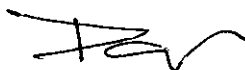


COMPARAÇÃO DE DOIS MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO EM MODELOS
HIDROLÓGICOS DO TIPO CHUVA-VAZÃO

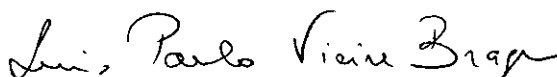
Otto Corrêa Rotunno Filho

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
NECESSARIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS
EM ENGENHARIA CIVIL

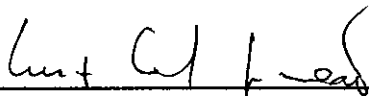
Aprovada por:



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



Prof. Luis Paulo Vieira Braga, Ph.D.



Prof. Luiz Carlos Guimarães, Ph.D.

ROTUNNO FILHO, OTTO CORRÊA

Comparação de Dois Métodos de Otimização em Modelos Hidrológicos do Tipo Chuva-Vazão [Rio de Janeiro] 1989 XX, 156 p. 29,7 cm (COPPE/UFRJ), M.Sc., Engenharia Civil, 1989)

Tese - Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE

1 Modelo Chuva-Vazão I. COPPE.UFRJ II. Título (série)

Aos meus pais, a minha irmã e
à Luciah

Agradecimentos

Ao orientador e amigo Paulo Canedo de Magalhães que ofereceu sua ajuda inestimável na análise dos problemas enfrentados durante a realização dessa dissertação.

Ao professor e amigo Adilson Xavier pela sua colaboração na revisão do texto.

Ao amigo Luiz Alfredo pela ajuda no entendimento do Método de Direções Viáveis em Duas Etapas.

Aos meus pais Otto Corrêa Rotunno e Maria do Carmo Mendes Rotunno pelo carinho, apoio e incentivo que sempre me deram para que esse objetivo fosse alcançado.

A minha irmã Silvana Mendes Rotunno que é uma grande amiga e que tem me acompanhado durante a vida.

À minha futura esposa Luciah Maria Elias Emanuelli pelo amor e confiança que sempre depositou em mim.

Aos amigos Nilo, Fernando, Selbach, Eri, Carlos e Edson pelo companheirismo que sempre uniu o grupo.

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

COMPARAÇÃO DE DOIS MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO EM MODELOS
HIDROLÓGICOS DO TIPO CHUVA-VAZÃO

Otto Corrêa Rotunno Filho

Novembro de 1989

Orientador: Paulo Canedo de Magalhães

Programa : Engenharia Civil

No uso de modelos hidrológicos determinísticos do tipo chuva-vazão, depara-se, muitas vezes, com dificuldades no ajuste dos parâmetros à bacia hidrográfica em questão. O ajuste automático por processos de otimização vem sendo uma ferramenta alternativa de grande valia, quer pela rapidez com que se processa a calibração, como também pela qualidade obtida na representação do comportamento hidrológico adequado. Nesse trabalho é apresentada a comparação de duas metodologias diferentes para a rotina de otimização de parâmetros. A primeira metodologia é baseada no Método de Rosenbrock Modificado e a segunda no Método de Rosen, onde além do valor da função objetivo são também consideradas as derivadas parciais da função objetivo em relação aos parâmetros do modelo hidrológico utilizado. Para a análise comparativa, foi utilizada uma modificação do Modelo SMAP e a função objetivo dos Mínimos Quadrados.

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

Otto Corrêa Rotunno Filho

November, 1989

Thesis Supervisor: Paulo Canedo de Magalhães

Department: Civil Engineering

In the use of conceptual rainfall-runoff models we frequently face difficulties in the estimation of parameters. The automatic calibration using optimization algorithms has been a valuable alternative instrument due to the efficiency in the calibration process and the quality obtained in the performance of present comparative studies of two different conceptual catchment optimization methods. The first method is based on Rosenbrock Modified and the second one is based on Rosen's Method which is a derivative-based optimization algorithm. For the comparative analysis the conceptual catchment rainfall-runoff, named SMAP modified, and the simple least squares criterion were employed.

INDICE

CAPÍTULO I	- INTRODUÇÃO	1
CAPÍTULO II	- REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	4
II.1	- Classificação dos modelos.....	5
II.2	- Calibração de um modelo.....	7
II.2.1	- Escolha e avaliação da função objetivo.....	10
II.2.2	- Estrutura de erros em modelos chuva-vazão.....	15
II.2.3	- Apresentação de outros erros que podem estar presentes em um processo de calibração.....	20
II.2.4	- Considerações sobre a utilização de restrições.....	22
II.2.5	- Métodos matemáticos de otimização....	23
II.2.6	- Discussão sobre a utilização dos métodos diretos e indiretos.....	27
II.2.7	- Tamanho da amostra a ser utilizada na fase de calibração.....	29
II.2.8	- Identificabilidade em modelos hidrológicos.....	30
II.2.9	- Revisão de alguns índices e diagnósticos úteis quando da utilização de um modelo.....	30
CAPÍTULO III	- DESCRIÇÃO DOS ELEMENTOS UTILIZADOS NA COMPARAÇÃO DOS MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO DIRETOS E INDIRETOS.....	33
III.1	- Modelo hidrológico utilizado.....	33
III.2	- Dados utilizados.....	38
III.3	- Métodos de otimização utilizados.....	39
III.4	- Função objetivo.....	45

CAPITULO IV	- IMPLEMENTAÇÃO DO MODELO E RESULTADOS COMPUTACIONAIS.....	46
IV.1	- Alternativas de funcionamento do modelo e obtenção das expressões analíticas das vazões por ele geradas....	46
IV.2	- Implementação das derivadas da função objetivo em relação aos parâmetros do modelo.....	49
IV.3	- Análise dos valores obtidos para as derivadas parciais da função objetivo	55
IV.4	- Comparação dos resultados obtidos pelos métodos de otimização de Rosen e Rosenbrock.....	60
CAPITULO V	- INVESTIGAÇÃO SOBRE AS CAUSAS DOS PROBLEMAS ENCONTRADOS NA FASE DE CALIBRAÇÃO.....	90
V.1	- Problemas encontrados com o uso de derivadas.....	90
CAPITULO VI	- CONCLUSÕES E SUGESTÕES.....	118
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....		128
APENDICE A	- PROGRAMA DO MODELO SMAP (FORTRAN).....	135
APENDICE B	- DEFINIÇÃO DOS POSSIVEIS CAMINHOS NO MODELO SMAP.....	139

APENDICE C - EXPRESSÕES ANALÍTICAS DAS VAZÕES GERA-
DAS PELO MODELO SMAP PARA OS DIVER-
SOS CAMINHOS DEFINIDOS..... 151

LISTA DE FIGURAS

Figura II.1 - Forma típica de uma curva-chave.....	16
Figura II.2 - Variação de uma função objetivo F com um parâmetro e_i	22
Figura III.1 - Esquema do modelo SMAP.....	34
Figura III.2 - Conceitos do "Soil Conservation Service".....	35
Figura III.3 (a) - Método univariacional.....	42
Figura III.3 (b) - Método de rotação de coordenadas.....	42
Figura IV.1 - Fluxograma do modelo SMAP.....	48
Figura IV.2 - Variações de F e ∇F no \mathbb{R}^2	53
Figura IV.3 - Variações de F e ∇F no \mathbb{R}^2	57
Figura IV.4 - Variações de $\nabla^2 F$ no \mathbb{R}^2	59
Figura V.1 - Superfície de resposta para as seguintes situações: matriz definida positiva, matriz semi-definida positiva e matriz indefinida.....	92
Figura V.2 - Superfície de resposta de um função quadrática.....	98

Figura V.3 - Superfície de resposta do modelo SMAP para os parâmetros KPER e CPER correspondentes à amostra: KSUP = 0.50000; KPER = 0.05000 ; KSUB = 0.99985; ABSI = 0.70000 ; CPER = 0.25000; NSAT = 300.0000..... 104

Figura V.4 - Superfície de resposta do modelo SMAP para os parâmetros KPER e CPER correspondentes à amostra: KSUP = 0.50000; KPER = 0.05000 ; KSUB = 0.99985; ABSI = 0.70000 ; CPER = 0.50000; NSAT = 300.0000..... 104

Figura V.5 - Superfície de resposta do modelo SMAP para os parâmetros KPER e CPER correspondentes à amostra: KSUP = 0.50000; KPER = 0.05000 ; KSUB = 0.99985; ABSI = 0.70000 ; CPER = 0.70000; NSAT = 300.0000..... 105

Figura V.6 - Superfície de resposta do modelo SMAP para os parâmetros KPER e CPER correspondentes à amostra: KSUP = 0.80000; KPER = 0.15000 ; KSUB = 0.99300; ABSI = 0.70000 ; CPER = 0.50000; NSAT = 300.0000..... 105

