(t) - x(t)) \quad (1)$$

$$x_i(t+1) = x_i(t) + v_i(t+1) \quad (2)$$

Onde w é o coeficiente de inércia que possui um papel importante para determinar se a busca será em torno de um ótimo local (valores baixos de w) ou global (para valores mais elevados w), c_1 e c_2 são constantes que variam de 1,5 a 2,0, com a soma não maior que 4, r_1 e r_2 são números aleatórios uniformemente distribuídos no intervalo de 0 a 1. P é a melhor posição da partícula t até o momento, também denominada melhor posição local, Pg é o vetor com a melhor posição global para todas as partículas, até o momento, $x_i(t)$ é o vetor da posição atual da partícula i , e $v_i(t)$ é a velocidade da partícula i .

O valor do coeficiente w parece ser o que mais afeta o PSO (Coello Coello et al., 2004). Alguns autores recomendam iniciar a otimização com valores mais elevados de w e diminuindo o mesmo ao logo da otimização. Os valores sugeridos para w são entre 0,4 to 1,4.

2.2 Algoritmo Genético

O Algoritmo Genético (AG) é baseado nos mecanismos de seleção natura e foi proposto pro Goldberg (1989). O AG funciona com uma população inicial, formada pelos como cromossomos, que por sua vez são formados pelos genes (variáveis de decisão). Os cromossomos podem ter representação binária ou real, definindo assim dois tipos de algoritmos, os de representação real e de representação binária. Neste trabalho foi utilizado um algoritmo com representação real.

No AG existem três operadores: seleção, cruzamento e mutação, para gerar a nova população de indivíduos filhos a partir da população dos pais.

O operador de seleção é usado para selecionar os cromossomos para, a partir deles, aplicar os operadores de cruzamento e mutação. Existem diferentes operadores de seleção (Deb, 1999), e em geral cromossomos com valor maior de função objetivo têm maiores chances de serem selecionados e sobreviver. Uma das dificuldades dos algoritmos de otimização baseados em população é que uma

vez que a busca encontra um valor de ótimo local, a busca pode se concentrar em torno desta região (Deb, 1999).

O algoritmo genético utilizado neste trabalho foi baseado no código disponível em Deb (2008) e Deb e Berger (2001). O operador de utilizado neste algoritmo é o *Simulated Binary Crossover* (SBX, Deb e Berger, 2001) e utiliza uma distribuição de probabilidades em torno de dois pais para criar as soluções filhos. Diferentemente de outras implantações de algoritmos genéticos baseados em números reais, esta versão procura simular a distribuição de probabilidades utilizada na versão com codificação binária.

Após a seleção e cruzamento a mutação é realizada para preservar a diversidade da população. A probabilidade de mutação deve ser mantida baixa, pois valores altos podem comprometer boas soluções (Deb, 1999).

2.3 Aplicação dos Algoritmos Evolucionários

Analisando a bibliografia recente constata-se uma crescente utilização de algoritmos evolucionários entre eles os Algoritmos Genéticos e o Particle Swarm Optimization nas diversas áreas da engenharia de recursos hídricos. Quando foca-se a busca para a utilização de algoritmos para calibração de modelos de qualidade da água o número de publicações torna-se mais restrito.

Mulligan et. al (1998) fez uma aplicação utilizando algoritmos genéticos para calibração dos parâmetros de qualidade da água para oxigênio dissolvido OD e demanda bioquímica de oxigênio DBO. As conclusões deste estudo demonstraram que o AG obtém ótimas estimativas em problemas de otimização não linear com diversas restrições.

Kondageski e Fernandes (2007) desenvolveram rotinas de algoritmo genético para calibração de um modelo de qualidade da água para um rio hipotético, apresentado por Chapra (1997), dividido em trechos. Foram definidos 5 cenários, onde empregou-se diferentes números de pontos de monitoramento para a calibração do modelo, para cada cenário foram realizadas 200 simulações. Observou-se que para os cenários com maior número de pontos de monitoramento as constantes de qualidade calculadas apresentaram forte relação linear entre si. Além disso, observou-se que as concentrações de DBO e OD calculadas com as médias das constantes aproximaram-se dos valores monitorados destas concentrações.

Sowinski e Neugebauer (2007) aplicaram o Modelo WODA (Water Oxidation Deoxidation Assessment) com a finalidade de obter a calibração automática dos parâmetros de OD e DBO. O Modelo WODA utiliza o algoritmo genético para a otimização. O modelo foi aplicado para a determinação dos parâmetros do Rio Warta na Polônia. Bons ajustes foram obtidos na comparação dos valores calculados e observados.

3. METODOLOGIA

Os modelos de qualidade da água para rios têm como finalidade básica simular os processos físicos observados nos mesmos. Este processo de simulação deve representar de forma realista os processos ocorridos, como lançamento de efluentes e captações.

Tendo em vista a importância da representação destes procedimentos buscou-se a utilização do equacionamento apresentado por Chapra (1997), uma vez que este vem sendo amplamente utilizado.

O balanço quantitativo e qualitativo nos nós foi calculado através das Equações 3 e 4, respectivamente.

$$Q_{rio+1} = Q_{rio} + Q_{nat} + Q_{eflu} - D \quad (3)$$

$$C_0 = \frac{Q_{eflu} C_{eflu} + Q_{nat} C_{nat} + Q_{rio} C_{rio}}{Q_{eflu} + Q_{nat} + Q_{rio}} \quad (4)$$

Onde: Q_{eflu} e C_{eflu} representam a vazão e a concentração do efluente, respectivamente; Q_{nat} e C_{nat} representam a vazão e a concentração natural afluente, respectivamente; e Q_{rio} e C_{rio} representam a vazão e a concentração do rio, respectivamente.

A demanda bioquímica de oxigênio (DBO) foi determinada através da Equação 5, a qual representa o decaimento da matéria orgânica no trecho de rio considerado, e o comportamento do oxigênio dissolvido no trecho foi obtido a partir da Equação 6.

$$L = L_0 e^{-\frac{k_r x}{U}} + \frac{S_L}{k_r} \left(1 - e^{-\frac{k_r x}{U}} \right) \quad (5)$$

Onde: K_r representa a taxa total de remoção (dia^{-1}); K_d representa a taxa de remoção relacionada a decomposição da matéria orgânica (dia^{-1}); K_s a taxa de remoção relacionada a sedimentação (dia^{-1}); L_0 representa a concentração de DBO carbonácea inicial (mg/L); U é a velocidade (m/s); x é a distância (m); S_L representa a carga difusa de DBO ($\text{g/m}^3\text{dia}$).

$$D = D_0 e^{-\frac{k_a x}{U}} + \frac{k_d L_0}{k_a - k_r} \left(e^{-\frac{k_r x}{U}} - e^{-\frac{k_a x}{U}} \right) + \frac{1}{k_a} \left(\frac{S_L k_d}{k_r} \right) \left(1 - e^{-\frac{k_a x}{U}} \right) - \frac{S_L k_d}{k_r (k_a - k_r)} \left(e^{-\frac{k_r x}{U}} - e^{-\frac{k_a x}{U}} \right) \quad (6)$$

Onde: D representa o déficit de oxigênio (mg/L); D_0 o déficit inicial de oxigênio (mg/L); e K_a a constante de reaeração (dia^{-1}).

Para que o modelo de simulação reproduza corretamente o perfil do parâmetro analisado, devem ser adotados valores adequados para os coeficientes k_a , k_d e k_s . A determinação destes valores pode se tornar um processo exaustivo devido ao grande número de combinações possíveis. Este processo é denominado de calibração do modelo.

Na calibração os valores dos parâmetros do modelo são identificados de maneira que forneçam o melhor ajuste entre as concentrações simuladas e as observadas. Uma vez estabelecidos, estes parâmetros possibilitam analisar cenários de carga distintos e desta forma avaliar os possíveis impactos gerados em função de modificações no meio.

