

Aperfeiçoamento e desenvolvimento de melhorias no Sistema Integrado de Modelagem de Poluição Pontual e Difusa (SIMPPOD)

Identificação:

Grande área do CNPq:	Ciências Exatas e da Terra
Área do CNPq:	Ciência da Computação
Título do Projeto:	Planejamento integrado de controle e redução de cargas pontuais e difusas de poluição em bacias hidrográficas
Professor Orientador:	Lucia Catabriga
Estudante PIBIC/PIVIC:	Juliane Azeredo Ferreira

Resumo: *O presente relatório apresenta os resultados do aperfeiçoamento e desenvolvimento de melhorias no Sistema Integrado de Modelagem de Poluição Pontual e Difusa (SIMPPOD). Em síntese, as melhorias são: implementação de outras funções objetivos, tratamento de novos parâmetros de entrada, a geração de novas saídas gráficas que levaram ao aperfeiçoamento da interface, bem como outras mudanças no que tange a funcionalidade de desempenho do código.*

Palavras chaves: Sistema de Suporte a Decisão. Python. Otimização. Poluição Pontual. Poluição Difusa.

1 Introdução

Os padrões brasileiros de qualidade de água foram fixados pela Resolução do Conselho Nacional de Meio Ambiente (Conama) nº 357 de 2005, a qual foi posteriormente complementada pela resolução Conama nº 430 de 2011, estabelecendo limites de concentração para vários parâmetros de qualidade de água.

Todavia, a qualidade de água nos rios brasileiros frequentemente está em desacordo com a legislação vigente, violando o referido padrão de qualidade, e essa violação ocorre principalmente devido à aportes de cargas poluentes aos cursos d'água. Tanto os processos naturais como atividades humanas influenciam na qualidade de água de corpos d'água. Entretanto, a intensificação destas atividades sobre a bacia hidrográfica geralmente resulta na deterioração da qualidade da água dos seus recursos hídricos. Estas atividades intervêm com o equilíbrio

do ecossistema resultando, por vezes, em perda de diversidade e alterações nos constituintes químicos e parâmetros físicos dos cursos d'água presentes na bacia.

A poluição hídrica pode ser classificada como pontual quando o lançamento de carga poluente ocorre de modo concentrado e numa localidade específica, como por exemplo, o esgoto de uma cidade. Por outro lado, a poluição hídrica pode ser classificada como difusa quando essa carga poluente não possui uma fonte ou localidade específica, como os poluentes que se encontram presentes nas enxurradas (Novotny (2003)).

Comumente são empregados métodos de busca, como algoritmos genéticos, para identificar valores mínimos de eficiências de remoção de cargas de poluição, de modo que os cursos d'água se mantenham de acordo com a legislação ambiental. Dada a complexidade presente em sistemas hídricos, principalmente pelas múltiplas variáveis e processos envolvidos a serem representados, o uso de meta-heurísticas como alternativa de otimização para estes sistemas vêm crescendo nos últimos anos (Maringanti (2011)).

Este assunto foi o tema principal da pesquisa de tese de Selenia Lopes Carvalho, defendida em dezembro de 2019 no Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental da UFES (Carvalho (2019)). Assim sendo, no edital PIBIC 2017/2018 foi apresentada proposta de projeto de pesquisa de implementação de modelo de qualidade de água para simular os efeitos e comportamentos destas cargas de poluição em cursos d'água, implementação de modelo de estimativa de produção de cargas difusas, além de algoritmo genético para otimizar a redução de cargas de origem pontual (Ribeiro (2018), Novotny (2000), Gonçalves & Resende (2011), Von Sperling (2014)). No ano seguinte, edital PIBIC 2018/2019, o projeto teve continuidade, sendo desenvolvido algoritmo de otimização para poluição difusa e uma primeira versão de interface, constituindo então um sistema de suporte a decisão denominado "Sistema Integrado de Modelagem de Poluição Pontual e Difusa" ou simplesmente "SIMPPOD" (Ribeiro (2019)). Dando continuidade a pesquisa, no edital PIBIC 2019/2020 foi então apresentada proposta direcionada ao aperfeiçoamento da interface, dos modelos presentes no SIMPPOD e a inclusão de outras metaheurísticas, o qual foi intitulado "Desenvolvimento de melhorias no Sistema Integrado de Modelagem de Poluição Pontual e Difusa (SIMPPOD)" (Ferreira (2020a), Ferreira (2020b)). Resultados obtidos foram publicados em (Ferreira et al., 2021).

O presente projeto teve por meta desenvolver melhorias no SIMPPOD, aperfeiçoando os resultados obtidos nos projetos de Iniciação Científica anteriores. O projeto previu o aperfeiçoamento e implementação de diferentes habilidades ao código, de modo a melhorar sua atuação, e incluir novas funcionalidades, como por exemplo a aplicação de novos parâmetros de entrada, utilização de um critério de parada e implementação de outras funções objetivas.

2 Objetivos

O presente projeto teve por objetivo incorporar novas funcionalidades, modelos de otimização e aperfeiçoar a relação do usuário com o SIMPPOD. Destacamos os seguintes objetivos específicos: (i) implementar e testar novas funções objetivos; (ii) implementar e testar a otimização de outros parâmetros de qualidade de água como, por exemplo, o nitrogênio; (iii) implementar e testar um critério de parada determinado; (iv) tratamento de novos parâmetros de entrada, como o fator de segurança do Oxigênio Dissolvido (OD); (v) geração de novas saídas gráficas como, por exemplo, do comportamento da função objetivo e do tempo de execução em cada iteração do programa; (vi) aplicar o SIMPPOD a outras bacias hidrográficas além da bacia hidrográfica do rio Pardo (atual área de estudo); (vii) otimizar e modularizar o código atual, bem como a sua interface; (viii) continuar a aperfeiçoar a atual interface, tornando-a mais funcional e amigável, principalmente para usuários com pouco ou nenhum conhecimento da modelagem computacional desenvolvida, mas que atuem nos setores afins a área de meio ambiente (comunidade leiga); (xix) desenvolver instalador para o SIMPPOD.