Figura V.7 - Esquema do modelo SIXPAR..... 107

LISTA DE TABELAS

Tabela IV.1 - Otimização dos parâmetros KSUP e KPER separadamente.....	62
Tabela IV.2 - Otimização dos parâmetros KSUB e ABSI separadamente.....	63
Tabela IV.3 - Otimização do parâmetro CPER.....	64
Tabela IV.4 - Otimização dos parâmetros KSUP e KPER	65
Tabela IV.5 - Otimização dos parâmetros KSUP e KSUB	66
Tabela IV.6 - Otimização dos parâmetros KSUP e ABSI	67
Tabela IV.7 - Otimização dos parâmetros KSUP e CPER	68
Tabela IV.8 - Otimização dos parâmetros KPER e KSUB	69
Tabela IV.9 - Otimização dos parâmetros KPER e ABSI	70
Tabela IV.10 - Otimização dos parâmetros KPER e CPER	71
Tabela IV.11 - Otimização dos parâmetros KSUB e ABSI	72
Tabela IV.12 - Otimização dos parâmetros KSUB e CPER	73
Tabela IV.13 - Otimização dos parâmetros ABSI e CPER	74
Tabela IV.14 - Otimização dos parâmetros KSUP, KPER e KSUB.....	75
Tabela IV.15 - Otimização dos parâmetros KSUP, KPER e ABSI.....	76
Tabela IV.16 - Otimização dos parâmetros KSUP, KPER e CPER.....	77

Tabela IV.17 - Otimização dos parâmetros KPER, KSUB e ABSI.....	78
Tabela IV.18 - Otimização dos parâmetros KPER, KSUB e CPER.....	79
Tabela IV.19 - Otimização dos parâmetros KSUB, ABSI e CPER.....	80
Tabela IV.20 - Otimização dos parâmetros KSUP, KPER, KSUB, ABSI e CPER.....	81
Tabela IV.21 - Índice de convergência e valor final da função objetivo para otimizações de pares de parâmetros.....	84
Tabela IV.22 - Índice de convergência e valor final da função objetivo para otimizações de três parâmetros.....	86
Tabela IV.23 - Índice de convergência e valor final da função objetivo para otimizações de cinco parâmetros.....	87
Tabela V.1 - Índice de concentricidade para cada par de parâmetros - modelo SMAP.....	99
Tabela V.2 - Índice de sensibilidade para cada um dos parâmetros- modelo SMAP.....	100
Tabela V.3 - Índice de sensibilidade para o grupo de parâmetros original - modelo SIXPAR....	110
Tabela V.4 - Índice de sensibilidade para o grupo de parâmetros modificado - modelo SIXPAR..	110

Tabela V.5 - Quadro comparativo entre o grupo de parâmetros original e modificado para um dado processo de otimização - modelo SIXPAR.....	111
Tabela V.6 - Parâmetros que causaram problemas nas otimizações realizadas (2 parâmetros).....	114
Tabela V.7 - Parâmetros que causaram problemas nas otimizações realizadas (3 parâmetros).....	115

LISTA DE SÍMBOLOS

Maiúsculas Romanas

- A - matriz do problema de otimização não-linear
- ABSI - abstração inicial, isto é, quantidade máxima de água que pode ser retida no solo e na superfície (mm) - Modelo SMAP
- ABSP - abstração potencial - Modelo SMAP
- BC_i - conteúdo de água da zona inferior - Modelo SIXPAR
- BM - máxima capacidade de armazenamento da zona inferior do solo
- BK - constante de recessão da zona inferior
- CNUM - curva número do SCS que está relacionada com o tipo de solo, cobertura vegetal e umidade antecedente da bacia sendo um valor tabelado em função destas grandezas
- EVPT - evaporação a nível potencial - Modelo SMAP
- EVPR - evapotranspiração remanescente a nível real - Modelo SMAP
- F - função objetivo do modelo
- G_i - submatriz de reestruturação obtida eliminando-se a i ésima linha e coluna
- H - matriz hessiana
- K - parâmetro da transformação proposta por Box e Cox

- KPER - coeficiente de recarga do aquífero - Modelo SMAP
- KSUP - constante de recessão do escoamento superficial -
Modelo SMAP
- M_{ei} - direção de descida obtida pelo método de Rosen
- NPER - capacidade de campo do solo - Modelo SMAP
- NSAT - nível de saturação do solo - Modelo SMAP
- NSUB - nível do reservatório subterrâneo - Modelo SMAP
- NSUP - nível do reservatório superficial - Modelo SMAP
- NSOL - nível do reservatório do solo - Modelo SMAP
- P - precipitação - Modelo SIXPAR
- PREC - volume de precipitação - Modelo SMAP
- $\overline{Q_{OBS}}$ - média das vazões observadas
- OPER - vazão de percolação - Modelos SMAP e SIXPAR
- QRES - volume para o escoamento superficial
- QSUB - vazão básica - Modelos SMAP e SIXPAR
- QSUP - parcela de vazão superficial - Modelos SMAP e
SIXPAR
- Q - vetor de vazões medidas discretamente
- S_i - acréscimo ou decréscimo a ser dado em uma variável

- S_{ii} - elemento da diagonal da matriz de reestruturação correspondente ao parâmetro e_i
- SOLI - taxa de umidade inicial do solo - Modelo SMAP
- TEMP - constante de ajuste de unidades - Modelo SMAP
- TSOL - taxa de umidade do reservatório do solo - Modelo SMAP
- UC_i - conteúdo de água da zona superior - Modelo SIXPAR
- UM - máxima capacidade de armazenamento da zona superior do solo - Modelo SIXPAR
- UK - constante de recessão da zona superior - Modelo SIXPAR
- X - vetor de dados de entrada no modelo (precipitação, evaporação potencial, etc) ; parâmetro da equação de percolação - Modelo SIXPAR
- X^* - variável aleatória indicadora de dados de entrada no modelo
- X_{ij} - índice de concentricidade
- Z - parâmetro da equação de percolação - Modelo SIXPAR

Minúsculas Romanas

- c_i - conjunto de restrições do problema de otimização não-linear
- cond(A) - número condição da matriz A

- e_t - erro entre a vazão gerada pelo modelo e a vazão observada no tempo t
- f - modelo hidrológico
- g_i - vetor correspondente a i ésima coluna da matriz de reestruturação deletando-se o i ésimo elemento
- $g^{(k)}$ - gradiente de $F(x)$ em $x^{(k)}$
- i - passo de tempo
- j - expoente da função objetivo baseada na diferença entre os valores de vazão observada e vazão gerada
- k - iteração do método de otimização
- \ln - logaritmo natural
- n - número de intervalos de tempo
- n_i - índice de sensibilidade
- p - número de parâmetros do modelo
- p^k - direção de descida no método de otimização
- q_t - vazão observada no tempo t
- $q_t^{(\lambda)}$ - vazão transformada no tempo t (Box e Cox)
- $q_{GER,i}$ - vazão gerada pelo modelo no passo de tempo i
- $q_{OBS,i}$ - vazão observada pelo modelo no passo de tempo i
- w_i - ponderador utilizado na função objetivo de mínimos quadrados

x_t - dado de entrada do modelo no tempo t

x^* - valor de entrada do modelo não afetado de erro

x^k - valor da variável x na iteração k

$\|x\|$ - norma euclidiana de um vetor

Maiúsculas Gregas

Ω - matriz de covariância dos erros em um modelo hidrológico

$|\Omega|$ - determinante da matriz de covariância Ω

Ω^{-1} - inversa da matriz de covariância Ω

Minúsculas Gregas

α - passo dado na direção p na iteração k

β - parâmetro usado na determinação do comprimento do passo na direção de pesquisa

η_t - série de erros transformados com distribuição normal

∇F - derivada primeira da função F

$\nabla^2 F$ - derivada segunda da função F

$\nabla_{\Theta}^2 SI$ - matriz de identificabilidade estrutural do modelo

σ^2 - variância da distribuição de erros em um modelo hidrológico

e - vetor de parâmetros do modelo hidrológico

e^* - conjunto de parâmetros fixos e verdadeiros não provenientes do processo de calibração

\hat{e} - conjunto de parâmetros obtidos por calibração

λ - parâmetro de transformação proposta por Box e Cox; parâmetro da transformação sugerida por Sorooshian e Dracup

λ_{\max} - maior autovalor da submatriz de reestruturação formada pela intersecção das linhas e colunas referentes a dois parâmetros do modelo

λ_{\min} - maior autovalor da submatriz de reestruturação formada pela intersecção das linhas e colunas referentes a dois parâmetros do modelo

$\hat{\gamma}^2$ - erro quadrático médio na predição de vazões

CAPITULO I

INTRODUÇÃO

Em hidrologia, muitos são os problemas encontrados quando o assunto é calibração de modelos hidrológicos do tipo chuva-vazão. Isso se deve ao fato de que, em geral, a superfície gerada por um modelo desse tipo é bastante complexa e quase sempre constituída por múltiplos mínimos locais e, por diversas vezes, com a ocorrência de vales e pontos de sela. De outro lado as ferramentas matemáticas de que dispomos até o momento conseguem resolver com eficiência e rapidez os problemas de otimização somente se a função associada ao modelo é bem comportada.