Visando a calibração automática do modelo, foram aplicados os algoritmos de otimização (AG e PSO) que tem como finalidade minimizar a função objetivo. Esta função objetivo é a soma quadrática das diferenças entre os valores observados e os calculados pelo modelo. Onde o critério de parada adotado neste estudo foi de 700 gerações. A Equação 7 apresenta a função objetivo a ser otimizada neste estudo.

$$f = \sum_{i=1}^N \left[w_{OD} \cdot (OD^*_i - OD_i)^2 + w_{DBO} \cdot (DBO^*_i - DBO_i)^2 \right] \quad (7)$$

Onde: $DBO^*(i)$ representa a concentração observada de DBO; $DBO(i)$ a concentração calculada de DBO; $OD^*(i)$ a concentração observada de OD; $OD(i)$ a concentração calculada de OD; w_{OD} o peso o parâmetro OD; w_{DBO} o peso do parâmetro DBO ($w_{DBO}=1-w_{OD}$); N o número de pontos de monitoramento.

4. ESTUDO DE CASO

Para este estudo foram testados dois algoritmos de otimização, Algoritmo Genético e Particle Swarm Optimization. O desempenho dos algoritmos propostos foi analisado através de duas redes, uma hipotética, apresentada por Chapra (1997), e outra real, sendo esta a bacia do rio Camanducaia.

4.1 Estudo de caso 1: Caso hipotético

A rede hipotética Chapra (1997) tem comprimento de 100 km e apresenta: um lançamento de esgoto no início da mesma (0 km) e a descarga de um rio afluente a 40 km do início da rede. A Figura 1 ilustra a rede proposta para o estudo de caso 1, onde a mesma foi dividida em três trechos, os dois primeiros com 40 km de comprimento e o terceiro com 60 km.

A Tabela 1 apresenta os valores da vazão e concentração dos parâmetros DBO, OD e temperatura para o rio hipotético considerados na simulação.

Neste estudo de caso, o espaço de busca para os coeficientes foram: $0 < ka < 5,0$; $0 < kd < 1,6$; e $0 < ks < 1,6$, para todos os trechos. Os parâmetros do AG adotados foram: taxa de cruzamento 95% e taxa de mutação 0,3%. Para o PSO os parâmetros adotados foram: coeficiente de inércia (w) foi variável de 1,2 diminuindo ao longo das interações até 0,7; valores das constantes c_1 e c_2 iguais a 1,6. O tamanho da população é 90 indivíduos.

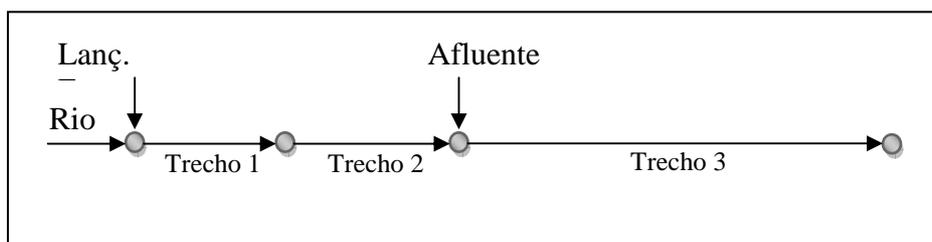


Figura 1 – Rede hipotética utilizada no Estudo de Caso 1

Tabela 1 – Valores de vazão e concentração dos parâmetros analisados para o caso hipotético

	Vazão (m ³ /s)	DBO (mg/L)	OD (mg/L)	Temperatura (°C)
Rio	5,787	2,0	7,5	20
Esgoto	0,463	200,0	2,0	28
Afluente	1,157	5,0	9,0	15

Nesta rede foram analisadas duas condições para verificar o desempenho dos algoritmos propostos. A primeira com três postos de monitoramento, localizados a jusante de cada trecho, e a segunda com dois postos de monitoramento, localizados a jusante do segundo e do terceiro trecho.

4.2 Estudo de caso 2: bacia hidrográfica do rio Camanducaia

Neste segundo estudo de caso foi analisado o Rio Camanducaia. Este rio é um importante afluente do Rio Jaguarí pertencente à Bacia Hidrográfica do Piracicaba. A bacia hidrográfica do Camanducaia tem área de 1044,17 km² e para este estudo foi dividida em 23 sub-bacias conforme Figura 2.

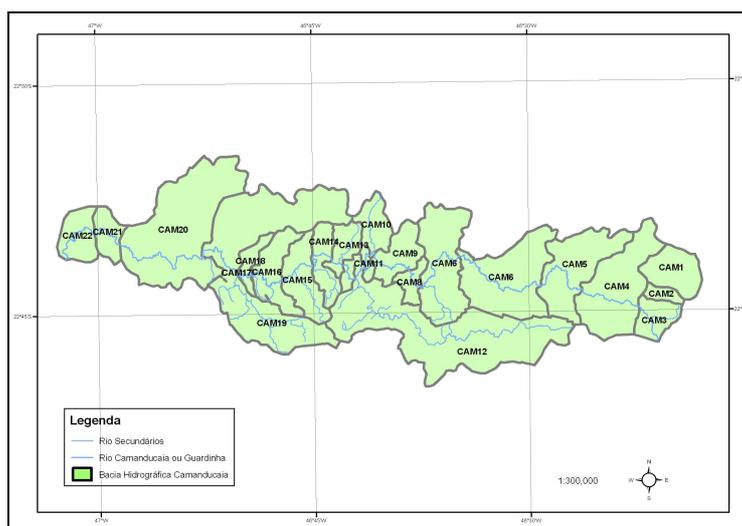


Figura 2 – Bacia Hidrográfica do Rio Camanducaia com suas Sub-bacias

A Tabela 2 apresenta os dados da bacia do rio Camanducaia, onde são observados valores da contribuição natural, lançamentos pontuais e características dos trechos utilizados nas simulações.

Tabela 2 – Dados pertencentes à bacia do rio Camanducaia utilizados nas simulações

Trecho	Dados Contribuição Natural			Dados Lançamento Pontual			Comprimento (km)	Coef Vel	Coef Vel Exp	Coef H	Coef H Prof	Dem (m3/s)
	Q (m3/s)	DBO (mg/L)	OD (mg/L)	Q (m3/s)	DBO (mg/L)	OD (mg/L)						
1	0	2	7	0	0	0	0.46	0.5	0.25	0.34	0.49	0
2	0.04	2	3	0	0	0	1.97	0.5	0.25	0.34	0.49	0
3	0.12	2	3	0.008	300	0	1.37	0.5	0.25	0.34	0.49	0
4	0.53	2	6	0	0	0	9.1	0.5	0.25	0.34	0.49	0
5	0.41	2	7	0	0	0	11.18	0.5	0.25	0.34	0.49	0
6	0.52	2	5	0	0	0	18.24	0.5	0.26	0.32	0.46	0
7	0.21	2	6	0	0	0	11.19	0.5	0.26	0.32	0.46	0
8	0.07	2	6	0	0	0	4.34	0.5	0.26	0.32	0.46	0
9	0.16	3	4	0	0	0	7.62	0.51	0.27	0.32	0.45	0
10	0.12	3	6	0.005	300	0	1.04	0.51	0.24	0.36	0.51	0.01
11	0.03	3	6	0.01	300	0	4.14	0.51	0.24	0.36	0.51	0
12	0.99	2	5	0	0	0	6.39	0.5	0.24	0.35	0.5	0.01
13	0.1	2	7	0.01	86	0	1.95	0.5	0.24	0.35	0.5	0.01
14	0.13	2	3	0.01	53	0	5.12	0.5	0.24	0.35	0.5	0.01
15	0.19	2	5	0	90	0	6.88	0.52	0.28	0.31	0.43	0.16
16	0.17	2	4	0.03	51.5	0	8.63	0.53	0.28	0.31	0.42	0.01
17	0	2	7	0.18	129	0	0.42	0.53	0.28	0.31	0.42	0
18	0	2	7	0	75	0	0.16	0.53	0.28	0.31	0.42	0.04
19	0.06	2	7	0	0	0	2.95	0.53	0.29	0.31	0.41	0
20	0.73	2	7	0	0	0	8.95	0.53	0.29	0.31	0.41	0
21	0.58	2	7	0	0	0	17.29	0.54	0.3	0.3	0.39	0
22	0.07	2	7	0.02	225	0	6.53	0.55	0.31	0.3	0.37	0
23	0.1	2	7	0	0	0	9.71	0.41	0.29	0.28	0.49	0

A Tabela 3 apresenta as estações de monitoramento de qualidade da água da CETESB, as quais foram utilizadas para verificar a calibração do modelo.

