

Análise e Superação de Algumas Dificuldades na
Calibração Automática do Modelo SMAP-II - Versão Suavizada

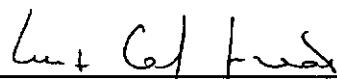
Fernanda Rocha Thomaz

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DA COORDENAÇÃO DOS PROGRAMAS
DE PÓS-GRADUAÇÃO DE ENGENHARIA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO
RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A
OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA CIVIL.

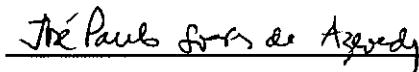
Aprovada por:



Prof. Paulo Canedo de Magalhães, Ph.D.
(Presidente)



Prof. Luiz Carlos Guimarães, Ph.D.



Eng. José Paulo Soares de Azevedo, Ph.D.

Rio de Janeiro, RJ - BRASIL
MAIO de 1992

THOMAZ, FERNANDA ROCHA

Análise e Superação de Algumas Dificuldades na Calibração Automática do modelo SMAP-II - Versão Suavizada [RIO DE JANEIRO] 1992

XIX, 102 p. 29,7 cm (COPPE/UFRJ), M. Sc., Engenharia Civil, 1992

Tese - Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE
I Modelo Chuva-Vazão I. COPPE - UFRJ II. Título (Série)

Agradecimentos

Ao orientador Paulo Canedo de Magalhães pela confiança, sugestão do tema e acompanhamento de todo o trabalho.

Ao co-orientador e amigo Adilson Elias Xavier pela grande contribuição no desenvolvimento de todo o trabalho.

A todos do Laboratório de Hidrologia, em especial à Luciene, Mário, Helena, Ligia, Rosa e Daisy pela ajuda e carinho durante esse período.

Aos amigos Maria Helena, Márcia, Amorim, Vânia, Márcio e Ferrari pela força, amizade e incentivo que sempre me dedicaram.

Aos meus irmãos, Célio e Carlos, e irmãs, Ana, Bel, Lúcia e Raquel por todo apoio e carinho em todos os momentos.

Aos meus padrinhos, Paulo e Regina, por todo amor e exemplo de vida.

Aos meus pais, Célio Thomaz e Lúcia Rocha, pelo incentivo, apoio e carinho que me dedicaram durante toda a minha vida. A minha maior amiga Lúcia por todo seu amor e dedicação.

Ao João Carlos Mattoso Salgado pelas sugestões, revisão no texto e por todo seu amor e companheirismo em todos os momentos.

Resumo da tese apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M. Sc.)

Análise e Superação de Algumas Dificuldades na Calibração Automática do Modelo SMAP-II - Versão Suavizada

Fernanda Rocha Thomaz

Maio de 1992

Orientador: Prof. Paulo Canedo de Magalhães

Programa: Engenharia Civil

Os modelos chuva-vazão procuram simular os processos físicos que ocorrem em uma bacia hidrográfica durante a fase terrestre do ciclo hidrológico. Para representar e unir os processos físicos são usadas funções matemáticas em cuja formulação existem parâmetros, estimados através de calibração manual ou automática. O processo de calibração é considerado uma das etapas mais difíceis e trabalhosas do processo de simulação.

Nesse trabalho analisam-se as dificuldades observadas na calibração automática do modelo SMAP-II, versão suavizada. Uma possível interação entre os parâmetros que representam a fase canal do modelo e a recessão do escoamento superficial é investigada a partir de análises das superfícies resposta, do cálculo do índice de sensibilidade e também do desenvolvimento das equações da fase canal. Para superação de dificuldades apresentam-se duas estratégias: A primeira relaciona-se com a escolha do valor inicial dos parâmetros no começo da calibração, a outra consiste na reestruturação da fase canal do modelo. Finalmente, apresentam-se os resultados de um estudo de sensibilidade de um dos parâmetros pertencentes ao método da penalização hiperbólica, responsável pela manutenção dos parâmetros no interior da região viável.

Abstract of thesis presented to COPPE/UFRJ as partial fulfillment of the requirements for degree of Master of Science (M.Sc.)

Analysis and Resolution of some difficulties in the automatic calibration of the SMAP-II model -
Smoothing - Version

Fernanda Rocha Thomaz

May of 1992

Thesis Supervisor: Paulo Canedo de Magalhães

Department: Civil Engineering

The rainfall-runoff models are used to simulate the physical processes which occur in a basin during the land phase of the hydrological cycle. To represent and link the physical processes, mathematical functions are used in which formulation there are parameters estimated by manual or automatic calibration. The calibration is one of the most difficult and arduous phases in the simulation process.

This work analyses the difficulties encountered in the automatic calibration of the SMAP-II model, smoothing version. A possible interdependence between the parameters of the channel phase and the runoff recession coefficient is investigated from analysis of the response surface, the sensivity ratio calculation and also the channel phase equations development. In order to overcome the difficulties two strategies are presented: The first one is related to the choice of the parameters initial values and the second consists in the channel phase reformulation. Finally, the results of a parameter sensivity study belonging to the method of Hyperbolic Penalty are presented. This method is responsible for the parameters maintainance in the feasible region.

ÍNDICE

| | |
|---|----|
| <u>CAPÍTULO I - INTRODUÇÃO</u> | 1 |
| <u>CAPÍTULO II - REVISÃO BIBLIOGRAFICA</u> | 4 |
| II.1 - Estrutura Típica dos Modelos Chuva-Vazão | 4 |
| II.2 - Calibração dos Modelos Chuva-Vazão | 7 |
| II.3 - Problemas na Identificabilidade dos Parâmetros | 12 |
| II.3.1 - Escolha da função objetivo | 13 |
| II.3.2 - Problemas causados pelos dados | 16 |
| II.3.3 - Escolha do algoritmo de otimização | 17 |
| II.3.4 - Estrutura dos modelos | 19 |
| <u>CAPÍTULO III - O MODELO E O PROCESSO DE CALIBRAÇÃO</u> | 28 |
| III.1 - Descrição do Modelo | 28 |
| III.2 - Técnica de Suavização | 35 |
| III.3 - Componentes Usados para Calibração do Modelo | 39 |
| <u>CAPÍTULO IV - ANÁLISE E ESTRATÉGIAS PARA SUPERAÇÃO DE DIFICULDADES</u> | 46 |
| IV.1 - Resultados da Calibração do Modelo | 46 |
| IV.2 - Análise de Dificuldades | 50 |

| | |
|---|-----------|
| IV.2.1 - Análise das superfícies resposta de KSUP x KARM, VTDH ₁ x KARM e KSUP x VTDH ₁ | 51 |
| IV.2.2 - Cálculo do índice de sensibilidade | 54 |
| IV.2.3 - Desenvolvimento das equações da fase canal do modelo | 60 |
| IV.3 - Estratégias para Superação de Dificuldades | 63 |
| IV.3.1 - Escolha do ponto inicial | 64 |
| IV.3.2 - Reestruturação da fase canal do modelo | 67 |
| CAPÍTULO V - ANÁLISE DOS RESULTADOS | 70 |
| V.1 - Ponto Inicial Central | 70 |
| V.2 - Calibração com o Modelo Reestruturado | 73 |
| CAPÍTULO VI - ESTUDO DO PARÂMETRO "λ" DA PENALIZAÇÃO | 76 |
| VI.1 - Valores Inicial e Final de λ | 77 |
| VI.2 - Precisão de cada Minimização (ACC) | 83 |
| VI.3 - Variação do λ entre Minimizações (λ^{k+1}) | 88 |
| CAPÍTULO VII - CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES | 92 |
| VII.1 - Conclusões | 92 |
| VII.2 - Recomendações | 94 |
| BIBLIOGRAFIA | 95 |

APÊNDICE A - DERIVADAS DAS FUNÇÕES RELACIONADAS COM A
NOVA FASE CANAL DO MODELO

100

LISTA DE FIGURAS

| | | |
|-----------------------|---|----|
| Figura II.1 - | Superfície resposta de uma função com dois parâmetros | 9 |
| Figura II.2 - | Reservatório de armazenamento simples | 14 |
| Figura II.3 - | Reservatório típico | 20 |
| Figura II.4 - | Fluxograma do reservatório típico | 21 |
| Figura II.5 - | Índice de interação entre dois parâmetros | 26 |
| Figura II.6 - | Parâmetros sem problemas de interação | 26 |
| Figura III.1 - | Esquema do modelo SMAP-II | 28 |
| Figura III.2 - | Histograma tempo-área | 32 |
| Figura III.3 - | Fluxograma do modelo após a reestruturação | 36 |
| Figura III.4 - | Representação gráfica das FUNC's nas formas original e suavizada | 39 |
| Figura III.5 - | Primeira fase do algoritmo: variação de α mantendo λ constante | 42 |
| Figura III.6 - | Segunda fase do algoritmo: variação de λ mantendo α constante | 42 |
| Figura IV.1 - | Superfície resposta de KSUP x KARM | 52 |
| Figura IV.2 - | Superfície resposta de VTDH ₁ x KARM | 53 |
| Figura IV.3 - | Superfície resposta de VTDH ₁ x KSUP | 54 |

| | |
|--|----|
| Figura IV.4 - Exemplo de uma região de indiferença para dois parâmetros | 57 |
| Figura IV.5 - Ponto inicial com desvios da solução | 64 |
| Figura IV.6 - Alternativa de escolha do ponto inicial | 66 |
| Figura IV.7 - Fase canal do modelo | 68 |
| Figura VI.1 - Precisão ρ x tempo de processamento ($625 \leq \lambda_i \leq 1000$, $ACC = \lambda / 10^7$ e $\lambda^{k+1} = \lambda \cdot 10^{-1}$) | 81 |
| Figura VI.2 - Precisão ρ x tempo de processamento ($625 \leq \lambda_i \leq 1000$, $ACC = \lambda / 10^6$ e $\lambda^{k+1} = \lambda \cdot 10^{-1}$) | 85 |
| Figura VI.3 - Precisão ρ x tempo de processamento ($625 \leq \lambda_i \leq 1000$, $ACC = \lambda / 10^6$ e $\lambda^{k+1} = \lambda \cdot 10^{-2}$) | 90 |

LISTA DE TABELAS

| | |
|---|-----------|
| Tabela II.1 - Relação de alguns modelos chuva-vazão | 6 |
| Tabela II.2 - Classificação dos algoritmos de otimização | 10 |
| Tabela II.3 - Relação de alguns trabalhos que verificaram o desempenho de algoritmos de otimização | 18 |
| Tabela III.1 - Restrições impostas a cada parâmetro do modelo | 40 |
| Tabela IV.1 - Resultados da calibração para ponto inicial com desvio de 10% da solução | 47 |
| Tabela IV.2 - Resultados da calibração para ponto inicial com desvio de 30% da solução | 48 |
| Tabela IV.3 - Resultados da calibração para ponto inicial com desvio de 50% da solução | 48 |
| Tabela IV.4 - Resultados da calibração para ponto inicial com desvio de 75% da solução | 49 |
| Tabela IV.5 - Índice de sensibilidade dos parâmetros do modelo | 59 |
| Tabela V.1 - Resultados da calibração para ponto inicial central utilizando-se seis séries sintéticas diferentes | 71 |
| Tabela V.2 - Ponto inicial central e conjunto solução da tabela (IV.1) | 72 |

| | |
|---|-----------|
| Tabela V.3 - Resultados da calibração com o modelo reformulado | 74 |
| Tabela V.4 - Índice de sensibilidade dos parâmetros do modelo reformulado | 75 |
| Tabela VI.1 - Tempo total de processamento para diferentes λ_i's | 78 |
| Tabela VI.2 - Função objetivo, precisão ρ e tempo de processamento de cada minimização. ($625 \leq \lambda_i \leq 1000$, $ACC = \lambda^k / 10^7$, $\lambda^{k+1} = \lambda^k \cdot 10^{-1}$) | 80 |
| Tabela VI.3 - Função objetivo, precisão ρ e tempo de processamento de cada minimização. ($625 \leq \lambda_i \leq 1000$, $ACC = \lambda^k / 10^6$, $\lambda^{k+1} = \lambda^k \cdot 10^{-1}$) | 84 |
| Tabela VI.4 - 1º vetor adotado para a variável ACC | 86 |
| Tabela VI.5 - 2º vetor adotado para a variável ACC | 87 |
| Tabela VI.6 - 3º vetor adotado para a variável ACC | 87 |
| Tabela VI.7 - 4º vetor adotado para a variável ACC | 87 |
| Tabela VI.8 - 5º vetor adotado para a variável ACC | 87 |
| Tabela VI.9 - Função objetivo, precisão ρ e tempo de processamento de cada minimização. ($625 \leq \lambda_i \leq 1000$, $ACC = \lambda^k / 10^6$, $\lambda^{k+1} = \lambda^k \cdot 10^{-2}$) | 89 |
| Tabela VI.10 - Redução no tempo de processamento | 91 |

LISTA DE SÍMBOLOSMaiúsculas Romanas

ABSI - abstração inicial (parâmetro do modelo SMAP-II).

ACC - precisão de cada minimização, usada na regra de parada da rotina de otimização sem restrições.

CHUVA - precipitação média sobre a bacia.

CPER - capacidade de campo (parâmetro do modelo SMAP-II).

CPS(θ_i) - sensibilidade paramétrica condicional do parâmetro θ_i .

EVPT - evaporação a nível potencial.

EVPTS - evapotranspiração a nível real. Parcela a ser evaporada do reservatório do solo no SMAP-II.

F(θ, α, λ) - função objetivo modificada pelo termo da penalização.

FO - função objetivo de modelos chuva-vazão.

FUNC1 - função que representa o extravazamento do reservatório do solo no SMAP-II.

FUNC2 - função que representa o cálculo da precipitação efetiva no SMAP-II.

FUNC3 - função que representa o cálculo da evaporação potencial no SMAP-II.

FUNC4 - função que representa a parcela não satisfeita de evaporação a nível potencial no SMAP-II.

FUNC5 - função que representa o nível do reservatório do solo após a retirada da parcela de evaporação (modelo SMAP-II).

FUNC6 - função que representa a parcela disponível no reservatório do solo para percolação para o aquífero no SMAP-II.

G_i - submatriz de reestruturação.

H(.) - modelo chuva-vazão.

HUI - hidrograma unitário instantâneo.

I - vetor das variáveis de entrada de modelos chuva-vazão.

K - coeficiente de recessão do reservatório do solo.

KARM - representa o efeito de amortecimento por armazenamento na calha (parâmetro do SMAP-II).

KPER - coeficiente de recarga para o aquífero (parâmetro do modelo SMAP-II).

KSUB - coeficiente de recessão do reservatório subterrâneo (parâmetro do modelo SMAP-II).

KSUP - coeficiente de recessão do reservatório de superfície (parâmetro do modelo SMAP-II).

M - capacidade máxima de armazenamento do reservatório típico.

NPER - nível d'água mínimo do reservatório do solo retido por capilaridade.

NSAT - capacidade máxima do reservatório do solo (parâmetro do modelo SMAP-II).

NSOL - nível d'água do reservatório do solo no SMAP-II.

NSOLES - atualização parcial do nível d'água do reservatório do solo ($NSOLES = NSOL_{t-1} + FUNC3_t$).

NSOLP - atualização parcial do nível d'água do reservatório do solo ($NSOLP_t = NSOLES - FUNC1_t$).

NSOLPP - atualização parcial do nível d'água do reservatório do solo ($NSOLPP_t = NSOLP_t - EVPTS$).

NSUB - nível d'água do reservatório subterrâneo no SMAP-II.

NSUP - nível d'água do reservatório de superfície no SMAP-II.

PI - ponto inicial. Valor atribuído aos parâmetros no início da calibração.

PF - ponto final. Valor dos parâmetros no final da calibração.

$P(g_i(\theta), \alpha, \lambda)$ - função penalidade.

$PS(\theta_i)$ - índice de sensibilidade paramétrica condicional do parâmetro θ_i .

QCAL_t - vazão de saída do modelo SMAP-II no instante t, considerando os efeitos de translação e amortecimento da hidrógrafa no canal.

QENT_t - vazão gerada pelo modelo SMAP-II no instante t, considerando o efeito de translação da hidrógrafa no canal.

QGER - vazão gerada pela fase terra do modelo

QINF - parcela da chuva que contribui para o reservatório do solo no modelo SMAP-II.

QOBS - vetor de vazões observadas.

QOBS_t - vazão observada no instante t.

QPER - vazão de recarga para o reservatório subterrâneo no SMAP-II.

QRES - parcela da chuva que contribui para o reservatório de superfície no modelo SMAP-II.

QSUB - escoamento subterrâneo ou básico do SMAP-II.

QSUP - escoamento superficial ou direto do SMAP-II.

R_t - vazão de transbordo do reservatório típico no instante t.

S_t - vazão inferior do reservatório típico no instante t.

SI ou SI($\theta, \Delta\theta$) - função de identificabilidade estrutural do modelo.

S_{i,i} - elemento da diagonal da matriz de identificabilidade estrutural correspondente ao parâmetro θ_i .

U - ordenada do hidrograma unitário instantâneo amortecido (parâmetro do SMAP-II considerando a reestruturação da fase canal do modelo).

VTDH - ordenadas do histograma tempo-área (parâmetro do SMAP-II).

Z_t(θ) - vazão gerada pelo modelo no instante t a partir do conjunto de parâmetros θ .

$Z_t(\theta + \Delta\theta)$ - vazão gerada pelo modelo no instante t a partir do conjunto de parâmetros $\theta + \Delta\theta$

Minúsculas Romanas

d - parâmetro da função de suavização.

e - vetor de erros estocásticos.

$f(\theta)$ - função objetivo original (penalização hiperbólica).

g_i - vetor correspondente à iésima coluna da matriz de identificabilidade estrutural, eliminando-se o iésimo elemento.

$g_i(\theta)$ - restrições impostas aos parâmetros do modelo SMAP-II.

m - número de restrições do modelo.

n - número de parâmetros.

$nobs$ - número de observações.

$ntdh$ - número de ordenadas do histograma tempo-área.

$ntdhu$ - número de ordenadas do hidrograma unitário instantâneo.

p - constante que atualiza a precisão ACC em cada minimização.

q - constante que atualiza o parâmetro " λ " em cada minimização, no algoritmo de resolução do método de penalização hiperbólica.

t - instante de tempo.

u_t - variável de entrada do reservatório típico proveniente da chuva ou de outros reservatórios no instante t.

x_t - nível d'água do reservatório típico no instante t.

Maiúsculas gregas

$\Delta\theta$ - vetor de perturbação no vetor θ .

ΔZ_t - diferença entre as vazões geradas em dois pontos próximos no instante t.

$\nabla_{\theta}^2 SI$ - matriz de identificabilidade estrutural local em θ .

$\nabla_{\Delta\theta}^2 SI$ - matriz de identificabilidade estrutural em $\Delta\theta$.

$\nabla_{\theta} Z(\theta)$ - vetor de derivadas primeiras da vazão gerada pelo modelo a partir do vetor de parâmetros θ .

Minúsculas gregas

α - ângulo formado entre a abscissa e a assíntota à função penalidade.

β - passo do parâmetro " α " no algoritmo de resolução do método de penalização hiperbólica.

λ - parâmetro da função penalidade

λ_i - valor inicial do parâmetro " λ " no algoritmo de resolução do método de penalização hiperbólica.

λ_f - valor final do parâmetro " λ " no algoritmo de resolução do método de penalização hiperbólica.

v - ângulo a partir do qual é calculado o índice de interação entre dois parâmetros

η_i - índice de sensibilidade do parâmetro θ_i .

$\phi(x_t, M, d)$ - função de suavização aplicada ao modelo SMAP-II.

θ - vetor de parâmetros do modelo.

ψ - contorno da região de indiferença.

ρ - precisão de casas decimais.

$\frac{\delta^2 Z}{\delta \Delta \theta^2}$ - matriz de derivadas segundas da vazão Z.

CAPÍTULO IINTRODUÇÃO

Nos últimos anos, vários pesquisadores têm estudado e analisado as dificuldades associadas à calibração automática de modelos chuva-vazão (JOHNSTON e PILGRIM (1976); SOROOSHIAN e ARFI (1982); GUPTA e SOROOSHIAN (1985); SOROOSHIAN e GUPTA (1985); HENDRICKSON, SOROOSHIAN e BRAZIL (1988); ROTUNNO e CANEDO (1987); SILVA (1990); e outros).

Segundo JOHNSTON e PILGRIM (1976), as superfícies resposta dos modelos chuva-vazão apresentam algumas características, tais como descontinuidades, regiões de indiferença, vales alongados decorrentes da interação entre parâmetros, e vários pontos de mínimos locais que dificultam o processo de otimização.

Essas características podem estar relacionadas a deficiências na estrutura do modelo, a imperfeições decorrentes da representação dos processos físicos e aos dados de calibração. O efeito combinado desses problemas influencia na forma da superfície resposta, onde a busca pelos valores ótimos dos parâmetros se realiza.

O problema das descontinuidades foi identificado por GUPTA e SOROOSHIAN (1985) como consequência da existência de estruturas de patamares limitantes na formulação da maioria dos modelos. Este problema foi resolvido por CANEDO, SILVA e XAVIER (1989), que trataram essas estruturas por técnicas de suavização, permitindo o uso de algoritmos de otimização que usam derivadas primeira e segunda da função objetivo em relação aos parâmetros do modelo.

Nesse trabalho, são analisadas as dificuldades observadas no processo de calibração automática de um

modelo baseado no SMAP-II de DIB (1986), versão suavizada, proposto por SILVA (1990).

Essa análise foi feita a partir da superfície resposta dos parâmetros que representam os efeitos de amortecimento do escoamento superficial, translação da hidrografia e amortecimento no canal, e do cálculo do índice de sensibilidade de cada parâmetro proposto por SOROOSHIAN e GUPTA (1985).

Para superação das dificuldades observadas, apresenta-se uma forma alternativa para escolha do ponto inicial a ser fornecido aos parâmetros no começo da calibração do modelo. Além disso, é proposta uma alteração na formulação da fase canal do modelo onde os parâmetros que representam os efeitos de translação e amortecimento no canal são substituídos pelo hidrograma unitário instantâneo amortecido.

Por último, realiza-se um estudo da sensibilidade de variação do parâmetro externo " λ " da penalização hiperbólica (XAVIER (1982)), responsável pela manutenção dos parâmetros do modelo dentro da região viável.

Esta dissertação está dividida em sete capítulos. No capítulo II encontra-se uma revisão dos principais problemas na calibração de modelos chuva-vazão.

O capítulo III apresenta a descrição do modelo, da técnica de suavização e dos componentes usados para calibração do modelo.

No capítulo IV são feitas análises das dificuldades observadas no processo de calibração do modelo e são propostas duas estratégias para superação dessas dificuldades.

No capítulo V, são analisados os resultados obtidos na calibração do modelo considerando as estratégias adotadas

no capítulo IV.

No capítulo VI é feito um estudo do parâmetro " λ " da penalização hiperbólica.

Finalmente no capítulo VII são apresentadas as conclusões e recomendações do presente trabalho.

CAPÍTULO IIREVISÃO BIBLIOGRÁFICA**II.1 - ESTRUTURA TÍPICA DOS MODELOS CHUVA-VAZÃO**

Os modelos chuva-vazão procuram simular os fenômenos que ocorrem em uma bacia hidrográfica durante a fase terrestre do ciclo hidrológico.

De uma forma geral, são utilizados para estudar o comportamento dos fenômenos hidrológicos na bacia, na extensão de séries de vazão, no dimensionamento de obras hidráulicas, na previsão de cheias e no estudo dos efeitos de mudanças no uso do solo.

São constituídos na maioria das vezes por reservatórios fictícios que representam a capacidade de armazenamento da água nas vegetações, depressões e nas camadas do solo. O movimento da água na bacia é reproduzido pela transferência de água entre os reservatórios e pela adição ou/e deplecionamento de água em cada reservatório.

A simulação do movimento e distribuição da água é quantificada através de "funções matemáticas" que representam e unem os processos físicos que ocorrem na bacia. Alguns exemplos desses processos físicos são a infiltração no solo, a percolação da zona superior para a zona inferior do solo, o escoamento superficial e profundo, a evaporação de todas as camadas do solo, entre outros.

Os dados de entrada são na maioria das vezes a altura de chuva e evaporação potencial, em geral concentrados, representando a altura de chuva e evaporação média sobre a bacia. A saída do modelo corresponde, geralmente, à vazão no ponto de controle considerado.

Duas características importantes dos modelos chuva-vazão citadas em SOROOSHIAN (1988) são:

- . Atualização das condições de umidade na bacia a cada intervalo de tempo; e
- . Simulação de algumas das não linearidades dominantes do sistema tais como aquelas associadas à saturação do solo.

Um modelo é uma representação imperfeita e simplificada do sistema físico, e portanto está sujeito a várias fontes de incerteza.

Conforme CANEDO (1989), o problema se encontra na grandeza e no controle dessas imperfeições. Qualquer modelo chuva-vazão que seja adequado, confiável e muitas vezes testado ou aplicado nas melhores circunstâncias, fornecerá resultados com incertezas.

O'DONNELL e CANEDO (1980) relacionaram as principais fontes de incerteza na modelagem chuva-vazão, apresentadas a seguir.