Via de regra a calibração é feita por processos agrupados em duas grandes classes: os processos manuais, onde se destaca o método da tentativa-e-erro, apoiado ou não em análises detalhadas dos dados, e os processos de calibração automática.

Esses últimos, por sua vez, podem ser subdivididos em dois grandes grupos:

- processos diretos, baseados nos métodos de otimização de busca direta, onde se destacam os métodos de Direções Rotativas (ROSENBROCK, 1960), do Poliedro Flexível (NELDER e MEAD, 1965) e Busca de Trajetórias (CHOOKE e JEEVES, 1961); não utilizam valores de derivadas da função objetivo ;

- processos indiretos, baseados nos métodos que utilizam os valores das derivadas da função objetivo em relação aos parâmetros.

Esses últimos, que nessa dissertação serão denominados simplesmente por métodos indiretos, têm demonstrado grande eficácia em outras áreas do conhecimento, mas têm sido pouco explorados no campo da hidrologia devido, talvez, à complexidade da função a ser

otimizada e da dificuldade de serem obtidos os seus gradientes.

Assim, procurou-se verificar o que aconteceria quando se fizesse uso, no processo de otimização, de um método direto (Rosenbrock Modificado) e dois métodos indiretos (Direções Viáveis em Duas Etapas e Rosen), onde esses últimos têm sua procura de mínimos baseada nos valores das derivadas parciais da função objetivo em relação a cada parâmetro envolvido.

Em comparação aos métodos diretos, os indiretos exigem um trabalho extra bastante significativo para a obtenção das expressões das derivadas parciais da função objetivo escolhida. Esse trabalho será tanto mais árduo quanto mais complexo for o modelo hidrológico utilizado e maior o número de parâmetros a serem calibrados.

As vantagens do método indireto são sua suposta rapidez de convergência e a possibilidade de mais facilmente detectar problemas estruturais do modelo, tais como interdependência de parâmetros e a influência de um determinado parâmetro na convergência dos demais durante a calibração do modelo, bem como uma série de indicadores da qualidade da superfície de resposta do modelo baseados na matriz hessiana.

A tese está dividida em seis (6) capítulos.

No segundo capítulo, faz-se uma revisão bibliográfica dos principais tópicos relativos aos modelos hidrológicos chuva-vazão.

No terceiro capítulo, descrevem-se os elementos utilizados para efetuar a comparação entre os métodos de otimização direto e indireto. Entre esses elementos estão o modelo hidrológico, dados de alimentação do modelo, função objetivo e os métodos de otimização propriamente

ditos.

No quarto capítulo, é apresentada a metodologia seguida para obtenção das derivadas parciais da função objetivo em relação aos parâmetros, bem como uma apresentação dos resultados computacionais provenientes da aplicação de dois dos métodos de otimização estudados (Rosenbrock Modificado e Rosen).

No quinto capítulo, é feita uma investigação sobre as causas dos problemas encontrados no decorrer do processo de otimização.

Finalmente, no sexto capítulo, são apresentadas as conclusões e sugestões dessa dissertação.

CAPITULO II

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A modelagem da parte do ciclo hidrológico que ocorre em terra para uma determinada bacia hidrográfica é um dos grandes desafios dos hidrólogos. Isso se deve ao fato de que os processos físicos que acontecem na natureza são extremamente complexos, levando a que se sugiram simplificações desses processos. Dessa forma, são elaborados os modelos que procuram representar e simular o comportamento da natureza. NASH e SUTCLIFFE (1970) apresentam uma boa discussão sobre os aspectos relevantes que devem ser levados em conta quando da utilização de um modelo hidrológico. O'DONNELL e CANEDO (1980) relacionam uma série de fontes de incerteza que podem estar presentes quando da modelagem de uma bacia hidrográfica.

Algumas dessas fontes de incerteza podem ser discriminadas da seguinte maneira:

-Registro de dados

- a) erro na coleta de dados brutos
- b) informações pontuais são tomadas como médias espaciais
- c) informações contínuas são referenciadas por médias temporais
- d) processos de estimação para variáveis não diretamente observadas

-Estrutura do modelo hidrológico

- a) conhecimento imperfeito dos processos físicos que ocorrem na bacia
- b) aproximações introduzidas na representação dos processos físicos quando da modelagem
- c) substituição de propriedades variáveis espacialmente na bacia por valores concentrados
- d) tratamento de processos que ocorrem simultaneamente como se cada um desses processos ocorresse isoladamente
- e) omissão de alguns processos que ocorrem, dado que não

atendem o objetivo de uma certa modelagem

Calibração do modelo

- a) escolha da função objetivo
- b) tamanho da amostra a ser utilizada na fase de ajuste do modelo
- c) variabilidade que pode afetar o processo de calibração em virtude do uso de diferentes amostras
- d) critérios para declarar convergência dos parâmetros no processo de otimização
- e) dificuldades na estimação adequada dos parâmetros

II.1- CLASSIFICAÇÃO DOS MODELOS

Os modelos podem ser classificados em físicos, analógicos e matemáticos. O modelo físico representa o sistema por um protótipo em escala menor na maior parte dos casos. Na hidráulica, a teoria da semelhança é utilizada para o estabelecimento dos modelos reduzidos. Os modelos analógicos valem-se da analogia das equações que regem diferentes fenômenos para modelar, no sistema mais conveniente, o fenômeno mais complexo. DICKINSON, HOLLAND e SMITH (1967) citam vários trabalhos onde foram empregados modelos do tipo físico e do tipo analógico. Já os modelos matemáticos, segundo CLARKE (1973), podem ser divididos em quatro grandes grupos:

- 1- estocásticos-conceituais
- 2- estocásticos-empíricos
- 3- determinísticos-conceituais
- 4- determinísticos-empíricos

Com relação à primeira classificação (estocásticos e determinísticos) tem-se que, segundo CHOW (1964), se a chance de ocorrência das variáveis é levada em conta e o conceito de probabilidade é introduzido na formulação do modelo, o processo e o modelo são ditos estocásticos. Por outro lado, se a chance de ocorrência das variáveis

envolvidas no processo é ignorada, e o modelo segue uma lei definida que não a lei das probabilidades, o modelo e os processos são ditos determinísticos. YEVJEVICH (1974) discutiu as características determinísticas e estocásticas de algumas variáveis hidrológicas.

A segunda classificação, ou seja, a distinção entre modelos conceituais e empíricos, baseia-se no fato de se querer diferenciar modelos que utilizam equações que levam em consideração os processos físicos que ocorrem na natureza e modelos que fazem uso de equações empíricas que simulem esses mesmos processos. Esses modelos que fazem uso de relações empíricas são, muitas vezes, denominados na literatura como modelos do tipo caixa-preta ("black box").

No entanto, essa distinção é extremamente difícil em vista do fato de que alguns modelos, classificados e reconhecidos como conceituais, apresentam, na verdade, determinadas equações empíricas para exprimir um determinado processo físico. É o caso, por exemplo, do modelo de Boughton (BOUGHTON, 1965, 1966) em que a equação de infiltração utilizada é uma adaptação da equação de Horton, ela mesma uma equação empírica relacionando infiltração e conteúdo de umidade do solo. Pode-se citar também o modelo Stanford (CRAWFORD e LINSLEY, 1966). Isto justifica a tendência de se classificar a maioria dos modelos hidrológicos atuais como semi-conceituais e empíricos.

Os modelos podem ainda ser classificados como do tipo concentrado ("lumped models") e do tipo distribuído. Com respeito à discriminação entre modelos concentrados e distribuídos, TUCCI (1985) et alii reconhecem um modelo concentrado quando seus parâmetros e variáveis modificam-se somente em função do tempo e um modelo distribuído quando esses componentes variam também segundo o espaço.

II.2- CALIBRAÇÃO DE UM MODELO

O uso de um modelo hidrológico do tipo chuva-vazão passa pelas seguintes fases: calibração, verificação e aplicação.

A calibração é a fase da simulação onde os parâmetros devem ser identificados e avaliados. Essa é a fase que tem recebido grande atenção na literatura. Merece maiores considerações e, portanto, será melhor analisada no próximo item.