3 Metodologia

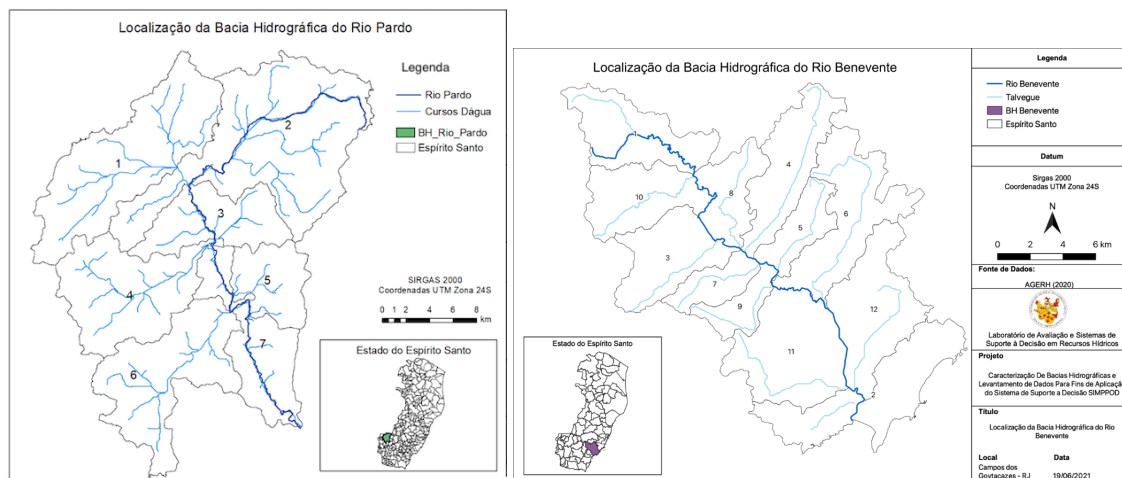
A seguir são discriminadas as metodologias utilizadas para a realização de cada componente e etapa deste projeto de iniciação científica.

3.1 Características das bacias estudadas

A bacia hidrográfica do Rio Pardo, afluente do Rio Itapemirim, está localizada quase totalmente no estado do Espírito Santo (Ferreira, 2020a). Uma sucinta caracterização da bacia pode ser vista na Figura 1a. Os esgotos domésticos dos núcleos urbanos dos municípios de Ibatiba e Lúna são caracterizadas como fontes pontuais. Para a caracterização de fontes difusas - as entradas de lançamento de esgoto - a bacia hidrográfica é subdivida em sete unidades, denominadas de sub-bacias e identificadas pelos algarismos de 1 a 7 na Figura 1a.

A bacia hidrográfica do Rio Benevente, a qual se encontra no sul do Estado do Espírito Santo, abrange 5 municípios capixabas, totalizando uma área de 1208,31 km². Para a caracterização de fontes difusas a bacia hidrográfica é subdivida em doze sub-bacias identificadas pelos algarismos de 1 a 12 na Figura 1b.

Uma descrição mais completa das características da bacia do Rio Pardo pode ser analisada em Carvalho (2019), enquanto que a da bacia do Rio Benevente pode ser vista em Cordeiro (2021).



(a) Rio Pardo (Fonte: Carvalho (2019).)

(b) Rio Benevente (Fonte: Cordeiro (2021)).

Figura 1: Mapas de localização das bacias hidrográficas em estudo.

3.2 Sistema Integrado de Modelagem de Poluição Pontual e Difusa

O SIMPPPOD é um sistema de suporte a decisão que permite ao usuário estimar a produção de cargas difusas e simular o perfil de qualidade de água em rios a partir de entrada de fontes pontuais e difusas. Ademais, permite identificar os percentuais de remoção/redução necessários a serem aplicados a estas cargas de modo a garantir a classe de qualidade de água desejada pelos usuários.

Portanto, o SIMPPPOD é um sistema de suporte ao enquadramento e ao planejamento e gestão de recursos hídricos (Carvalho, 2019). Ele é composto por dois algoritmos de otimização: o Algoritmo Genético de Otimização de Fontes Pontuais (AGOFP) e o Algoritmo Genético de Otimização de Fontes Difusas (AGOFD) (Ferreira et al., 2021), um modelo de qualidade de água denominado Qual-UFGM (Von Sperling, 2014), um modelo hidrológico (Novotny, 2003) e também um modelo de estimativa de cargas difusas (Novotny, 2003).

Um Algoritmo Genético é composto por uma população de *cromossomos (soluções)*, os quais são submetidos a uma função de avaliação, *função objetivo* (FO), considerando um conjunto de restrições a serem atendidas Linden (2003). Tais funções objetivo serão elucidadas na Seção 3.3. No SIMPPPOD foram considerados três algoritmos genéticos distintos: algoritmo genético com mutação, denominado de AG1 Linden (2003), algoritmo genético com mutação e elitismo, denominado AG2, e algoritmo genético das chaves aleatórias viciadas ou *Biased Random-Key Genetic Algorithm* (BRKGA) Gonçalves & Resende (2011). Entretanto esse projeto tratou apenas do AG2 e BRKGA, visto que estudos previamente realizados mostraram a ineficiência deste AG1 no assunto (Ferreira et al., 2021).