Registro de dados na bacia

- * Erros na coleta dos dados
- * Redução dos dados pontuais para médias espaciais
- * Redução dos dados contínuos para médias temporais
- * Erros no processo de estimativa de variáveis que não são diretamente observadas

Estrutura dos modelos chuva-vazão

- * Conhecimento imperfeito dos processos físicos
- * Aproximações na representação do sistema físico pelo modelo
- * Substituição de variáveis com variação espacial por valores concentrados

- * Omissão de processos físicos considerados sem importância para um propósito de modelagem

Calibração do modelo

- * Escolha da função objetivo
- * Tamanho da amostra a ser usada na calibração
- * Variabilidade da calibração frente a diferentes amostras
- * Critério para declarar convergência dos parâmetros durante a otimização
- * Inabilidade para distinguir os pontos de mínimo local e global

Nos últimos anos, diversos modelos chuva-vazão têm sido desenvolvidos, variando quanto à estrutura, desde as mais simples com poucos parâmetros até outras mais complexas envolvendo um maior número de parâmetros. Na tabela (II.1) estão relacionados alguns modelos citados na literatura.

Tabela II.1 - Relação de alguns modelos chuva-vazão

| MODELO | AUTOR |
|--|------------------------------|
| SSARR-Streamflow Synthesis and Reservoir Regulation (1958) | U.S. Army Corp of Engineers |
| SWM - Stanford Watershed Model (1966) | Crawford e Linsley |
| Dawdy e O'Donnell | DAWDY e O'DONNELL (1965) |
| Boughton (1966) | Boughton |
| Sacramento (1973) | Burnash, Ferral e McGuire |
| COPPE/TWM | CANEDO (1974) |
| SMAP | LOPES, BRAGA e CONEJO (1981) |
| IPH | TUCCI (1981) |

Nas funções matemáticas usadas para representar os processos físicos que ocorrem na bacia hidrográfica, existem algumas constantes chamadas de parâmetros do modelo. Alguns desses parâmetros podem, teoricamente, ser estimados através do estudo das características físicas da bacia ou por medição direta. Entretanto, estas alternativas são na maioria das vezes impraticáveis, face à variabilidade espacial dos subprocessos físicos envolvidos. Outros parâmetros apresentam fraca conceituação física e assim não são facilmente quantificados.

Por este motivo, os parâmetros são estimados através do processo de calibração no qual valores ótimos são determinados antes do modelo ser aplicado para simulação da vazão. Esse assunto será abordado no próximo item.

II.2 - CALIBRAÇÃO DE MODELOS CHUVA-VAZÃO

Os modelos chuva-vazão são gerais e devem ser calibrados para aplicações específicas. O processo de calibração corresponde à fase de identificação dos parâmetros da bacia que está sendo modelada. Nesse instante o modelo chuva-vazão torna-se específico para uma certa situação.

Conforme mencionado por SOROOSHIAN e ARFI (1982), a calibração é o estágio mais crítico de todo o processo de modelagem. Mesmo o modelo mais sofisticado e realista, se não for bem calibrado produzirá erros muito grandes na simulação das vazões.

A calibração de um modelo pode ser feita através dos processos manual e automático. No processo de calibração manual, também chamado de método de tentativa e erro, o hidrólogo atribui valores aos parâmetros até encontrar valores que melhor reproduzam as vazões observadas na bacia em estudo. É um processo trabalhoso onde os resultados da calibração dependem da experiência do hidrólogo. Além

disso, é um método bastante subjetivo uma vez que dois usuários de mesma experiência podem chegar a resultados distintos.

Como citado em CANEDO (1989), um modelo que tenha 10 parâmetros e o usuário atribua apenas 4 valores para cada parâmetro, poderá ser testado $4^{10} = 1048576$ vezes se todas as possibilidades forem verificadas. Esse número de combinações pode impedir que o usuário faça uma calibração mais apurada, como seria desejado.

Na calibração automática, a busca dos parâmetros é feita de forma sistemática através de algoritmos de otimização que procuram minimizar ou maximizar um critério matemático de ajuste, conhecido como função objetivo.

Essa técnica de calibração pode ser representada da seguinte forma:

$$\text{Otimizar } FO(e) = FO(Q_{OBS}, H(I, \theta)) \quad (II.1)$$

Onde:

Q_{OBS} - vetor de vazões observadas;

I - vetor das variáveis de entrada (geralmente chuva e evaporação);

$H(\cdot)$ - modelo chuva-vazão;

θ - vetor de parâmetros do modelo;

e - vetor de erros estocásticos; e,

FO - função objetivo.

A função objetivo, como indicado na equação (II.1), procura medir o ajuste entre as vazões calculadas pelo modelo e as vazões observadas na bacia.

Para uma dada amostra, o valor da função objetivo é dependente apenas dos valores atribuídos aos parâmetros. Os "n" parâmetros de um modelo são representados pelas "n" coordenadas de um sistema "n" dimensional, onde é definida

a função objetivo. O gráfico da função objetivo forma uma superfície situada no espaço "n+1" dimensional conhecida como superfície resposta.

No ponto mais baixo dessa superfície está localizado o menor valor da função objetivo ao qual estão associados os valores ótimos dos parâmetros. Esse ponto é chamado de mínimo global.

A figura (II.1) mostra um exemplo de uma superfície resposta de uma função de dois parâmetros X_1 e X_2 , apresentada em JOHNSTON e PILGRIM (1973).

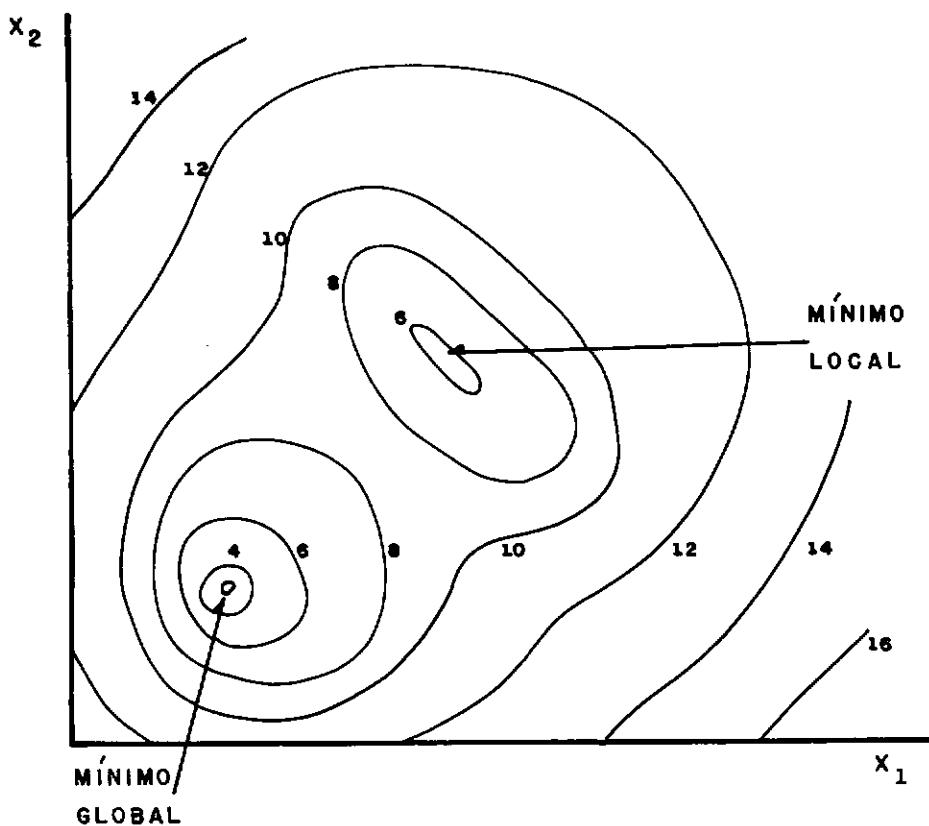


Figura II.1 - Superfície resposta de uma função com dois parâmetros - fonte: JOHNSTON E PILGRIM (1973)

Pode ser observado na figura (II.1) um ponto de mínimo local caracterizado por um valor de função objetivo menor que os pontos ao seu redor, porém maior que um ou mais pontos localizados em outra parte da superfície resposta.

Informações a respeito da superfície resposta são usadas pelos algoritmos de otimização na busca dos valores ótimos dos parâmetros. Durante o processo de busca a sequência de pontos gerados pelo algoritmo pode convergir indistintamente quer para um ponto de mínimo global quer para um ponto de mínimo local. Isso ocorre em função dos algoritmos de otimização não terem informações de como distinguir os pontos de mínimo local do ponto de mínimo global.

Os algoritmos de otimização estão divididos em três classes principais: busca direta, primeira ordem e segunda ordem. A tabela (II.2) apresenta as informações utilizadas por cada classe e alguns algoritmos encontrados na literatura.

Tabela II.2 - Classificação dos algoritmos de otimização

| CLASSE | INFORMAÇÕES UTILIZADAS | ALGORITMOS CONHECIDOS |
|----------------------|--|--|
| BUSCA DIRETA | Função Objetivo | <ul style="list-style-type: none"> . Direções Rotativas (ROSENBROCK (1960)) . Busca de Trajetórias (Hooke e Jeeves) . Poliedros Flexíveis (Nelder e Mead) |
| 1 ^a ORDEM | Função Objetivo Derivada Primeira | <ul style="list-style-type: none"> . Direções de Máximo Declive (Steepest descent) |
| 2 ^a ORDEM | Função Objetivo Derivada Primeira Derivada Segunda | <ul style="list-style-type: none"> . Newton-Raphson . Quasi-Newton . Newton modificado |

Os algoritmos de otimização pertencentes à classe dos métodos de busca randômica também são encontrados com frequência na literatura.

Neste trabalho foi usado o método de penalização hiperbólica (XAVIER (1982)) para transformar o problema restrito original numa sequência de problemas irrestritos que foram resolvidos pelo método de otimização Quasi-Newton com atualização BFGS. Este assunto será tratado no próximo capítulo.

O uso de algoritmos de otimização acelera a calibração tornando-a relativamente mais objetiva uma vez que o hidrólogo não está envolvido diretamente no processo. Entretanto, os problemas identificados ao longo do tempo mostram que a experiência do hidrólogo é de grande importância na calibração automática de modelos chuva-vazão.

A primeira pesquisa conhecida que utilizou uma técnica automática para estimar os parâmetros de um modelo chuva-vazão foi o trabalho de DAWDY e O'DONNELL (1965). Neste trabalho, foi usado o método de direções rotativas de ROSEN BROCK (1960) com algumas alterações, acoplado a um modelo de estrutura simplificada. A função objetivo usada foi a de mínimos quadrados que representa a soma dos quadrados das diferenças entre as vazões observadas e geradas pelo modelo.

Os autores estudaram a sensibilidade de resposta do modelo face a variações em cada um dos parâmetros, utilizando série de vazões sintéticas geradas pelo próprio modelo. O uso de dados sintéticos permite testar o algoritmo de otimização quanto à eficiência e rapidez.

DAWDY e O'DONNELL (1965) concluíram que o melhor ajuste entre os dados observados e calculados pelo modelo é função da estrutura do modelo, da precisão dos dados usados, do método de otimização e do critério de ajuste (função objetivo). A forma da superfície resposta determinará o desempenho do método de otimização. Dessa maneira, os dois últimos critérios citados estão interrelacionados.

Também verificaram a necessidade de se testar outros tipos de funções objetivo e métodos de otimização, na calibração de modelos chuva-vazão.

A partir dessa pesquisa pioneira, os problemas associados a calibração automática de modelos chuva-vazão foram ganhando um espaço cada vez maior na literatura. Esse assunto será tratado no próximo item.

II.3 - PROBLEMAS NA IDENTIFICABILIDADE DOS PARAMETROS

JOHNSTON e PILGRIM (1976) afirmam que um dos problemas mais comuns na calibração automática de modelos chuva-vazão é a obtenção de diferentes grupos de valores ótimos dos parâmetros a partir de diferentes grupos de valores iniciais ou de dados observados em uma dada bacia. Segundo eles, quando isto ocorre, os verdadeiros valores ótimos não são obtidos e portanto, os valores ajustados são questionáveis.

Para identificar o problema, os autores realizaram uma análise na superfície resposta dos parâmetros do modelo Boughton. A partir dessa análise, foram observadas algumas características na superfície resposta que podem gerar dificuldades aos métodos de otimização, na busca do valor mínimo da função objetivo. Essas características são as seguintes:

***Vales alongados com pouca declividade** - Surgem em função da existência de interdependência entre certos parâmetros do modelo.

***Regiões de indiferença** - A superfície resposta é bem plana e o gradiente é quase zero. Surgem quando o valor da função objetivo é indiferente a mudanças no valor de um ou mais parâmetros.

***Descontinuidades na superfície resposta.**

***Presença de mínimos locais.**

Essas características são as principais responsáveis pela dificuldade de encontrar parâmetros únicos e conceitualmente realísticos. Por este motivo, nos últimos anos, vários pesquisadores têm procurado identificar as principais causas que geram as características observadas por JOHNSTONe PILGRIM (1976).

Têm sido analisados os problemas relacionados com a escolha do algoritmo de otimização, função objetivo, estrutura do modelo, dados de calibração, e a influência desses fatores na forma da superfície resposta e nos resultados da calibração. Estes problemas são discutidos a seguir.

II.3.1 - Escolha da Função Objetivo

A escolha da função objetivo deve ser feita de acordo com o objetivo do uso do modelo. Se a escolha não for apropriada implicará num aumento de imprecisões nos resultados.

Por exemplo, se o modelo é aplicado para o estudo de vazões de cheia de uma bacia, uma função objetivo que dará um bom ajuste é a de mínimos quadrados. Essa função é bastante usada e está descrita na equação (II.2) a seguir.

$$FO = \sum_{t=1}^{nobs} (Q_{OBS}_t - Q_{CAL}(t))^2 \quad (II.2)$$

Onde:

FO - função objetivo;

t - tempo;

Q_{OBS}_t - vazão observada no instante t ;
 Q_{CAL}_t - vazão calculada pelo modelo no instante t ;
 θ - vetor de parâmetros do modelo; e,
 n_{obs} - número total de observações utilizadas.

Por outro lado, se o objetivo da modelagem for o ajuste de vazões de pequena magnitude, a função objetivo poderia ser a seguinte:

$$FO = \sum_{t=1}^{n_{obs}} \left(\frac{1}{Q_{OBS}_t} - \frac{1}{Q_{CAL}_t} \right)^2 \quad (II.3)$$

CANEDO (1979) concluiu que apenas vazões de magnitude bem pequena, próximas a zero, são simuladas com precisão quando usada a função objetivo dada pela expressão (II.3).

Estudos relativos ao critério de escolha da função objetivo foram elaborados por DISKIN e SIMON (1977) e CANEDO (1979).

JOHNSTON e PILGRIM (1976), analisaram a superfície resposta para diferentes tipos de função objetivo, usando um modelo com um único reservatório de armazenamento conforme ilustra a figura (II.2).

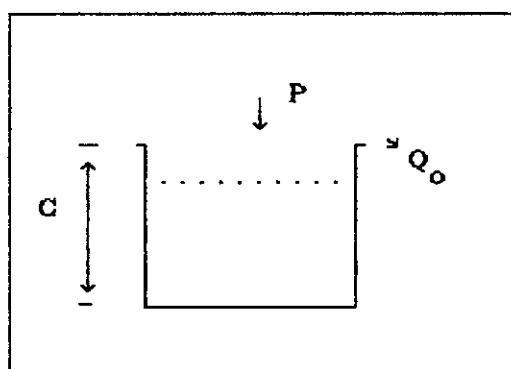


Figura II.2 - Reservatório de armazenamento simples

fonte: JOHNSTON E PILGRIM (1976)

Essa análise foi elaborada a partir da variação do expoente "j" da função objetivo que descreve o somatório dos desvios absolutos apresentada na equação (II.4) a seguir.

$$FO = \sum_{t=1}^{nobs} | QOBS_t - QCAL_t |^j \quad (II.4)$$

Os autores concluíram que a variação no expoente da função objetivo da equação (II.4), apenas altera a escala vertical da superfície resposta sem mudar a posição do ponto de mínimo global. Como não existe alteração nos valores ótimos dos parâmetros, a reprodução pelo modelo de pequenos e grandes eventos é independente do valor do expoente "j".

Entretanto, verificaram que $j = 1/2$ e provavelmente qualquer valor entre zero e um, a superfície resposta torna-se insatisfatória em função do surgimento de regiões planas e de possíveis pontos de mínimos locais sobre cada descontinuidade.

Verificaram também que para $j=2$ a forma da superfície resposta é parabólica, conduzindo a uma função objetivo mais apropriada.

Conforme mencionado em CANEDO (1989), SOROOSHIAN e DRACUP (1980) sugerem que a função objetivo usada na calibração deve considerar a natureza estocástica dos erros nos dados. Para isso propõem o uso da teoria da máxima verossimilhança. Estudos nessa área foram feitos por SOROOSHIAN e GUPTA (1983) e SOROOSHIAN, GUPTA e FULTON (1983).

Recentemente, CASTRO (1992) analisou diversas funções objetivo adotadas em modelos chuva-vazão sob o ponto de vista do objetivo do uso do modelo e da fundamentação estatística intrínseca a cada função objetivo.

II.3.2 - Problemas Causados pelos Dados

Para calibrar um modelo chuva-vazão, é necessário ter em mãos registros históricos de precipitação, evaporação e vazão que sejam de boa qualidade e de extensão adequada. Entretanto, muitas vezes, os dados disponíveis não representam o total de eventos possíveis de ocorrer em uma bacia hidrográfica e apresentam erros provenientes da coleta dos dados básicos e de aproximações.

Conforme mencionado por SOROOSHIAN e GUPTA (1983), o processo de calibração pode ser incapaz, por exemplo, de estimar os valores dos parâmetros que representam a capacidade máxima dos reservatórios de armazenamento de um modelo chuva-vazão, se eles não forem ativados adequadamente pelos dados.

Essa falta de ativação pode produzir uma superfície resposta bem complexa, com regiões de indiferença, levando a dificuldades no processo de obtenção dos parâmetros. É necessário, portanto, que se faça uma escolha adequada dos dados de calibração.

Os resultados do estudo elaborado por IBBITT (1972) usando uma amostra de dados pequena, mostram que uma das causas dos problemas obtidos na convergência dos parâmetros pode ter sido a insuficiência de informações contidas nos dados.

Em O'DONNELL e CANEDO (1980), foi estudada a influência do tamanho da amostra usada na calibração. Os resultados obtidos revelaram que registros de 3 anos são satisfatórios, recomendando como situação ideal o uso de 5 anos de registros. Registros acima desse valor adicionam poucas informações ao processo de calibração.

Os erros provenientes da coleta dos dados de precipitação, evaporação e vazão também prejudicam a estimativa dos parâmetros. Esses erros podem ser dos tipos aleatórios ou sistemáticos.

Erros aleatórios produzirão este mesmo tipo de erro na vazão gerada pelo modelo. Já os erros sistemáticos implicarão em estimativas incorretas dos valores dos parâmetros, sendo difícil identificá-los na saída do modelo.

Conforme mencionado por SOROOSHIAN e GUPTA (1983), os erros sistemáticos são mais graves e são encontrados com freqüência nos registros de vazão.

Para quantificar esse dois tipos de erros, SOROOSHIAN e DRACUP (1980) propuseram o uso de uma função objetivo baseada na teoria da máxima verossimilhança, conforme mencionado no item anterior.

II.3.3 - Escolha do Algoritmo de Otimização

Os algoritmos pertencentes à classe dos métodos de busca direta, tabela (II.2), têm sido usados com bastante freqüência na calibração automática de modelos chuva-vazão (DAWDY e O'DONNELL (1965), DAWDY e BERGMANN (1969), O'CONNELL, NASH e FARRELL (1970), NASH e SUTCLIFFE (1970), MANDEVILLE, O'CONNELL E SUTCLIFFE (1970), IBBITT (1972), JOHNSTON e PILGRIM (1973,1976), CANEDO (1979), DISKIN e SIMON (1977), SOROOSHIAN e GUPTA (1983), SOROOSHIAN e ARFI (1982)).

Segundo GUPTA e SOROOSHIAN (1985) e ROTUNNO (1989), a justificativa para o uso desses métodos por alguns autores, deve-se à dificuldade em calcular explicitamente as derivadas da função objetivo em relação aos parâmetros do modelo, necessárias aos métodos de primeira e segunda ordem.

Além disso, a existência de descontinuidades na superfície resposta afeta o desempenho dos métodos que necessitam de continuidade nas derivadas primeira e segunda da função objetivo.

Alguns pesquisadores verificaram a eficiência de diferentes algoritmos de otimização, tanto de busca direta como de primeira e segunda ordem, na calibração de diferentes modelos chuva-vazão. Alguns desses trabalhos estão resumidos na tabela II.3.

Tabela II.3 - Relação de alguns trabalhos que verificaram o desempenho de algoritmos de otimização

| AUTOR | MODELO USADO | BACIA | ALGORITMOS USADOS | MELHOR DESEMPENHO |
|---|-------------------|-----------------|--|-------------------------------|
| IBBITT e O'DONNELL (1971) | DAWDY e O'DONNELL | SÉRIE SINTÉTICA | a)5 B.DIRETA b)1 1 ^ª ORDEM c)2 2 ^ª ORDEM d)1 B.RANDOM | MÉTODO DE ROSENBROCK |
| JOHNSTON e PILGRIM (1976) | BOUGHTON | LIDSDALE2 | a)SIMPLEX b>DAVIDON, FLETCHER e POWELL | MÉTODO SIMPLEX DE NELDER MEAD |
| PICKUP (1977) | BOUGHTON | SÉRIE SINTÉTICA | a) 4 MÉTODOS | MÉTODO SIMPLEX DE NELDER MEAD |
| GUPTA e SOROOSHIAN (1985) | SIXPAR | SÉRIE SINTÉTICA | a)SIMPLEX b>MARQUADT-GAUSS-NEWTON | MÉTODO SIMPLEX DE NELDER MEAD |
| HENDRICKSON, SOROOSHIAN e BRAZIL (1988) | SACRAMENTO | SÉRIE SINTÉTICA | a)BUSCA DE TRAJETÓRIAS b>MARQUADT-GAUSS-NEWTON | BUSCA DE TRAJETÓRIAS |
| ROTUNNO (1989) | SMAP | SÉRIE SINTÉTICA | a)ROSEN b)ROSEN BROCK | MÉTODO DE ROSEN BROCK |

De uma forma geral, os métodos de busca direta tiveram um desempenho melhor ou foram considerados mais robustos que os métodos que usam derivadas.

Nos trabalhos de IBBITT e O'DONNELL (1971), JOHNSTON e PILGRIM (1976) e PICKUP (1977), as derivadas da função objetivo em relação aos parâmetros do modelo foram calculadas de forma numérica, por meio de técnicas de diferenças finitas. Segundo JOHNSTON e PILGRIM (1976), essas aproximações podem ser a causa do melhor desempenho dos métodos de busca direta.

Em GUPTA e SOROOSHIAN (1985), HENDRICKSON, SOROOSHIAN e BRAZIL (1988) e ROTUNNO (1989), as derivadas foram calculadas analiticamente e recursivamente no tempo a partir da definição dos vários caminhos que a água pode percorrer dentro do modelo.

Entretanto, mesmo com o cálculo explícito das derivadas, os problemas relacionados com o uso de algoritmos de primeira e segunda ordem não foram resolvidos.

Isso ocorre em função da existência de uma variedade de caminhos a serem percorridos pela água dentro dos modelos chuva-vazão que fazem aparecer as descontinuidades nas derivadas da função objetivo, impedindo que os métodos de primeira e segunda ordem tenham um bom desempenho. Este assunto será tratado no próximo item.

II.3.4 - Estrutura dos modelos

De uma forma geral, os modelos chuva-vazão são constituídos de estruturas de patamares limitantes representadas na formulação do modelo por estruturas de desvios condicionais (IF's). Essas estruturas dão origem a vários modos de operação do modelo que geram diferentes caminhos a serem percorridos pela água.

Com o objetivo de determinar as expressões das derivadas, GUPTA e SOROOSHIAN (1985) analisaram os diferentes modos de operação de um reservatório de armazenamento simples, que é uma estrutura típica de patamares limitantes. Este reservatório está ilustrado na figura (II.3).

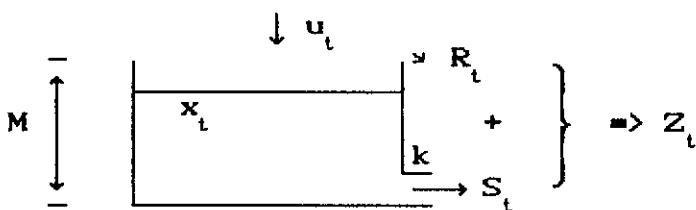


Figura II.3 - Reservatório típico

Quando o nível do reservatório (x_t) for menor ou igual ao nível máximo de armazenamento (M), a vazão resultante (Z_t) será dada apenas pela vazão inferior (S_t), representando o primeiro modo de operação desse sistema.

O segundo modo de operação ocorrerá quando o nível do reservatório (x_t) for maior que M . Neste caso, a vazão resultante (Z_t) será dada pela soma das vazões de transbordo (R_t) e inferior (S_t).

Esses dois modos de operação, geram duas formas distintas de equacionamento do modelo como demonstra o fluxograma da figura (II.4).

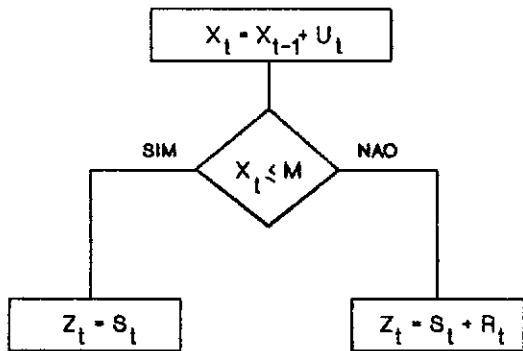


Figura II.4 - Fluxograma do reservatório típico

Conforme mencionado por SILVA (1990), a vazão Z_t embora seja uma função contínua, apresenta descontinuidade na derivada primeira e indeterminação na derivada segunda no ponto $x_t = M$.