Já com respeito à segunda etapa, pode-se dizer que a verificação consiste em utilizar o modelo já calibrado, com dados diferentes daqueles usados no ajuste. Na prática, quando se dispõe de um registro de dados suficientemente grande, adota-se o procedimento de se dividir a amostra em duas partes de tal forma que, enquanto a primeira parte é utilizada na fase de calibração do modelo, a segunda serve para fazer a verificação ou validação do modelo calibrado. Nesse procedimento, o ajuste e o desempenho do modelo são avaliados. A verificação deve ser um processo repetido diversas vezes, pois é necessário constatar a validade do modelo e do seu ajuste para as diferentes condições em que o mesmo deverá ser usado. Além disso, o sistema pode sofrer alterações modificando os valores dos parâmetros. Por exemplo, num rio de seção aluvial, a morfologia pode mudar significativamente após uma cheia.

A terceira fase é a de aplicação. Aplicação, nesse texto, é entendida como a fase em que o modelo é usado para representar situações onde se desconhece a saída do sistema. A qualidade dos resultados obtidos nessa fase depende, essencialmente, da representatividade dos períodos usados no ajuste de contorno e da capacidade intrínseca ao modelo em simular as alternativas escolhidas pelo hidrólogo.

Conforme KUCZERA (1983), a literatura indica cinco grandes campos de aplicações de modelos chuva-vazão:

- extensão de séries de descarga
- geração de estatísticas sobre descargas
- acesso aos efeitos provenientes das mudanças no uso do solo
- predição de vazões em bacias não monitoradas
- predição dos efeitos provenientes das mudanças no uso do solo em regimes hidrológicos.

As três primeiras aplicações têm sido implementadas com relativo sucesso. Já as duas últimas têm encontrado grandes dificuldades de apresentarem resultados satisfatórios. Basicamente, o problema surge quando é tentado o desenvolvimento de relações de regressão entre os parâmetros oriundos do processo de otimização e as características físicas da bacia hidrográfica. MAGETTE et alli (1976) desenvolveram relações de regressão entre 6 parâmetros ajustados do modelo hidrológico de Kentucky e 15 características fisiográficas da bacia hidrográfica. Testes independentes revelaram que erros na predição de vazões médias anuais variavam de menos de 1% a 860%.

Uma das prováveis razões é que os parâmetros ajustados não foram corretamente identificados pelo processo de calibração. Por essa razão também, uma maior ênfase na parte de ajuste do modelo é dada nesse trabalho.

A calibração de um modelo é, indubitavelmente, uma das grandes dificuldades no tratamento de modelos hidrológicos. O objetivo de um processo de calibração é obter o conjunto de parâmetros comumente denominados de ótimos. Conforme TROUTMAN (1985), há 2 maneiras de se definir o que seja o conjunto de parâmetros ótimos. A primeira é defini-lo como o conjunto de parâmetros que assumem valores fisicamente compatíveis com a natureza e, mais precisamente, com a bacia hidrográfica em questão. A

segunda definição possível é aquela em que um determinado critério matemático, também chamado de função objetivo, é estabelecido. Procura-se, nesse caso, obter o conjunto de parâmetros que tornam as vazões geradas pelo modelo ajustadas aos valores de vazão observados.

Na verdade, essas duas definições se confundem, uma vez que espera-se obter boas previsões de vazão de forma que o valor assumido pela função objetivo seja baixo e, ao mesmo tempo, obter-se valores para os parâmetros que sejam fisicamente reais. Se houvesse um modelo que representasse exatamente a natureza, o conjunto ótimo de parâmetros atenderia as duas definições. Na prática, não temos um modelo perfeito, o que acarreta a obtenção de valores para os parâmetros que diminuem uma determinada função objetivo, mas que, muitas vezes, não conduzem a valores fisicamente reais, caso não seja feito uso de restrições aos valores dos parâmetros.

Conforme GUPTA e SOROOSHIAN (1985), os grandes problemas enfrentados na área de otimização de modelos decorrem do processo de obtenção do conjunto ótimo de parâmetros, já que as ferramentas matemáticas de que se dispõe não são as mais adequadas para esse tipo de trabalho. Esses problemas também foram constatados por IBBITT (1970), JOHNSTON e PILGRIM (1976), CANEDO (1979), SOROOSHIAN e DRACUP (1980), ALLEY et alii (1980), BRAZIL e HUDLOW (1981), MOORE e CLARKE (1981), SOROOSHIAN e alii (1982,1983), GUPTA e SOROOSHIAN (1983, 1985).

Antes de partir para uma discussão mais ampla dos múltiplos aspectos envolvidos na fase de calibração, é conveniente adotar uma expressão para a equação estrutural do modelo chuva-vazão. Matematicamente, a equação na sua forma reduzida assume a seguinte expressão:

$$q_t = f(X_t, \theta) + e_t, \quad t=1, \dots, n \quad (II.1)$$

onde:

q_t - vazão observada no instante de tempo t

$f(\cdot)$ - representa o modelo hidrológico escolhido para modelar o comportamento de uma determinada bacia hidrográfica

$X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ é a seqüência de dados de entrada ; é possível a utilização de uma ou mais séries de dados (precipitação, evaporação potencial, etc)

$\theta = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_s)$ é um conjunto de s parâmetros do modelo, alguns dos quais necessitam ser estimados, já que não podem ser diretamente medidos.

e_t - é o erro no instante de tempo t proveniente da diferença existente entre a vazão efetivamente observada e a vazão computada pelo modelo hidrológico escolhido

A apresentação da equação estrutural do modelo em uma forma na qual aparecem explicitamente os erros é importante na medida em que alguns hidrólogos, no decorrer dos últimos anos, têm se preocupado com a relevância da estrutura de erros assumida, quando da utilização de um modelo hidrológico na fase de calibração, com o intuito de se obter o chamado conjunto ótimo de parâmetros (SOROOSHIAN (1978), SOROOSHIAN e DRACUP (1980), TROUTMAN (1985)).

II.2.1 - Escolha e avaliação da função objetivo

Tendo em mente a discussão que foi feita com relação à obtenção do conjunto ótimo de parâmetros, surge a função objetivo como um critério matemático que busca quantificar em cada ponto no espaço de parâmetros o nível de aderência dos resultados produzidos pelo modelo teórico àqueles observados na realidade.

De imediato, podem ser levantados dois pontos importantes a serem analisados na escolha da função objetivo (JOHNSTON e PILGRIM (1973)):

a- intervalo de tempo que será considerado na determinação dos desvios entre vazões geradas pelo modelo e vazões observadas

b- a forma como as diferenças entre as vazões geradas e vazões observadas serão manipuladas antes de serem expressas por um índice numérico

Os intervalos de tempo podem ser fixos ou variáveis. Os modelos operam, em geral, com intervalos de tempo fixos. O intervalo de tempo pode ser o mês, o dia ou intervalos de tempo menores que o dia. No caso de intervalos de tempo variáveis, trabalhar-se-ia com eventos. Não há muitos trabalhos publicados na literatura que mostram um resultado comparativo concernente à utilização de intervalos fixos e variáveis. Em um trabalho de JOHNSTON e PILGRIM (1973), eles dizem não haver indicadores de grandes diferenças entre os conjuntos de parâmetros obtidos por essas diferentes abordagens.

Uma nova contribuição a respeito desse problema foi apresentada por DIB e CANEDO (1985) propondo que se adotassem intervalos de tempo da simulação variáveis em função do volume de precipitação sobre a bacia. Com isso reduz-se o tempo de processamento no período seco, sem maiores sacrifícios da precisão de cálculo, e aumenta-se a precisão durante o período chuvoso onde grandes volumes de água são precipitados.

Detendo-se na análise do emprego de intervalos de tempo fixos, verifica-se que reside nessa estrutura de cálculo uma fonte de incerteza. Essa fonte de incerteza está associada à discretização no tempo dos balanços de massa cumpridos pelos modelos hidrológicos do tipo

chuva-vazão. Na natureza esse balanço é contínuo, havendo a ocorrência de processos físicos simultaneamente. Já no modelo chuva-vazão, devido a uma restrição de ordem computacional, exige-se que os processos físicos sejam realizados um de cada vez, gerando diferenças nos resultados simulados. CANEDO (1989) mostra essa diferença através de um exemplo simples, porém bastante ilustrativo. Considera um reservatório sob adução contínua sendo deplecionado. Cria-se um modelo que poderia ser perfeito não fossem dois fatores: a adução contínua no tempo ser tomada como discreta e as duas maneiras de deplecionar o reservatório (saída e transbordo) nunca ocorrerem simultaneamente, pois o modelo as considera seqüencialmente. Se a discretização do tempo tendesse a zero, o problema seqüencial tenderia à simultaneidade. Mas como isso não acontece, verificam-se discrepâncias nos resultados de saída e transbordo do modelo para as duas diferentes formas de deplecionamento do reservatório em comparação com o sistema real.