O AGOFP busca identificar a eficiência mínima de remoção que uma determinada Estação de Tratamento de Esgoto (ETE) deve ter para não violar os limites de concentração de classe no curso d'água que recebe o efluente tratado. A melhor solução é aquela que apresenta a

menor eficiência de remoção atendendo aos padrões de classe de qualidade de água. Portanto, na versão da poluição pontual, o *cromossomo* é representado por um vetor composto por n_p números randômicos gerados no intervalo $[E_m; 0,9]$, sendo E_m a eficiência mínima¹ e n_p o número de lançamentos de esgoto na bacia hidrográfica.

Por sua vez, o AGOFD identifica o percentual mínimo a ser removido nos parâmetros DBO5, NH3, NO e P, considerando como restrição os mesmos limites de classe. Consequentemente, o cromossomo é definido como uma matriz $n_d \times 4$ de valores randômicos no intervalo $[0; 0,9]$, onde n_d representa o número de entradas de fonte difusas de poluição. Para ambos os rios em estudo, n_d representa o número de sub-bacias, conforme Figura 1a e Figura 1b.

Nas duas versões do algoritmo - AGOFP e AGOFD - a população inicial é formada a partir da geração aleatória de soluções até que n_{sol} soluções válidas sejam geradas. A partir da população inicial, as novas populações são geradas por meio de operadores genéticos. O cruzamento é a geração de um novo indivíduo (filho) que carrega material genético de outros dois (os pais). A mutação é caracterizada pela substituição de indivíduos de baixa qualidade por indivíduos gerados randomicamente.

3.3 Modelos de otimização

Os modelos de otimização buscam identificar a eficiência mínima de remoção que uma determinada Estação de Tratamento de Esgoto (ETE) deve ter para não violar os limites de concentração de classe no curso d'água que recebe o efluente tratado.

O SIMPPOD até então tratava de duas funções objetivo: uma para o AGOFP denominada FO1, e outra para o AGOFD denominada FO4. Estas são representadas pelas equações (1) e (2), respectivamente.

$$\min_{j=1, n_{sol}} F_P(j) = \sum_{i=1}^{n_p} E^j(i) \quad (1)$$

$$\min_{j=1, n_{sol}} F_D(j) = \sum_{i=1}^{n_d} \left[\left(W_{DBO_5} R_{DBO_5}^j(i) \right) + \left(W_{NH_3} R_{NH_3}^j(i) \right) + \left(W_{NO} R_{NO}^j(i) \right) + \left(W_P R_P^j(i) \right) \right] \quad (2)$$

onde $E^j(i)$ é a j -ésima eficiência de tratamento da i -ésima fonte poluidora pontual relativa a DBO5; R_*^j é a j -ésima remoção das cargas poluentes na i -ésima sub-bacia, W_* é o peso do parâmetro R_*^j , respectivamente, para DBO5, NH3, NO e P. Maiores detalhes acerca dessas funções objetivos pode ser encontrados em Carvalho (2019).

Neste projeto, foram trabalhados dois novos modelos de otimização para Algoritmo Genético de Otimização de Fontes Pontuais (AGOFP): um para o Nitrogênio Amoniacal somente, como descrito em (3) e denominado aqui como FO2, e outro para o Nitrogênio Amoniacal e a Demanda

¹Referente aos limites mínimos de eficiência que as ETes devem possuir, os quais foram fixados pela CONAMA 430/2011.

Bioquímica de Oxigênio simultaneamente, como explicitado em (4) e denominado aqui como FO3.

$$\min_{j=1, n_{sol}} F_P(j) = \sum_{i=1}^{n_p} E^j_{Namon}(i) \quad (3)$$

$$\min_{j=1, n_{sol}} F_P(j) = \sum_{i=1}^{n_p} \alpha E^j_{DBO_5}(i) + \beta E^j_{Namon}(i) \quad (4)$$

onde n_{sol} é o tamanho da população sendo considerado para o algoritmo de otimização, n_p é o número de lançamentos de esgoto na bacia hidrográfica, $E^j_{DBO_5}(i)$ é a j -ésima eficiência de tratamento da i -ésima fonte poluidora pontual relativa a DBO5, $E^j_{Namon}(i)$ é a j -ésima eficiência de tratamento da i -ésima fonte poluidora pontual relativa a Namon, e α e β são o peso do parâmetro E^j , respectivamente, para DBO5 e NH3. Maiores detalhes acerca dessas funções objetivos pode ser encontrados em Sá (2018).

3.4 Critério de parada

A definição do critério de parada em métodos aproximados é um importante passo para acelerar seu processo de solução. Neste trabalho foi considerado um critério de parada com base na otimização da função objetivo. Nos algoritmos AGOFP e AGOFD são analisadas os valores das funções objetivos durante a execução em suas 5 últimas iterações e, caso não ocorra uma melhora de pelo menos 5% neste valor, são gerados os arquivos de saída neste instante da execução. Ao final, a iteração que satisfaz o critério de parada é identificada e mostrada em alguns gráficos, como por exemplo: do comportamento da FO, do tempo de execução em cada iteração do programa e do número de filhos inválidos gerados nos cruzamentos - essa iteração onde o critério de parada foi atingido. Além disso, para cada arquivo de saída gerado relativo à otimização que considera o número total fixo de iterações, também é gerado um arquivo similar com os dados obtidos da primeira iteração que atendeu o critério de parada estabelecido.