Como os modelos chuva-vazão normalmente envolvem um número maior de estruturas tipo patamar semelhantes às descritas acima, os modos de operação ou a variedade de caminhos também aumentam significativamente. Desta forma, as descontinuidades aparecerão com maior frequência, prejudicando o uso de métodos de primeira e segunda ordem que necessitam de continuidade nas derivadas.

ROTUNNO (1989) concluiu que a solução do problema de otimização está diretamente ligado à remoção das descontinuidades presentes nos processos físicos. O autor sugeriu o uso de técnicas de suavização para eliminar essas descontinuidades.

Seguindo essa linha, SILVA (1990) aplicou uma técnica de suavização nas estruturas de patamares limitantes presentes no modelo SMAP-II de DIB (1986).

Primeiramente o modelo foi reestruturado, reduzindo-se o número de estruturas bipartidas (IF's) que levavam a uma variedade de caminhos desnecessários.

As seis estruturas de IF's que permaneceram no modelo após a reestruturação foram substituídas por funções de suavização. Essas funções possibilitaram a determinação de uma expressão única para a função objetivo, simbolizando um único caminho a ser percorrido pela água dentro do modelo.

Desta forma, a técnica de suavização empregada por SILVA (1990) eliminou as descontinuidades nas derivadas, permitindo o uso de algoritmos de primeira e segunda ordem. Além disso, manteve a integridade física do modelo e eliminou a rugosidade da superfície resposta e os consequentes mínimos locais.

Detalhes a respeito do modelo SMAP-II, da técnica de suavização e do método de otimização empregados são discutidos no próximo capítulo.

A utilização de técnicas de suavização tem se mostrado eficaz para eliminar as descontinuidades que surgem em função das estruturas tipo patamar existentes nos modelos chuva-vazão, SILVA (1990). Entretanto, existem outros problemas relacionados com a estrutura desses modelos que impedem uma boa estimativa dos parâmetros.

SOROOSHIAN e GUPTA (1983) estudaram as dificuldades associadas à estimativa dos parâmetros do modelo Soil Moisture Accounting do National Weather Service's River Forecast System (SMA-NWSRFS). A calibração do modelo foi feita utilizando-se a função objetivo de mínimos quadrados e o estimador de máxima verossimilhança considerando heteroscedasticidade nos erros.

Para cada tipo de função objetivo, foram analisadas as superfícies resposta dos parâmetros relacionados com o processo de percolação do modelo.

Os autores observaram que o estimador de máxima verossimilhança forneceu uma superfície resposta com propriedades superiores e contornos mais suaves que a função objetivo de mínimos quadrados.

Entretanto, em todas as superfícies resposta constatou-se a presença de vales muito alongados decorrentes da interação entre os parâmetros.

SOROOSHIAN e GUPTA (1983) concluíram que este problema está relacionado com a estrutura escolhida para representar os subprocessos físicos de percolação, o que torna praticamente impossível a estimativa de parâmetros únicos.

Como a maioria dos modelos chuva-vazão usam aproximações semelhantes para representar o processo de percolação, os autores acreditam que seja esta uma das possíveis causas dos problemas encontrados por outros pesquisadores na calibração de diferentes tipos de modelos.

Em GUPTA e SOROOSHIAN (1983), foram estudadas as propriedades da equação de percolação do modelo SIXPAR que é uma versão simplificada do modelo SMA-NWSRFS.

Os resultados deste estudo revelaram a presença de vales extensos na superfície resposta dos parâmetros que pertencem à equação de percolação, conforme observado por SOROOSHIAN e GUPTA (1983).

Verificaram também que este é um problema inerente à estrutura do modelo, porém a inclinação do vale é dependente do quanto os parâmetros relativos a esse processo são ativados pelos dados.

Para eliminar os problemas de interação entre os parâmetros da equação de percolação, os autores propuseram o uso de uma técnica de reparametrização. O objetivo desta técnica foi a obtenção de contornos da superfície resposta mais próximos possíveis da forma circular, sem afetar a integridade física do modelo.

Os resultados obtidos com a reparametrização indicaram uma grande melhora na identificabilidade dos parâmetros do modelo SIXPAR. Entretanto, esta solução é particular e específica para o modelo usado, não resolvendo os problemas dos modelos chuva-vazão de uma forma geral.

ROTUNNO (1989) não aplicou a técnica de reparametrização na equação de percolação do modelo SMAP de LOPES, BRAGA e CONEJO (1981) em função de algumas características específicas deste modelo.

No SMAP, o reservatório subterrâneo não possui limite físico para absorção de água, ou seja, não possui capacidade máxima de armazenamento. Como no modelo SIXPAR existe este limite físico, a reparametrização foi possível.

No trabalho de ROTUNNO (1989), a interação entre os parâmetros que fazem parte da equação de percolação foi identificada a partir de análises das superfícies resposta e do cálculo do índice de sensibilidade proposto por SOROOSHIAN e GUPTA (1985).

O índice de sensibilidade, calculado com base na matriz de identificabilidade estrutural do modelo, é uma medida útil para o estudo da natureza das interações entre os parâmetros no \mathbb{R}^n ($n =$ número de parâmetros), indicando quando um parâmetro é compensado pelos demais.

Esse índice é de grande valia pois permite detectar a importância relativa de cada parâmetro no processo de calibração, tornando possível que mudanças apropriadas sejam feitas no modelo.

De acordo com ROTUNNO (1989), a identificabilidade em modelos chuva-vazão pode ser dividida em duas partes. Na primeira, identificabilidade estrutural do modelo, fazem parte as especificações de entrada e saída do modelo, os possíveis modos de operação do modelo e a determinação das relações que governam o seu funcionamento. A segunda, identificabilidade dos parâmetros de um modelo, está associada ao processo de ajuste. Se um modelo chuva-vazão gera saídas diversas para diferentes grupos de parâmetros, diz-se que os parâmetros desse modelo são identificáveis.

SOROOSHIAN e ARFI (1982) propõem o uso de duas medidas de sensibilidade dos parâmetros que fornecem algumas idéias quantitativas sobre a forma da superfície resposta nas proximidades do ponto ótimo. Esses índices, concentricidade e interação, determinados para cada par de parâmetros, são calculados com base na aproximação da matriz de derivadas segundas (matriz hessiana).

Segundo os autores, as vantagens em usar tais medidas são as seguintes:

- . Identificar a natureza da interação entre os parâmetros e verificar o ajuste com os processos físicos;
- . Estabelecer uma medida de confiabilidade dos parâmetros e da função objetivo empregada; e,
- . Detectar a não identificabilidade dos parâmetros e com isso, mudar apropriadamente a estrutura do modelo.

O índice de concentricidade, usado por ROTUNNO (1989), mede a proximidade que as curvas de mesmo valor de função objetivo estão da forma circular.

O índice de interação é determinado através do ângulo entre o eixo principal da elipse e os eixos de direções dos parâmetros, conforme mostra a figura (II.5).

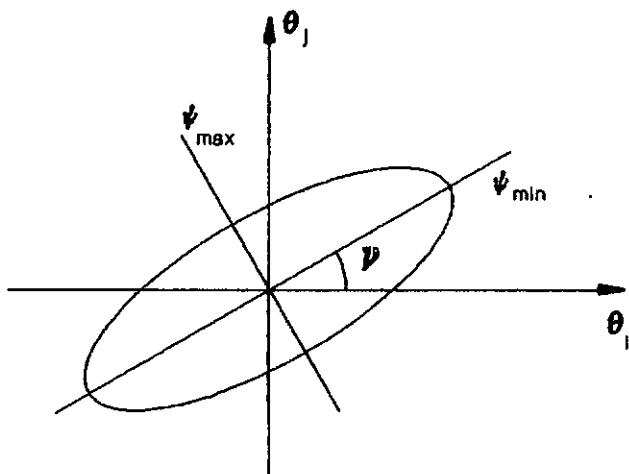


Figura II.5 - Índice de interação entre dois parâmetros

Quando o ângulo ψ for igual a 0° os eixos serão coincidentes, significando que não existe interação entre os parâmetros θ_i e θ_j . A figura (II.6) apresenta esta situação.

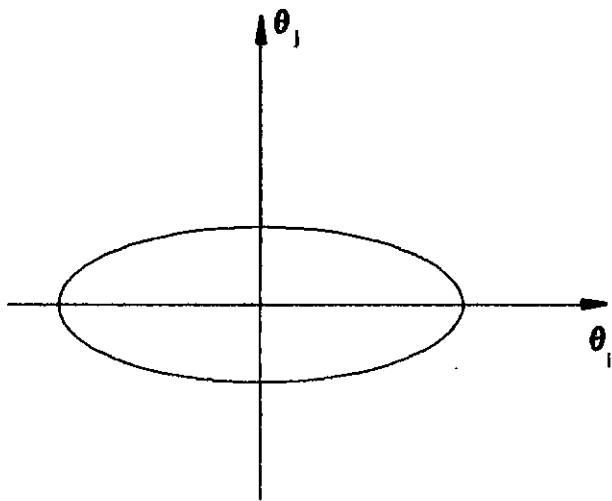


Figura II.6 - Parâmetros sem problemas de interação

Na figura (II.6), o menor eixo da elipse corresponde ao parâmetro com maior sensibilidade. Quanto mais alongada for a elipse, menos sensível será o parâmetro θ_i . Nesse caso surgem as regiões de indiferença.

A existência de problemas na estrutura dos modelos chuva-vazão faz surgir parâmetros inativos ou que interagem entre si, dificultando uma calibração precisa do modelo. Desta forma, é necessário tomar cuidados especiais na escolha ou formulação da estrutura de um modelo.

CAPÍTULO III

O MODELO E O PROCESSO DE CALIBRAÇÃO

III.1 DESCRIÇÃO DO MODELO

Foi utilizado um modelo baseado no SMAP-II de DIB (1986), versão suavizada, proposto por SILVA (1990). O SMAP-II é uma versão do modelo SMAP de LOPES, BRAGA e CONEJO (1981). A figura (III.1) a seguir ilustra todos os componentes do modelo SMAP-II.

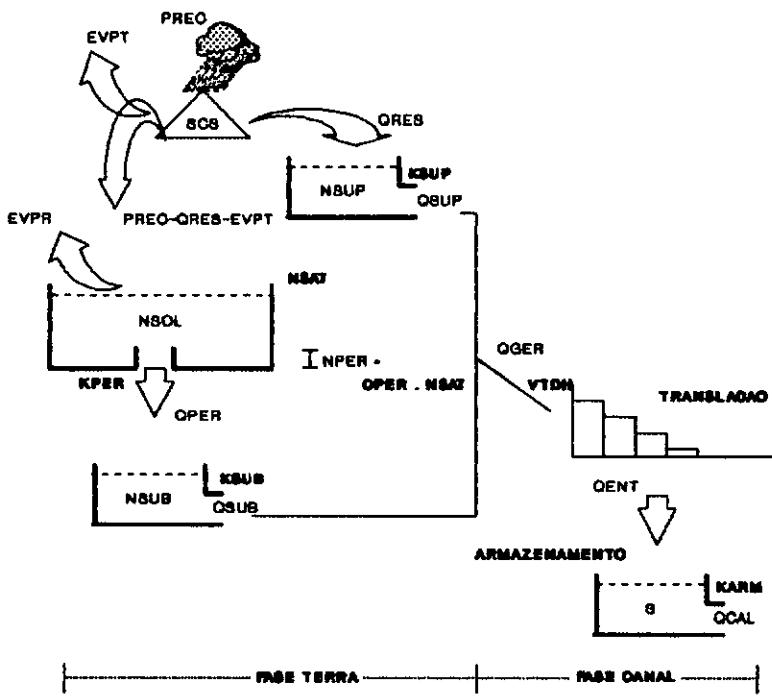


Figura III.1 - Esquema do modelo SMAP-II

O modelo SMAP-II possui três reservatórios de armazenamento, representando as camadas superior, superficial e subterrânea do solo. Alguns dos principais processos físicos que ocorrem na bacia hidrográfica são representados no modelo por equações matemáticas. Essas equações bem como a seqüência de resolução do modelo são descritas a seguir.

A separação da parcela da chuva que contribuirá para o escoamento superficial é feita através da equação do Soil Conservation Service - SCS, descrita em U.S. SOIL CONSERVATION SERVICE (1975), conforme a equação (III.1).

$$QRES = \frac{(CHUVA - ABSI)^2}{(CHUVA - ABSI + NSOL - NSAT)} \quad (III.1)$$

Onde:

QRES - parcela que contribuirá para o reservatório de superfície (mm);

ABSI - perdas por retenção vegetal e por acúmulo de água nas depressões do solo (mm);

NSOL - nível do reservatório que representa a camada superficial do solo (mm);

NSAT - nível de saturação do reservatório que representa a camada superficial do solo (mm); e,

CHUVA - precipitação média sobre a bacia (mm).

A parcela QRES é adicionada ao reservatório de superfície formando o nível d'água NSUP. Este nível é deplecionado a uma taxa KSUP resultando no escoamento superficial ou direto QSUP, conforme a expressão:

$$QSUP = NSUP (1 - KSUP) \quad (III.2)$$

Onde:

QSUP - escoamento superficial ou direto (mm/dia);

NSUP - nível do reservatório de superfície (mm); e,

KSUP - coeficiente de recessão do escoamento superficial (1/dia).

Após sofrer perda por evaporação a nível potencial (EVPT), a parcela resultante da chuva que contribuirá para o reservatório superficial do solo será a seguinte:

$$QINF = (CHUVA - QRES - EVPT) \quad (III.3)$$

Onde:

QINF - parcela da chuva que infiltrará para a camada superficial do solo; e,

EVPT - evaporação a nível potencial.

Esta parcela será somada ao nível d'água do reservatório do solo (NSOL). Quando NSOL for maior que NSAT, o excesso (NSOL - NSAT) será adicionado ao reservatório de superfície.

Nos casos onde a parcela (CHUVA - QRES) não for suficiente para satisfazer a EVPT, a umidade no reservatório do solo será atualizada através de perdas por evapotranspiração, dada pela expressão:

$$EVPTS = (EVPT - QINF) . \frac{NSOL}{NSAT} \quad (III.4)$$

Onde:

EVPTS - evapotranspiração remanescente a nível real.

A transferência de água do reservatório do solo para o aquífero é feita com base no conceito de capacidade de campo. Se NSOL for maior que o nível d'água retido no solo por capilaridade (NPER), haverá recarga para o reservatório subterrâneo segundo a expressão:

$$QPER = (NSOL - NPER) . \frac{NSOL}{NSAT} . KPER \quad (III.5)$$

$$NPER = CPER \cdot NSAT$$

(III.6)

Onde:

QPER - vazão a ser transferida para o reservatório subterrâneo (mm/dia);

NPER - nível d'água mínimo do reservatório do solo onde se verifica o fenômeno de capilaridade (mm);

CPER - parâmetro capacidade de campo. Fornece o percentual de água que será retida por capilaridade no solo; e,

KPER - coeficiente de recarga do aquífero (1/dia).

A vazão QPER é somada ao nível d'água do reservatório subterrâneo (NSUB) que será deplecionado a uma taxa KSUB formando o escoamento básico QSUB de acordo com a seguinte equação:

$$QSUB = (1 - NSUB) \cdot KSUB$$

(III.7)

Onde:

QSUB - escoamento básico (mm/dia);

NSUB - nível do reservatório subterrâneo (mm); e,

KSUB - coeficiente de recessão do reservatório subterrâneo (1/dia).

A vazão gerada pela fase terra do modelo é resultante da soma dos escoamentos direto e básico, de acordo com a equação (III.8) a seguir.

$$QGER = (QSUP + QSUB) \cdot AREA / TEMP$$

(III.8)

Onde:

QGER - vazão gerada pela fase terra do modelo (m^3/s);

AREA - área da bacia (km^2); e,

TEMP - constante de ajuste das unidades (TEMP = 86,4)

Para representar a fase canal do modelo são considerados os efeitos de translação da hidrógrafa através do canal e de amortecimento por armazenamento na calha, de acordo com o modelo idealizado por CLARK (1945). Neste modelo, o efeito de translação da hidrógrafa é determinado através do histograma tempo-área ou histograma de retardo da bacia. O histograma é construído dividindo-se a bacia, a partir do seu ponto de controle, em linhas de igual tempo de percurso até este mesmo ponto, ou seja, dividindo a bacia por suas isócronas.

A figura (III.2) a seguir apresenta um exemplo de um histograma tempo-área.

Determinada a área entre as isócronas, calcula-se as ordenadas do histograma tempo-área em frações da área total da bacia. Geralmente, as ordenadas são consideradas como parâmetros do modelo por ser difícil determinar com precisão as isócronas da bacia.

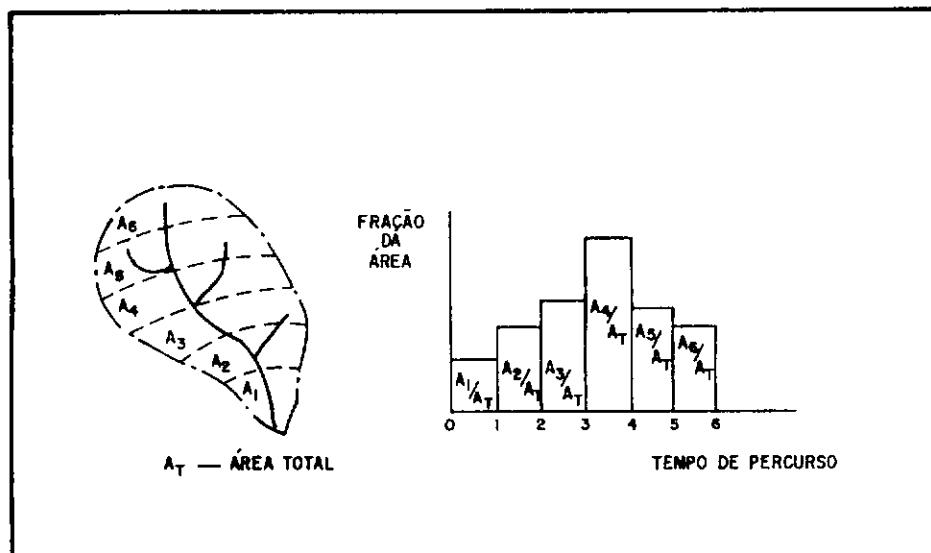


Figura III.2 - Histograma tempo - área

fonte: SILVA (1990)

No caso do modelo SMAP-II, as ordenadas do histograma tempo-área são representadas pelos VTDH's, considerados como parâmetros a otimizar. A equação desta fase do modelo é dada por:

$$QENT_t = \sum_{j=1}^{ntdh} QGER_{t-j+1} \cdot VTDH_j \quad (III.9)$$

Onde:

$QENT_t$ - vazão transladada no tempo t (m^3/s);

$QGER_{t-j+1}$ - vazão gerada "j" intervalos de tempo anteriores (m^3/s);

$VTDH_j$ - ordenada do histograma tempo-área da bacia. Representa o efeito de translação da hidrografia através do canal principal até o ponto de controle da bacia (adimensional); e,

$ntdh$ - número de ordenadas do histograma tempo-área da bacia.

O efeito de amortecimento é simulado, fazendo-se a propagação das vazões transladadas ($QENT$) através de um reservatório com armazenamento igual ao do canal. Isso significa imaginar um reservatório no ponto de controle da bacia com características tais que " $QCAL = K.S$ ", onde " $QCAL$ " é a vazão de saída, " S " o armazenamento e " K " a constante de armazenamento. A equação de continuidade para este reservatório será:

$$\frac{dS}{dt} = QENT - QCAL \quad (III.10)$$

Como $QCAL = K \cdot S$, então:

$$\frac{dQCAL}{dt} = K \cdot \frac{dS}{dt} \quad (III.11)$$

Substituindo a equação (III.10) em (III.11) obtém-se a seguinte expressão:

$$\frac{dQCAL}{dt} = K \cdot (QENT - QCAL) \quad (III.12)$$

Considerando as aproximações:

$$1) \frac{dQCAL}{dt} = \frac{QCAL_t - QCAL_{t-1}}{\Delta t}$$

2) QCAL é a média aritmética entre as QCAL's no instante de tempo atual e anterior, dada por:

$$QCAL = \frac{QCAL_t + QCAL_{t-1}}{2}$$

Substituindo as aproximações (1) e (2) na equação (III.12), tem-se:

$$QCAL_t = K \cdot \Delta t [QENT_t - ((QCAL_t + QCAL_{t-1}) / 2)] + QCAL_{t-1} \quad (III.13)$$

Rearranjando a expressão (III.13) obtém-se:

$$QCAL_t = \frac{K \cdot \Delta t}{1 + K \cdot \Delta t / 2} \cdot QENT_t + \frac{1 - K \cdot \Delta t / 2}{1 + K \cdot \Delta t / 2} \cdot QCAL_{t-1} \quad (III.14)$$

Considerando que:

$$\frac{1 - K \cdot \Delta t / 2}{1 + K \cdot \Delta t / 2} = KARM$$

Então:

$$\frac{K \cdot \Delta t}{1 + K \cdot \Delta t / 2} = (1 - KARM)$$

Substituindo as considerações acima em (III.14), obtém-se a equação que representa o efeito de amortecimento no modelo SMAP-II.

$$QCAL_t = (1 - KARM) \cdot QENT_t + KARM \cdot QCAL_{t-1} \quad (\text{III.15})$$

Onde:

$QCAL_t$ - vazão de saída do modelo, considerando os efeitos de translação e amortecimento no canal (m^3/s);
 $QCAL_{t-1}$ - vazão de saída no instante anterior (m^3/s); e,
KARM - representa o efeito de amortecimento por armazenamento na calha.

As grandezas ABSI, KSUP, NSAT, CPER, KPER, KSUB, KARM E VTDH's são considerados parâmetros do modelo, sendo seus valores determinados a partir do processo de calibração.

As grandezas SUBI e SOLI que representam o estado inicial e final dos reservatórios de superfície e do solo respectivamente, também são consideradas parâmetros do modelo SMAP-II de DIB (1986).

Entretanto, neste trabalho, essas grandezas não são tratadas como parâmetros a otimizar. Conforme SILVA (1990), os valores de SUBI e SOLI são estimados a priori e utiliza-se um período de aquecimento, a partir do qual estas estimativas não influenciam nos resultados.

III.2 - TÉCNICA DE SUAVIZAÇÃO

O modelo SMAP-II foi reestruturado por SILVA (1990) antes da aplicação da técnica de suavização. Como mencionado no capítulo anterior a reestruturação teve por objetivo reduzir o número das estruturas bipartidas (IF's) que levam a uma variedade de caminhos desnecessários a serem percorridos pela água dentro do modelo. O fluxograma do modelo após a reestruturação é apresentado na figura (III.3).