Tabela 3 – Estações de qualidade da água utilizadas no estudo

Sub-bacia	Posto	Período de dados
Camanducaia	CMDC02050	2004 - 2007
	CMDC02100	2002 - 2007
	CMDC02300	2000 - 2007
	CMDC02400	2000 - 2007
	CMDC02900	2000 - 2007

Neste estudo de caso, o espaço de busca para os coeficientes foram: $0,1 < ka < 6,0$; $0,1 < kd < 1,6$; e $0 < ks < 1,6$, para todos os trechos. Os parâmetros do AG adotados foram: taxa de cruzamento 95% e taxa de mutação 0,3%. Para o PSO os parâmetros adotados foram: coeficiente de inércia variável (w), de 1,2 e diminuindo ao longo das interações até 0,7; valores das constantes c_1 e c_2 iguais a 1,6. O tamanho da população é 690 indivíduos.

5. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste item serão apresentados os resultados obtidos nas simulações, para os dois estudos de caso descritos acima, utilizando os algoritmos propostos.

5.1 Estudo de caso 1: rede hipotética

A rede proposta para este estudo de caso foi dividida em três trechos, sendo que existem três constantes de qualidade da água por trecho a serem otimizadas (ka , kd e ks), totalizando 9 variáveis de decisão. Esta rede não apresenta grande esforço computacional, onde o tempo de processamento para cada simulação foi 1,04 segundos para o AG e 0,51 segundos para o PSO.

A primeira condição analisada para verificação do desempenho dos algoritmos testados utilizou três pontos de monitoramento, como já descrito.

Os resultados obtidos foram bons para os dois algoritmos analisados, AG e PSO. A Tabela 4 mostra os resultados estatísticos da função objetivo obtidos para 100 simulações.

Tabela 4 – Dados estatísticos obtidos para o AG e PSO considerando três pontos de monitoramento

	AG	PSO
Mínimo	1.58E-30	2.67E-18
Máximo	1.11E-21	1.33E-10
Média	3.51E-23	1.79E-12
Mediana	5.37E-26	3.21E-15
Desvio Padrão	2.25E-42	1.78E-20

Os valores obtidos para a função objetivo nas 100 simulações, tanto para o AG quanto para o PSO, foram satisfatórios. Ao analisar as diferenças entre os valores mínimos e máximos observaram-se variações de pequenas amplitudes, isto também pode ser observado analisando os valores do desvio padrão.

A Figura 3 ilustra os valores estatísticos obtidos para as variáveis analisadas (ka , kd e ks) para cada trecho da rede nas 100 simulações realizadas para o AG e PSO, quando considerados três pontos de monitoramento. Nesta estatística são apresentados, no formato Box-plot, os valores máximos e mínimos, os quartis 25% e 75% da distribuição.

Os valores apresentados na Figura 3 mostram que os coeficientes ka , kd e ks obtidos nas 100 simulações foram mais dispersos no espaço de busca para o PSO que os valores obtidos com AG.

A Figura 4 apresenta a relação entre os coeficientes ka e kd para os três trechos simulados. Observa-se que os dois algoritmos mantiveram o mesmo comportamento para os coeficientes ka e kd , também pode ser visualizado que estes coeficientes obtiveram valores concentrados dentro de

uma faixa menor para as simulações obtidas com o AG quando comparados com os valores obtidos com o PSO.

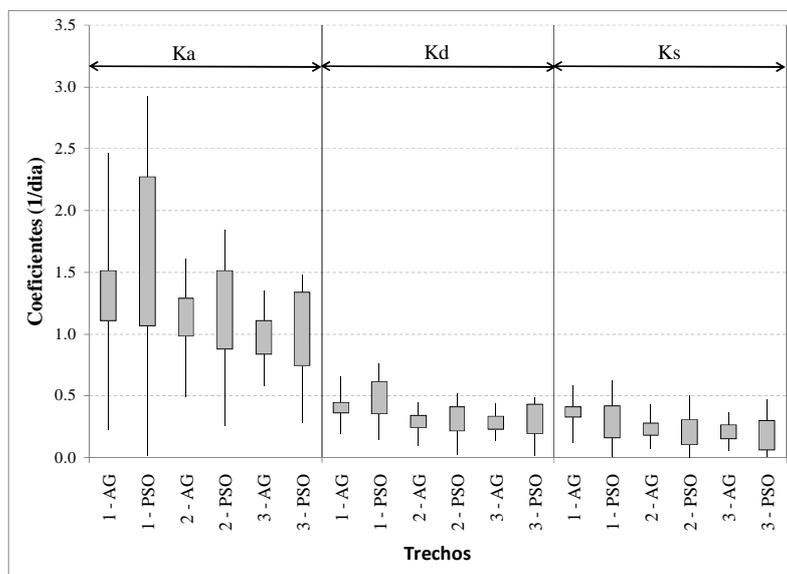


Figura 3 – Box-plot dos coeficientes de qualidade da água com três postos de monitoramento para o estudo de caso 1

Como se observa no trecho 1, os valores obtidos para ka e kd , com a utilização do AG, apresentaram maior concentração de valores dentro das faixas 1,1 – 1,5 e 0,36 – 0,44, respectivamente. Quando utilizado o PSO estes valores se concentraram dentro das faixas 1,06 – 2,27 e 0,35 – 0,61 para os coeficientes ka e kd , respectivamente. Comportamento semelhante foi observado para os trechos 2 e 3. Estas faixas representam o intervalo dentro do qual se encontram 25 a 75% dos valores simulados.

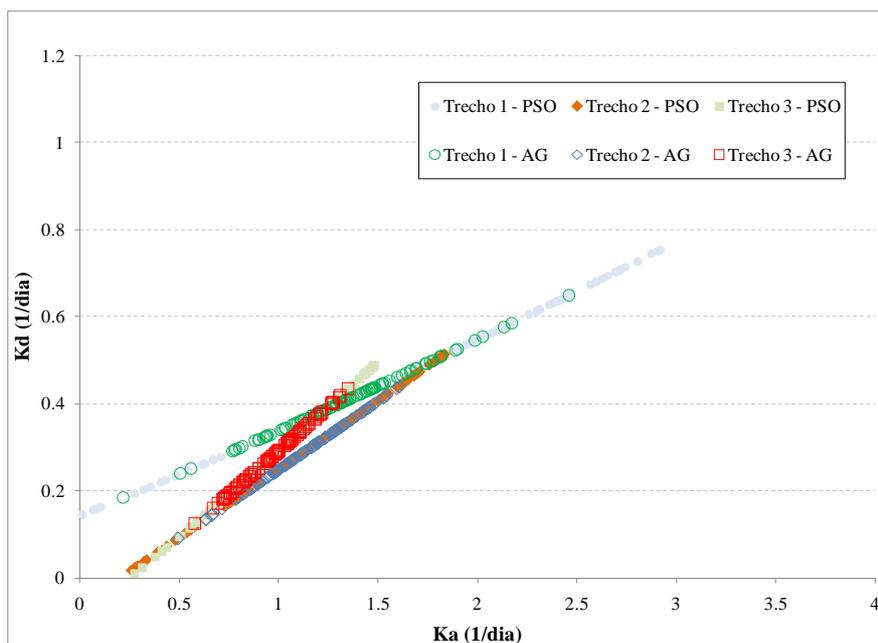


Figura 4 – Relação entre os coeficientes ka e kd nos trechos simulados com três postos de monitoramento para o estudo de caso 1

A Figura 5 mostra os perfis de DBO e OD das 100 simulações, para os trechos analisados, com os dois algoritmos, AG e PSO. Na mesma figura pode ser visualizada a localização dos três postos de monitoramento considerados.