Já com respeito à manipulação das diferenças entre vazões observadas e vazões geradas traduzida, em última análise, na minimização ou maximização de uma função objetivo, há uma ampla discussão na literatura (IBBITT (1970), IBBITT e O'DONNEL (1971), DAWDY e allii. (1972), LEAVESLEY (1973), JOHNSTON e PILGRIM (1973,1976), CANEDO (1979), SOROOSHIAN e DRACUP (1980), SOROOSHIAN (1980), TROUTMAN (1982a,1983), JONES (1983), WILLIAMS e YEH (1983), LEAVESLEY et allii(1983), TROUTMAN (1985)).

Em geral, a função objetivo assume a seguinte forma:

$$F = \sum_{i=1}^n | q_{GER,i} - q_{OBS,i} |^j \quad (II.2)$$

onde:

- $q_{GER,i}$ - vazão gerada pelo modelo no passo de tempo i
- $q_{OBS,i}$ - vazão observada no passo de tempo i
- n - número de intervalos de tempo

e as barras verticais indicam valor absoluto da expressão contida entre elas.

Assim, conforme o valor do expoente j , várias funções objetivos podem ser estabelecidas e, por conseqüência, diferentes superfícies de resposta para o modelo obtidas. Em um trabalho de JOHNSTON e PILGRIM (1973) é feito um estudo da influência do expoente j na superfície de resposta do modelo que, nesse caso, era representado por um único reservatório correspondendo, mais precisamente, ao reservatório de intercepção do modelo de Boughton (BOUGHTON (1965,1966)). O exemplo estudado foi bastante simples já que se considerou apenas um parâmetro e a saída do reservatório era função linear do parâmetro. Verificou-se que o expoente é responsável pela variabilidade vertical da superfície de resposta sem alterar a posição do mínimo, e que o valor do parâmetro ótimo independia da reprodução pelo modelo de eventos maiores ou menores. Notou-se, isso sim, que o uso de $j=2$, por exemplo, conduzia à obtenção de uma superfície de resposta com forma mais propícia a detectar-se o valor ótimo do que o uso de $j=1/2$.

Variações da expressão (II.2) apresentada são comuns. Muitas vezes, não se consideram as diferenças entre vazões geradas e vazões observadas tomadas com seu valor absoluto. Em outros casos, faz-se uso de diferenças entre os logaritmos das vazões geradas e observadas (DAWDY e LICHTY, 1968). O uso de logaritmos está ligado à idéia de dar importância maior a erros relativos. Há também aplicações em que são utilizadas funções objetivos onde são feitas ponderações sobre as diferenças existentes entre vazões geradas e observadas. Exemplo é a função objetivo utilizada pelo modelo HEC-1 (U.S. Army Corps of Engineers, 1973) expressa por:

$$F = \sum_{i=1}^n w_i (q_{OBS,i} - q_{GER,i})^2 \quad (II.3)$$

onde:

$$w_i = \frac{q_{\text{OBS},i} + \overline{Q_{\text{OBS}}}}{2\overline{Q_{\text{OBS}}}}$$

e $\overline{Q_{\text{OBS}}}$ é a média das vazões observadas.

Toda a análise sobre a escolha da função objetivo está relacionada com o propósito do uso do modelo. Uma escolha inadequada amplifica as incertezas dos resultados. Assim é que o especialista deve analisar quais são os objetivos a serem alcançados pela calibração, ou seja, se é desejável, por exemplo, melhor reprodução das descargas de pico ou das descargas de base. Além disso, deve-se estar consciente de que os objetivos estão diretamente associados com a forma com que serão tratados os erros existentes entre vazões observadas e as vazões geradas pelo modelo.

Poucos têm sido os trabalhos publicados sobre a análise de funções objetivos. Dois deles que merecem ser mencionados são DISKIN e SIMON (1977) e CANEDO (1979) nos quais é apresentada uma discussão detalhada sobre diferentes funções objetivos e os casos onde melhor se aplicam.

É publicado, então, o trabalho de SOROOSHIAN e DRACUP (1980) que configura o surgimento de uma outra linha no tratamento de funções objetivos. Essa nova abordagem para o questionamento sobre qual a melhor função objetivo a ser adotada encontra-se embasada no estudo adequado da estrutura de erros de um determinado modelo hidrológico (TROUTMAN (1982,1983,1985), KUCZERA (1982,1983)).

II.2.2 - Estrutura de erros em modelos chuva-vazão

Conforme CLARKE (1973), os erros nos modelos chuva-vazão, que estão representados pelo termo e_t presente na equação (II.1), apresentam a seguinte estrutura:

- os erros são estatisticamente independentes dos valores $f(X, Q, \theta)$, conforme notação adotada para a equação (II.1), e são identicamente distribuídos;
- os erros são estatisticamente independentes entre eles, ou seja, o erro existente entre a vazão gerada pelo modelo e a vazão observada no passo de tempo t independe do erro existente no passo de tempo $t+1$
- os erros têm média zero e variância constante σ^2 :

$$E(e_t) = 0 \quad \text{Var}(e_t) = \sigma^2$$
- os erros são normalmente distribuídos

O grande problema das hipóteses assumidas por essa estrutura de erros é que elas não são necessariamente sempre respeitadas. Enfrenta-se, na prática, abordagens onde há autocorrelação dos erros e a variância dos erros não é constante (heterocedasticidade). No caso de modelos que operam a nível diário ou intervalos de tempo menores, a questão da autocorrelação dos erros aparece com maior clareza, conforme AITKEN (1983). Com relação à não constância da variância dos erros, pode-se evidenciar esse fato pela constatação de que, usualmente, os maiores eventos possuem erros de predição associados maiores. Através da Figura (II.1) que apresenta a forma típica de uma curva-chave, se entende perfeitamente esse problema. Percebe-se que, quando se está na parte da curva-chave correspondente a cotas mais elevadas, uma mudança unitária no eixo vertical traduz-se em grandes desvios nos valores de descarga resultantes, o que se atenua na medida em que se caminha para valores de cota mais baixos.

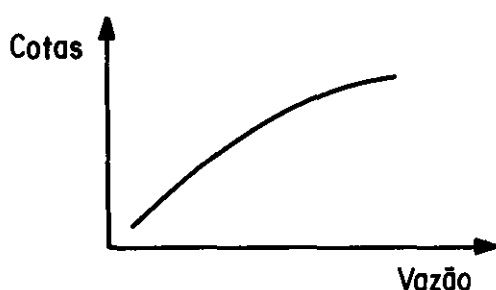


Figura II.1- Forma Típica de uma Curva-Chave

Tendo em mente as possíveis violações das hipóteses anteriormente assumidas, instrumentos novos no campo da hidrologia determinística começam a ser utilizados. Esses instrumentos provêm, muitas vezes, da hidrologia estocástica.

Para solução da heterocedasticidade, são sugeridas transformações nos dados de vazões observadas conforme Box e Cox(1964), obedecendo a seguinte relação:

$$q_t^{(\lambda)} = \frac{(q_t + K)^\lambda - 1}{\lambda} \quad \lambda > 0 \quad t=1, \dots, n \quad (\text{II.4-a})$$

$$q_t^{(\lambda)} = \ln (q_t + K) \quad \lambda=0 \quad t=1, \dots, n \quad (\text{II.4-b})$$

onde q_t é o valor de descarga original segundo notação da equação (II.1), $q_t^{(\lambda)}$ é o valor de descarga transformada, λ e K são parâmetros da transformação e \ln é o logaritmo natural. Os parâmetros λ e K são obtidos frequentemente através do estimador de máxima verossimilhança.

O objetivo dessa transformação é reduzir a assimetria da amostra, levando a que se obtenha, na grande maioria dos casos, uma série de erros com distribuição normal. Assim, os erros denotados por e_t na equação (II.1) tornam-se:

$$\eta_t = q_t^{(\lambda)} - E(q_t^{(\lambda)}) \quad t=1, 2, \dots, n$$

Com o trabalho de SOROOSHIAN e DRACUP (1980) procura-se focar essa problemática sob o prisma do uso do estimador de máxima verossimilhança. Na hipótese que os erros obedeçam a função de distribuição de probabilidades normal com média zero e matriz de covariância ω , a função de verossimilhança é expressa por:

$$L(\theta), \Omega = \ln L(\theta), \Omega = -(n/2) \ln(2\pi) - 1/2 \ln|\Omega| - 1/2 [(\langle q_y \rangle_{OBS} - \langle q_y \rangle_{GER})^T \Omega^{-1} (\langle q_y \rangle_{OBS} - \langle q_y \rangle_{GER})] \quad (II.6)$$

onde:

- $|\Omega|$ é o determinante da matriz de covariância Ω
- Ω^{-1} é a inversa da matriz de covariância Ω
- $\langle q_y \rangle_{OBS}$ é o vetor de vazões observadas (n delas medidas discretamente em y anos)
- $\langle q_y \rangle_{GER}$ é o vetor de vazões geradas pelo modelo (n delas geradas discretamente em y anos)
- $\langle \theta \rangle$ é o vetor de parâmetros
- n é o número de intervalos de tempo

Quando a expressão (II.6) é maximizada com relação aos parâmetros desconhecidos, obtém-se um conjunto de valores para os parâmetros que, usados no modelo, vão produzir a hidrógrafa com a maior probabilidade de estar próxima à verdadeira. Os elementos desconhecidos da matriz Ω podem ser estimados simultaneamente. Verifica-se que, por essa abordagem, pressupõe-se um dado processo de correlação dos erros.