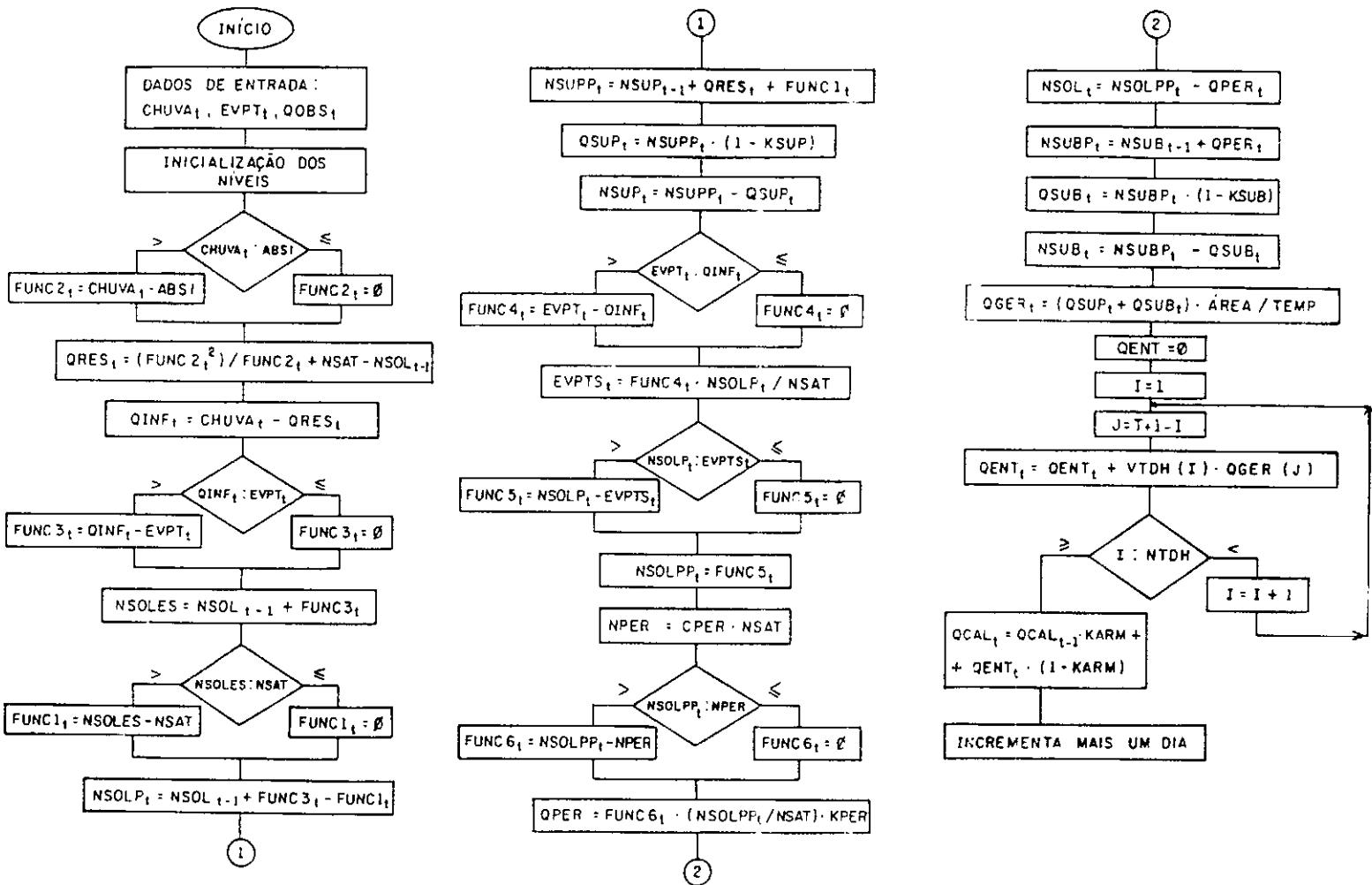


Figura III .3 – Fluxograma do modelo após a reestruturação

Fonte : SILVA (1990)

Na figura (III.3) podem ser observadas sete estruturas de IF's que permaneceram no modelo após a reestruturação. Dentre elas, as seis primeiras, são conhecidas como estruturas de patamares limitantes. Estas estruturas são as responsáveis pelo surgimento de descontinuidades nas derivadas primeira e segunda da função objetivo conforme demonstrado em GUPTA E SOROOSHIAN (1985), SILVA (1990) e no item II.3.4 do presente trabalho. As seis estruturas remanescentes obedecem ao seguinte sistema de equações:

- 1) $FUNC2_t = 0 , \quad \text{se } CHUVA_t \leq ABSI$
 $FUNC2_t = (CHUVA_t - ABSI) , \quad \text{se } CHUVA_t > ABSI$

- 2) $FUNC3_t = 0 , \quad \text{se } QINF_t \leq EVPT_t$
 $FUNC3_t = (QINF_t - EVPT_t) , \quad \text{se } QINF_t > EVPT_t$

- 3) $FUNC1_t = 0 , \quad \text{se } NSOLES \leq NSAT$
 $FUNC1_t = (NSOLES - NSAT) , \quad \text{se } NSOLES > NSAT$

- 4) $FUNC4_t = 0 , \quad \text{se } EVPT_t \leq QINF_t$
 $FUNC4_t = (EVPT_t - QINF_t) , \quad \text{se } EVPT_t > QINF_t$

- 5) $FUNC5_t = 0 , \quad \text{se } NSOLP_t \leq EVPTS_t$
 $FUNC5_t = (NSOLP_t - EVPTS_t) , \quad \text{se } NSOLP_t > EVPTS_t$

- 6) $FUNC6_t = 0 , \quad \text{se } NSOLPP_t \leq NPER$
 $FUNC6_t = (NSOLPP_t - NPER) , \quad \text{se } NSOLPP_t > NPER$

Para eliminar as descontinuidades nas derivadas primeira e segunda da função objetivo, SILVA (1990) substituiu as variáveis $\text{FUNC}_k(t)$, onde k varia de um até seis, por uma função de suavização ϕ definida em XAVIER (1982) e expressa por:

$$\phi(x_t, M, d) = \frac{Y}{Y^2 - 1} \left\{ W + \left[W^2 + d^2 \frac{(Y^2 - 1)^2}{Y^2} \right]^{1/2} \right\}$$

(III.16)

Onde:

$$Y = \operatorname{tg} \frac{3\pi}{8}$$

$$W = x_t - M$$

x_t = valor correspondente às variáveis CHUVA_t, QINF_t, NSOLES, EVPT_t, NSOLP_t e NSOLPP_t nas seis FUNC_k(t).

M = parâmetro correspondente às variáveis ABSI, EVPT_t, NSAT, QINF_t, EVPTS_t E NPER nas seis FUNC_k(t).

As propriedades desta função são demonstradas em XAVIER (1982) e descritas em SILVA (1990). A figura (III.4) apresenta o gráfico das variáveis FUNC_k(t) nas formas original e suavizada.

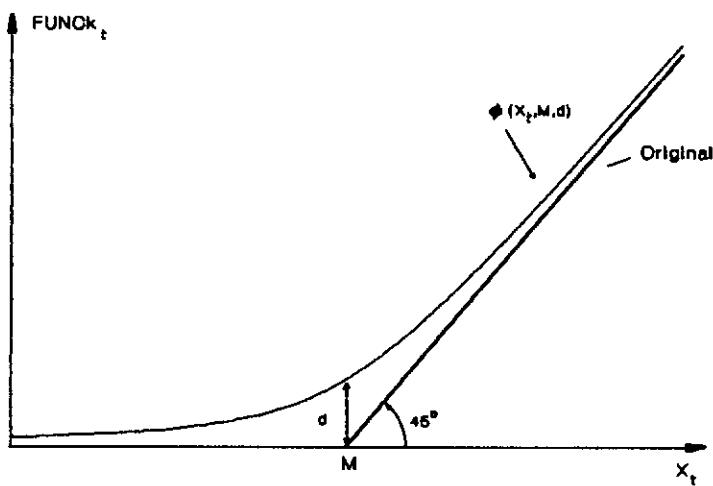


Figura III.4 - Representação gráfica das FUNC's nas formas original e suavizada

O parâmetro d é o responsável pela aderência entre as curvas original e suavizada, sendo que, com o valor $d=0$ a aderência é total.

A técnica de suavização aplicada ao modelo SMAP-II garante a continuidade nas derivadas primeira e segunda da função objetivo, possibilitando o uso de algoritmos de otimização de primeira e segunda ordem. Além disso, uma característica muito importante desta técnica é que ela mantém a integridade física do modelo.

III.3 - COMPONENTES USADOS PARA CALIBRAÇÃO DO MODELO

Para calibração do modelo SMAP-II, versão suavizada, foram usados os mesmos componentes utilizados por SILVA (1990), detalhados a seguir.

A função objetivo adotada foi a de mínimos quadrados, descrita no capítulo anterior e expressa por:

$$FO = \sum_{t=1}^{nobs} (QCAL_t - QOBS_t)^2 \quad (III.17)$$

Os parâmetros do modelo foram restritos dentro de seus domínios de validade para evitar que assumam valores sem significado físico. A tabela (III.1) mostra as restrições impostas a cada parâmetro do modelo.

| RESTRIÇÃO | |
|-----------|---|
| 1 | $0 < ABSI < 10$ |
| 2 | $0 < KSUP < 1,0$ |
| 3 | $0 < NSAT < 1200$ |
| 4 | $0 < CPER < 1,0$ |
| 5 | $0 < KPER < 1,0$ |
| 6 | $0 < KSUB < 1,0$ |
| 7 | $0 < KARM < 1,0$ |
| 8 | $0 < VTDH_j < 1,0$ |
| 9 | $1,0 - \sum_{j=1}^{ntdh-1} VTDH_j \geq 0$ |

Tabela III.1 - Restrições impostas a cada parâmetro do modelo

A restrição (9) pode ser escrita desta forma porque nela está incorporado que o somatório das ordenadas dos VTDH's é igual a um e que a última ordenada é função das demais, não sendo tratada como parâmetro do modelo.

Para resolução do problema de otimização com restrições foi usado o método de penalização hiperbólica proposto por XAVIER (1982), que transforma o problema restrito original em uma seqüência de problemas irrestritos. Neste método é feita uma modificação na função objetivo original, conforme a seguinte expressão:

$$F(\theta, \alpha, \lambda) = f(\theta) + \sum_{i=1}^m P(g_i(\theta), \alpha, \lambda) \quad (III.18)$$

Onde:

- $F(\theta, \alpha, \lambda)$ - função objetivo modificada;
- $f(\theta)$ - função objetivo original;
- m - número de restrições;
- $g_i(\theta)$ - i ésima restrição imposta aos parâmetros do modelo;
- α, λ - parâmetros da função de penalidade; e,
- $P(g_i(\theta), \alpha, \lambda)$ - função penalidade expressa por:

$$P = \frac{\operatorname{tg}(\frac{\pi-\alpha}{2})}{\operatorname{tg}^2(\frac{\pi-\alpha}{2})-1} \left[-g(\theta) + \sqrt{g^2(\theta) + \lambda^2 \frac{[\operatorname{tg}^2(\frac{\pi-\alpha}{2})-1]^2}{\operatorname{tg}^2(\frac{\pi-\alpha}{2})}} \right] \quad (\text{III.19})$$

$$\alpha \in (0, \pi/2) \quad \text{e} \quad \lambda \geq 0$$

A idéia geométrica que fundamenta o algoritmo é a seguinte:

Inicialmente como mostra a figura (III.5), aumenta-se o ângulo α da assíntota a função penalidade, provocando um significativo aumento da penalização fora da região viável, enquanto que, simultaneamente, reduz-se a penalização para pontos dentro da região viável. O processo continua até que se consiga um ponto viável.

Daí em diante mantém-se α constante e diminui-se seqüencialmente o valor de λ . Desta forma, a penalização interior torna-se cada vez mais irrelevante mantendo-se o nível de proibitividade fora da região viável. A figura (III.6) ilustra esta segunda fase do processo.

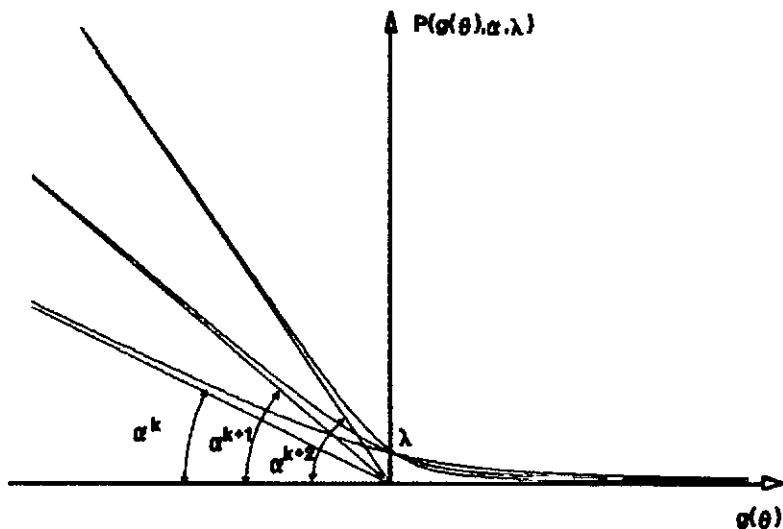


Figura III.5 - Primeira fase do algoritmo : variação de α mantendo λ constante

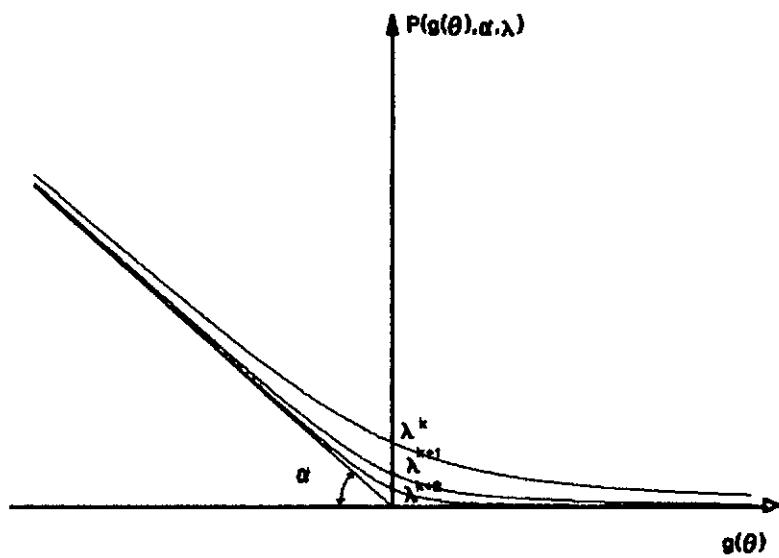


Figura III.6 - Segunda fase do algoritmo: variação de λ mantendo α constante

O algoritmo geral de resolução do método de penalização hiperbólica é expresso pela sequência abaixo:

- 1) Faça $k = 0$, $\alpha^1 = \alpha^0$, $\lambda^1 = \lambda^0$, sendo $0 < \alpha^0 < \pi/2$ e $\lambda^0 > 0$.
Tome um ponto inicial igual a θ^0 .
- 2) Faça $k = k + 1$.
- 3) Resolva o problema de minimização sem restrições da função modificada F :

$$F(\theta, \alpha^k, \lambda^k) = f(\theta) + \sum_{i=1}^m P_i [g_i(\theta), \alpha^k, \lambda^k]$$

A partir do ponto θ^{k-1} , achando o ponto θ^k ótimo.

- 4) Teste se θ^k é viável.
Se viável \rightarrow vá para o passo (6).

- 5) Faça $\begin{cases} \alpha^{k+1} = \beta \alpha^k + (1 - \beta) \frac{\pi}{2}, & 0 < \beta < 1 \\ \lambda^{k+1} = \lambda^k \end{cases}$

Vá para o passo (2).

- 6) Regra de parada - Teste se θ^k é aceitável.
Se aceitável \rightarrow vá para o passo (8).

- 7) Faça $\begin{cases} \lambda^{k+1} = q \lambda^k, & 0 < q < 1 \\ \alpha^{k+1} = \alpha^k \end{cases}$

Vá para o passo (2).

- 8) θ^k é a solução. Fim.

O parâmetro "a" é considerado constante com valor igual a $a = \pi / 2,00000005$, eliminando o passo (5) do algoritmo de resolução do método de penalização hiperbólica. Essa metodologia conduz a uma penalização bastante forte para os pontos fora da região viável, região esta delimitada pelas restrições impostas a cada parâmetro do modelo indicadas na tabela (III.1).

Uma sequência de problemas irrestritos é gerada a partir da variação controlada do parâmetro externo λ da penalização. A cada minimização k , o valor deste parâmetro é atualizado (passo (7)), formando uma sequência convergente a zero que proporciona a convergência do problema irrestrito ao problema restrito original.

Foi adotado para a calibração do modelo um valor inicial para o parâmetro externo λ igual a 1000 e final igual a 10^{-3} . O valor de "q" do passo (7) que faz a atualização do parâmetro λ para a minimização seguinte foi considerado igual a 10^{-1} .

O parâmetro "d" da suavização está acoplado linearmente ao parâmetro " λ " da penalização da seguinte forma:

$$d^k = \frac{\lambda^k}{1000} \quad (\text{III.20})$$

Como o valor de " λ " tende a zero, o valor de "d" também convergirá para zero. Deve ser lembrado que o valor do parâmetro "d" igual a zero representa fielmente o modelo na sua formulação original (com as estruturas em patamares). Dessa forma, o mecanismo de vinculação entre " λ " e "d" acima descrito garante totalmente a integridade física do modelo na sua formulação original.

No capítulo VI é apresentada uma análise quanto à sensibilidade de variação do parâmetro " λ " da penalização, e consequentemente do parâmetro "d" da suavização, uma vez que esses dois parâmetros estão acoplados.

Para resolução da sequência de problemas irrestritos foi utilizado o método de otimização Quasi-Newton com atualização BFGS (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shano), descrita em vários textos como em GILL, MURRAY e WRIGHT (1981).

Neste método são utilizadas derivadas primeira e segunda da função objetivo em relação a cada parâmetro. As derivadas segundas são calculadas a partir de aproximações numéricas das derivadas primeiras.

No próximo capítulo são analisados os resultados da calibração do modelo e algumas dificuldades observadas em todo o processo.

CAPÍTULO IVANALISE E ESTRATÉGIAS PARA SUPERAÇÃO DE DIFICULDADESIV.1 - RESULTADOS DA CALIBRAÇÃO DO MODELO

Para calibração do modelo foi usada série sintética de vazões diárias geradas pelo próprio modelo, a partir de uma série de 5 anos de precipitações diárias observadas na bacia do rio Fartura.

O uso de dados sintéticos permite o conhecimento prévio do ponto de mínimo global, tornando possível verificar a precisão dos parâmetros estimados na calibração.

Adotou-se um período de aquecimento de 60 dias com o objetivo de eliminar os erros provenientes das estimativas iniciais do conteúdo dos reservatórios que representam as camadas do solo.

Foram consideradas três ordenadas para o histograma tempo-área, representadas pelos VTDH's, sendo que a última ordenada foi calculada de forma que a soma das ordenadas fosse igual a um. Assim, pode ser considerado como nove o total de parâmetros a serem calibrados.

Como tradicionalmente adotado na literatura (DAWDY e O'DONNELL (1965); IBBITT e O'DONNELL (1971); GUPTA e SOROOSHIAN (1985); HENDRICKSON, SOROOSHIAN e BRAZIL (1988); ROTUNNO (1989) e SILVA (1990)) foram escolhidos pontos iniciais com desvios percentuais em relação ao conjunto de parâmetros usado para gerar a série sintética de vazões (solução).

Os pontos iniciais adotados correspondem a desvios de menos 10, 30, 50 e 75% da solução, para todos os parâmetros com exceção dos VTDH's. Para estes parâmetros foram

adotados dois conjuntos iniciais diferentes evitando assim que a última ordenada de VTDH tenha um valor inadequado, uma vez que é função das demais.

A técnica de suavização utilizada por SILVA (1990) mostrou-se uma escolha acertada, oferecendo diferenciabilidade de segunda ordem da função objetivo o que permite a utilização de rotinas de otimização mais poderosas. Com isso, foi possível obter resultados destacáveis quando comparados aos encontrados na literatura. Entretanto, nem todas as questões foram resolvidas. Em alguns casos são observadas dificuldades no processo de convergência dos parâmetros que podem estar relacionadas a problemas na estrutura do modelo.

As tabelas (IV.1) a (IV.4) apresentam os resultados da calibração para pontos iniciais com desvios de 10, 30, 50 e 75% da solução, e dois conjuntos de VTDH's iniciais.

Tabela IV.1 - Resultados da calibração para ponto inicial com desvio de 10% da solução

| DESVIOS | | -10 % | | | |
|------------------------|---------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|
| PARAMETRO | SOLUÇÃO | 1 | | 2 | |
| | | PI | PF | PI | PF |
| ABSI | 3,000 | 2,700 | 3,0000 | 2,700 | 3,0000 |
| KSUP | 0,750 | 0,675 | 0,7499 | 0,675 | 0,7500 |
| NSAT | 600,0 | 540,0 | 600,00 | 540,0 | 600,00 |
| CPER | 0,300 | 0,270 | 0,3000 | 0,270 | 0,3000 |
| KPER | 0,015 | 0,0135 | 0,0150 | 0,0135 | 0,0150 |
| KSUB | 0,992 | 0,8928 | 0,9919 | 0,8928 | 0,9919 |
| KARM | 0,100 | 0,090 | 0,0998 | 0,090 | 0,0998 |
| VTDH ₁ | 0,900 | 0,970 | 0,8998 | 0,950 | 0,8998 |
| VTDH ₂ | 0,070 | 0,020 | 0,0701 | 0,030 | 0,0701 |
| FUNÇÃO OBJETIVO | | $0,16 \times 10^5$ | $0,53 \times 10^6$ | $0,17 \times 10^5$ | $0,50 \times 10^6$ |

Tabela IV.2 - Resultados da calibração para ponto inicial com desvio de 30% da solução

| DESVIOS | | -30 % | | | |
|-------------------|---------|----------------------|-----------------------|----------------------|----------------------|
| PARAMETRO | SOLUÇÃO | 3 | | 4 | |
| | | PI | PF | PI | PF |
| ABSI | 3,000 | 2,100 | 3,0000 | 2,100 | 2,6671 |
| KSUP | 0,750 | 0,525 | 0,7499 | 0,525 | 0,1755 |
| NSAT | 600,0 | 420,0 | 600,00 | 420,0 | 594,89 |
| CPER | 0,300 | 0,210 | 0,3000 | 0,210 | 0,3042 |
| KPER | 0,015 | 0,0105 | 0,0150 | 0,0105 | 0,0152 |
| KSUB | 0,992 | 0,6944 | 0,9919 | 0,6944 | 0,9919 |
| KARM | 0,100 | 0,070 | 0,0998 | 0,070 | 0,7559 |
| VTDH ₁ | 0,900 | 0,970 | 0,8998 | 0,950 | 0,9938 |
| VTDH ₂ | 0,070 | 0,020 | 0,0701 | 0,030 | 0,2x10 ⁻⁶ |
| FUNÇÃO OBJETIVO | | 0,38x10 ⁵ | 0,34x10 ⁻⁶ | 0,38x10 ⁵ | 1,44 |

Tabela IV.3 - Resultados da calibração para ponto inicial com desvio de 50% da solução

| DESVIOS | | -50 % | | | |
|-------------------|---------|----------------------|-----------------------|----------------------|-----------------------|
| PARAMETRO | SOLUÇÃO | 5 | | 6 | |
| | | PI | PF | PI | PF |
| ABSI | 3,000 | 1,500 | 0,15x10 ⁻⁷ | 1,500 | 0,15x10 ⁻⁷ |
| KSUP | 0,750 | 0,375 | 0,9950 | 0,375 | 0,9950 |
| NSAT | 600,0 | 300,0 | 126,84 | 300,0 | 126,84 |
| CPER | 0,300 | 0,150 | 0,9144 | 0,150 | 0,9144 |
| KPER | 0,015 | 0,0075 | 0,9999 | 0,0075 | 0,9999 |
| KSUB | 0,992 | 0,496 | 0,5649 | 0,496 | 0,5649 |
| KARM | 0,100 | 0,050 | 0,33x10 ⁻⁷ | 0,050 | 0,33x10 ⁻⁷ |
| VTDH ₁ | 0,900 | 0,970 | 0,7900 | 0,950 | 0,7900 |
| VTDH ₂ | 0,070 | 0,020 | 0,2099 | 0,030 | 0,2099 |
| FUNÇÃO OBJETIVO | | 0,97x10 ⁵ | 3,21x10 ⁻⁸ | 0,95x10 ⁵ | 3,21x10 ⁻⁸ |

Tabela IV.4 - Resultados da calibração para ponto inicial com desvio de 75% da solução

| DESVIOS | | -75 % | | | |
|-------------------|---------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|----------------------|
| PARAMETRO | SOLUÇÃO | 7 | | 8 | |
| | | PI | PF | PI | PF |
| ABSI | 3,000 | 0,7500 | 3,0000 | 0,7500 | 2,6671 |
| KSUP | 0,750 | 0,1875 | 0,7500 | 0,1875 | 0,1755 |
| NSAT | 600,0 | 150,00 | 600,00 | 150,00 | 594,89 |
| CPER | 0,300 | 0,0750 | 0,3000 | 0,0750 | 0,3042 |
| KPER | 0,015 | 0,00375 | 0,0150 | 0,00375 | 0,0152 |
| KSUB | 0,992 | 0,2480 | 0,9920 | 0,2480 | 0,9919 |
| KARM | 0,100 | 0,0250 | 0,0999 | 0,0250 | 0,7559 |
| VTDH ₁ | 0,900 | 0,9700 | 0,8999 | 0,9500 | 0,9938 |
| VTDH ₂ | 0,070 | 0,0200 | 0,0700 | 0,0300 | 0,3x10 ⁻⁶ |
| FUNÇÃO OBJETIVO | | 0,23x10 ⁻⁶ | 0,99x10 ⁻⁷ | 0,23x10 ⁻⁶ | 1,44 |

Para pontos iniciais com desvios de 10% da solução, casos 1 e 2 da tabela (IV.1), os parâmetros convergiram para o ponto de mínimo global e os valores obtidos de função objetivo foram pequenos, da ordem de 10⁻⁶.

Entretanto, nos casos 5 e 6 da tabela (IV.3), para pontos iniciais com desvios de 50%, foi observada convergência para o mesmo ponto de mínimo local. Nos dois casos os parâmetros KPER e KSUP tenderam para um e os parâmetros ABSI e KARM para zero, que são valores próximos aos limites superior e inferior respectivamente, do intervalo de validade desses parâmetros indicado na tabela (III.1). Esses resultados demonstram uma certa tendência de KPER, KSUP, ABSI e KARM saírem da região viável, confirmando as observações feitas por SILVA (1990).

Para pontos iniciais com desvios de 30 e 75%, casos 3, 4 da tabela (IV.2) e 7, 8 da tabela (IV.4) respectivamente, houve convergência para o ponto de mínimo global apenas nos casos 3 e 7, enquanto nos casos 4 e 8 houve convergência para o mesmo mínimo local.

Nesses dois últimos casos (4 e 8), embora a função objetivo encontrada tenha sido pequena (1,44) e a maioria dos parâmetros tenha convergido para valores próximos da solução, os parâmetros KSUP e KARM trocaram praticamente de valor e os VTDH's e ABSI não convergiram para os seus valores verdadeiros.

Esses resultados evidenciam a necessidade de analisar as causas que determinam as dificuldades observadas no processo de calibração do modelo. Essas dificuldades também foram encontradas por JOHNSTON e PILGRIM (1976), GUPTA e SOROOSHIAN (1983), SOROOSHIAN e GUPTA (1985), ROTUNNO (1989), entre outros, na calibração de diferentes modelos chuva-vazão.