Em questões de nomenclatura, este trabalho considera como "Otimização Completa" os resultados obtidos através da execução de todas as iterações fornecidas no arquivo de entrada, e "Otimização Rápida" os resultados gerados na primeira iteração que satisfaz o critério de parada.

3.5 Python

A linguagem de programação Python é uma linguagem de alto nível de multiparadigma, sendo orientada a objetos, funcional, procedural e imperativa. Possui uma codificação próxima à linguagem natural, priorizando, assim, sua legibilidade. Tratando-se de representação visual, Tkinter, uma biblioteca do Python, possibilita o desenvolvimento de interfaces gráficas. O estudo da linguagem foi norteado pelo livro Lutz & Ascher (2007).

Tal linguagem foi utilizada para a criação do programa SIMPPOD, com foco neste projeto no aprimoramento das saídas e refinamento e modularização do programa e de sua interface. Além disso, a linguagem Python foi empregada no tratamento de novos parâmetros, na geração

de novas saídas gráficas e em algumas otimizações no código como, por exemplo, o ajuste das unidades e legendas nos arquivos de saída e o plote dos limites de concentração de cada parâmetro de acordo com a legislação vigente para a classe de qualidade de água escolhida pelo usuário. Por fim, essa linguagem foi necessária para criar um instalador executável do SIMPPOD, que será discutido na Seção 3.6.

3.6 Executável

Um executável é um arquivo que compreende a representação binária das instruções de máquina, como também uma representação de mais baixo nível destas quando preciso, para que o programa gerado possa ser executado sem a necessidade do código-fonte. No processo de geração deste arquivo executável, todas as bibliotecas necessárias para o funcionamento do sistema são embutidas nele afim de que possa rodar sem que seja exigida alguma instalação prévia ao uso. Portanto, qualquer indivíduo com o arquivo executável de um programa pode utilizá-lo, independente se a máquina deste contém estas bibliotecas ou não, criando um acesso mais fácil a aplicação.

4 Resultados

4.1 Mudanças no código do SIMPPOD

Foram realizados ajustes nos arquivos de saída gerados por cada modo e tipo de execução. No geral estas mudanças referem-se a inserir no cabeçalho das tabelas, unidades nas variáveis de saída, e outras informações que facilitem a leitura dos dados simulados por parte do usuário. Os nomes dos arquivos também foram padronizados e modificados de modo a deixar mais evidente seu conteúdo. Ademais, com a criação do critério de parada, novos arquivos passaram a ser gerados - aqueles relacionados à otimização agora possuem também uma versão denominada "Versão Rápida" com os resultados obtidos na primeira iteração que satisfaz o critério determinado.

Com relação ao SIMPPOD, houve o aperfeiçoamento da relação usuário-código a partir do aprimoramento e da modularização do programa, em que os diferentes modos de execução podem ser executados separadamente em módulos visuais na interface. Isso ocorreu por meio da criação e manipulação de métodos ligados à representação visual através de melhorias na interface previamente desenhada, tais como: criação de tela para escolha de execução, criação de tela para escolha do tipo de execução para um modo selecionado, criação de tela para escolha do algoritmo de otimização a ser usado quando o modo de otimização for selecionado, criação de tela com apenas os arquivos e parâmetros de entrada relacionados ao modo e tipo selecionados e geração de uma mensagem de erro quando pelo menos um arquivo/parâmetro de entrada estiver faltando. Além disso, houve a redação de um texto informativo acerca do programa SIMP-

POD no botão *Sobre* exibido na tela inicial do programa. A Figura 2 exemplifica uma dessas telas criadas. As demais podem ser visualizadas no relatório parcial deste mesmo projeto (Ferreira, 2020b).

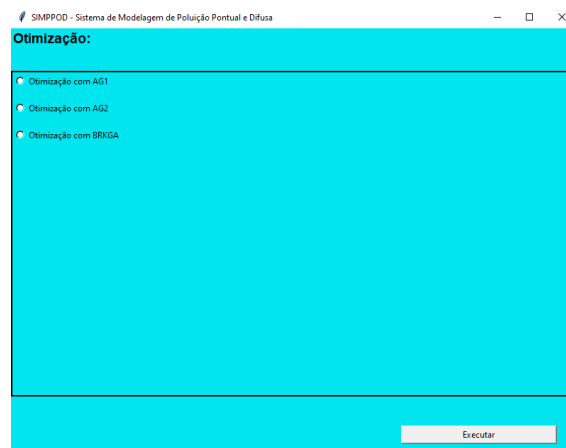


Figura 2: Nova tela de seleção do algoritmo a ser utilizado no modo de execução "Otimização".

Dentre as melhorias destacamos que os gráficos de comportamentos dos parâmetros de qualidade de água passam a explicitar o limite de concentração estabelecido pela Resolução do Conselho Nacional de Meio Ambiente (Conama), com base na classe do rio fornecida no arquivo de entrada. Finalmente, novos gráficos são gerados no modo de otimização: comportamento da função objetivo, do tempo de execução em cada iteração do programa e do número de filhos inválidos gerados nos cruzamentos. Estes exibem também a última iteração da otimização rápida, ou seja, a primeira iteração que atende o critério de parada. Exemplos desses gráficos poderão ser visualizados nas Seção 4.2.1 e Seção 4.2.2.

4.2 Experimentos Numéricos

Foram realizados experimentos na Bacia do Rio Pardo e na Bacia do Rio Benevente, utilizando dados de tipo de solo e de uso e ocupação do solo referentes ao ano de 2015, disponibilizados pelo GEOBASES², além de outras variáveis físicas levantadas nos trabalhos de Carvalho (2019); Cordeiro (2021).