Sob a hipótese anteriormente mencionada de que os erros seguem uma distribuição normal com média zero, a expressão da função de máxima verossimilhança se reduz à função objetivo dos mínimos quadrados ponderada sob a forma:

$$\min F = \sum_{t=1}^n w_t (q_{OBS,t} - q_{GER,t})^2 \quad (II.7)$$

onde

de variância $\hat{\sigma}^2$. A variância correspondente ao processo não estacionário, ou seja, de descargas não transformadas é dada, conforme BARTLETT'S (1947), por:

$$\hat{\sigma}_t^2 = q_{GER,t}^{2(1-\lambda)} * \hat{\sigma}^2 \quad (II.9)$$

Colocando (II.9) em (II.8) vem:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\theta, \Omega, \lambda) = \ln L(\theta, \Omega, \lambda) = & -(n/2) \ln(2\pi\hat{\sigma}^2) + 1/2 \sum_{t=1}^n \ln w_t - \\ & 1/2 \hat{\sigma}^{-2} \sum_{t=1}^n w_t (q_{Y_{OBS,t}} - q_{Y_{GER,t}})^2 \end{aligned} \quad (II.10)$$

onde:

$$w_t = q_{GER,t}^{2(\lambda-1)}$$

Em (II.10), $\langle \theta \rangle$ e λ são os parâmetros desconhecidos. O parâmetro λ é determinado, assumindo-se $\langle \theta \rangle$ conhecido, por

$$\frac{\partial \ln L(\langle \theta \rangle, \Omega, \lambda)}{\partial \lambda} = 0 \quad \text{resultando} \quad (II.11)$$

$$\sum_{t=1}^n \ln(q_{GER,t}) - \hat{\sigma}^{-2} \sum_{t=1}^n q_{GER,t}^{2(\lambda-1)} \ln(q_{GER,t}) (q_{OBS,t} - q_{GER,t})^2 = 0 \quad (II.12)$$

O parâmetro λ deve ser obtido por processo iterativo. SOROOSHIAN e DRACUP(1980) sugerem que se faça uso de um processo de otimização em duas etapas conforme segue:

1- Estabelecer $\hat{\sigma}^2=1.0$ para todo o processo e $\lambda=1.0$ como estimativa inicial para o parâmetro de transformação; salienta-se o fato de que para $\lambda=1.0$, a maximização de (II.10) com respeito a $\langle \theta \rangle$ resulta exatamente nas mesmas estimativas obtidas pelo frequentemente utilizado método dos mínimos quadrados;

2- Para a primeira iteração, seleciona-se um conjunto de valores para $\langle \theta \rangle$ e nas iterações subsequentes faz-se uso dos valores de $\langle \theta \rangle$ obtidos na iteração anterior; aplica-se, então, um processo de otimização para maximizar (II.10) ficando definido um novo conjunto $\langle \theta \rangle$;

3- Para o conjunto $\langle \theta \rangle$ obtido no passo 2 e estando de posse da série de vazões geradas para essa situação, trata-se de obter o valor ótimo de λ em (II.12);

4- Retorna-se ao passo 2 e repete-se o processo de otimização. Os novos valores w_t são computados com o valor de λ obtido no passo 3; o processo continua enquanto houver uma maximização do valor obtido em (II.10), o que significa dizer enquanto o valor de λ variar significativamente de uma iteração para outra;

5- O conjunto de parâmetros provenientes do processo de calibração, denotado por $\langle \theta^* \rangle$, é o que deve ser usado para as finalidades desejadas.

Como se vê, a nova forma de abordagem, que leva em conta explicitamente a estrutura estatística dos erros, conduz, provavelmente, à estimativa mais correta dos parâmetros do modelo.

II.2.3- Apresentação de outros erros que podem estar presentes em um processo de calibração

Em modelos do tipo chuva-vazão, a vazão Q é uma variável aleatória relacionada com dados de entrada x^* (precipitação, evaporação, temperatura etc). A série x^* corresponde a dados desprovidos de erro, sendo teoricamente a melhor série de entrada para o modelo. Com os dados de entrada x^* e um conjunto de parâmetros θ^* , que é o melhor conjunto de parâmetros quando a série é x^* , pode-se computar os valores de vazão previstos pelo modelo

denotado por $f(x^*, \theta^*)$. Esse conjunto de dados x^* está, na verdade, associado a variáveis aleatórias do tipo X^* . No caso de série de dados de chuva, por exemplo, o que se tem em um dado tempo é apenas uma observação de um processo estocástico. Assim dado que se tem um conjunto de observações x^* , é possível relacionar uma faixa de valores para a vazão Q . Essa faixa é caracterizada pela distribuição de probabilidades de Q condicionada a $X^* = x^*$ ($Q/X^* = x^*$). Surge, então, a questão de quão relacionada é a vazão real ($Q/X^* = x^*$) com a vazão prevista pelo modelo $f(x^*, \theta^*)$. Nenhum modelo é capaz de prever valores de descarga sem erros associados.; haverá quase sempre uma diferença entre $Q/X^* = x^*$ e $f(x^*, \theta^*)$. Aceita-se que as premissas de estudos de regressão podem ser aplicadas para descrever essa diferença. Assume-se que em média o modelo prevê valores de vazão corretamente:

$$E(Q/X^* = x^*) = f(x^*, \theta^*) \quad (\text{II.13})$$

onde:

x^* denota o valor de entrada do modelo não afetado de erro, proveniente da variável aleatória X^*
 θ^* é o conjunto de valores fixos e verdadeiros dos parâmetros não provenientes do processo de calibração

Supõe-se também que:

$$\text{Var}(Q/X^* = x^*) = \sigma^{*2} \quad (\text{II.14})$$

onde σ^{*2} é a variância decorrente exclusivamente de erro no modelo, em virtude de não representar perfeitamente a natureza.

TROUTMAN (1982) analisa em detalhe os erros relacionados com as variáveis de entrada do modelo. Recomenda-se a sua leitura para um maior aprofundamento teórico sobre a estrutura de erros presente em modelos chuva-vazão.

II.2.4 - Considerações sobre a utilização de restrições

O uso de restrições em modelos hidrológicos do tipo chuva-vazão é prática recomendada.

Imagine-se que a variação da função objetivo de um modelo com um dado parâmetro obedeça a forma indicada na Figura (II.2) mostrada a seguir.

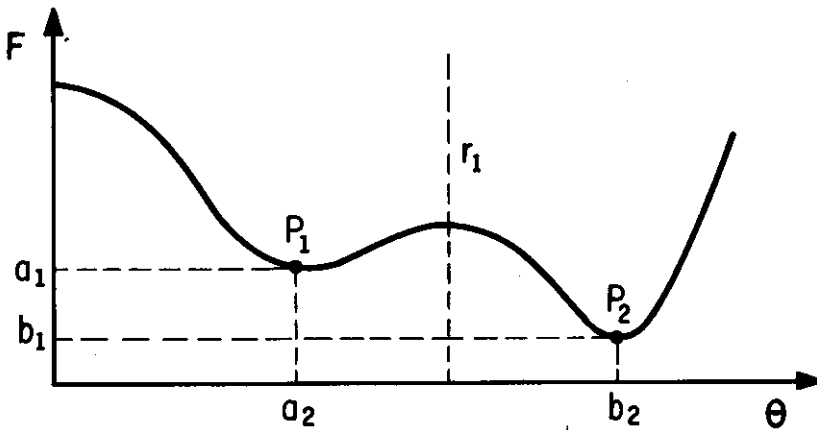


Figura II.2 - Variação de uma função objetivo F com um parâmetro θ_i

Sejam as retas r_1 e o eixo y limitadores da região de validade para o parâmetro θ_i . Esses limitadores estão associados com a faixa de valores em que o parâmetro dispõe de significado físico. Sejam $P_1 (a_2, a_1)$ - mínimo local - e $P_2 (b_2, b_1)$ - mínimo global - pontos particulares da curva de variação da função objetivo. Um dado processo de otimização identificaria o ponto P_2 como de mínimo,

caso não houvesse restrições. Assim teríamos um valor para o parâmetro desprovido de significado físico. Sabe-se que valores irrealistas, mesmo que conduzam a uma boa aderência na calibração, poderão pôr em risco as futuras previsões. Por outro lado, fazendo-se uso dos limitadores previamente mencionados, o ponto identificado como de mínimo pelo algoritmo de otimização seria P1. Em que pese não ser o mínimo global, apresenta-se contido na faixa de valores fisicamente possíveis.