IV.2 - ANÁLISE DE DIFICULDADES

Para analisar as possíveis causas das dificuldades observadas na calibração do modelo foram desenvolvidos os seguintes aprimoramentos:

- * Determinação e análise das superfícies resposta dos parâmetros que representam o amortecimento do escoamento superficial (KSUP) e a fase canal do modelo (KARM e VTDH's).
- * Determinação do índice de sensibilidade de cada parâmetro, calculado com base na matriz de identificabilidade estrutural do modelo.

- * Desenvolvimento das expressões que fazem parte da fase canal do modelo.

Esse conjunto de medidas tem por objetivo identificar problemas de mínimos locais, interação entre parâmetros e os parâmetros menos sensíveis do modelo. A partir dessa identificação podem ser feitas modificações na estrutura do modelo de forma a torná-la mais identificável, e com isso obter resultados mais precisos.

IV.2.1 - Análise das superfícies resposta de KSUP x KARM, KARM x VTDH1 E KSUP x VTDH1

Uma possível interação entre os parâmetros KSUP e KARM foi investigada a partir da análise da superfície resposta gerada para esses dois parâmetros, utilizando o mesmo conjunto solução das tabelas (IV.1) a (IV.4) usado para gerar a série sintética durante a calibração do modelo. A figura (IV.1) apresenta a superfície resposta para KSUP e KARM.

Nesta superfície resposta (figura (IV.1)) são observados vales muito alongados resultantes de uma forte interação entre os parâmetros. Esta interação indica que mudanças nos valores de um parâmetro são compensadas por mudanças nos valores do outro parâmetro sem alterar a vazão gerada pelo modelo e portanto, o valor da função objetivo.

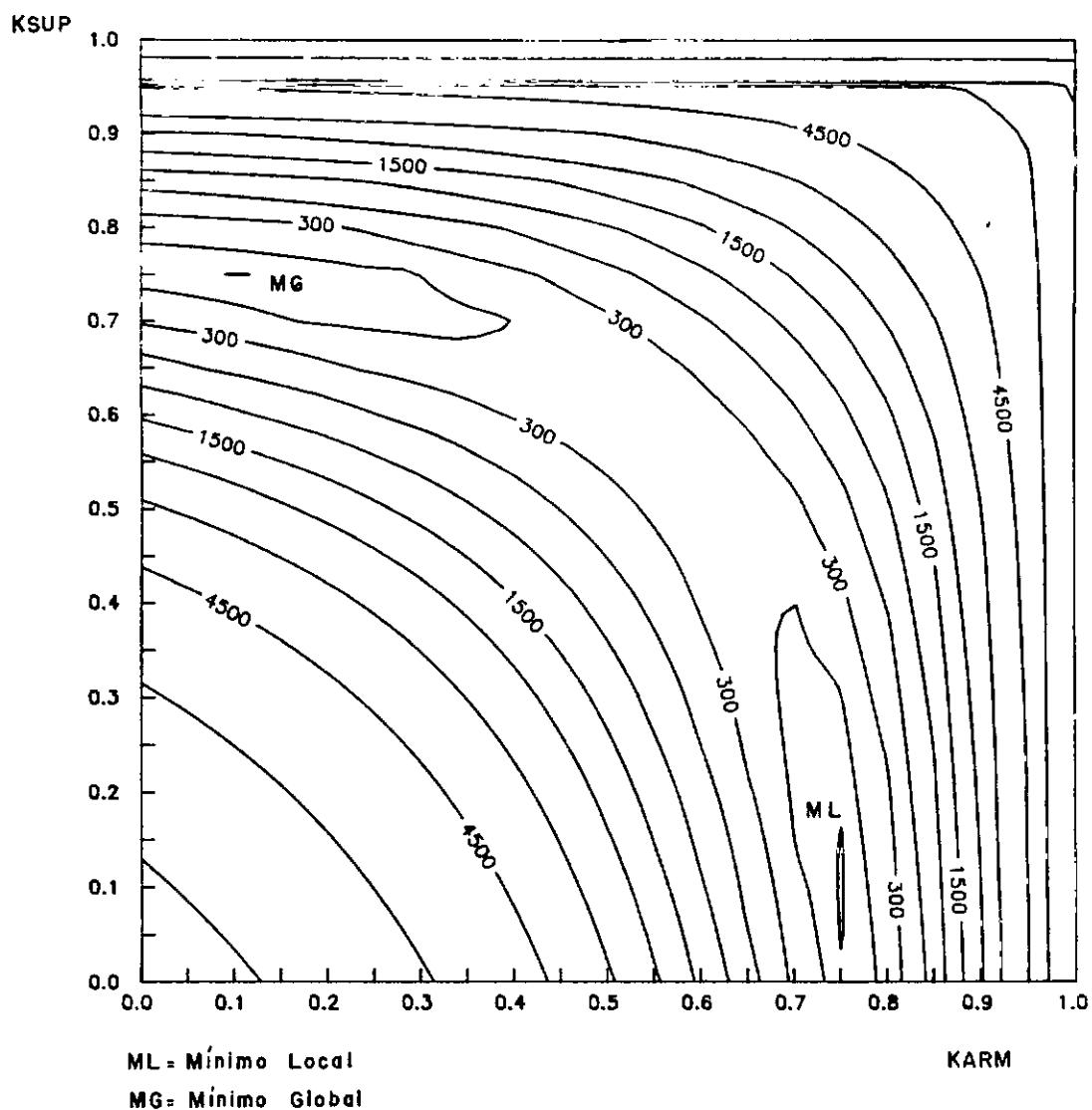


Figura IV.1 - Superfície resposta de KSUP x KARM

Além disso, é observada a presença de regiões de indiferença onde o valor da função objetivo não é alterada face a mudanças nos valores dos parâmetros. Também são observados um ponto de sela e um ponto de mínimo local nas proximidades de $KARM = 0,76$ e $KSUP = 0,15$.

Este mínimo local, explica os resultados obtidos na calibração (casos 4 e 8 das tabelas (IV.2) e (IV.4)) onde os parâmetros $KSUP$ e $KARM$ trocaram praticamente de valor. Pela simetria da superfície resposta, conclui-se então que os parâmetros convergiram para este ponto de mínimo local.

Analogamente, estudou-se uma possível interação entre os parâmetros VTDH₁ e KARM. A figura (IV.2) mostra a superfície resposta para esses dois parâmetros.

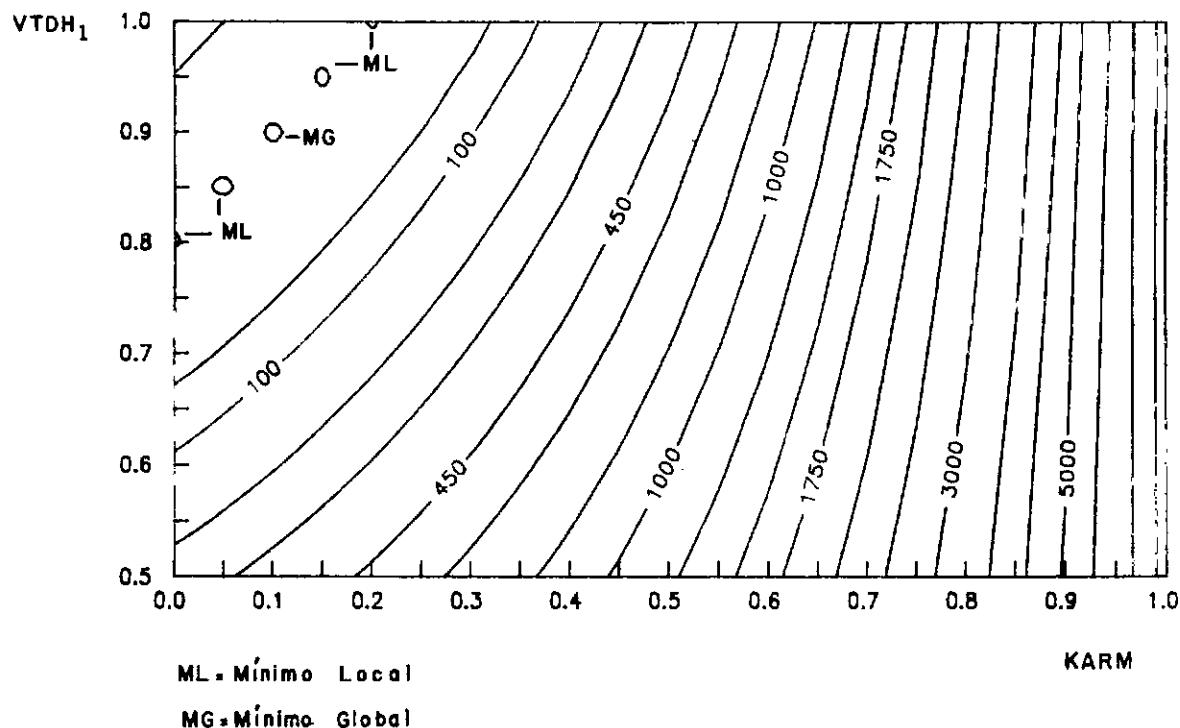


Figura IV.2 - Superfície resposta de VTDH₁ e KARM

Nesta superfície resposta verifica-se a existência de uma forte interação entre os parâmetros, regiões de indiferença e a presença de vários pontos de mínimo local. Estes vários mínimos locais justificam os resultados distintos obtidos nos casos 3, 7, 4 e 8 das tabelas (IV.2) e (IV.4) onde os dois primeiros convergiram para a solução global e os últimos para o mesmo mínimo local. Nesse caso, observou-se que a convergência para o mínimo global ou local é dependente dos valores iniciais atribuídos aos VTDH's (PID).

A outra superfície resposta analisada foi a referente aos parâmetros VTDH₁ e KSUP, apresentada na figura (IV.3) a seguir.

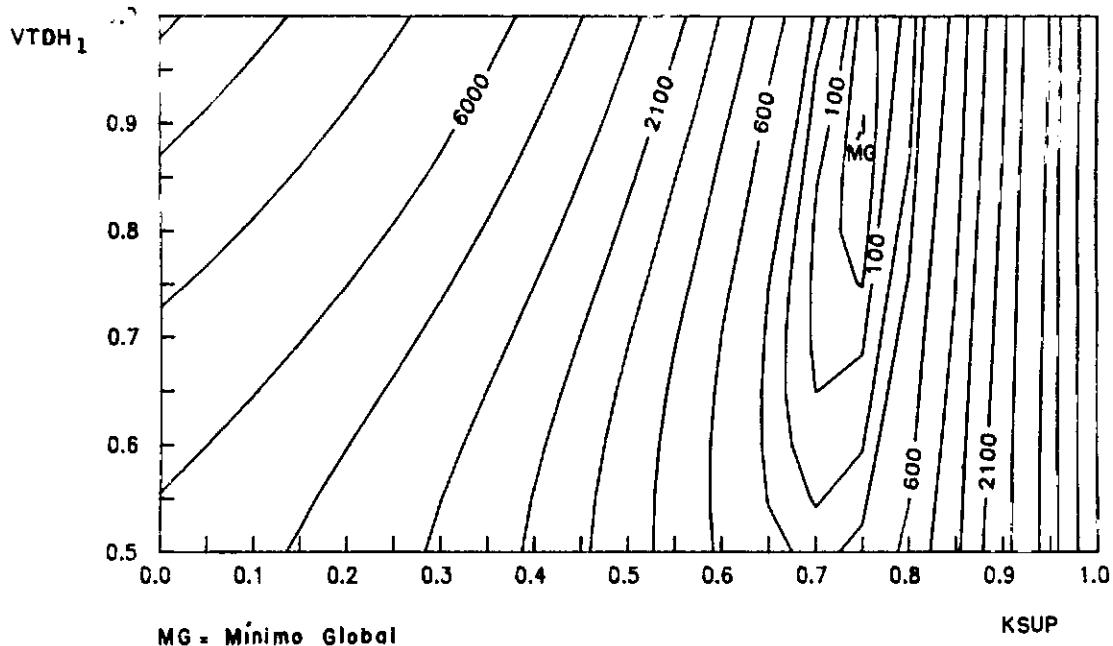


figura IV.3 - Superfície resposta de VTDH1 x KSUP

Na superfície resposta acima são observados regiões de indiferença e vales alongados que podem prejudicar a obtenção dos valores ótimos dos parâmetros. Entretanto, pode-se dizer que essa superfície está bem comportada diante das superfícies de KSUP x KARM e KARM x VTDH₁ (figuras (IV.1) e (IV.2)).

IV.2.2 - Cálculo do índice de sensibilidade

Além da análise das superfícies resposta, foi calculado o índice de sensibilidade para cada parâmetro do modelo proposto por SOROOSHIAN E GUPTA (1985) e usado por ROTUNNO e CANEDO (1987) e ROTUNNO (1989).

O índice de sensibilidade é calculado a partir do conceito de identificabilidade estrutural, que tem base apenas nas propriedades estruturais do modelo e é independente da natureza estocástica dos erros.

A identificabilidade estrutural de um modelo numa região próxima ao ponto ótimo, é dada pela seguinte expressão:

$$SI = SI(\theta, \Delta\theta) = \sum_{t=1}^{nobs} [Z_t(\theta + \Delta\theta) - Z_t(\theta)]^2 \quad (IV.1)$$

$$= \sum_{t=1}^{nobs} [\Delta Z_t]^2$$

Onde:

- $SI(\theta, \Delta\theta)$ - função identificabilidade estrutural do modelo;
- $Z_t(\theta)$ - sequência de vazões geradas pelo modelo a partir do conjunto de parâmetros θ ; e,
- $Z_t(\theta + \Delta\theta)$ - sequência de vazões geradas pelo modelo a partir de um novo grupo de parâmetros $(\theta + \Delta\theta)$, obtido através de uma perturbação $\Delta\theta$ nos parâmetros.

Observa-se que $SI(\theta, \Delta\theta) = 0$ quando $\Delta\theta = 0$ e é maior ou igual a zero para todo $\Delta\theta \neq 0$. Para que a estrutura do modelo seja globalmente identificável é necessário que $SI \neq 0$ para todo $\Delta\theta \neq 0$.

Uma condição suficiente para garantia da identificabilidade global, é que a função SI seja convexa sobre todo $\Delta\theta$. Isso implica que a matriz de derivadas segundas de SI em relação a $\Delta\theta$ seja definida positiva.

A partir da equação (IV.1) obtém-se a matriz de derivadas segundas de SI em relação a $\Delta\theta$, que é expressa por:

$$\nabla_{\Delta\theta}^2 SI = 2 \left[\frac{\partial^2 Z}{\partial \Delta\theta^2} (\theta + \Delta\theta) \right]^T \cdot \Delta Z + 2 \left[\frac{\partial Z}{\partial \Delta\theta} (\theta + \Delta\theta) \right]^T \cdot \frac{\partial Z}{\partial \Delta\theta} (\theta + \Delta\theta) \quad (IV.2)$$

A identificabilidade é verificada a partir da determinação da matriz $\nabla_{\Delta\theta}^2 \text{SI}$ que deve ser positiva definida para todo $\Delta\theta$. Como este procedimento na prática torna-se muito difícil, o problema é resolvido através de uma medida de identificabilidade local em θ ($\nabla_{\theta}^2 \text{SI}$), definida a partir do limite $\nabla_{\Delta\theta}^2 \text{SI}$ quando $\Delta\theta \rightarrow 0$, formada pela seguinte expressão:

$$\nabla_{\theta}^2 \text{SI} = \lim_{\Delta\theta \rightarrow 0} \nabla_{\Delta\theta}^2 \text{SI} = 2 \cdot \nabla_{\theta} Z(\theta)^T \cdot \nabla_{\theta} Z(\theta) \quad (\text{IV.3})$$

Onde:

$\nabla_{\theta}^2 \text{SI}$ - matriz de identificabilidade estrutural local em θ

A função de identificabilidade estrutural SI (equação (IV.1)) pode ser expandida em série de Taylor até segunda ordem no ponto $\Delta\theta = 0$, resultando na expressão:

$$\text{SI} = \frac{1}{2} \Delta\theta^T \cdot \nabla_{\theta}^2 \text{SI}(\theta) \cdot \Delta\theta \quad (\text{IV.4})$$

O valor de SI mede as diferenças entre as vazões geradas pelo modelo em $\theta + \Delta\theta$ e θ . Considerando $\Psi/2$ um valor de SI para o qual as vazões geradas pelo modelo são idênticas, tem-se:

$$\Psi \leq \Delta\theta^T \cdot \nabla_{\theta}^2 \text{SI}(\theta) \cdot \Delta\theta \quad (\text{IV.5})$$

A equação (IV.5) forma uma superfície hiper-elíptica no espaço dos parâmetros, centrada em θ para um valor fixo de SI. O contorno dessa superfície delimita a região de indiferença que é uma região aproximada dentro da qual as vazões geradas pelo modelo são idênticas. A figura (IV.4) apresenta um exemplo de uma região de indiferença para dois parâmetros.

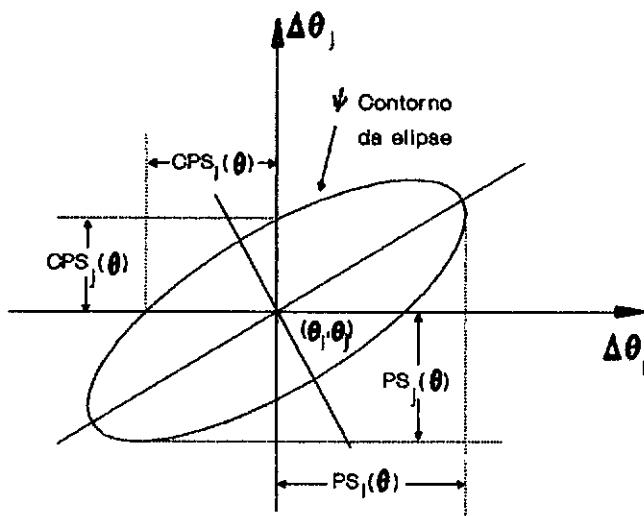


Figura IV.4 - Exemplo de uma região de indiferença para dois parâmetros - Fonte: SOROOSHIAN e GUPTA (1985)

De acordo com SOROOSHIAN e GUPTA (1985) e CASTRO (1992), o cálculo do índice de sensibilidade envolve a determinação de duas grandezas características da superfície hiper-elíptica. São elas a sensibilidade paramétrica condicional (CPS) e o índice de sensibilidade paramétrica (PS), indicados na figura (IV.4).

O máximo que cada parâmetro θ_i pode variar dentro da região de indiferença, enquanto os demais parâmetros permanecem fixos em seus valores ótimos, é dado por CPS (θ_i).

$$\text{CPS} (\theta_i) = \pm \left(\frac{\Psi}{S_{ii}} \right)^{1/2} \quad (\text{IV.6})$$

Por outro lado, o máximo que cada parâmetro θ_i pode variar dentro da região de indiferença, permitindo que todos os parâmetros variem simultaneamente é dado por PS (θ_i).

$$PS(\theta_i) = \pm \left[\frac{\Psi}{S_{ii} - g_i^T \cdot G_i^{-1} \cdot g_i} \right]^{1/2} \quad (IV.7)$$

A relação entre $PS(\theta_i)$ e $CPS(\theta_i)$ fornece o índice de sensibilidade (η_i), representado pela equação (IV.8).

$$\eta_i = \frac{PS(\theta_i)}{CPS(\theta_i)} = \left[\frac{S_{ii}}{S_{ii} - g_i^T \cdot G_i^{-1} \cdot g_i} \right] \quad (IV.8)$$

Onde:

η_i - índice de sensibilidade do parâmetro θ_i ;

S_{ii} - elemento da diagonal da matriz de identificabilidade estrutural correspondente ao parâmetro θ_i ;

g_i - vetor equivalente à iésima coluna da matriz de identificabilidade estrutural, eliminando-se o iésimo elemento; e,

G_i - submatriz de $\nabla_{\theta}^2 SI(\theta)$, resultante da eliminação da iésima linha e iésima coluna.

O índice de sensibilidade é adequado ao estudo de interação entre parâmetros no \mathbb{R}^n . Também indica se a estrutura do modelo facilita ou dificulta a obtenção dos valores ótimos dos parâmetros.

Valores elevados para o índice de sensibilidade indicam que o parâmetro θ_i tem pequena identificabilidade, pois variações em relação ao seu correto valor podem ser compensadas por mudanças nos valores dos outros parâmetros, sem alterar a vazão gerada pelo modelo.

Para o índice de sensibilidade igual a um (1,0), valor mínimo e situação ideal, não existe compensação e o parâmetro θ_i é considerado essencial ao modelo. Nesse caso, os eixos maior e menor da elipse da figura (IV.4) são coincidentes com os eixos dos parâmetros, resultando em valores de PS (θ_i) e GPS (θ_i) iguais. Isso indica que não existe interação entre os parâmetros.

A tabela (IV.5) apresenta o índice de sensibilidade para cada parâmetro do modelo SMAP-II versão suavizada, utilizando o mesmo conjunto solução usado na calibração do modelo (tabelas (IV.1) a (IV.4)) e para gerar as superfícies resposta (figuras (IV.1) a (IV.3)).

Tabela IV.5 - Índice de sensibilidade dos parâmetros do modelo

| PARAMETRO | SOLUÇÃO | η_i |
|-------------------|---------|----------|
| ABSI | 3,000 | 2,06 |
| KSUP | 0,750 | 2,69 |
| NSAT | 600,0 | 4,12 |
| CPER | 0,300 | 3,41 |
| KPER | 0,015 | 4,91 |
| KSUB | 0,992 | 1,81 |
| KARM | 0,100 | 30,21 |
| VTDH ₁ | 0,900 | 42,91 |
| VTDH ₂ | 0,070 | 23,25 |

Pelos resultados obtidos na tabela (IV.5), o parâmetro mais sensível do modelo é o KSUB que obteve o menor índice de sensibilidade. Isso comprova os resultados encontrados por ROTUNNO (1989) para o modelo SMAP de LOPES, BRAGA e CONEJO (1981).

Os índices de sensibilidade dos parâmetros KARM e VTDH's são elevados, indicando a existência de interação entre eles, identificada anteriormente na análise das superfícies resposta. Essa interação pode ser explicada através do desenvolvimento das equações da fase canal do modelo. Como KARM e VTDH's aparecem juntos na formulação do modelo, um parâmetro pode estar influenciando o comportamento do outro.

O desenvolvimento das equações da fase canal do modelo, apresentado no próximo item, evidencia a origem da forte interação entre os parâmetros KARM e VTDH's.

IV.2.3 - Desenvolvimento das equações da fase canal do modelo

Como foi visto anteriormente, a interação entre parâmetros, os mínimos locais e as regiões de indiferença dificultam a obtenção dos valores ótimos dos parâmetros. Isso ocorre muitas vezes em consequência da formulação do modelo que pode produzir um alto grau de não linearidade em função da presença de interações multiplicativas entre os parâmetros. Visando um conhecimento mais profundo da fase canal do modelo, foi feito um desenvolvimento detalhado das equações que fazem parte dessa fase.

Conforme apresentado no capítulo III, as equações que representam a fase canal do modelo são as seguintes:

$$QENT_t = \sum_{j=1}^{n_{tdh}} QGER_{t-j+1} \cdot VTDH_j \quad (IV.9)$$

$$QCAL_t = (1 - KARM) \cdot QENT_t + KARM \cdot QCAL_{t-1} \quad (IV.10)$$

Desenvolvendo a expressão de QCAL para um intervalo de tempo anterior obtém-se:

$$QCAL_{t-1} = (1 - KARM) \cdot QENT_{t-1} + KARM \cdot QCAL_{t-2} \quad (IV.11)$$

Substituindo a equação (IV.11) em (IV.10) obtém-se:

$$\begin{aligned} QCAL_t &= (1 - KARM) QENT_t + KARM (1 - KARM) QENT_{t-1} + \\ &\quad KARM^2 \cdot QCAL_{t-2} \end{aligned} \quad (IV.12)$$

Para dois intervalos de tempo anteriores, a expressão de QCAL é:

$$QCAL_{t-2} = (1 - KARM) \cdot QENT_{t-2} + KARM \cdot QCAL_{t-3} \quad (IV.13)$$

Analogamente, substituindo a equação (IV.13) em (IV.12) obtém-se:

$$\begin{aligned} QCAL_t &= (1 - KARM) QENT_t + KARM (1 - KARM) QENT_{t-1} + \\ &\quad KARM^2 (1 - KARM) QENT_{t-2} + KARM^3 \cdot QCAL_{t-3} \end{aligned} \quad (IV.14)$$

Generalizando tem-se:

$$\begin{aligned} QCAL_t &= (1 - KARM) QENT_t + KARM (1 - KARM) QENT_{t-1} + \\ &\quad KARM^2 (1 - KARM) QENT_{t-2} + \dots + \\ &\quad KARM^{i-1} (1 - KARM) QENT_{t-i+1} + KARM^i \cdot QCAL_{t-i} \end{aligned} \quad (IV.15)$$

Onde:

$$QCAL_{t-i} = (1 - KARM) \cdot QENT_{t-i} + KARM \cdot QCAL_{t-i+1} \quad (IV.16)$$

Substituindo a expressão (IV.16) em (IV.15), tem-se:

$$\begin{aligned}
 QCAL_t = & (1 - KARM) QENT_t + KARM \cdot (1 - KARM) QENT_{t-1} + \\
 & KARM^2 \cdot (1 - KARM) QENT_{t-2} + \dots + \\
 & KARM^{i-1} \cdot (1 - KARM) QENT_{t-i+1} + \\
 & KARM^i \cdot (1 - KARM) QENT_{t-i+1} + KARM^{i+1} QCAL_{t-i-1}
 \end{aligned}$$

(IV.17)

Desprezando a parcela $KARM^{i+1} \cdot QCAL_{t-i-1}$ da expressão (IV.17), tem-se:

$$\begin{aligned}
 QCAL_t = & (1 - KARM) QENT_t + KARM \cdot (1 - KARM) QENT_{t-1} + \\
 & KARM^2 \cdot (1 - KARM) QENT_{t-2} + \dots + \\
 & KARM^{i-1} \cdot (1 - KARM) QENT_{t-i+1} + \\
 & KARM^i \cdot (1 - KARM) QENT_{t-i}
 \end{aligned}$$

(IV.18)

Reescrevendo a equação (IV.18) tem-se:

$$QCAL_t = (1 - KARM) \sum_{i=0}^{t-1} KARM^i \cdot QENT_{t-i} \quad (IV.19)$$

Substituindo a equação (IV.9) em (IV.19), tem-se:

$$QCAL_t = (1 - KARM) \sum_{i=0}^{t-1} KARM^i \left[\sum_{j=1}^{n_{tdh}} QGER_{t-j+i-i} \cdot VTDH_j \right]$$

$$QCAL_t = (1 - KARM) \sum_{i=0}^{t-1} \sum_{j=1}^{n_{tdh}} QGER_{t-j+i-i} \cdot KARM^i \cdot VTDH_j$$

(IV.20)

A equação (IV.20) mostra a forma multiplicativa em que se relacionam os parâmetros KARM e VTDH's na formulação do modelo. Essa forma multiplicativa, intrinsecamente não linear, pode provocar o surgimento de vários pontos de mínimos locais. Ou seja, para diferentes grupos de valores de KARM e VTDH's podemos obter pequenos valores de função objetivo.