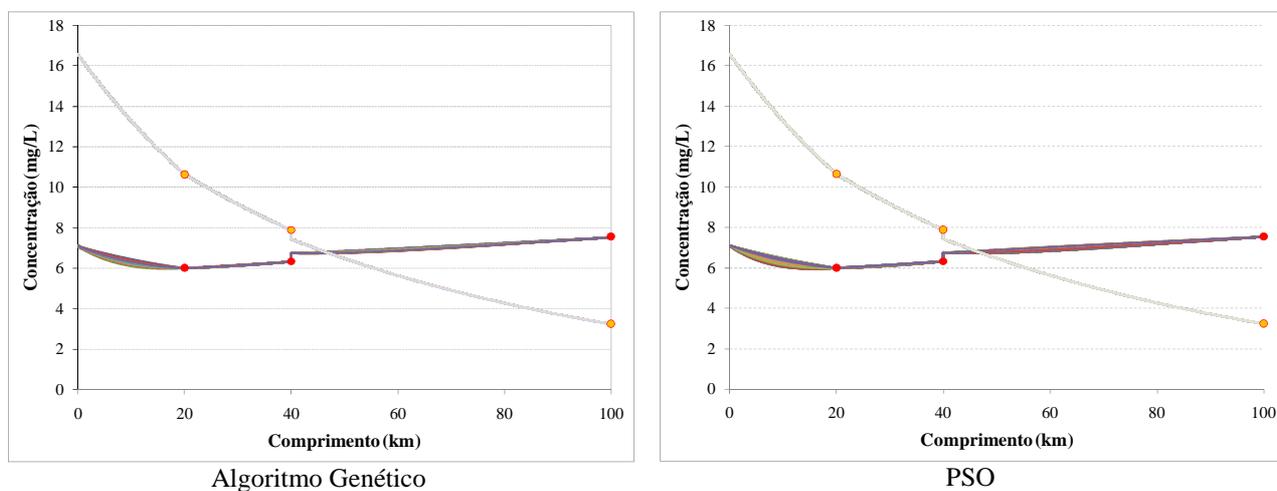


Figura 5 – Perfil de DBO e OD ao longo dos trechos com três postos de monitoramento para o estudo de caso 1

Os resultados obtidos para os perfis de OD e DBO foram satisfatórios para os dois algoritmos. No entanto, como os valores dos coeficientes ka , kd e ks obtidos através do PSO apresentaram-se mais dispersivos que os obtidos com AG, uma nova análise foi realizada. Esta dispersão pode ser observada na Figura 3 e Figura 4.

Nesta nova condição de verificação do desempenho dos algoritmos propostos foram considerados dois pontos de monitoramento, sendo diferenciado da análise anterior pela subtração do ponto de monitoramento entre o trecho 1 e o trecho 2. Esta nova condição confere um maior grau de liberdade à análise. Os resultados obtidos pela função objetivo para as 100 simulações utilizando dois pontos de monitoramento encontram-se na Tabela 5.

Tabela 5 - Dados estatísticos obtidos para o AG e PSO considerando dois pontos de monitoramento

	AG	PSO
Mínimo	0.00E+00	3.94E-31
Máximo	3.94E-31	9.74E-20
Média	6.02E-32	1.06E-21
Mediana	0.00E+00	9.61E-27
Devio Padrão	1.98E-60	9.40E-39

Ao analisar a Tabela 5 observa-se o mesmo comportamento obtido nas simulações considerando os três pontos de monitoramento. Porém, numa análise mais criteriosa, observou-se que os valores obtidos pela função objetivo considerando dois pontos de monitoramento foram menores que os obtidos com três pontos.

Este resultado justifica-se por se tratar de um problema menos complexo, uma vez que o número de variáveis foi mantido e a verificação da função objetivo foi realizada em apenas dois pontos, o que conferiu uma maior liberdade ao problema a ser otimizado. Ou seja, os algoritmos conseguem gerar valores de função objetivo melhores através de combinações dos valores de coeficientes do modelo de qualidade dos trechos a montante do primeiro ponto de monitoramento.

A Figura 6 ilustra, em formato Box-plot, os valores estatísticos obtidos para as variáveis analisadas (ka , kd e ks) para cada trecho da rede nas 100 simulações realizadas para o AG e PSO, quando analisados dois pontos de monitoramento.

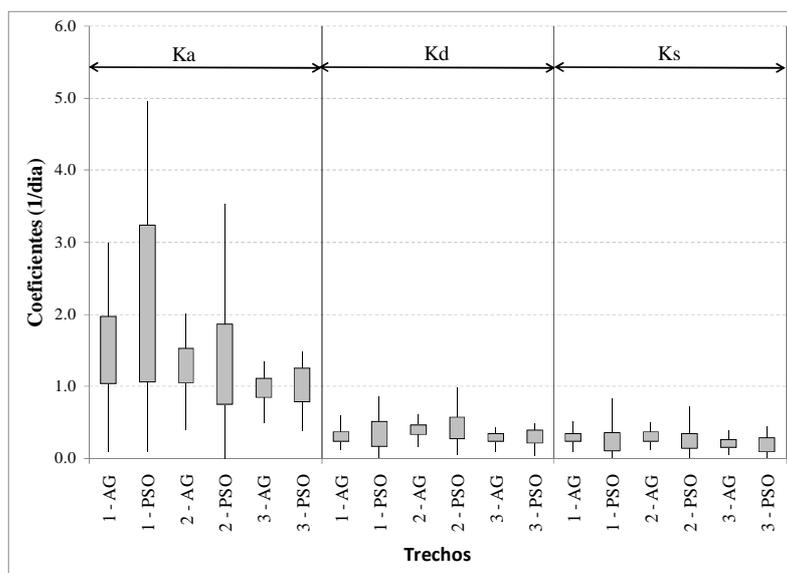


Figura 6 - Box-plot dos coeficientes de qualidade da água com dois postos de monitoramento para o estudo de caso 1

Nesta análise apresentada na Figura 6, com apenas dois postos de monitoramento, observa-se a característica dispersiva para as variáveis obtidas com o PSO, quando estas variáveis são comparadas com os valores obtidos pelo AG.

A Figura 7 apresenta a relação entre os coeficientes ka e kd para os trechos simulados com dois pontos de monitoramento.

Observa-se que os dois algoritmos mantiveram comportamento similar para os coeficientes ka e kd . Os coeficientes obtidos com a utilização do AG mantiveram-se concentrados dentro de uma faixa menor quando comparados com os obtidos com o PSO.

Pode-se observar que no trecho 1, os valores obtidos para ka e kd , com a utilização do AG, apresentaram maior concentração de valores dentro das faixas 1,04 – 1,96 e 0,23 – 0,33, respectivamente. Quando utilizado o PSO estes valores se concentraram dentro das faixas 1,06 – 3,24 e 0,16 – 0,51 para os coeficientes ka e kd , respectivamente. Comportamento semelhante foi

observado para os trechos 2 e 3. Estas faixas representam o intervalo dentro do qual se encontram 25 a 75% dos valores simulados.