As restrições, em última análise, refletem o maior ou menor conhecimento do calibrador a respeito das condições de variabilidade dos parâmetros de um certo modelo. JOHNSTON e PILGRIM (1973,1976), DISKIN e SIMON (1977) e CANEDO (1979) abordam o problema para modelos chuva-vazão. COOLEY (1982,1983) também discute de forma bastante interessante esse tópico, embora para modelos de água subterrânea.

A incorporação de outras informações de entrada, além de precipitação e evaporação potencial, na tentativa de melhor identificação dos parâmetros do modelo, foi também bem abordada por KUCZERA (1983). Nesse caso, o autor analisa o problema fazendo uso da Teoria de Bayes.

II.2.5- Métodos matemáticos de otimização

Antes de entrar na abordagem do tema propriamente dito, é importante tecer alguns comentários a cerca dos tipos de processos de calibração existentes.

O processo de calibração pode ser manual ou automático. No tipo manual, o calibrador modifica, em geral, um parâmetro por vez, verificando, em seguida, as diferenças provenientes de cada ajustamento. Esse tipo de ajuste é bastante lento, sendo defendido por alguns pesquisadores, em virtude de que proporcionam ao

calibrador uma sensibilidade maior no uso do modelo. Muitas vezes, o usuário da calibração manual não se preocupa em estabelecer um critério matemático de minimização ou maximização de uma certa função objetivo. Nesse caso, os critérios de mudança de valores dos parâmetros são subjetivos, baseados na experiência do calibrador. Resulta que para cada operador há uma resposta diferente.

Já os métodos de calibração automática, olhado por alguns com receios e desconfianças, fazem uso de um processo numérico com vistas a otimizar uma determinada função objetivo. Uma das grandes vantagens é a maior rapidez/eficiência na obtenção de um conjunto de parâmetros que satisfaça um determinado critério matemático. Além disso, esse tipo de processo tem maior objetividade. Possibilita a comparação de critérios, métodos e respostas em diferentes amostras da mesma população. Em contrapartida, apresenta certa subjetividade na escolha da função objetivo que será minimizada. Há ainda a possibilidade de se cair em mínimos locais não adequados, o que pode ser normalmente corrigido com novos valores iniciais e com boas rotinas de otimização. Outro problema reside na complexidade da função objetivo que dificulta o uso de rotinas clássicas poderosas.

De agora em diante, quando for referida a palavra calibração, entenda-se calibração automática.

Os métodos matemáticos de otimização constituem, pois, um dos elementos do processo de calibração.

Pode-se dizer que esses métodos, utilizados nas mais diversas áreas de estudo, dividem-se em duas grandes classes: métodos de pesquisa diretos e métodos de pesquisa indiretos.

A grande diferença existente entre esses dois tipos

deve-se ao fato de que, enquanto os métodos diretos fazem uso apenas da informação relativa ao valor da função objetivo, os métodos indiretos utilizam informações sobre o valor da função, as primeiras derivadas parciais da função objetivo em relação aos parâmetros do modelo e, em alguns casos, segundas derivadas parciais da função objetivo em relação aos parâmetros do modelo.

Problema não restrito

Os métodos de otimização utilizam-se de um processo iterativo seguindo uma seqüência de pontos em direção ao ponto ótimo.

Cada iteração de um método de descida consiste de três partes. Estando na iteração k no ponto $x^{(k)}$, a primeira parte calcula uma direção de descida $p^{(k)}$, ou seja, para um valor suficientemente pequeno $\alpha > 0$, a relação abaixo é válida:

$$F(x^{(k)} + \alpha p^{(k)}) < F(x^{(k)}) \quad (\text{II.15})$$

A segunda parte calcula um valor para o passo $\alpha^{(k)}$, de forma que haja um decréscimo conveniente no valor da função objetivo. O próximo ponto na iteração $k+1$ é dado pela expressão:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha^{(k)} p^{(k)} \quad (\text{II.16})$$

A terceira parte usa as informações obtidas nas etapas 1 e 2 para atualizar as informações necessárias.

Quando a função $F(x)$ é diferenciável, a inequação (II.15) é satisfeita se for atendida a seguinte condição:

$$g^{(k)T} p^{(k)} < 0 \quad \text{onde} \quad (\text{II.17})$$

$g^{(k)T}$ é o gradiente de $F(x)$ em $x^{(k)}$ e o índice T serve para indicar que se trata de um vetor linha.

Dado, então, um ponto $x^{(k)}$ e o gradiente $g^{(k)}$ pode-se procurar uma direção $p^{(k)}$ que satisfaça (II.15). Se um vetor $p^{(k)}$, atendendo tais condições, for encontrado, ele pode ser utilizado como uma direção de busca em um método de descida.

Não sendo encontrado um $p^{(k)}$ que satisfaça tais condições, então, em princípio, $x^{(k)}$ é a solução desejada para o problema de minimizar $F(x)$. Essas são as condições necessárias para que $x^{(k)}$ seja a solução, denominadas na literatura por condições de primeira ordem.

Acontece, ocasionalmente, que, as condições de primeira ordem são satisfeitas em $x^{(k)}$, e, no entanto, o ponto não é o mínimo de $F(x)$, já que as condições de primeira ordem são necessárias mas não suficientes. Isso se dá porque pode haver direções em que haja decréscimo da função $f(x)$ e em que é satisfeita a equação $g^{(k)T} p^{(k)} = 0$, ou seja, se está na presença de um ponto de sela.

Em função desse problema, é que se devem usar as chamadas condições de segunda ordem, onde informações sobre as derivadas segundas da função objetivo em relação aos parâmetros são requeridas.

Métodos diretos sem restrições

Alguns exemplos de métodos diretos bastante aplicados em hidrologia são o Poliedro Flexível (NELDER e MEAD (1965)) e o método de busca por Direções Rotativas (ROSENBRICK (1960)). O funcionamento desses métodos baseia-se unicamente na comparação de valores da função objetivo. Em vista das poucas hipóteses que se faz a cerca da função objetivo, em geral não mais do que a continuidade, esses métodos ganharam destaque nos

problemas em que derivadas são difíceis de calcular ou superfícies geradas pelo problema apresentam pontos de descontinuidade. A vantagem observada nessas situações é uma maior robustez em relação aos métodos que utilizam gradientes. Deficiências que podem ser apontadas são que, enquanto os métodos que utilizam gradientes têm uma forte fundamentação matemática, os métodos diretos, embora se baseiem em esquemas engenhosos e sofisticados, são destituídos de tal fundamentação teórica. Pode-se também levantar o problema da convergência, onde os métodos diretos têm a maior tendência de terminar a pesquisa prematuramente ou prolongar a busca desnecessariamente. Esses métodos exigem, na grande maioria dos casos, um elevado número de iterações, acarretando um processo de convergência bastante lento.

Métodos indiretos sem restrições

Já os métodos indiretos requerem, além dos valores da função objetivo, informações sobre derivadas parciais da função objetivo em relação aos parâmetros.

A fundamentação desses métodos reside essencialmente no desenvolvimento de uma função em Séries de Taylor.

Pode-se distinguir duas grandes classes de métodos: métodos de 1^a ordem e métodos de 2^a ordem. Entende-se por métodos de 1^a ordem aqueles que utilizam unicamente informações sobre as derivadas primeiras de uma função, enquanto por métodos de 2^a ordem os que também fazem uso de informações sobre derivadas segundas dessa função.

II.2.6- Discussão sobre a utilização dos métodos diretos e indiretos

Na literatura existente sobre o assunto, em

hidrologia, os trabalhos publicados, na sua quase totalidade, fazem uso de métodos diretos (DAWDY e O'DONNELL (1965), NASH e SUTCLIFFE (1970), IBBITT(1970), JOHNSTON e PILGRIM (1973,1976), CANEDO (1979), SOROOSHIAN et alii (1982,1983)). A justificativa do uso desse tipo de método, em prejuízo dos métodos que utilizam técnicas baseadas no cálculo de gradientes, está no fato de que muitos hidrólogos julgam praticamente impossível computar explicitamente as derivadas parciais da função objetivo em relação aos parâmetros. Acrescente-se a isso, o fato de que a complexidade dos modelos hidrológicos dá margem ao surgimento de funções objetivos não muito bem comportadas, o que acarreta o aparecimento de possíveis pontos de descontinuidade. Essas razões levaram os hidrologistas a se afastarem dos métodos indiretos.