A parcela $QCAL_{t-1}$ da equação (IV.10), mostra a interação recursiva entre KARM e VTDH's que se estende até o primeiro instante de tempo ($t=1$). Desta forma, o parâmetro KARM influencia diretamente nos VTDH's, impedindo uma atuação independente desses parâmetros. Além disso, o parâmetro KARM também interage com o KSUP conforme observado na superfície resposta da figura (IV.1).

As análises feitas mostram a necessidade de serem adotadas algumas medidas para superação de dificuldades, e assim tornar a estrutura da fase canal do modelo mais identificável.

IV.3 - ESTRATÉGIAS PARA SUPERAÇÃO DE DIFICULDADES

A pequena identificabilidade da fase canal do modelo SMAP-II foi comprovada através da análise das superfícies resposta, do cálculo do índice de sensibilidade e do desenvolvimento das equações desta parte do modelo.

Em função das dificuldades observadas, principalmente relacionadas com interação entre parâmetros e mínimos locais, adotou-se duas estratégias com o objetivo de atenuá-las ou superá-las. A primeira estratégia está relacionada com a escolha do ponto inicial a ser fornecido aos parâmetros no começo da calibração e a outra refere-se a uma reestruturação da fase canal do modelo.

IV.3.1 - Escolha do ponto inicial

A escolha do valor inicial a ser fornecido aos parâmetros no início da calibração é de grande importância para o processo de convergência dos parâmetros. Desta forma, a escolha desse ponto não deve ser feita de forma automática, sem um conhecimento prévio da estrutura do modelo, do comportamento e das características físicas dos parâmetros e da forma das superfícies resposta geradas por eles.

Entretanto, observa-se na literatura (DAWDY e O'DONNELL (1965), IBBITT e O'DONNELL (1971), GUPTA e SOROOSHIAN (1985), HENDRICKSON, SOROOSHIAN e BRAZIL (1988), ROTUNNO (1989), SILVA (1990)) que a eficiência da calibração vem sendo avaliada a partir da convergência, ou não, dos parâmetros para uma solução conhecida, partindo-se de pontos iniciais com desvios percentuais em relação a essa solução. A figura (IV.5) ilustra este procedimento para um exemplo com os parâmetros KSUP e KARM.

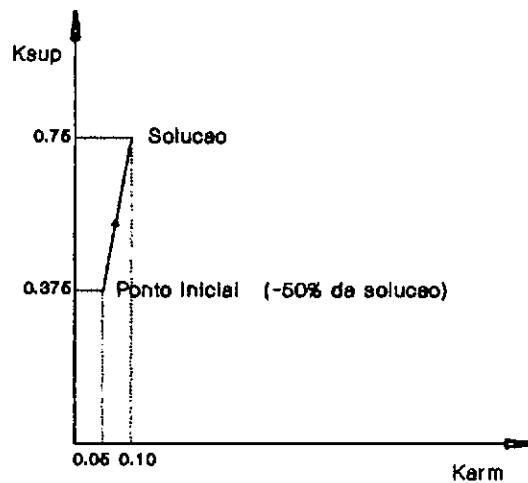


Figura IV.5 - Ponto inicial com desvios da solução

Essa forma de verificar a eficiência da calibração torna-se inadequada quando o ponto inicial estiver localizado em uma região da superfície resposta onde são encontrados mínimos locais, pontos de sela, regiões de indiferença e vales alongados. Essas características com certeza prejudicam a obtenção dos valores ótimos dos parâmetros.

Nas superfícies resposta das figuras (IV.1) a (IV.3) são observadas a maioria dessas características e pelos resultados da calibração do modelo (tabelas (IV.2) e (IV.4)), a escolha do ponto inicial influenciou de forma decisiva na convergência dos parâmetros para a solução ou para um ponto de mínimo local.

Dependendo do desvio aplicado ao valor considerado "verdadeiro" de um parâmetro, podem ser obtidos pontos iniciais de até dez vezes esse valor. Essa distância entre ponto inicial e solução pode resultar em dificuldades no processo de convergência dos parâmetros. Considerando que o valor ótimo do parâmetro KARM é igual a 0,10 e que o ponto inicial de busca para esse parâmetro seja de menos 75% da solução (tabela (IV.4)), tem-se que:

$$\left. \begin{array}{l} \text{Solução} \rightarrow KARM = 0,10 \\ \text{Ponto inicial} \rightarrow KARM = 0,025 \end{array} \right\} \text{Solução} = 4 \times \text{P.Inicial}$$

Além disso, não existe qualquer razão para se aumentar desnecessariamente as dificuldades no processo de calibração automática através da escolha de um ponto inicial a priori sabido desfavorável.

Numa aplicação prática este procedimento torna-se inviável pois se desconhece a solução, sendo necessário atribuir valores aos parâmetros, selecionados de acordo com a experiência do hidrólogo.

Por todos esses motivos, é desejável usar um ponto inicial mais favorável à calibração de forma a ajudar na obtenção do conjunto ótimo de parâmetros.

Neste trabalho, diversamente dos critérios adotados por outros autores, porém mais coerente com as aplicações práticas, adotou-se a alternativa de manter o ponto inicial fixo e variar o conjunto solução usado para gerar as séries sintéticas. A figura (IV.6) mostra um exemplo deste procedimento para os parâmetros KSUP e KARM.

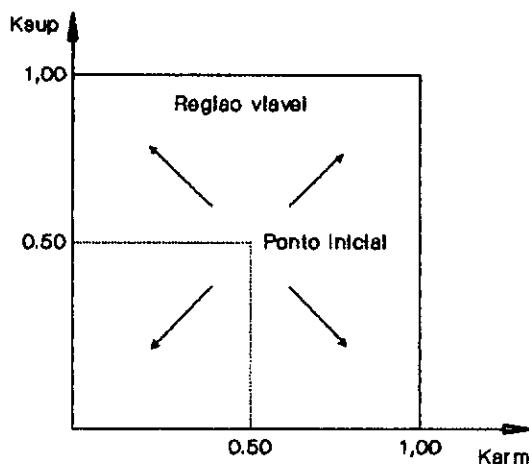


Figura IV.6 - Alternativa de escolha do ponto inicial

Adotou-se como ponto inicial, o valor médio dentro do intervalo de validade de cada parâmetro conforme apresentado na figura (IV.6). Entretanto, podem ser incorporados na estimativa dos valores iniciais, o conhecimento a respeito dos parâmetros, das superfícies resposta geradas por eles, da estrutura do modelo e dos dados hidrométricos. Além disso, em uma aplicação prática podem ser usados conhecimentos a respeito das características físicas da bacia. Esse conjunto de medidas deve resultar em uma maior garantia de convergência para o ponto de mínimo global.

Os desvios entre solução e ponto inicial são menores uma vez que é usado o ponto inicial central ou uma boa estimativa inicial do valor do parâmetro. Para exemplificar, considerando que o ponto inicial do parâmetro KARM seja 0,50, valor no centro do intervalo de validade, se aplicarmos um desvio de menos 75% do ponto inicial, o desvio máximo entre solução e ponto inicial será dado por:

$$\left. \begin{array}{l} \text{Solução} \rightarrow \text{KARM} = 0,375 \\ \text{Ponto inicial} \rightarrow \text{KARM} = 0,500 \end{array} \right\} \text{Solução} = 1,33 \times \text{P.Inicial}$$

A principal vantagem em usar essa alternativa para escolha do ponto inicial é que a calibração de um modelo poderá ser avaliada frente a uma variedade de bacias, representadas pelas diferentes séries sintéticas de vazões utilizadas.

A forma alternativa de escolha do ponto inicial, proposta neste trabalho, não é uma medida estrutural mas sim uma forma de atenuar os problemas na calibração do modelo através de um ponto inicial mais adequado à realidade, utilizando-se conhecimentos a respeito dos parâmetros do modelo, das superfícies resposta geradas por eles, da estrutura do modelo e das características físicas da bacia.

No próximo item é apresentada uma medida estrutural para eliminar algumas das dificuldades observadas na calibração e na análise de sensibilidade dos parâmetros relacionados com a fase canal do modelo SMAP-II versão suavizada.

IV.3.2 - Reestruturação da fase canal do modelo

Para superar as dificuldades observadas na calibração do modelo, principalmente no que diz respeito aos problemas de interação entre os parâmetros KARM x KSUP e KARM x VTDH's, foi feita uma modificação na estrutura da fase canal do modelo.

A fase canal do modelo SMAP-II, conforme mencionado anteriormente, representa os efeitos de translação da hidrógrafa através do canal principal e de amortecimento por armazenamento na calha, de acordo com o modelo idealizado por CLARK (1945).

O histograma tempo-área representa o efeito de translação da hidrógrafa sob a forma de um hidrograma unitário instantâneo (HUI) que não sofreu amortecimento. Após a aplicação do efeito de amortecimento, obtém-se o HUI amortecido. A figura (IV.7) ilustra esta situação.

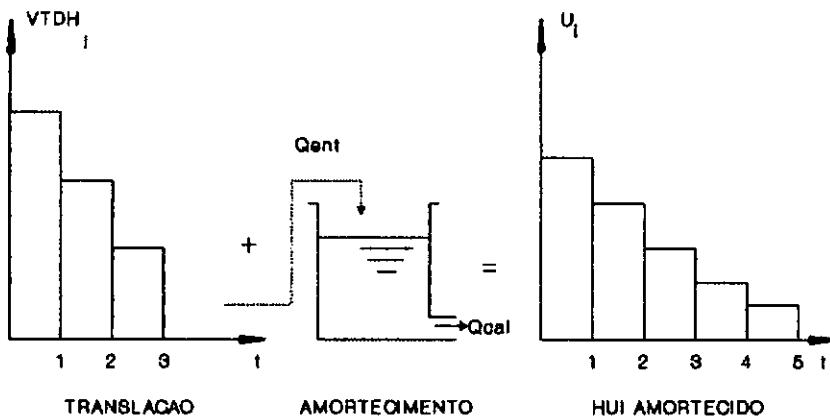


Figura IV.7 - Fase canal do modelo

A reestruturação da fase canal do modelo, proposta nesse trabalho, consistiu na modelagem do HUI amortecido, reunindo os efeitos de translação e amortecimento na calha.

A nova equação para a fase canal do modelo SMAP-II é dada por:

$$QCAL_t = \sum_{j=1}^{ntdhu} QGER_{t-j+1} \cdot U_j \quad (IV.21)$$

Onde:

- $QCAL_t$ - Vazão de saída do modelo no instante t (m^3/s);
- $QGER_{t-j+1}$ - Vazão gerada pela fase terra do modelo (m^3/s);
- U_j - Ordenada do hidrograma unitário instantâneo amortecido; e,
- $ntdhu$ - Número de ordenadas do hidrograma unitário instantâneo amortecido.

As ordenadas do HUI amortecido são consideradas parâmetros do modelo. As restrições (7), (8) e (9) apresentadas na tabela (III.1), impostas aos parâmetros KARM e VTDH's do modelo original, foram substituídas por duas restrições impostas aos parâmetros U's:

$$* \quad 0 < U_j < 1,0$$

$$* \quad 1,0 - \sum_{j=1}^{ntdhu-1} U_j \geq 0$$

Na última restrição está incorporado que a soma das ordenadas do HUI amortecido é igual 1,0, exatamente igual ao caso anterior considerado.

Com a alteração feita na fase canal do modelo, as derivadas da função objetivo em relação a cada parâmetro do modelo, necessárias ao algoritmo de otimização Quasi-Newton, também foram modificadas e estão apresentadas no apêndice "A".

No próximo capítulo são apresentados os resultados obtidos com a calibração do modelo, utilizando as estratégias adotadas para superação de dificuldades. A título de verificação, também foram calculados o índice de sensibilidade para cada parâmetro do modelo reformulado.

CAPITULO VANALISE DOS RESULTADOS**V.1 - PONTO INICIAL CENTRAL**

O modelo original foi calibrado, mantendo-se o ponto inicial no valor médio do intervalo de validade de cada parâmetro. O parâmetro NSAT foi considerado igual a 300 para ativar o mecanismo de transbordamento do reservatório do solo, como sugerido por GUPTA e SOROOSHIAN (1985) na calibração do modelo SIXPAR.

Em função das características dos VTDH's, citadas anteriormente, a segunda e terceira ordenadas desses parâmetros não tiveram seus valores no centro do intervalo de validade.

Para avaliar o desempenho da calibração frente a uma variedade de bacias, foram usadas várias séries sintéticas diferentes, determinadas a partir de 6 conjuntos solução considerados pontos extremos dentro do domínio de significação de cada parâmetro.

Esses pontos foram escolhidos pela maior distância existente entre ponto inicial e solução, determinando assim, uma maior dificuldade para o algoritmo encontrar a solução.

A tabela (V.1) apresenta os resultados da calibração considerando ponto inicial central e seis séries sintéticas diferentes.

Tabela V.1 - Resultados da calibração para ponto inicial central utilizando-se seis séries sintéticas diferentes

| PAR. | LIMITES | P. INIC. | SOL 1 | SOL 2 | SOL 3 | SOL 4 | SOL 5 | SOL 6 |
|------------------------|---------|----------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|
| ABSI | 0 - 10 | 5,00 | 9,50 | 9,50 | 9,50 | 9,50 | 9,50 | 9,50 |
| KSUP | 0 - 1 | 0,50 | 0,05 | 0,05 | 0,95 | 0,05 | 0,05 | 0,05 |
| NSAT | 0-1200 | 300,0 | 1100 | 1100 | 50 | 1100 | 50 | 1100 |
| CPER | 0 - 1 | 0,50 | 0,95 | 0,95 | 0,05 | 0,95 | 0,95 | 0,05 |
| KPER | 0 - 1 | 0,50 | 0,05 | 0,05 | 0,05 | 0,05 | 0,05 | 0,95 |
| KSUB | 0 - 1 | 0,50 | 0,95 | 0,05 | 0,95 | 0,95 | 0,10 | 0,95 |
| KARM | 0 - 1 | 0,50 | 0,05 | 0,95 | 0,95 | 0,95 | 0,95 | 0,95 |
| VTDH ₁ | 0 - 1 | 0,50 | 0,90 | 0,90 | 0,90 | 0,90 | 0,90 | 0,90 |
| VTDH ₂ | 0 - 1 | 0,40 | 0,06 | 0,06 | 0,06 | 0,06 | 0,06 | 0,06 |
| FUNÇÃO OBJETIVO | | | 3×10^{-6} | 6×10^{-6} | 9×10^{-6} | 6×10^{-6} | 4×10^{-7} | 2×10^{-8} |

Os resultados mostram que em todas as séries sintéticas usadas, os parâmetros convergiram para a solução e a função objetivo encontrada foi pequena, menor que 10^{-5} .

Entretanto, quando se utilizou o ponto inicial central e o conjunto solução usado na fase de análise de dificuldades (tabelas (IV.1) a (IV.4)), os parâmetros convergiram para um ponto de mínimo local apesar da obtenção de uma função objetivo pequena. A tabela (V.2) a seguir mostra essa situação.

Tabela V.2 - Ponto inicial central utilizando conjunto solução da tabela (IV.1)

| PARAMETROS | LIMITES | SOLUÇÃO | P.INICIAL | PONTO FINAL |
|-----------------------------|---------|---------|--------------------|-----------------------|
| ABSI | 0 - 10 | 3,00 | 5,0 | 2,667 |
| KSUP | 0 - 1 | 0,75 | 0,5 | 0,176 |
| NSAT | 0-1200 | 600,0 | 300,0 | 594,9 |
| CPER | 0 - 1 | 0,30 | 0,5 | 0,304 |
| KPER | 0 - 1 | 0,015 | 0,5 | 0,0152 |
| KSUB | 0 - 1 | 0,992 | 0,5 | 0,9919 |
| KARM | 0 - 1 | 0,10 | 0,5 | 0,756 |
| VTDH ₁ | 0 - 1 | 0,90 | 0,5 | 0,994 |
| VTDH ₂ | 0 - 1 | 0,07 | 0,04 | $0,21 \times 10^{-7}$ |
| F U N Ç A O O B J E T I V O | | | $0,12 \times 10^6$ | 1,445 |

Os resultados da tabela (V.2) mostram que a seleção do ponto inicial central por si só não resolve integralmente os problemas de convergência. Se a estrutura do modelo produzir mínimos locais não existe algoritmo que garanta convergência para o mínimo global. Desta forma, o ponto inicial apenas facilita ou dificulta a obtenção do ponto de mínimo global.

Para o caso em análise, os valores iniciais atribuídos aos parâmetros KSUP e KARM estão localizados em uma região da superfície resposta onde se encontra um ponto de sela no espaço das duas dimensões consideradas (figura (IV.1). A partir desta informação poderiam ser usados valores iniciais para os parâmetros KARM e KSUP que estivessem localizados em uma região da superfície mais adequada.

Portanto, o uso do ponto inicial no centro do intervalo de validade dos parâmetros é uma medida que atenua o problema mas não resolve o problema definitivamente. A seguir são apresentados os resultados da calibração considerando o modelo reformulado.

V.2 - CALIBRAÇÃO COM O MODELO REESTRUTURADO

Na calibração do modelo reformulado, foram consideradas 5 ordenadas para o HUI amortecido representadas pelos parâmetros U's. A última ordenada U_5 foi calculada em função das demais, de forma que a soma de todas as ordenadas fosse igual a um, seguindo a mesma metodologia empregada aos VTDH's.

Foi utilizado ponto inicial no centro do intervalo de validade para todos os parâmetros, com exceção dos parâmetros NSAT (valor inicial igual a 300 para ativar todos os modos de operação do modelo conforme GUPTA e SOROOSHIAN (1985)), e da segunda, terceira e quarta ordenadas dos U's.

A tabela (V.3) apresenta os resultados da calibração do modelo reformulado. Deve ser ressaltado que os parâmetros que não foram modificados tiveram seus valores iniciais mantidos nos mesmos valores da tabela (V.2).

Tabela V.3 - Resultados da calibração com o modelo reformulado

| PARAMETROS | SOLUÇÃO | P. INICIAL | PONTO FINAL |
|-----------------|---------|-----------------------|-----------------------|
| ABSI | 3,00 | 5,0 | 3,000 |
| KSUP | 0,75 | 0,5 | 0,749 |
| NSAT | 600,0 | 300,0 | 600,0 |
| CPER | 0,30 | 0,5 | 0,300 |
| KPER | 0,015 | 0,5 | 0,015 |
| KSUB | 0,992 | 0,5 | 0,992 |
| U ₁ | 0,90 | 0,5 | 0,899 |
| U ₂ | 0,04 | 0,4 | 0,040 |
| U ₃ | 0,03 | 0,05 | 0,030 |
| U ₄ | 0,02 | 0,03 | 0,019 |
| FUNÇÃO OBJETIVO | | $0,13 \times 10^{-6}$ | $0,15 \times 10^{-6}$ |

Os resultados obtidos na tabela (V.3), mostram que todos os parâmetros convergiram para a solução e a função objetivo foi pequena, da ordem de 10^{-6} . Comparando estes resultados com aqueles obtidos para o modelo original (tabela V.2), pode ser observado que as dificuldades de convergência para pontos de mínimos locais foram superadas.

Desta forma, é provável que a identificabilidade estrutural do modelo tenha melhorado após a reestruturação. Para comprovar esta melhora, foi calculado o índice de sensibilidade para cada parâmetro do modelo reformulado. Os resultados são apresentados na tabela (V.4) a seguir.

Tabela V.4 - Índice de sensibilidade dos parâmetros do modelo reformulado

| PARAMETROS | SOLUÇÃO | η_i |
|----------------|---------|----------|
| ABSI | 3,00 | 2,06 |
| KSUP | 0,75 | 3,18 |
| NSAT | 600,0 | 4,19 |
| CPER | 0,30 | 3,40 |
| KPER | 0,015 | 4,91 |
| KSUB | 0,992 | 1,82 |
| U ₁ | 0,90 | 4,40 |
| U ₂ | 0,04 | 2,86 |
| U ₃ | 0,03 | 2,39 |
| U ₄ | 0,02 | 1,54 |

Comparando estes últimos resultados com aqueles exibidos na tabela (IV.5) para o modelo original, podemos ver que houve uma diminuição significativa no índice de sensibilidade dos parâmetros relacionados com a fase canal do modelo reformulado. Os demais parâmetros permaneceram com valores de índice de sensibilidade aproximadamente iguais aos valores obtidos para o modelo original.

Esses resultados indicam que a reformulação feita na parte canal do modelo SMAP-II versão suavizada mostrou-se eficiente, melhorando a identificabilidade estrutural do modelo para a série de dados utilizada. Entretanto, como a modificação feita na fase canal do modelo tem uma base física, acredita-se que a melhora obtida deve ser alcançada para qualquer série de dados a ser usada. Além disso, foram realizados alguns testes com séries sintéticas diferentes e os resultados confirmam a melhora na identificabilidade estrutural do modelo.

CAPÍTULO VIESTUDO DO PARÂMETRO λ DA PENALIZAÇÃO

Com o objetivo de superar algumas dificuldades na calibração do modelo SMAP-II versão suavizada, foram implementadas a reestruturação da fase canal do modelo e uma alternativa para seleção do ponto inicial. Apesar dessas implementações, ainda perduram algumas questões de natureza computacional, que solucionadas podem melhorar ainda mais o desempenho do processo de calibração automática.

Neste capítulo são abordadas questões tais como: valor inicial (λ_i) e final (λ_f) do parâmetro λ da penalização hiperbólica, variação do λ entre minimizações (λ^{k+1}) e precisão de cada minimização (ACC) usada na regra de parada da rotina de otimização sem restrições.

Embora não sejam questões centrais, o desempenho de todo processo pode ficar comprometido se essas questões não tiverem o merecido cuidado e o devido equacionamento.

Na fase de calibração do modelo tanto na forma original como após a reestruturação da fase canal, capítulo IV, foram adotados os seguintes valores para as variáveis citadas acima:

$$* \lambda_i = 1000$$

$$* \lambda_f = 10^{-4}$$

$$* ACC = \frac{\lambda^k}{p}, \quad p = 10^7$$

$$* \lambda^{k+1} = q \cdot \lambda^k, \quad q = 10^{-1}$$

$$* d^k = \frac{\lambda^k}{1000}$$

A fim de minimizar o tempo de processamento da calibração do modelo, foram desenvolvidas análises de sensibilidade dessas variáveis, visando a obtenção de valores ótimos para cada uma delas. Esse estudo foi elaborado de forma a garantir a convergência do processo.

VI.1 - VALORES INICIAL E FINAL DE λ

Foram testados diversos valores iniciais para o parâmetro " λ " da penalização hiperbólica e, por consequência, para o parâmetro de aderência "d" da suavização, uma vez que esses dois parâmetros estão acoplados linearmente conforme mencionado no capítulo III.

Para realização dos testes de calibração, os parâmetros λ_f , λ^{k+1} e ACC foram mantidos em seus valores originais e tomou-se como fixo o seguinte ponto inicial no centro da região viável:

| | | | |
|--------------|--------------|--------------|--------------|
| ABSI = 5,00 | KSUP = 0,50 | NSAT = 300,0 | CPER = 0,50 |
| KPER = 0,50 | KSUB = 0,50 | $U_1 = 0,50$ | $U_2 = 0,40$ |
| $U_3 = 0,07$ | $U_4 = 0,02$ | | |

Como conjunto solução utilizou-se o ponto especificado na tabela (V.3).

A tabela (VI.1) apresenta o tempo de processamento para cada λ_i testado. O tempo de processamento está especificado em minutos do computador IBM 4381 com uma precisão de 53 dígitos binários ou 15,9546 dígitos decimais. Este tempo corresponde ao tempo total do processo, onde o parâmetro da penalização é atualizado a cada minimização a partir do valor inicial λ_i até atingir o valor final λ_f , conforme descrito no item III.3.