Após um conjunto preliminar de testes, em todos os experimentos foram considerados: um número fixo de iterações ($n_{iter} = 50$), sendo cada população de tamanho fixo $n_{sol} = 50$ indivíduos; os pesos W_* da Equação (4) iguais a 0,50; a porcentagem do conjunto elite de 30% e do conjunto de mutantes de 10%. Os valores adotados para a porcentagens de elite e mutantes foram baseados nos resultados encontrados no trabalho de Gonçalves & Resende (2011). Com o objetivo de minimizar os efeitos aleatórios dos algoritmos, foram realizados um total de 10 repetições dos testes para todos os métodos considerados e todos os resultados a seguir mostram as médias obtidas nas 10 execuções.

²Sistema Integrado de Bases Geoespaciais do Estado do Espírito Santo (<https://geobases.es.gov.br>)

Os objetivos dos experimentos a seguir são retratar e comparar as otimizações completa e rápida para cada uma das bacias simuladas. Por falta de espaço mostraremos somente os resultados para o algoritmo AGOFP.

4.2.1 Bacia do Rio Pardo

A Tabela 1 apresenta a média e o desvio padrão do número de inválidos dos mutantes e do tempo de execução para os algoritmos AG2 e BRKGA na versão AGOFP, na otimização completa e rápida para a bacia do Rio Pardo, considerando as FOs 2 e 3. Claramente o número de inválidos para a otimização completa é mais elevado. Essa característica é esperada uma vez que são consideradas um total maior de iterações. Consequentemente o tempo de execução da otimização rápida é muito menor, levando menos de 20 segundos para o critério de parada ser atingido e gerar as saídas gráficas correspondentes.

Tabela 1: Média e Desvio Padrão do conjunto de inválidos gerados na criação do grupo de mutantes em valor unitário, bem como do tempo de execução em segundos, no AGOFP do AG2 e BRKGA, para as FOs 2 e 3, na otimização completa (OC) e na otimização rápida (OR), referentes à bacia do Rio Pardo.

FO	Método	Parâmetro	OC		OR	
			Média	DP (%)	Média	DP (%)
FO2	AG2	inválidos [u]	0,00	0,00	0,00	0,00
		tempo de execução [s]	52,66	2,21	7,43	3,94
	BRKGA	inválidos [u]	53,38	9,60	7,63	25,22
		tempo de execução [s]	55,44	1,43	7,89	2,49
FO3	AG2	inválidos [u]	1146,50	4,19	136,00	12,55
		tempo de execução [s]	97,32	2,60	18,35	3,87
	BRKGA	inválidos [u]	1148,63	5,03	141,38	22,49
		tempo de execução [s]	96,50	2,34	18,17	5,57

A média e o desvio padrão das funções objetivos FO2 e FO3, tanto na otimização completa quanto na otimização rápida, para os métodos AG2 e BRKGA aplicados à poluição pontual são apresentados na Tabela 2. É notável que as médias das FOs variam pouco entre a OC e a OR para ambos algoritmos.

A Tabela 3 apresenta as eficiências de NH₃ na FO2 e de DBO₅ e NH₃ na FO3 para a bacia do Rio Pardo. Nos dois algoritmos são geradas eficiências próximas entre a otimização completa e a rápida, com desvios padrão menores para o parâmetro de qualidade de água avaliado para a FO2 no modo OC. Já na FO3, os desvios padrão são um pouco maiores, com eficiências que divergem mais entre OC e OR. Contudo, em ambas, os resultados são similares e satisfatórios, mostrando que o critério de parada traz resultados tão bons quando consideradas todas as 50 iterações, na bacia do Rio Pardo.

Tabela 2: Média e Desvio Padrão da FO2 e da FO3 no AG2 e BRKGA para AGOFP, na otimização completa (OC) e na otimização rápida (OR), referentes à bacia do Rio Pardo.

FO	Método	OC		OR	
		Média	DP (%)	Média	DP (%)
FO2	AG2	1,49	0,15	1,50	0,34
	BRKGA	0,19	5,09	0,21	7,29
FO3	AG2	0,91	0,97	0,94	1,89
	BRKGA	0,92	1,56	0,93	1,65

Tabela 3: Média e Desvio Padrão das eficiências de NH3 na FO2 e de DBO5 e NH3 na FO3, no AG2 e BRKGA para AGOFP, na otimização completa (OC) e na otimização rápida (OR), referentes à bacia do Rio Pardo.

FO	Método	Parâmetro	OC		OR	
			Média	DP (%)	Média	DP (%)
FO2	AG2	NH3	1,49	0,15	1,50	0,34
	BRKGA	NH3	0,19	5,09	0,21	7,29
FO3	AG2	DBO5	1,06	0,89	1,10	1,37
		NH3	0,76	1,64	0,79	4,21
	BRKGA	DBO5	1,06	0,91	1,08	2,19
		NH3	0,77	2,76	0,79	2,41

Um exemplo do comportamento do parâmetro de qualidade da amônia, antes e depois do processo de otimização, pode ser visualizado na Figura 3. Estas saídas gráficas explicitam o limite de concentração estabelecido pela Conama com base na classe do rio Pardo fornecida como dado de entrada. Como pode ser observado no cenário otimizado (Fig. 3b) os limites de NH3 não são violados, enquanto que no cenário base são (Fig.3a). A Fig. 4a apresenta o comportamento da FO2 ao longo das 50 iterações. Podemos observar que o valor da FO quase não varia. Em geral o tempo de processamento para as 50 iterações não variam muito após o critério de parada ser estabelecido, como pode ser observado na Fig. 4b.