Outra análise permitida na Figura 7 é em relação á maior dispersão observada nos trechos 1 e 2 devido ao maior grau de liberdade proporcionado ao considerar apenas dois pontos de monitoramento.

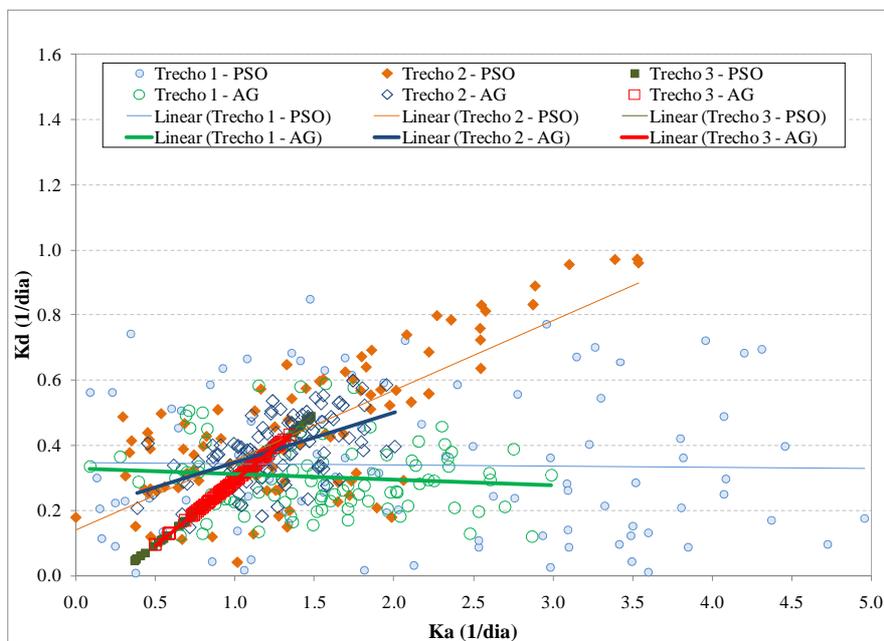


Figura 7 - Relação entre os coeficientes ka, kd nos trechos simulados com dois postos de monitoramento para o estudo de caso 2

A Figura 8 apresenta os perfis de DBO e OD das 100 simulações, para os trechos analisados, com os algoritmos AG e PSO. Na mesma figura pode ser visualizada a localização dos dois postos de monitoramento.

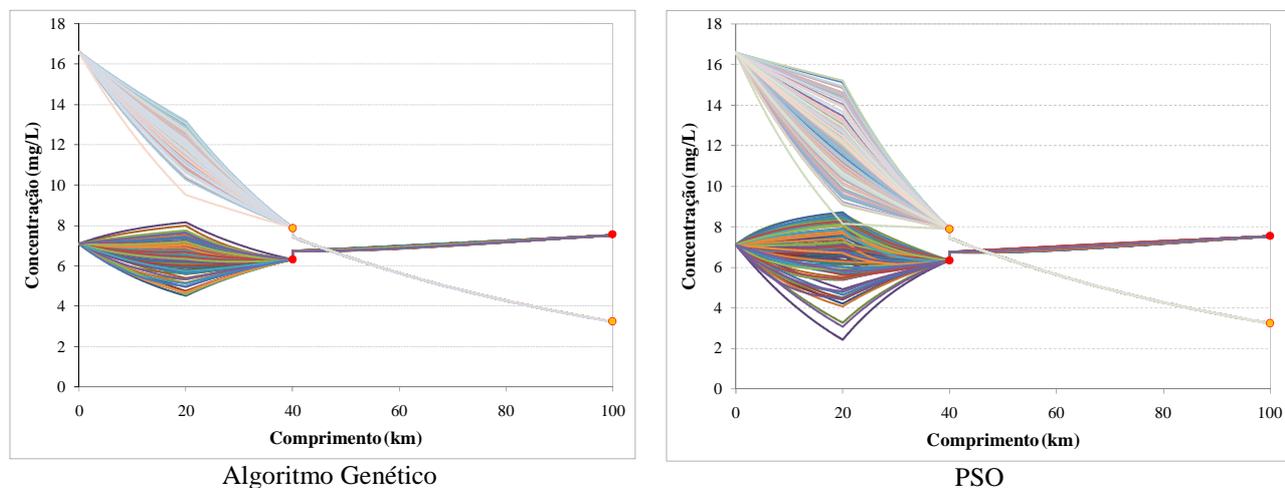


Figura 8 – Perfil de DBO e OD ao longo dos trechos com dois postos de monitoramento para o estudo de caso 2

Os perfis de OD e DBO refletem a dispersão resultante do grau de liberdade atribuído nesta simulação. A maior dispersão dos coeficientes ka , kd e ks , obtidos através do PSO, foi refletida no perfil de DBO e OD quando comparado com o perfil produzido pelo AG.

Visando verificar a eficiência dos algoritmos nos cenários considerados com dois e três pontos de monitoramento, realizou-se a comparação entre os valores obtidos para os coeficientes nas simulações. A Tabela 6 apresenta os valores médios e o desvio padrão dos coeficientes obtidos, pelo AG e PSO, em cada trecho nas 100 simulações, onde foram considerados dois e três pontos de monitoramento.

Tabela 6 – Comparação entre os coeficientes obtidos com a utilização de dois e três pontos de monitoramento

Trechos	Coeficiente	Simulação com 2 Pontos Monitoramento		Simulação com 3 Pontos Monitoramento	
		Média	Desvio Padrão	Média	Desvio Padrão
Trecho 1	Ka - AG	1.514	0.622	1.329	0.365
	Ka - PSO	2.119	1.303	1.627	0.784
Trecho 2	Ka - AG	1.269	0.341	1.126	0.235
	Ka - PSO	1.392	0.777	1.176	0.446
Trecho 3	Ka - AG	0.969	0.189	0.974	0.171
	Ka - PSO	1.008	0.303	1.030	0.339
Trecho 1	Kd - AG	0.304	0.107	0.407	0.076
	Kd - PSO	0.339	0.219	0.473	0.165
Trecho 2	Kd - AG	0.389	0.098	0.289	0.074
	Kd - PSO	0.438	0.221	0.305	0.140
Trecho 3	Kd - AG	0.280	0.076	0.282	0.069
	Kd - PSO	0.296	0.121	0.306	0.136
Trecho 1	Ks - AG	0.284	0.089	0.359	0.077
	Ks - PSO	0.241	0.169	0.292	0.167
Trecho 2	Ks - AG	0.305	0.092	0.228	0.075
	Ks - PSO	0.263	0.166	0.211	0.142
Trecho 3	Ks - AG	0.208	0.075	0.206	0.068
	Ks - PSO	0.191	0.121	0.182	0.135

Na comparação entre a simulação com dois e três pontos de monitoramento, observou-se que o AG e PSO apresentaram maior dispersão para a simulação com dois pontos, como pode ser visualizado na Tabela 6.

Os desempenhos dos algoritmos na solução do problema proposto apresentaram ótimos resultados quando analisada a função objetivo. No entanto, o PSO apresentou maior dispersão para os valores dos coeficientes ka , kd e ks dentro do espaço de busca. Esta dispersão foi refletida nos perfis de DBO e OD, como apresentado na Figura 8.

O algoritmo genético mostrou apresentar valores menos dispersivos para as variáveis dentro do espaço de busca, principalmente para a análise com 2 pontos de monitoramento que apresenta um maior grau de liberdade.

5.2 Estudo de caso 2: bacia do rio Camanducaia

A rede do rio Camanducaia foi dividida em 23 trechos e como existem três constantes de qualidade da água por trecho a serem otimizadas (ka , kd e ks) o total de variáveis nesta rede é 69.