Tabela VI.1 - Tempo total de processamento para diferentes λ_i 's

| λ_i | TEMPO DE CPU |
|-------------|--------------|
| 1 | 27:04 |
| 10 | 20:18 |
| 100 | 19:05 |
| 600 | 17:33 |
| 625 | 14:46 |
| 650 | 14:57 |
| 700 | 16:00 |
| 800 | 15:40 |
| 900 | 15:23 |
| 1000 | 16:26 |
| 1200 | 18:48 |
| 2000 | 19:55 |
| 10000 | 32:06 (*) |

(*) - Os parâmetros não convergiram para a solução.

Pelos resultados da tabela (VI.1), observa-se que os menores tempos de processamento são obtidos para λ_i variando entre 625 e 1000. Valores exteriores ao intervalo fornecem um tempo de processamento maior, comprometendo em alguns casos a obtenção dos valores ótimos dos parâmetros.

Com relação ao valor final λ_f , esta variável está associada diretamente com a precisão desejada no valor da função objetivo. Foi adotada a seguinte definição para precisão:

$$\rho = - \log_{10} (f(\theta))$$

Esta fórmula estabelece a precisão como sendo aproximadamente o número de casas decimais (zeros) antes do

primeiro algarismo significativo (diferente de zero). Deve ser observado que a definição da precisão ρ só é válida para séries sintéticas.

Para a faixa de valores de λ_i entre 625 e 1000, correspondente aos menores tempos de processamento, foram determinadas a função objetivo, a precisão ρ e o tempo de processamento no final de cada minimização. Os resultados são apresentados na tabela (VI.2), onde os valores da coluna "Tempo CPU" estão especificados em minutos do computador IBM 4381.

Os valores da precisão ACC e da atualização de λ para a minimização seguinte (λ^{k+1}) foram mantidos em seus valores originais, utilizados no capítulo IV. Como existem limites inferiores para λ_i e d, abaixo dos quais ocorrem desastres numéricos (devido a estar trabalhando no limite de precisão da máquina: 53 dígitos binários de precisão ou 15,9546 dígitos decimais), são apresentados resultados até a minimização onde não se verifica tais problemas.

A figura (VI.1) apresenta os resultados da tabela (VI.2) sob a forma de gráficos de precisão ρ x tempo de processamento, para cada λ_i testado. Nesses gráficos, obtém-se uma estimativa do tempo de processamento a ser gasto na calibração do modelo, em função do λ_i e da precisão ρ selecionados.

Para uma série com diferente número de observações, indica-se fazer uma correção linear, na medida em que o tempo total de processamento é dominado pelo tempo de cálculo da função objetivo que por sua vez é linearmente dependente do número de observações da série.

Tabela VI.2 - Função Objetivo, precisão ρ e tempo de processamento de cada minimização.
 $(625 \leq \lambda_i \leq 1000, ACC = \lambda^k / 10^7 \text{ e } \lambda^{k+1} = \lambda^k \cdot 10^{-1})$

| λ_i | Minimização | F.Objetivo | Precisão | Tempo CPU Acumulado (s) |
|-------------|-------------|------------------------|----------|-------------------------|
| 1000 | 1 | $0,139 \times 10^2$ | -1,1457 | 9:43 |
| | 2 | 0,16002 | 0,7958 | 11:35 |
| | 3 | $0,416 \times 10^{-2}$ | 2,3813 | 12:15 |
| | 4 | $0,162 \times 10^{-4}$ | 4,7895 | 14:19 |
| | 5 | $0,158 \times 10^{-6}$ | 6,8013 | 14:59 |
| 900 | 1 | $0,114 \times 10^2$ | -1,0560 | 9:17 |
| | 2 | 0,12993 | 0,8863 | 10:58 |
| | 3 | $0,307 \times 10^{-2}$ | 2,5130 | 11:38 |
| | 4 | $0,132 \times 10^{-4}$ | 4,8809 | 13:16 |
| | 5 | $0,127 \times 10^{-6}$ | 6,8955 | 13:56 |
| 800 | 1 | $0,905 \times 10^1$ | -0,9566 | 9:05 |
| | 2 | 0,10289 | 0,9876 | 10:43 |
| | 3 | $0,219 \times 10^{-2}$ | 2,6587 | 11:23 |
| | 4 | $0,104 \times 10^{-4}$ | 4,9833 | 13:25 |
| | 5 | $0,994 \times 10^{-7}$ | 7,0025 | 14:05 |
| 700 | 1 | $0,699 \times 10^1$ | -0,8445 | 8:57 |
| | 2 | $0,789 \times 10^{-1}$ | 1,1027 | 10:37 |
| | 3 | $0,151 \times 10^{-2}$ | 2,8203 | 11:14 |
| | 4 | $0,795 \times 10^{-5}$ | 5,0995 | 13:21 |
| | 5 | $0,758 \times 10^{-7}$ | 7,1206 | 14:01 |
| 650 | 1 | $0,606 \times 10^1$ | -0,7826 | 8:23 |
| | 2 | $0,681 \times 10^{-1}$ | 1,1666 | 10:01 |
| | 3 | $0,124 \times 10^{-2}$ | 2,9077 | 10:38 |
| | 4 | $0,686 \times 10^{-5}$ | 5,1639 | 13:14 |
| | 5 | $0,640 \times 10^{-7}$ | 7,1936 | 13:46 |
| 625 | 1 | $0,5621 \times 10^1$ | -0,7498 | 8:31 |
| | 2 | $0,630 \times 10^{-1}$ | 1,2004 | 10:11 |
| | 3 | $0,111 \times 10^{-2}$ | 2,9530 | 10:48 |
| | 4 | $0,634 \times 10^{-5}$ | 5,1979 | 12:39 |
| | 5 | $0,592 \times 10^{-7}$ | 7,2277 | 13:19 |

Obs: (1) - Tempo de CPU em (min:seg)

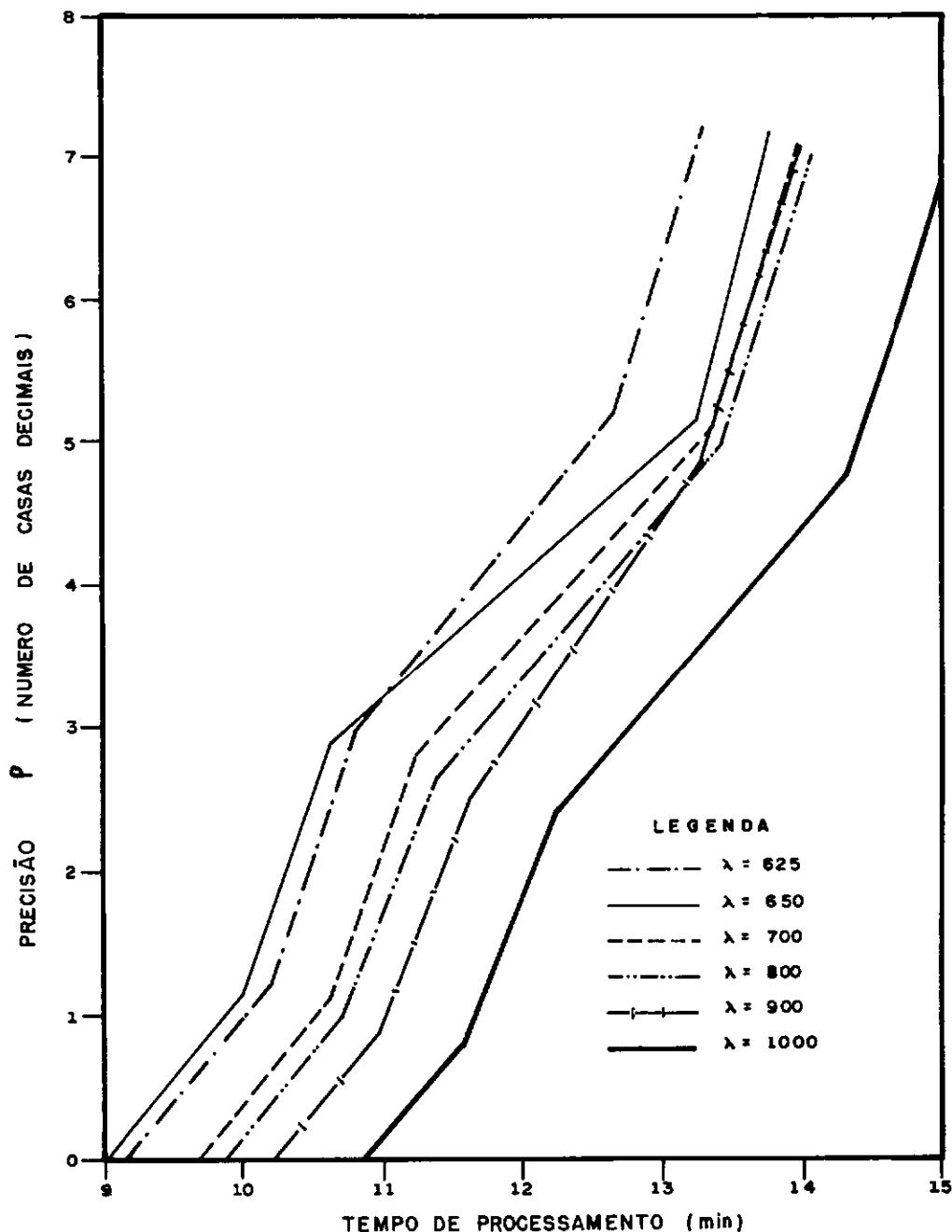


Figura VI.1 - Precisão P x tempo de processamento
 $(625 \leq \lambda_i \leq 1000, ACC = \lambda/10^7 \text{ e } \lambda^{k+1} = \lambda \cdot 10^{-1})$

Verifica-se na figura (VI.1), para valores de λ_i iguais a 650, 700, 800 e 900 e precisão ρ superior a 4,0, que os tempos de processamento são muito próximos. Quando comparados aos tempos de processamento para $\lambda_i = 1000$, obtém-se uma economia de cerca de 1 minuto de processamento. Por outro lado, a maior economia, da ordem de 2 minutos, é obtida com a escolha de $\lambda_i = 625$.

Para precisão ρ inferior a 4,0, a melhor escolha corresponde a $\lambda_i = 650$, com uma economia de cerca de 2 minutos em relação ao tempo de processamento obtido para $\lambda_i = 1000$.

Um ponto importante que pode ser observado na figura (VI.1) e na tabela (VI.2) é que a primeira minimização gasta um tempo de processamento dominantemente maior que as demais, em todos os λ_i testados.

Para um nível de precisão de duas casas decimais, valor mais do que suficiente para qualquer aplicação prática em hidrologia, essa minimização inicial corresponde a cerca de 75% a 80% do tempo de processamento total.

A dominância absoluta da minimização inicial sobre o tempo total ressalta a importância da escolha de um ponto inicial adequado. Pontos iniciais escolhidos a partir de desvios da solução, como aqueles tradicionalmente adotados na literatura (DAWDY e O'DONNELL (1965), IBBITT e O'DONNELL (1971), GUPTA e SOROOSHIAN (1985), ROTUNNO (1989), e outros) podem aumentar significativamente o tempo de processamento da calibração.

No próximo item, são estudadas alternativas para redução do tempo de processamento, não só na primeira minimização como em todo o processo, a partir de mudanças na precisão de cada minimização (ACC).

VI.2 - PRECISÃO DE CADA MINIMIZAÇÃO (ACC)

A variável de precisão ACC, usada na regra de parada da rotina de minimização sem restrições, é atualizada a cada minimização pelo valor do parâmetro λ dividido por uma constante "p" igual a 10^7 . Portanto, para cada minimização tem-se um valor diferente para ACC.

Com o objetivo de reduzir o tempo de processamento gasto na calibração do modelo, foram testados diversos valores para a variável de precisão ACC a partir de mudanças no valor da constante p. Esses testes foram feitos para uma faixa de valores de p entre 1 e 10^7 considerando valores de $\lambda_i = 1000$ e $\lambda_f = 10^{-4}$ ou o valor limite abaixo do qual ocorrem desastres numéricos, conforme mencionado anteriormente.

Verificou-se que valores de p entre 1 e 10^5 aumentam o tempo de processamento. Por outro lado, para valores de p entre 1 e 10^2 os parâmetros do modelo não convergem para a solução.

Entre os sete valores testados, o menor tempo de processamento foi verificado para $p = 10^6$. Esse resultado recomenda a utilização de um valor nesse entorno. Os resultados do tempo de processamento, da precisão ρ e função objetivo, para $p = 10^6$ e λ_i entre 625 e 1000 são apresentados na tabela (VI.3).

A figura (VI.2) apresenta esses resultados sob a forma de gráficos da precisão ρ x tempo de processamento para cada λ_i usado.

Tabela VI.3 - Função Objetivo, precisão ρ e tempo de processamento de cada minimização.
 $(625 \leq \lambda_i \leq 1000, ACC = \lambda^k / 10^\sigma \text{ e } \lambda^{k+1} = \lambda^k \cdot 10^{-1})$

| λ_i | Minimização | F.Objetivo | Precisão | Tempo CPU Acumulado (1) |
|-------------|-------------|------------------------|----------|-------------------------|
| 1000 | 1 | $0,139 \times 10^2$ | -1,1457 | 9:43 |
| | 2 | $0,563 \times 10^1$ | -0,7509 | 10:15 |
| | 3 | $0,162 \times 10^{-2}$ | 2,7893 | 11:55 |
| | 4 | $0,166 \times 10^{-4}$ | 4,7792 | 12:29 |
| | 5 | $0,536 \times 10^{-6}$ | 6,2711 | 13:06 |
| 900 | 1 | $0,114 \times 10^2$ | -1,0569 | 8:37 |
| | 2 | $0,391 \times 10^1$ | -0,5925 | 9:09 |
| | 3 | $0,132 \times 10^{-2}$ | 2,8808 | 10:47 |
| | 4 | $0,134 \times 10^{-4}$ | 4,8724 | 11:21 |
| | 5 | $0,393 \times 10^{-6}$ | 6,4062 | 11:58 |
| | 6 | $0,244 \times 10^{-6}$ | 6,6121 | 12:46 |
| 800 | 1 | $0,905 \times 10^1$ | -0,9566 | 9:03 |
| | 2 | $0,263 \times 10^1$ | -0,4213 | 9:37 |
| | 3 | $0,104 \times 10^{-2}$ | 2,9831 | 11:15 |
| | 4 | $0,106 \times 10^{-4}$ | 4,9766 | 11:49 |
| | 5 | $0,259 \times 10^{-6}$ | 6,5862 | 12:26 |
| | 6 | $0,151 \times 10^{-6}$ | 6,8198 | 13:29 |
| | 7 | $0,150 \times 10^{-6}$ | 6,8227 | 14:27 |
| 700 | 1 | $0,699 \times 10^1$ | -0,8445 | 8:56 |
| | 2 | $0,168 \times 10^1$ | -0,2241 | 9:30 |
| | 3 | $0,796 \times 10^{-3}$ | 3,0991 | 11:05 |
| | 4 | $0,805 \times 10^{-5}$ | 5,0942 | 11:39 |
| | 5 | $0,169 \times 10^{-6}$ | 6,7718 | 12:16 |
| | 6 | $0,905 \times 10^{-7}$ | 7,0435 | 13:11 |
| | 7 | $0,874 \times 10^{-7}$ | 7,0587 | 14:27 |
| 650 | 1 | $0,637 \times 10^1$ | -0,8043 | 7:40 |
| | 2 | $0,177 \times 10^1$ | -0,2476 | 8:12 |
| | 3 | $0,686 \times 10^{-3}$ | 3,1635 | 9:58 |
| | 4 | $0,693 \times 10^{-5}$ | 5,1594 | 10:32 |
| | 5 | $0,134 \times 10^{-6}$ | 6,8718 | 11:09 |
| | 6 | $0,174 \times 10^{-7}$ | 7,7589 | 13:10 |
| | 7 | $0,159 \times 10^{-7}$ | 7,7991 | 14:03 |
| 625 | 1 | $0,563 \times 10^1$ | -0,7506 | 7:55 |
| | 2 | $0,114 \times 10^1$ | -0,0554 | 8:27 |
| | 3 | $0,635 \times 10^{-3}$ | 3,1975 | 10:13 |
| | 4 | $0,640 \times 10^{-5}$ | 5,1938 | 10:47 |
| | 5 | $0,117 \times 10^{-6}$ | 6,9310 | 11:24 |
| | 6 | $0,554 \times 10^{-7}$ | 7,2562 | 12:20 |
| | 7 | $0,549 \times 10^{-7}$ | 7,2608 | 13:18 |

Obs: (1) - Tempo de CPU em (min:seg)

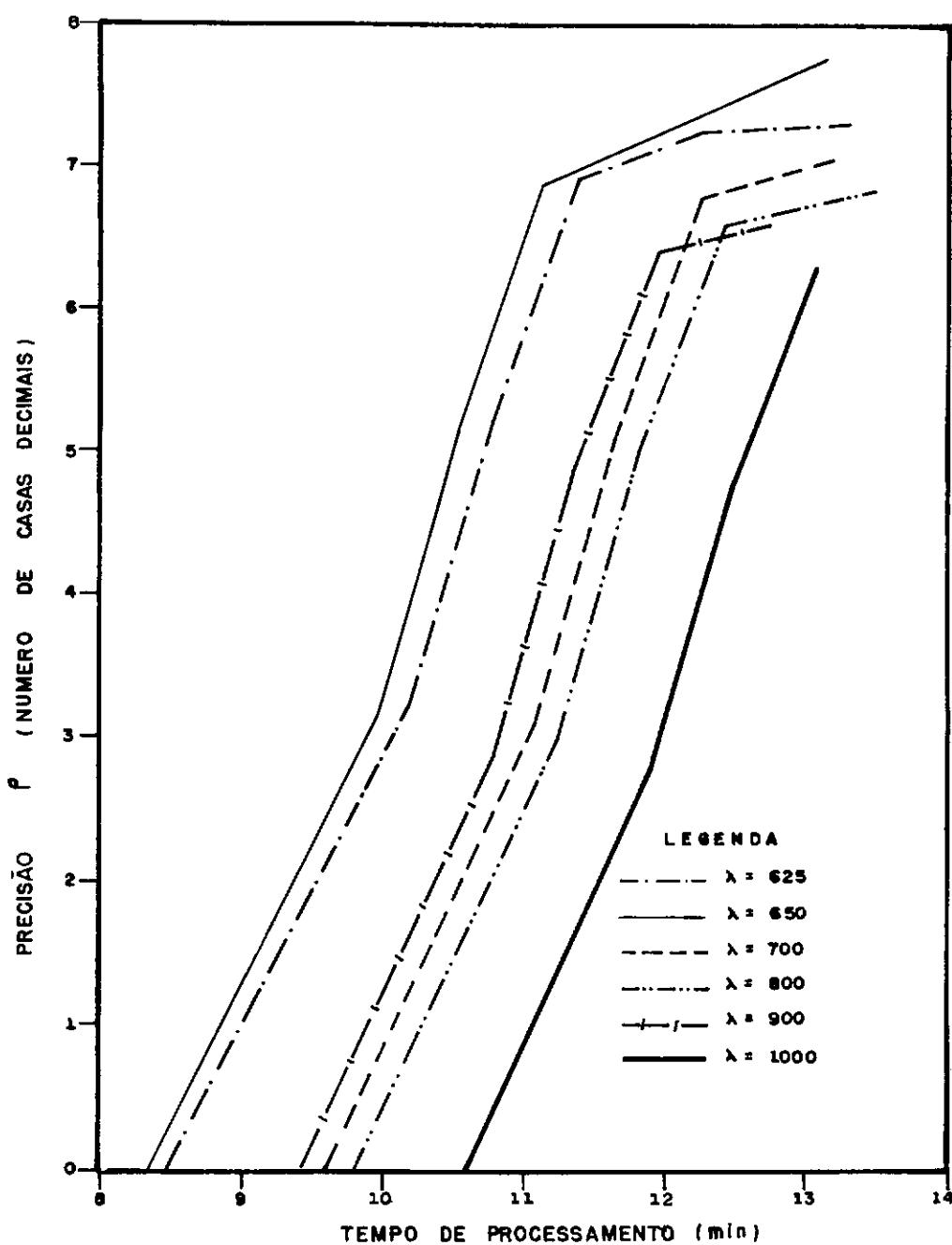


Figura VI.2 - Precisão ρ x tempo de processamento
 $(625 \leq \lambda_i \leq 1000, ACC = \lambda / 10^6 \text{ e } \lambda^{k+1} = \lambda \cdot 10^{-1})$

Os resultados apresentados na tabela (VI.3) e na figura (VI.2) indicam que $\lambda_i = 650$ representa a escolha mais apropriada, com uma redução no tempo de processamento de cerca de dois minutos quando comparada à $\lambda_i = 1000$.

Comparando o gráfico para $\lambda_i = 650$ da figura (VI.2) com o gráfico relativo a $\lambda_i = 1000$ da figura (VI.1) que representa a calibração original do modelo, houve uma redução média de 25% de tempo de processamento. De toda sorte, mesmo com a diminuição da precisão de cada minimização e variações no valor inicial λ_i , não foi observada redução significativa no tempo de processamento.

Após esta etapa desenvolveu-se análises visando reduzir o tempo de processamento, em particular da primeira minimização, através da modificação da estrutura da equação da precisão ACC de forma a torná-la independente do valor de λ em cada minimização. Essa modificação baseia-se no fato de que a primeira minimização trabalha com valores elevados de função objetivo, d e λ , não sendo necessário uma precisão ACC da ordem de 10^{-4} .

Para isso, a variável ACC foi transformada em vetor onde cada coordenada deste vetor é o valor da precisão em cada minimização, não tendo dessa maneira qualquer vinculação com o parâmetro λ . As tabelas (VI.4) a (VI.8) apresentam os valores de tempo de processamento e função objetivo para cada um dos cinco vetores de precisão adotados. Os testes realizados correspondem a um valor inicial $\lambda_i = 1000$ e o valor final λ_f segue a metodologia adotada anteriormente.

Tabela VI.4 - 1º vetor adotado para a variável ACC

| Minimização | ACC | F.Objetivo | Tempo CPU |
|-------------|-----------|-----------------------|-----------|
| 1 | 10^{-3} | $0,14 \times 10^2$ | 9:41 |
| 2 | 10^{-3} | $0,57 \times 10^4$ | 24 |
| 3 | 10^{-5} | $0,16 \times 10^{-2}$ | 2:14 |
| 4 | 10^{-6} | $0,17 \times 10^{-4}$ | 35 |
| 5 | 10^{-7} | $0,53 \times 10^{-6}$ | 38 |
| 6 | 10^{-9} | $0,37 \times 10^{-6}$ | 1:50 |

Tabela VI.5 - 2º vetor adotado para a variável ACC

| Minimização | ACC | F.Objetivo | Tempo CPU |
|-------------|-----------|-----------------------|-----------|
| 1 | 10^{-1} | $0,88 \times 10^5$ | 45 |
| 2 | 10^{-2} | $0,13 \times 10^4$ | 5:02 |
| 3 | 10^{-3} | $0,15 \times 10^{-1}$ | 10:53 |
| 4 | 10^{-5} | $0,13 \times 10^{-1}$ | 33 |
| 5 | 10^{-7} | $0,16 \times 10^{-6}$ | 1:42 |

Tabela VI.6 - 3º vetor adotado para a variável ACC

| Minimização | ACC | F.Objetivo | Tempo CPU |
|-------------|-----------|--------------------|-----------|
| 1 | 10^{-1} | $0,88 \times 10^5$ | 44 |
| 2 | 10^{-2} | $0,13 \times 10^4$ | 5:00 |
| 3 | 10^{-2} | $0,18 \times 10^3$ | 8:21 |
| 4 | 10^{-4} | $0,17 \times 10^3$ | 32 |
| 5 | 10^{-6} | 0,32 | 8:21 |

Tabela VI.7 - 4º vetor adotado para a variável ACC

| Minimização | ACC | F.Objetivo | Tempo CPU |
|-------------|-----------|-----------------------|-----------|
| 1 | 1,0 | $0,76 \times 10^5$ | 44 |
| 2 | 10^{-2} | $0,13 \times 10^4$ | 5:00 |
| 3 | 10^{-3} | 0,46 | 9:16 |
| 4 | 10^{-5} | $0,16 \times 10^{-4}$ | 1:29 |
| 5 | 10^{-7} | $0,16 \times 10^{-6}$ | 38 |

Tabela VI.8 - 5º vetor adotado para a variável ACC

| Minimização | ACC | F.Objetivo | Tempo CPU |
|-------------|-----------|-----------------------|-----------|
| 1 | 10^{-2} | $0,41 \times 10^4$ | 2:47 |
| 2 | 10^{-5} | 0,16 | 10:33 |
| 3 | 10^{-6} | $0,41 \times 10^{-2}$ | 40 |
| 4 | 10^{-7} | $0,16 \times 10^{-4}$ | 1:53 |
| 5 | 10^{-8} | $0,16 \times 10^{-6}$ | 41 |

Os resultados das tabelas (IV.2) a (IV.8) mostram que em todos os casos houve uma redução no tempo de processamento da primeira minimização. Entretanto, esta redução é compensada por acréscimos no tempo de processamento das minimizações seguintes.