Para comparar os resultados obtidos pela otimização completa e rápida, foi utilizada a otimização da amônia no rio Pardo. A Fig. 5 apresenta os perfis de concentração de NH3 considerando as duas versões, considerando a FO2 no AG2. É perceptível que a otimização obtida na versão OR é expressivamente similar a obtida na versão OC, fortalecendo a ideia do uso de um critério de parada para simplificação da execução do programa.

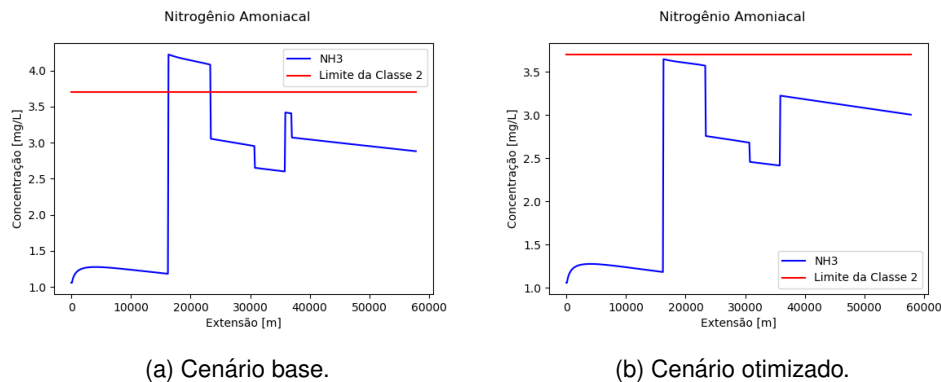


Figura 3: Gráfico do comportamento da NH3 para a FO2 no AGOFP do BRKGA na área de estudo do Rio Pardo com o seu limite de classe correspondente, no cenário base à esquerda e no cenário otimizado à direita.

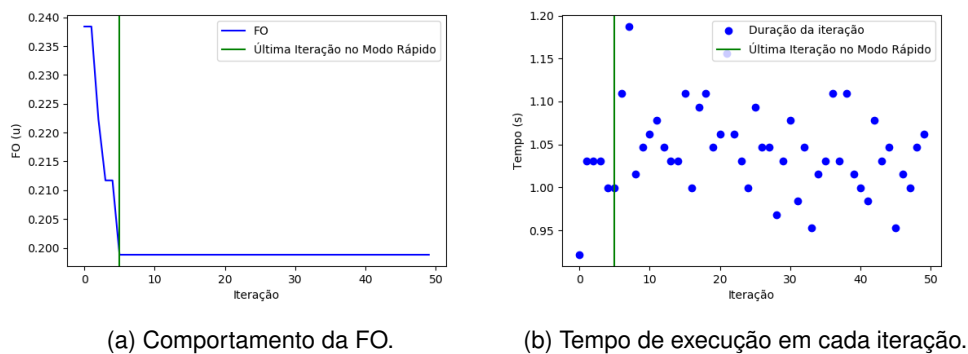


Figura 4: Alguns dos novos gráficos gerados pelo programa no modo "Otimização" para a FO2 no AGOFP do BRKGA na bacia do Rio Pardo.

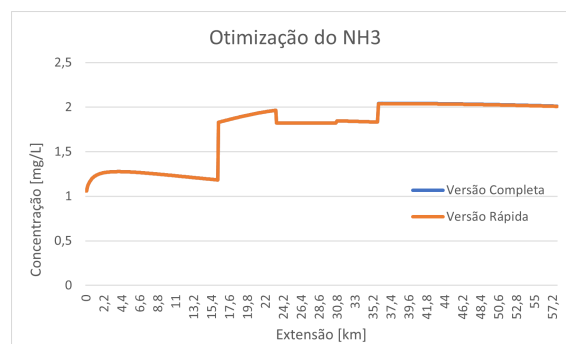


Figura 5: Comparação entre a otimização da NH3 obtida na otimização completa e rápida para a FO2 no AGOFP do AG2 na bacia do Rio Pardo.

4.2.2 Bacia do Rio Benevente

A Tabela 4 apresenta a média e o desvio padrão do número de inválidos dos mutantes e do tempo de execução para os algoritmos AG2 e BRKGA na versão AGOFP, na otimização completa e rápida para a bacia do Rio Benevente, para as FOs 2 e 3. Análogo ao encontrado para o Rio

Pardo, o número de inválidos para a OR é mais reduzido, bem como o tempo de execução, enfatizando positivamente o uso do critério de parada, isto é, a otimização rápida.

Tabela 4: Média e Desvio Padrão do conjunto de inválidos gerados na criação do grupo de mutantes em valor unitário, bem como do tempo de execução em segundos, no AGOFP do AG2 e BRKGA, para as FOs 2 e 3, na otimização completa (OC) e na otimização rápida (OR), referentes à bacia do Rio Pardo.

FO	Método	Parâmetro	OC		OR	
			Média	DP (%)	Média	DP (%)
FO2	AG2	inválidos [u]	0,00	0,00	0,00	0,00
		tempo de execução [s]	123,98	0,73	17,83	0,81
	BRKGA	inválidos [u]	1001,75	2,70	123,75	12,43
		tempo de execução [s]	205,29	1,64	40,05	6,88
FO3	AG2	inválidos [u]	997,63	5,03	115,75	6,56
		tempo de execução [s]	205,15	2,53	38,81	3,53
	BRKGA	inválidos [u]	985,88	4,70	115,63	17,96
		tempo de execução [s]	133,69	5,00	24,47	7,15

A média e o desvio padrão das funções objetivos FO2 e FO3, tanto na otimização completa quanto na otimização rápida, para os métodos AG2 e BRKGA aplicados à poluição pontual são apresentados na Tabela 5. As médias das FOs para os algoritmos AG2 e BRKGA contam com um desvio padrão mais elevado, com discrepâncias mais consideráveis entre os modos de otimização. O BRKGA com a FO2 apresenta as melhores médias nos modos OC e OR, sendo que no modo OC temos o melhor desempenho.