A rede conta com cinco pontos de monitoramento e o tempo de processamento para cada simulação foi 29,5 segundos para o AG e 24,1 segundos para PSO.

Os resultados estatísticos obtidos para a função objetivo nas 100 simulações do rio Camanducaia são apresentados na Tabela 7. Para ambos algoritmos a diferença entre os valores mínimos e máximos da função objetivo é pequena, porém, observou-se que o valor da diferença para o PSO é um pouco maior que o encontrado com o AG, mas mostrou-se insignificante.

Tabela 7 - Dados estatísticos obtidos para o AG e PSO no rio Camanducaia

	AG	PSO
Mínimo	0.1050356	0.1049877
Máximo	0.1050364	0.1322873
Média	0.1050359	0.1078002
Desvio Padrão	1.72E-07	5.82E-03

A Tabela 8 apresenta os valores médios e o desvio padrão para os coeficientes ka , kd e ks obtidos nas 100 simulações para os algoritmos AG e PSO no rio Camanducaia.

Tabela 8 - Coeficientes obtidos nas 100 simulações com AG e PSO no rio Camanducaia

Trechos	Ka - AG		Ka - PSO		Kd - AG		Kd - PSO		Ks - AG		ks - PSO	
	Média	Desvio Padrão	Média	Desvio Padrão	Media	Desvio Padrão	Média	Desvio Padrão	Média	Desvio Padrão	Média	Desvio Padrão
1	0.58	0.21	3.17	1.69	0.22	0.07	0.84	0.42	0.14	0.07	0.74	0.45
2	0.80	0.32	3.11	1.64	0.30	0.09	0.86	0.44	0.21	0.09	0.76	0.46
3	0.82	0.30	2.98	1.71	0.27	0.09	0.84	0.44	0.21	0.09	0.85	0.48
4	1.63	0.33	2.76	1.67	0.47	0.07	0.60	0.38	0.42	0.08	0.45	0.39
5	1.85	0.33	2.81	1.91	0.44	0.06	0.47	0.30	0.38	0.07	0.34	0.30
6	1.91	0.22	2.23	1.44	0.37	0.04	0.33	0.19	0.30	0.04	0.25	0.21
7	1.55	0.15	1.24	0.80	0.40	0.05	0.41	0.27	0.30	0.05	0.31	0.29
8	2.37	0.41	2.57	1.83	0.38	0.07	0.56	0.37	0.41	0.09	0.33	0.33
9	2.45	0.27	2.42	1.52	0.34	0.05	0.31	0.21	0.37	0.06	0.27	0.25
10	1.87	0.42	2.77	1.80	0.35	0.08	0.71	0.44	0.39	0.11	0.60	0.44
11	2.34	0.32	2.54	1.60	0.32	0.05	0.44	0.29	0.35	0.06	0.25	0.25
12	0.10	0.00	0.10	0.00	0.10	0.00	0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	0.10	0.00	0.14	0.24	0.10	0.00	0.16	0.18	0.00	0.00	0.01	0.07
14	0.10	0.00	0.10	0.00	0.10	0.00	0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	3.23	0.57	3.58	1.77	1.10	0.13	1.25	0.38	1.45	0.06	1.25	0.41
16	3.16	0.42	3.54	1.64	1.14	0.13	1.31	0.33	1.48	0.06	1.31	0.36
17	1.56	0.36	3.50	1.72	0.30	0.08	0.96	0.41	0.34	0.11	0.86	0.44
18	1.17	0.36	3.22	1.70	0.34	0.09	0.95	0.39	0.40	0.15	0.96	0.46
19	3.10	0.53	3.53	1.59	1.25	0.08	1.34	0.28	1.52	0.02	1.41	0.31
20	2.24	0.20	2.13	0.96	1.48	0.03	1.49	0.12	1.57	0.01	1.53	0.11
21	0.36	0.06	0.28	0.15	0.10	0.00	0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	0.29	0.15	0.55	0.37	0.10	0.00	0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	0.51	0.20	3.24	1.69	0.19	0.05	0.85	0.47	0.11	0.06	0.83	0.47

Os valores obtidos para os coeficientes mostraram comportamento similar aos encontrados no estudo de caso 1. Os resultados obtidos pelo PSO possuem um desvio padrão maior que os obtidos com o AG, o que mostra a característica mais dispersiva das variáveis no espaço de busca do PSO.

A Figura 9 e a Figura 10 ilustram os valores estatísticos, no formato Box-plot, obtidos para os coeficientes ka e kd , respectivamente, para cada trecho da rede nas 100 simulações realizadas para o AG e PSO, no rio Camanducaia (estudo de caso 2).

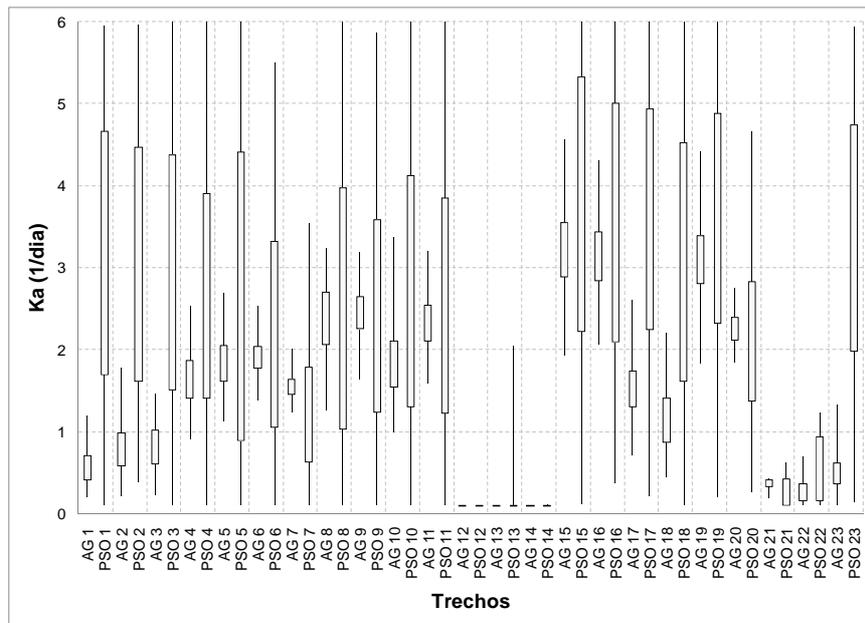


Figura 9 – Box-plot do coeficiente ka para o estudo de caso 2

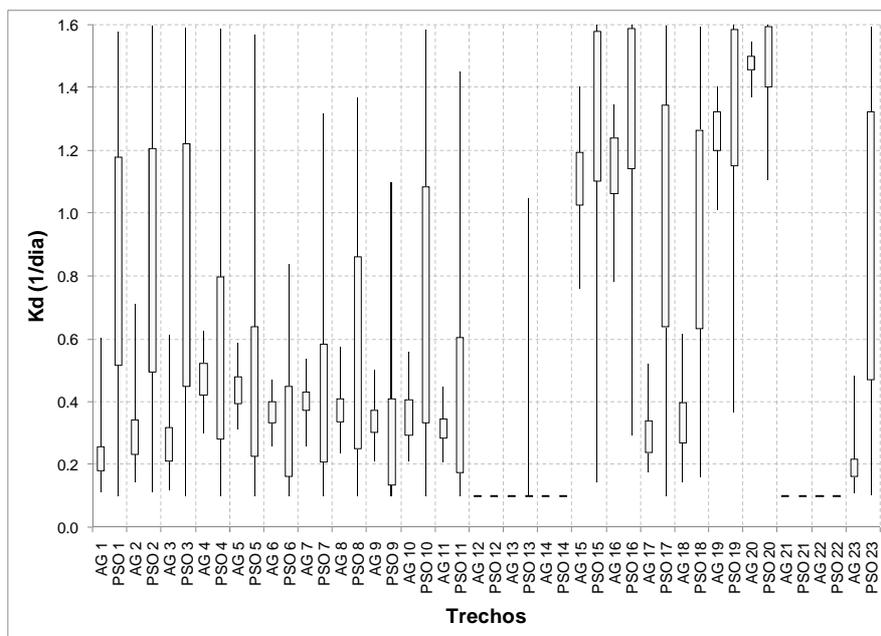


Figura 10 - Box-plot do coeficiente kd para o estudo de caso 2

As Figura 11 e 12 mostram os perfis de DBO nas 100 simulações para o rio Camanducaia utilizando o AG e PSO, respectivamente. Nas Figura 11 e 12 podem ser visualizados os Box-plots dos cinco pontos de monitoramento considerados.