Por exemplo, no primeiro vetor adotado (tabela(VI.4)) são gastos cerca de dez minutos de processamento para obter uma função objetivo de $0,14 \times 10^2$, enquanto no terceiro vetor (tabela (VI.6)) são gastos cerca de quarenta segundos para obter uma função objetivo igual a $0,88 \times 10^5$. Como esse valor de função objetivo é grande, o algoritmo gasta na segunda e terceira minimizações cerca de cinco e oito minutos respectivamente para reduzir o valor de função objetivo a um patamar de $0,18 \times 10^3$. Ou seja, a economia de tempo na primeira minimização é compensada pelo acréscimo nas duas minimizações seguintes.

De todos os vetores adotados, o menor tempo de processamento foi obtido pelo primeiro vetor, apresentado na tabela (VI.4). Entretanto, comparando-se estes resultados com aqueles apresentados na tabela (VI.3) não houve redução do tempo de processamento.

Desta forma, podemos concluir que o tempo total de processamento foi sensível à mudança feita na metodologia de definição da variável ACC mas não foi reduzido.

VI.3 - VARIAÇÃO DO λ ENTRE MINIMIZAÇÕES (λ^{k+1})

O parâmetro λ da penalização hiperbólica tem sido atualizado a cada minimização a partir do valor de λ no final da minimização multiplicado por uma constante $q=10^{-1}$.

Também com o objetivo de reduzir o tempo de processamento, foram testados diferentes valores para a constante q . Os resultados para $q = 10^{-2}$ e λ_i variando

entre 625 e 1000 são apresentados na tabela (VI.9). A figura (VI.3) mostra esses resultados sob a forma de gráficos da precisão ρ x tempo de processamento.

Tabela VI.9 - Função Objetivo, precisão ρ e tempo de processamento de cada minimização.

$$(625 \leq \lambda_i \leq 1000, ACC = \lambda^k / 10^6 \text{ e } \lambda^{k+1} = \lambda^k \cdot 10^{-2})$$

| λ | Minimização | F.Objetivo | Precisão | Tempo CPU Acumulado (1) |
|-----------|-------------|------------------------|----------|-------------------------|
| 1000 | 1 | $0,139 \times 10^2$ | -1,1457 | 9:42 |
| | 2 | $0,162 \times 10^{-2}$ | 2,7893 | 11:25 |
| | 3 | $0,558 \times 10^{-6}$ | 6,2538 | 12:02 |
| | 4 | $0,372 \times 10^{-6}$ | 6,4301 | 13:06 |
| 900 | 1 | $0,114 \times 10^2$ | -1,0569 | 8:35 |
| | 2 | $0,132 \times 10^{-2}$ | 2,8808 | 10:15 |
| | 3 | $0,378 \times 10^{-6}$ | 6,4223 | 10:52 |
| | 4 | $0,343 \times 10^{-7}$ | 7,4649 | 12:40 |
| 800 | 1 | $0,905 \times 10^4$ | -0,9566 | 9:01 |
| | 2 | $0,104 \times 10^{-2}$ | 2,9831 | 10:41 |
| | 3 | $0,265 \times 10^{-6}$ | 6,5766 | 11:18 |
| 700 | 1 | $0,699 \times 10^4$ | -0,8445 | 8:56 |
| | 2 | $0,796 \times 10^{-3}$ | 3,0991 | 10:33 |
| | 3 | $0,169 \times 10^{-6}$ | 6,7714 | 11:10 |
| | 4 | $0,869 \times 10^{-7}$ | 7,0609 | 12:16 |
| 650 | 1 | $0,637 \times 10^4$ | -0,8043 | 7:40 |
| | 2 | $0,686 \times 10^{-3}$ | 3,1645 | 9:23 |
| | 3 | $0,132 \times 10^{-6}$ | 6,8804 | 10:00 |
| | 4 | $0,647 \times 10^{-7}$ | 7,1893 | 10:58 |
| 625 | 1 | $0,563 \times 10^4$ | -0,7506 | 7:54 |
| | 2 | $0,635 \times 10^{-3}$ | 3,1975 | 9:29 |
| | 3 | $0,116 \times 10^{-6}$ | 6,9359 | 10:09 |
| | 4 | $0,539 \times 10^{-7}$ | 7,2683 | 11:04 |

Obs: (1)- Tempo de CPU em (min:seg)

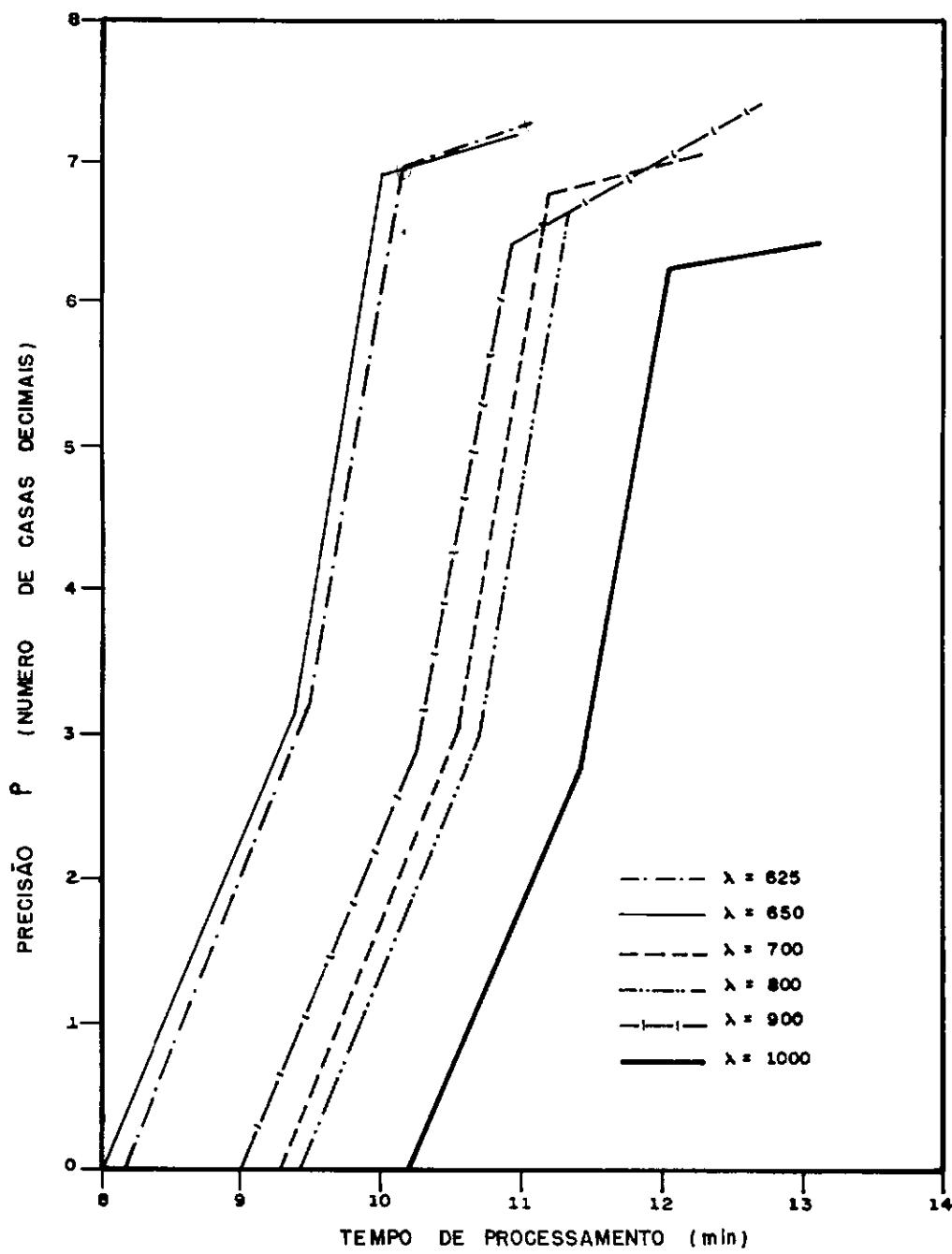


Figura VI.3 - Precisão ρ x tempo de processamento
 $(625 \leq \lambda_i \leq 1000, ACC = \lambda / 10^{\delta}$ e $\lambda^{k+1} = \lambda \cdot 10^{-2}$)

Os resultados confirmam que o valor inicial $\lambda_i = 650$ é a escolha mais adequada. Para este valor de λ_i , os tempos de processamento obtidos para $q = 10^{-2}$ (tabela (VI.9)) são inferiores aos obtidos para $q = 10^{-1}$ (tabela (VI.3)), para todas as minimizações a menos da primeira que mantém um valor obviamente igual.

Comparando-se o gráfico de $\lambda_i = 1000$ correspondente à calibração original, figura (VI.1), com o gráfico de $\lambda_i = 650$ onde são considerados $q = 10^{-2}$ e $p = 10^6$, figura (VI.3), obtém-se para precisão ρ entre 2 e 6, redução no tempo de processamento conforme indicado na tabela (VI.10).

Tabela VI.10 - Redução no tempo de processamento

| ρ | TEMPO CPU $\lambda_i = 1000$ ($q = 10^{-1}, p = 10^7$) | TEMPO CPU $\lambda_i = 650$ ($q = 10^{-2}, p = 10^6$) | REDUÇÃO NO TEMPO CPU |
|--------|--|---|----------------------------|
| 2 | 12:05 | 8:54 | 25% |
| 4 | 13:39 | 9:32 | 30% |
| 6 | 14:45 | 9:51 | 35% |

A vista dos resultados computacionais obtidos para a série de dados utilizada neste estudo, é possível sugerir a adoção dos seguintes valores para as variáveis λ_i , λ_f , ACC e λ^{k+1} :

1. $\lambda_i = 650$.

2. λ_f , deve ser escolhido de acordo com a precisão desejada.

3. $ACC = \frac{\lambda^k}{p}$, onde $p = 10^6$

4. $\lambda^{k+1} = \lambda^k \cdot q$, onde $q = 10^{-2}$

CAPÍTULO VIICONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

VI.1 - CONCLUSÕES

A partir dos resultados obtidos na calibração do modelo suavizado foram observadas, em alguns casos, dificuldades no processo de convergência dos parâmetros. Para identificar a origem dessas dificuldades foram feitas análises das superfícies resposta dos parâmetros KSUP, KARM e VTDH₁, calculou-se o índice de sensibilidade de cada parâmetro do modelo e foram desenvolvidas as equações da fase canal do modelo. Essas medidas adotadas ensejaram as seguintes conclusões:

* As superfícies respostas dos parâmetros KARM x KSUP e KARM x VTDH₁ possuem vales alongados decorrentes de uma forte interação entre esses parâmetros, mínimos locais e regiões de indiferença.

* Os valores elevados de índice de sensibilidade obtidos para os parâmetros KARM e VTDH's, indicaram a pequena identificabilidade da estrutura da fase canal do modelo.

* O desenvolvimento das equações da fase canal mostrou a forma multiplicativa, altamente não linear, em que se relacionam KARM e VTDH's. Essa forma multiplicativa deve ser responsável pelo surgimento de pontos de mínimos locais e de interação entre esses parâmetros.

Efetuada a análise de dificuldades, adotaram-se duas estratégias para eliminar ou atenuar os problemas identificados. Estas estratégias, escolha do ponto inicial e reestruturação da fase canal do modelo, proporcionaram as seguintes conclusões:

* A escolha do ponto inicial a ser usado no início da calibração é de grande importância para o processo de

convergência dos parâmetros.

* A alternativa aqui adotada de manter o ponto inicial fixo, no centro do intervalo de validade dos parâmetros, por si só não resolve os problemas de convergência. Se a estrutura do modelo for tal que produza interdependência entre os parâmetros e mínimos locais, não existem garantias do processo convergir para a solução ótima global.

* Uma forma de atenuar esse problema é estimar os valores iniciais dos parâmetros a partir de informações a respeito da bacia hidrográfica, da análise das superfícies resposta e da experiência do hidrólogo com o modelo. Outra forma é estimar esses valores a partir das informações contidas nas séries de dados. Por exemplo, no modelo SMAP-II os valores iniciais dos parâmetros KSUP e KSUB poderiam ser estimados a partir dos métodos de separação dos componentes do hidrograma.

* A maior identificabilidade da fase canal do modelo após a reestruturação foi comprovada pelos valores pequenos de índice de sensibilidade obtidos para os parâmetros KSUP e U's. Tal alternativa mostrou-se eficiente, superando os problemas de convergência para mínimos locais e de interação entre parâmetros.

Quanto ao estudo do parâmetro λ da penalização hiperbólica, método responsável pela transformação do problema restrito original numa sequência de problemas irrestritos, foram feitas diversas tentativas no sentido de reduzir o tempo de processamento gasto na calibração do modelo. Essas tentativas abordaram os valores inicial (λ_i) e final (λ_f), a precisão de cada minimização (ACC) e a variação do λ entre minimizações. Concluiu-se que:

* A primeira minimização gasta um tempo de processamento dominadamente maior que as demais, em todos os λ_i testados. Essa dominância ressalta a importância da escolha de um ponto inicial adequado.

* Apesar de todos os testes e mudanças realizadas não houve diminuição significativa do tempo de processamento. A redução máxima alcançada foi da ordem de 35% para uma precisão ρ de seis casas decimais.

VI.2 - RECOMENDAÇÕES

Com o desenvolvimento das pesquisas na área de calibração automática de modelos chuva-vazão, principalmente após a aplicação de técnicas de suavização, as dificuldades na utilização de métodos de otimização de primeira e segunda ordem foram superadas. Verifica-se nesse trabalho e em SILVA (1990) a eficiência e o bom desempenho do método Quasi-Newton com atualização BFGS.

No entanto, recomenda-se a utilização da técnica de suavização e do método de penalização hiperbólica, XAVIER (1982), em modelos mais complexos com o objetivo de verificar a performance da técnica empregada.

O sucesso obtido na calibração automática do modelo SMAP-II, versão suavizada, foi alcançado trabalhando-se em todo domínio de significação física dos parâmetros. É evidente, que se existir qualquer informação hidrológica para delimitar mais precisamente o domínio de validade dos parâmetros (através da inclusão de outras restrições ou do estreitamento da faixa de validade), a convergência para a solução ótima do problema será favorecida. Desta forma, em um caso prático recomenda-se a utilização de restrições barrando o parâmetro a uma faixa de valores compatível com a bacia em estudo.

Os estudos efetuados no presente trabalho demonstraram a necessidade do estabelecimento de estruturas de modelos com maior identificabilidade. Assim, o hidrólogo ao construir ou escolher um modelo deve ter em mente todas as implicações matemáticas provenientes da representação dos processos físicos, principalmente no que diz respeito à não linearidade das funções do modelo.

BIBLIOGRAFIA

- CANEDO, P. M. (1974), "Versão COPPE do TWM para Calibração em Bacias Hidrográficas com Solos Residuais", Tese de Mestrado, Universidade Federal do Rio de Janeiro.
- CANEDO, P. M. (1979), "The Reliability of Conceptual Catchment Model Calibration", Ph.D. Thesis, University of Lancaster, UK.
- CANEDO, P. M. (1989), "Hidrologia Superficial", ABRH, Ed. UFRJ.
- CANEDO, P. M., SILVA, L. P. e XAVIER, A. E. (1989), "Calibração Automática de Modelos Chuva-Vazão por meio de Técnicas de Suavização", IV Simpósio Luso-Brasileiro de Hidráulica e Recursos Hídricos, Lisboa-Portugal.
- CASTRO, M. (1992), "Funções Objetivo de Mínimos Quadrados Generalizados nos Modelos Conceituais Chuva-Vazão", Tese M.Sc., COPPE/UFRJ, Brasil.
- CLARK, C. O. (1945), "Storage and the Unit Hydrograph", Proceedings of Am. Soc. Civil Eng., nº 69, pp. 1419-1447.
- DAWDY, D. R. e BERGMANN, J. M. (1969), "Effect of Rainfall Variability on Streamflow Simulation", Water Resources Research, vol. 5, nº 5, pp. 958-966.
- DAWDY, D. R. e O'DONNELL, T. (1965), "Mathematical Models of Catchment Behavior", Journal of the Hydraulics Division ASCE, vol. 91, nº HY4, pp. 123-137.
- DIB, K. R. (1986), "Manual de Apresentação do Modelo SMAP-II", Publicação Interna, Enge-Rio Engenharia e Consultoria S.A., Rio de Janeiro-RJ.

DISKIN, M. H. e SIMON, E. (1977), "A Procedure for the Selection of Objective Functions for Hydrological Simulation Models", Journal of Hydrology, vol. 34, n° 1/2, pp. 129-149.

GILL P., MURRAY W. e WRIGHT M.M. (1981), "Practical Optimization", Princeton University Press, N. Y..

GUPTA, V. K. e SOROOSHIAN, S. (1983), "Uniqueness and Observability of Conceptual Rainfall-Runoff Model Parameters : The Percolation Process Examined", Water Resources Research, vol. 19, n° 1, pp. 269-276.

GUPTA, V. K. e SOROOSHIAN, S. (1985), "The Automatic Calibration of Conceptual Catchment Models using Derivative-based Optimization Algorithms", Water Resources Research, vol. 21, n° 4, pp. 473-485.

HENDRICKSON, J. D., SOROOSHIAN, S. e BRAZIL, L. E. (1988), "Comparision of Newton-type and Direct Search Algorithms for Calibration of Conceptual Rainfall-Runoff Models", Water Resources Research, vol. 24, n° 5, pp. 691-700.

IBBITT, R. P. (1972), "Effects of Random Data Errors on the Parameter Values for a Conceptual Model", Water Resources Research, vol. 8, n° 1, pp. 70-78.

IBBITT, R. P. e O'DONNELL, T. (1971), "Fitting Methods for Conceptual Catchment Models", Journal of the Hydraulics Division ASCE, vol. 97, n° HY9, pp. 1331-1342.

JOHNSTON, P. R. e PILGRIM, D. H. (1973), "A Study of Parameter Optimization for a Rainfall-Runnoff Model", University of New South Wales School of Civil Engineering, Report n° 131.

JOHNSTON, P. R. e PILGRIM, D. H. (1976), "Parameter Optimization for Watershed Models", Water Resources Research, vol. 12, n° 3, pp. 477-486.

LOPES, J. E. G., BRAGA, B. P. F. e CONEJO, J. G. L. (1981), "SMAP - A Simplified Hydrologic Model", Proceedings of the International Symposium on Applied Modelling, Mississippi-USA.

MANDEVILLE, A. N., O'CONNELL, P. E., SUTCLIFFE, J. V. e NASH, J. E. (1970), "River Flow Forecasting through Conceptual Models Part III - The Ray Catchment at Greendon Underwood", Journal of Hydrology, vol. 11, n° 2, pp. 109-128.

NASH, J. E. e SUTCLIFFE, J. V. (1970), "River Flow Forecasting through Conceptual Models Part I - A Discussion of Principles", Journal of Hydrology, vol. 10, n° 3, pp. 282-290.

O'CONNELL, P. E., NASH, J. E. e FARRELL, J. P. (1970), "River Flow Forecasting through Conceptual Models Part II - The Brosna Catchment at Ferbane", Journal of Hydrology, vol. 10, n° 4, pp. 317-329.

O'DONNELL, T. e CANEDO , P. (1980), "The Reliability of Conceptual Basin Model Calibration", Hydrological Forecasting - IAHS Publ. no. 129, pp. 263-269.

PICKUP, G. (1977), "Testing the Efficiency of Algorithms and Strategies for Automatic Calibration of Rainfall-Runoff Models", Hydrological Sciences Bulletin, Vol. 22, n° 2, pp. 257-274.

ROSEN BROCK, H. H. (1960), "An Automatic Method of Finding the Greatest of Least Value of a Function", Comp. Journal, V. 3, pp. 175-184.

- ROTUNNO, O. C. e CANEDO, P. M. (1987), "Comparação de Dois Métodos de Otimização em Modelos Hidrológicos do Tipo Chuva-Vazão", VII Simpósio de Hidrologia e Recursos Hídricos, Salvador-BA.
- ROTUNNO, O. C. (1989), "Comparação de Dois Métodos de Otimização em Modelos Hidrológicos do Tipo Chuva-Vazão", Tese M.Sc., COPPE/UFRJ, Brasil.
- SILVA, L. P. (1990), "Calibração Automática de Modelos Tipo Chuva-Vazão Utilizando Técnicas de Suavização - Uma Aplicação ao Modelo SMAP-II", Tese M.Sc., COPPE/UFRJ, Brasil.
- SOROOSHIAN, S. (1988), "Parameter Identifiability in Conceptual Rainfall-Runoff Models", Prepared for the 3rd Water Resources Operations Management Workshop, Colorado State University.
- SOROOSHIAN, S. e ARFI, F. (1982), "Response Surface Sensitivity Analysis Methods for Postcalibration Studies", Water Resources Research, vol. 18, n° 5, pp. 1531-1538.
- SOROOSHIAN, S. e DRACUP, J. A. (1980), "Stochastic Parameter Estimation Procedures for Hydrologic Rainfall-Runoff Models : Correlated and Heteroscedastic Error Cases", Water Resources Research, vol. 16, n° 2, pp. 430-442.
- SOROOSHIAN, S. e GUPTA, V. K. (1983), "Automatic Calibration of Conceptual Rainfall-Runoff Models : The Question of Parameter Observability and Uniqueness", Water Resources Research, vol. 19, n° 1, pp. 260-268.
- SOROOSHIAN, S. e GUPTA, V. K. (1985), "The Analysis of Structural Identifiability : Theory and Application to Conceptual Rainfall-Runoff Models", Water Resources Research, vol. 21, n° 4, pp. 487-495.

- SOROOSHIAN, S., GUPTA, V. K. e FULTON, J. L. (1983), "Evaluation of Maximum Likelihood Parameter Estimation Techniques for Conceptual Rainfall-Runoff Models : Influence of Calibration Data Variability and Length on Model Credibility", Water Resources Research, vol. 19, n° 1, pp. 251-259.
- TUCCI, C. E. M., SANCHEZ, J. e LOPES, M. O. S. (1981), "Modelo IPH II para Simulação de Precipitação-Vazão na Bacia: Alguns Resultados", Anais do IV Simpósio Brasileiro de Hidrologia e Recursos Hídricos, Fortaleza.
- U.S. SOIL CONSERVATION SERVICE (1975), "Urban Hydrology for Small Watersheds", Technical Release n° 55 , U.S. Department of Agriculture.
- XAVIER, A. E. (1982), "Penalização Hiperbólica", Anais do I Congresso Latino Americano de Pesquisa Operacional e Engenharia de Sistemas, Rio de Janeiro, pp. 468-482.

APENDICE ADERIVADAS DAS FUNÇÕES RELACIONADAS COM A NOVA FASE CANAL DO MODELO

A derivada da função objetivo é expressa por:

$$FO = \sum_{t=1}^{nobs} (QCAL_t - QOBS_t)^2$$

$$DFO(1..N) = \sum_{t=1}^{nobs} 2.(QCAL_t - QOBS_t) . DQCAL(1..N)$$

Onde:

nobs - número de observações

N - número de parâmetros, correspondente a:

- 1 - ABSI
- 2 - KSUP
- 3 - NSAT
- 4 - CPER
- 5 - KPER
- 6 - KSUP
- 7 em diante - ordenadas do HUI - U

Lembrando que: $QCAL_t = \sum_{j=1}^{ntdh_u} QGER_{t-j+1} \cdot U_j$

As derivadas de QCAL são expressas por:

- Com relação a ABSI, KSUP, NSAT, CPER, KPER e KSUB

$$DQCAL(1..6) = \sum_{j=1}^{ntdh_u} U_j . DQGER(t+1-j, 1..6)$$

As derivadas de $DQGER_{(i+1-j, 1 \dots 6)}$ estão descritas em SILVA (1990).

- Com relação aos U's

Se $ntdhu = 5$, os valores de QCAL nos cinco primeiros instantes de tempo são:

$$QCAL_1 = QGER_1 \cdot U_1$$

$$QCAL_2 = QGER_2 \cdot U_1 + QGER_1 \cdot U_2$$

$$QCAL_3 = QGER_3 \cdot U_1 + QGER_2 \cdot U_2 + QGER_1 \cdot U_3$$

$$QCAL_4 = QGER_4 \cdot U_1 + QGER_3 \cdot U_2 + QGER_2 \cdot U_3 + QGER_1 \cdot U_4$$

$$QCAL_5 = QGER_5 \cdot U_1 + QGER_4 \cdot U_2 + QGER_3 \cdot U_3 + QGER_2 \cdot U_4 + QGER_1 \cdot U_5$$

Como a última ordenada U_5 é função das ordenadas anteriores, tem-se:

$$\begin{aligned} QCAL_5 = & QGER_5 \cdot U_1 + QGER_4 \cdot U_2 + QGER_3 \cdot U_3 + QGER_2 \cdot U_4 + \\ & + QGER_1 \cdot (1 - U_1 - U_2 - U_3 - U_4) \end{aligned}$$

A derivada de QCAL em relação a U_1 será expressa por:

. Em $t = 1 \rightarrow DQCAL(7) = QGER_1$

. Em $t = 2 \rightarrow DQCAL(7) = QGER_2$

. Em $t = 3 \rightarrow DQCAL(7) = QGER_3$

. Em $t = 4 \rightarrow DQCAL(7) = QGER_4$

. Em $t = 5 \rightarrow DQCAL(7) = QGER_5 - QGER_1$

De forma genérica, as derivadas de QCAL em relação aos U's são:

$$DQCAL(N) = QGER_{t+7-N} - QGER_{t+1-ntdhu}$$

Onde:

N varia entre 7 e (6 + ntdhu-1);

e

(t + 7 - N) \geq 1

(t + 1 - ntdhu) \geq 1