Tabela 5: Média e Desvio Padrão da FO2 e da FO3 no AG2 e BRKGA para AGOFP, na otimização completa (OC) e na otimização rápida (OR), referentes à bacia do Rio Benevente.

FO	Método	OC		OR	
		Média	DP (%)	Média	DP (%)
FO2	AG2	3,82	0,11	3,85	0,30
	BRKGA	0,80	1,77	0,99	6,50
FO3	AG2	2,42	1,15	2,55	1,34
	BRKGA	2,42	1,08	2,55	2,05

A Tabela 6 apresenta as eficiências de NH3 na FO2 e de DBO5 e NH3 na FO3 para a bacia do Rio Benevente. Aqui são geradas eficiências um pouco mais discrepantes entre a otimização completa e a rápida, com desvios padrão menores para os parâmetros de qualidade de água avaliados para a FO2 e para a FO3 no modo OC. Para este caso, os resultados obtidos através das 50 iterações são consideravelmente melhores do que os obtidos pelo critério de parada, podendo ser concluído que o critério de parada adotado para o Rio Benevente precisa ser melhorado.

Tabela 6: Média e Desvio Padrão das eficiências de NH₃ na FO2 e de DBO5 e NH₃ na FO3, no AG2 e BRKGA para AGOFP, na otimização completa (OC) e na otimização rápida (OR), referentes à bacia do Rio Benevente.

FO	Método	Parâmetro	OC		OR	
			Média	DP (%)	Média	DP (%)
FO2	AG2	NH ₃	3,82	0,11	3,85	0,30
	BRKGA	NH ₃	0,80	1,77	0,99	6,50
FO3	AG2	DBO5	3,95	0,64	4,00	1,60
		NH ₃	0,88	5,19	1,09	9,86
	BRKGA	DBO5	3,98	1,20	4,08	1,70
		NH ₃	0,88	3,18	1,03	8,26

A Fig. 6 apresenta o comportamento do parâmetro de qualidade da amônia, antes e depois do processo de otimização para o BRKGA. Como pode ser observado no cenário base (Fig. 6a) o limite de NH₃ é discretamente violado, enquanto que no cenário otimizado não ((Fig. 6b). O comportamento da FO2 ao longo das 50 iterações pode ser observado na Fig. 7a, mostrando que após ser atingido o critério de parada ainda há uma pequena variação da FO. A Fig. 7b mostra que o tempo de execução de cada iteração possui uma variação discreta ao longo das 50 iterações na bacia do Rio Benevente.

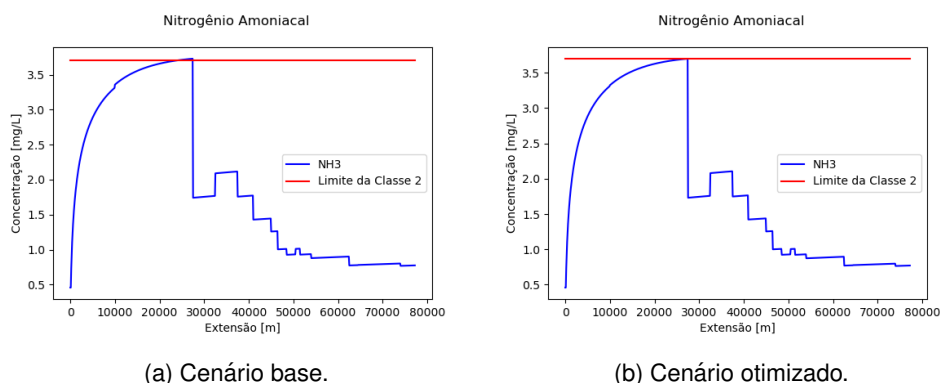


Figura 6: Gráfico do comportamento da NH₃ para a FO2 no AGOFP do BRKGA na área de estudo do Rio Benevente com o seu limite de classe correspondente, no cenário base à esquerda e no cenário otimizado à direita.

A Fig. 8 compara os perfis de NH₃ nas versões resultados OC e OR, considerando a FO2 no BRKGA no Rio Benevente. Mais uma vez observamos que os perfis são similares, fortalecendo a ideia do uso de um critério de parada para diminuir o tempo de execução do programa.

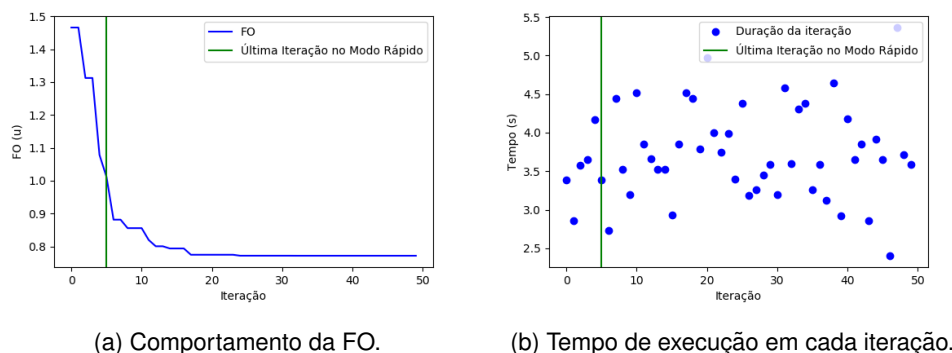


Figura 7: Alguns dos novos gráficos gerados pelo programa no modo "Otimização" para a FO2 no AGOFP do BRKGA na bacia do Rio Benevente.