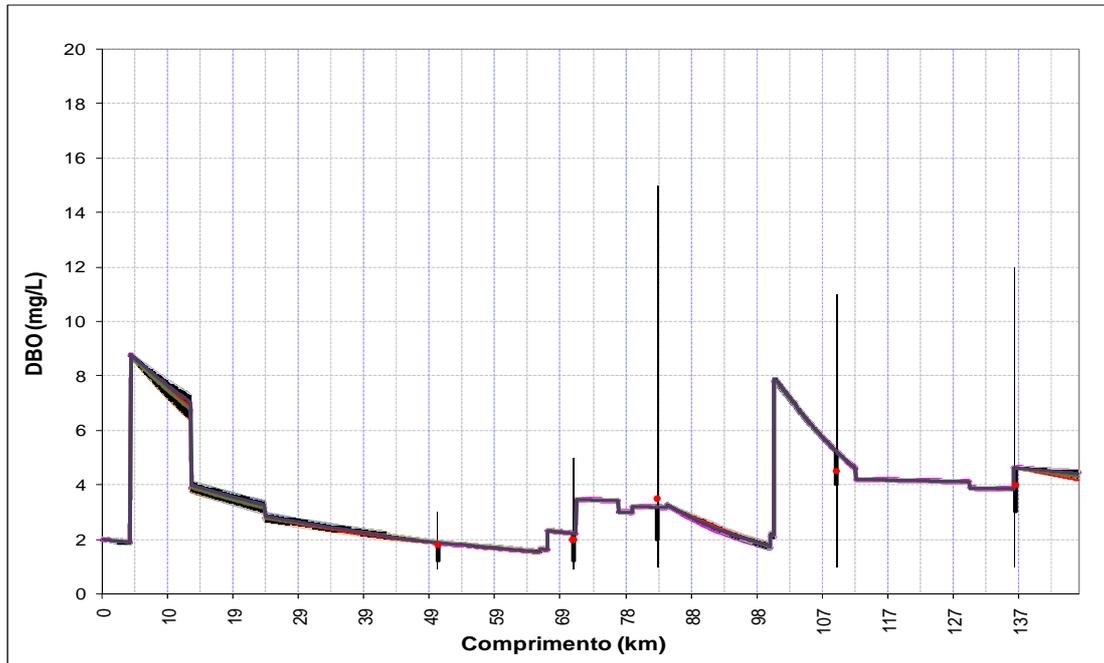


Figura 11 - Perfil de DBO no rio Camanducaia obtido com AG

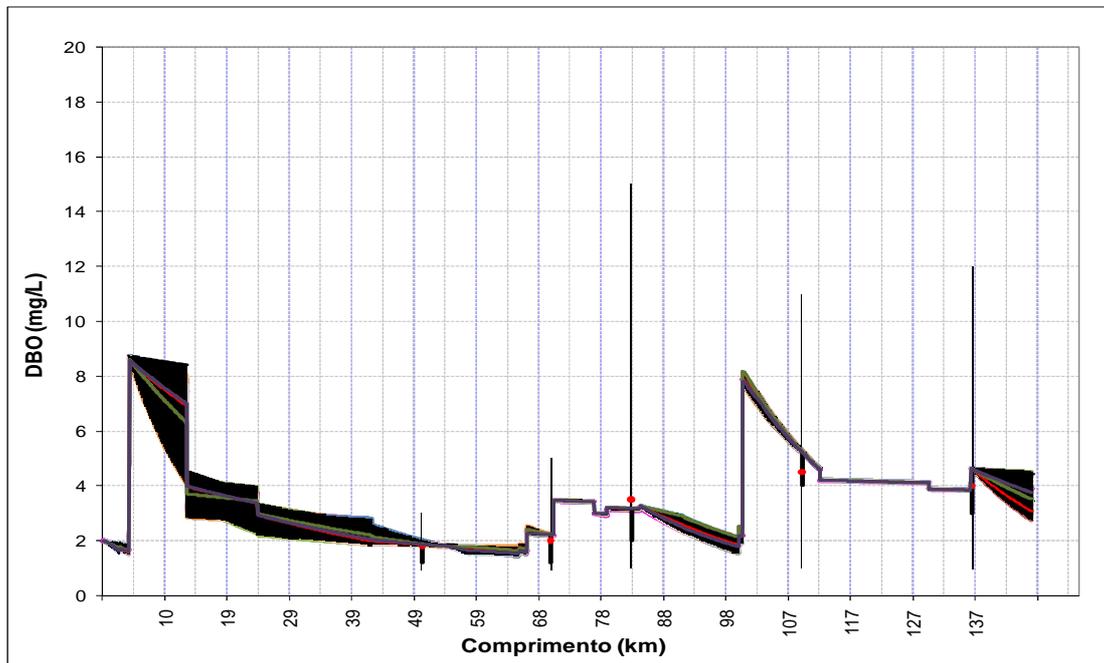


Figura 12- Perfil de DBO no rio Camanducaia obtido com PSO

As Figura 13 e 14 apresentam os perfis de OD nas 100 simulações no rio Camanducaia utilizando o AG e PSO, respectivamente.