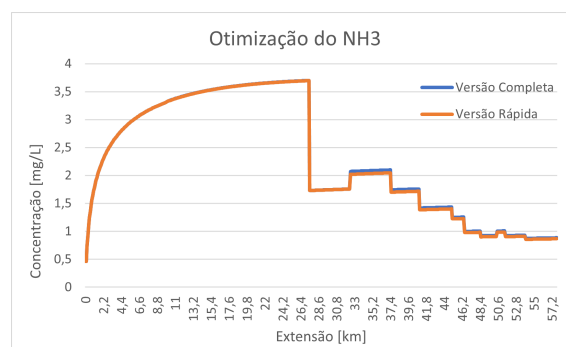


Figura 8: Comparação entre a otimização da NH3 obtida na otimização completa e rápida para a FO2 no AGOFP do BRKGA na bacia do Rio Benevente.

5 Discussão e Conclusões

Este trabalho apresenta uma aplicação dos algoritmos genéticos AG2 e BRKGA, com e sem um critério de parada, em duas bacias: Rio Pardo e Rio Benevente, localizadas no estado do Espírito Santo. Foram utilizadas duas funções objetivo aplicadas as fontes pontuais: uma para o Nitrogênio Amoniacal somente, denominada FO2, e outra para o Nitrogênio Amoniacal e a Demanda Bioquímica de Oxigênio simultaneamente, denominada FO3. Para o conjunto de testes realizados, foram consideradas execuções sem e com critério de parada, denominadas Otimização Completa (OC) e Otimização Rápida (OR) respectivamente, a fim de avaliar a eficiência do critério de parada considerado em cada bacia. Pode-se concluir que, para a bacia do Rio Pardo, a OR foi satisfatória, apresentando média dos valores similares e desvio padrão pequeno. Já para a bacia do Rio Benevente, a OR apresentou valores médios e desvio padrão um pouco mais discrepantes, indicando que o critério de parada adotado ainda não está representando bem os dados da bacia do Rio Benevente. Contudo, em ambas as bacias em estudo, o comportamento do parâmetro avaliado NH3 na OR mostrou-se similar ao na OC. Estudos futuros apontam para a definição de novos critérios de parada que permitam diminuir os desvios padrão encontrados.

Referências

- Carvalho, S. L. (2019). *Sistema De Suporte A Decisão Para Planejamento, Controle E Redução De Cargas Difusas E Pontuais Em Bacias Hidrográficas*. PhD thesis, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental - UFES. Tese de Doutorado em Engenharia Ambiental.
- Cordeiro, L. E. (2021). Caracterização de Bacias Hidrográficas e Levantamento de Dados para Fins de Aplicação do Sistema de Suporte à Decisão SIMPPOD. Technical report, Universidade Federal do Espírito Santo (UFES).
- Ferreira, J. A., Carvalho, S. L., Rangel, M. C., & Catabriga, L. (2021). Comparação de algoritmos genéticos na solução de problemas de aporte de cargas de poluição em rios. *Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional*.
- Ferreira, J. A. (2020a). Desenvolvimento de melhorias no Sistema Integrado de Modelagem de Poluição Pontual e Difusa (SIMPPOD) - Subprojeto de Iniciação Científica. Technical report, Universidade Federal do Espírito Santo (UFES).
- Ferreira, J. A. (2020b). Planejamento integrado de controle e redução de cargas pontuais e difusas de poluição em bacias hidrográficas - Relatório Parcial. Technical report, Universidade Federal do Espírito Santo (UFES).
- Gonçalves, J. F. & Resende, M. G. (2011). Biased random-key genetic algorithms for combinatorial optimization. *Journal of Heuristics*, 17.
- Linden, R. (2003). *Algoritmos Genéticos*. Ciência Moderna, Rio de Janeiro.
- Lutz, M. & Ascher, D. (2007). *Aprendendo Python*. Bookman, Porto Alegre, 2. ed. edition.
- Maringanti, C. e. a. (2011). Application of a multi-objective optimization method to provide least cost alternatives for nps pollution control. *Environmental Management*, 48:448–461.
- Novotny, V. (2000). Integrating diffuse nonpoint pollution control and water body restoration into watershed management. *Journal Of The American Water Resources Association*, 35:717–727.
- Novotny, V. (2003). *Water quality: diffuse pollution and watershed management*. John Wiley, New Jersey.
- Ribeiro, L. F. O. (2018). Implementação de rotinas de Otimização de Ferramentas de Controle e Redução de Poluição para Rios e Córregos. Technical report, Universidade Federal do Espírito Santo (UFES).
- Ribeiro, L. F. O. (2019). Implementação de rotinas de Otimização de Ferramentas de Controle e Redução de Poluição para Rios e Córregos - Aperfeiçoamento e Complementação do SSD. Technical report, Universidade Federal do Espírito Santo (UFES).
- Sá, G. L. N. (2018). Estimativa de eficiências mínimas de remoção de nitrogênio em sistemas de tratamento de esgotos - uma abordagem para o âmbito de bacias hidrográficas. Master's thesis, Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória.
- Von Sperling, M. (2014). *Introdução À Qualidade Das Águas E Ao Tratamento De Esgotos*. Departamento de Engenharia Sanitária e Ambiental, UFMG, Belo Horizonte, 4. ed. edition.