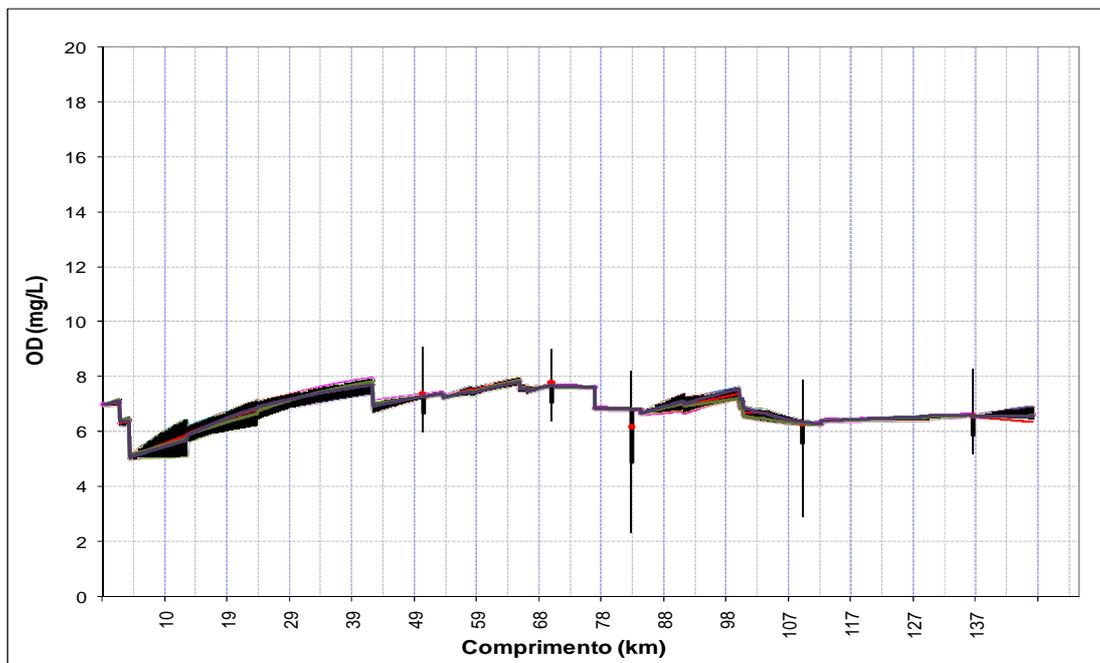


Figura 13 - Perfil de OD no rio Camanducaia obtido com AG

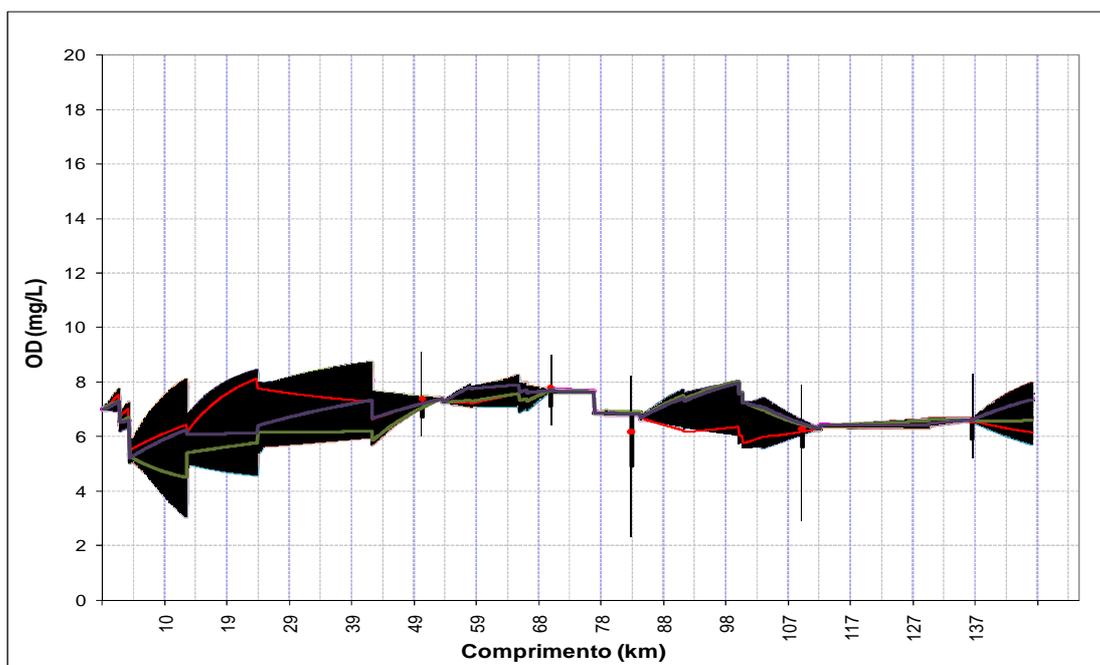


Figura 14 - Perfil de OD no rio Camanducaia obtido com PSO

As Figuras 11 a 14 mostram que os dois algoritmos apresentaram bom desempenho para a função objetivo na calibração do rio Camanducaia. No entanto, a maior dispersão apresentada pelo PSO na obtenção das variáveis, no espaço de busca, resultou em um pior desempenho na caracterização dos perfis de DBO e OD, quando comparados com os resultados obtidos pelo AG.

A característica dispersiva apresentada pelo PSO pode estar relacionada ao método de determinação de novos indivíduos. O algoritmo apresentou resultados excelentes para a solução do problema proposto, considerando apenas o valor da sua função objetivo.

Devido à suas características de fácil implementação e velocidade de processamento apresentadas pelo PSO, estudos devem ser aprofundados para analisar melhor esta característica dispersiva das variáveis no problema proposto neste estudo.

A dispersão foi verificada para os dois algoritmos, mesmo que em diferentes ordens de grandeza, portanto, torna-se importante avaliar o comportamento dos coeficientes de qualidade da água nos trechos onde não existem pontos de monitoramento próximos, pois a não existência destes permite ao algoritmo um maior grau de liberdade na adoção das variáveis. O grau de liberdade para estes trechos pode ser restringido com o uso de penalidades na função objetivo e desta forma evitando a dispersão observada. Esta hipótese deve ser estudada e aprimorada em trabalhos futuros.

6. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste artigo foi analisado o comportamento e o desempenho dos Algoritmos Genéticos (AG) e do Particle Swarm Optimization (PSO) na calibração automática dos coeficientes ka , kd e ks para a simulação dos parâmetros de qualidade da água oxigênio dissolvido (OD) e demanda bioquímica de oxigênio (DBO).

Este estudo demonstrou que os algoritmos AG e PSO obtiveram bons resultados para a otimização dos problemas propostos quando analisados os resultados da função objetivo. Verificou-se que o PSO apresentou maior dispersão dos coeficientes quando comparados com os valores obtidos pelo AG, e este resultado foi refletido nos perfis de OD e DBO.

Destaca-se a necessidade de continuidade de estudos para uma melhor avaliação do comportamento dos coeficientes, em virtude das dispersões observadas em determinados trechos analisados. Assim como analisar a possibilidade de aplicar penalidades na função objetivo visando minimizar estas dispersões.

AGRADECIMENTOS

À Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo - FAPESP pela concessão da bolsa de doutorado. Ao Professor Dr. Darrell G. Fontane pelo suporte e orientação durante a estadia na Colorado State University e ao Dr. Alexandre M. Baltar pelas dicas e contribuição no desenvolvimento dos algoritmos utilizados no estudo.

BIBLIOGRAFIA

- CETESB – Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental. Relatório de Qualidade das Águas Interiores do Estado de São Paulo <http://www.cetesb.sp.gov.br/Agua/rios/publicacoes.asp>
- CHAPRA, S. C. *Surface Water Quality Modeling*. USA: McGraw-Hill, 1997. 844p
- COELLO COELLO, C. A., PULIDO, G. T. e LECHUGA, M. S. *Handling Multiple Objectives with Particle Swarm Optimization*. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, IEEE, Piscataway, NJ, 8 (3), 256 – 279, 2004.
- DEB, K. *Self-Adaptive Genetic Algorithms with Simulated Binary Crossover*. Evolutionary Computation. 9 (2) - Massachusetts Institute of Technology, 1999.
- DEB, K. e BEYER H.-G. *Self-Adaptive Genetic Algorithms with Simulated Binary Crossover*. Evolutionary Computation. 9 (2) - Massachusetts Institute of Technology, 2001.
- KENNEDY, J. e EBERHART, R. *Particle Swarm Optimization*. Proc. 4th IEEE Int. Conf. on Neural Networks, IEEE, Piscataway, NJ, 1942 – 1948, 1995.
- KONDAGESKI, J.H. e FERNANDES, C.V.S. *Proposta de Calibração de um Modelo Multi-parâmetro de Qualidade da Água Utilizando o Algoritmo Genético* in Anais do XVII Simpósio Brasileiro de Recursos Hídricos, São Paulo, 2007.
- GOLDBERG, D. E. *Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning*, Addison-Wesley, New York, 1989.
- MULLIGAN, A.E; BROWN, L.C. *Genetic Algorithms For Calibrating Water Quality Models*. Journal of Environmental Engineering. Vol 124, N0. 3, Março 1998.
- SOWINSKI, M; NEUGEBAUER, A. Calibration of Water-Quality Model “Woda” – Case Study of the Warta River. Journal of Environmental Engineering and Landscape Management. , Vol XV, No 2, 93–98, 2007.