É bem verdade que há alguns exemplos na literatura referentes ao emprego de métodos indiretos, onde os gradientes foram calculados por aproximação de diferenças finitas (IBBITT (1970), JOHNSTON e PILGRIM (1973,1976)). No entanto, os resultados obtidos por essas aplicações no campo hidrológico não foram bons.

Somente em 1985, GUPTA e SOROOSHIAN apresentaram um trabalho onde calculam explicitamente os valores das derivadas. Nesse trabalho, são mostrados resultados comparativos obtidos com o método direto do Poliedro Flexível (NELDER e MEAD (1965)) e o método indireto Newton-Raphson modificado, aplicados ao modelo SIXPAR (GUPTA e SOROOSHIAN (1983)). .

O SIXPAR é uma versão simplificada do modelo SMA-NWSRFS do U. S. National Weather Service. O modelo, que conta com seis (6) parâmetros, é apresentado no capítulo V. Basicamente é constituído de dois (2) reservatórios. Um simula a zona superficial do solo e o outro simula a zona mais profunda do solo. Nesse modelo despreza-se a evaporação.

GUPTA e SOROOSHIAN (1985) usam o cálculo das derivadas explícitas tentando superar as deficiências dos métodos de otimização até então utilizados pelos hidrólogos. Primeiramente estudam o comportamento de um reservatório, componente freqüente de modelos hidrológicos do tipo chuva-vazão. Esse reservatório possui dois parâmetros: a máxima capacidade de armazenamento e um parâmetro que configura a sua recessão. Chegam à conclusão que seria perfeitamente possível calcular as derivadas da função objetivo de forma explícita. Seguem, então, para a aplicação desse cálculo no modelo SIXPAR, onde acabam se defrontando com problemas no processo de calibração dos parâmetros. O insucesso nos resultados leva a que os referidos autores sugeriram que não há meios para se resolver o problema no âmbito dos processos de otimização e que o melhor, talvez, fosse estudar a identificabilidade do modelo, decorrente da formulação de sua estrutura. O conceito de identificabilidade é apresentado mais adiante no item (II.2.8).

A motivação dessa dissertação encontra-se no fato de que os resultados obtidos, embora não de completo sucesso, revelam, por outro lado, que não pode haver a rejeição pura e simples de métodos que fazem uso de derivadas primeiras e segundas em favor de métodos diretos.

Outrossim traz à tona a realidade que os métodos matemáticos, tanto diretos como indiretos, enfrentam dificuldades ao lidar com superfícies complexas como as geradas por modelos hidrológicos.

II.2.7- Tamanho da amostra a ser utilizada na fase de calibração

Essa é uma questão que sempre preocupa os hidrólogos, na medida em que se deseja que os parâmetros oriundos de um processo de ajuste não sejam afetados por

perturbações decorrentes do uso de diferentes tamanhos de amostra. CANEDO (1979) faz uma interessante abordagem sobre o assunto. Nesse trabalho, uma das conclusões alcançadas é que um período de 3 anos já se revela aceitável, enquanto um período de 5 anos poderia ser considerado, em termos práticos, como ideal.

II.2.8- Identificabilidade em modelos hidrológicos

A identificabilidade em modelos hidrológicos do tipo chuva-vazão pode ser dividida em duas partes:

- identificabilidade estrutural do modelo
- identificabilidade dos parâmetros do modelo

Com relação ao que se define identificabilidade estrutural do modelo, fazem parte as especificações das variáveis de entrada e saída do modelo, os possíveis modos de atuação do modelo e a determinação das relações que governam o seu funcionamento.

O conceito de identificabilidade dos parâmetros de um modelo está intimamente ligado aos aspectos anteriormente abordados, concernentes ao processo de ajuste. Se um modelo hidrológico gera saídas diversas para diferentes grupos de parâmetros, diz-se que os parâmetros desse modelo são identificáveis.

II.2.9- Revisão de alguns índices e diagnósticos úteis quando da utilização de um modelo

A revisão de índices e diagnósticos que aqui é apresentada tem a finalidade de poder auxiliar na avaliação de certas situações que ocorrem durante o período de calibração de um modelo, dar uma idéia da confiabilidade que se pode depositar nas estimativas dos

parâmetros, bem como detectar possíveis problemas na estruturação dos modelos. TROUTMAN (1982a, 1983, 1985) e KUCZERA (1983a) apresentam uma boa discussão sobre o assunto.

1- Plotagem dos resíduos ou erros versus vazão prevista

Permite verificar se há ou não algum tipo de tendência presente na predição de vazões, bem como observar o comportamento da variabilidade dos resíduos com o aumento de descargas.

2- Plotagem dos resíduos versus tempo

Possibilita detectar se há algum tipo de dependência bastante forte com relação ao tempo, dando margem a que se examine se o modelo está apresentando um comportamento adequado tanto nos meses secos como nos meses úmidos.

3- Plotagem dos resíduos em papel probabilístico normal

Permite que se examine se os erros seguem uma distribuição normal, validando assim uma das hipóteses assumidas sobre a estrutura de erros em modelos chuva-vazão.

4- Contagem do número de resíduos positivos, número de resíduos negativos e número de mudanças que ocorrem na passagem de erros positivos para erros negativos e vice-versa

São instrumentos úteis para determinar se o modelo, na maior parte do tempo ou em períodos específicos, está superestimando ou subestimando valores de vazão.

5- Cálculo de $\hat{\gamma}^2$ (estimativa de γ^2 - erro quadrático médio na predição de vazões, que aumenta em virtude de erros nos parâmetros)

$$E[\gamma^2(X, \hat{\theta})] \approx \sum_{j=1}^p \sum_{k=1}^p E \left[\frac{\partial F}{\partial \theta_j} * \frac{\partial F}{\partial \theta_k} \Big|_{\hat{\theta} = \theta^*} \right] (\hat{\theta}_j - \theta_j^*) (\hat{\theta}_k - \theta_k^*)$$

onde

p - número de parâmetros do modelo

$\frac{\partial F}{\partial \theta_i}$ - derivada da vazão gerada pelo modelo em relação ao parâmetro θ_i

$\hat{\theta}$ - vetor de parâmetros obtido pelo processo de ajuste

θ^* - conjunto de valores verdadeiros dos parâmetros

Na prática, como não se conhece θ^* , calcula-se a diferença para um parâmetro θ_i , $\Delta \theta_i = \theta_i - \theta_i^*$, através da atribuição de percentuais ao valor obtido pelo parâmetro através do processo de calibração.

A expressão permite calcular para cada parâmetro do modelo o valor de $\hat{\gamma}^2$, possibilitando que se verifique o que acontece com o erro quadrático médio total de predição quando ocorre um erro em um dado parâmetro. Consegue-se obter assim a sensibilidade e importância de cada parâmetro na resposta do modelo.

CAPITULO III

DESCRIBÇÃO DOS ELEMENTOS UTILIZADOS NA COMPARAÇÃO DOS
MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO: DIRETO E INDIRETO

III.1- Modelo Hidrológico Utilizado

O modelo utilizado foi uma modificação do SMAP de vazões diárias (LOPES, BRAGA e CONEJO (1981)) em que foram calibrados cinco (5) parâmetros em vez dos seis (6) originalmente propostos.

O modelo SMAP realiza, a nível diário, o balanço da umidade do solo baseado em três (3) reservatórios que representam a superfície e as zonas não saturada e saturada do solo da bacia, conforme o esquema da Figura (III.1).

A seqüência lógica do modelo inicia-se com a separação da precipitação (PREC) através da fórmula do "Soil Conservation Service - SCS", descrita na equação (III.1), que fornece a parcela QRES a ser transferida para o reservatório do escoamento superficial (RSUP), que representa o armazenamento da superfície:

$$QRES = \frac{(PREC - ABSI)^2}{(PREC - ABSI + ABSP)} \quad (III.1)$$

onde:

QRES - volume para o escoamento superficial (mm);

PREC - volume de precipitação (mm);

ABSI - abstração inicial, isto é, a quantidade máxima de água que pode ser retida no solo e na superfície (mm), definida por:

$$ABSP = 25.4 ((1000/CNUM) - 10) \quad (III.2)$$

onde:

CNUM - curva número do SCS que está relacionada com o tipo de solo, cobertura vegetal e umidade antecedente da bacia, sendo um valor tabelado em função destas grandezas (CHOW, 1964)

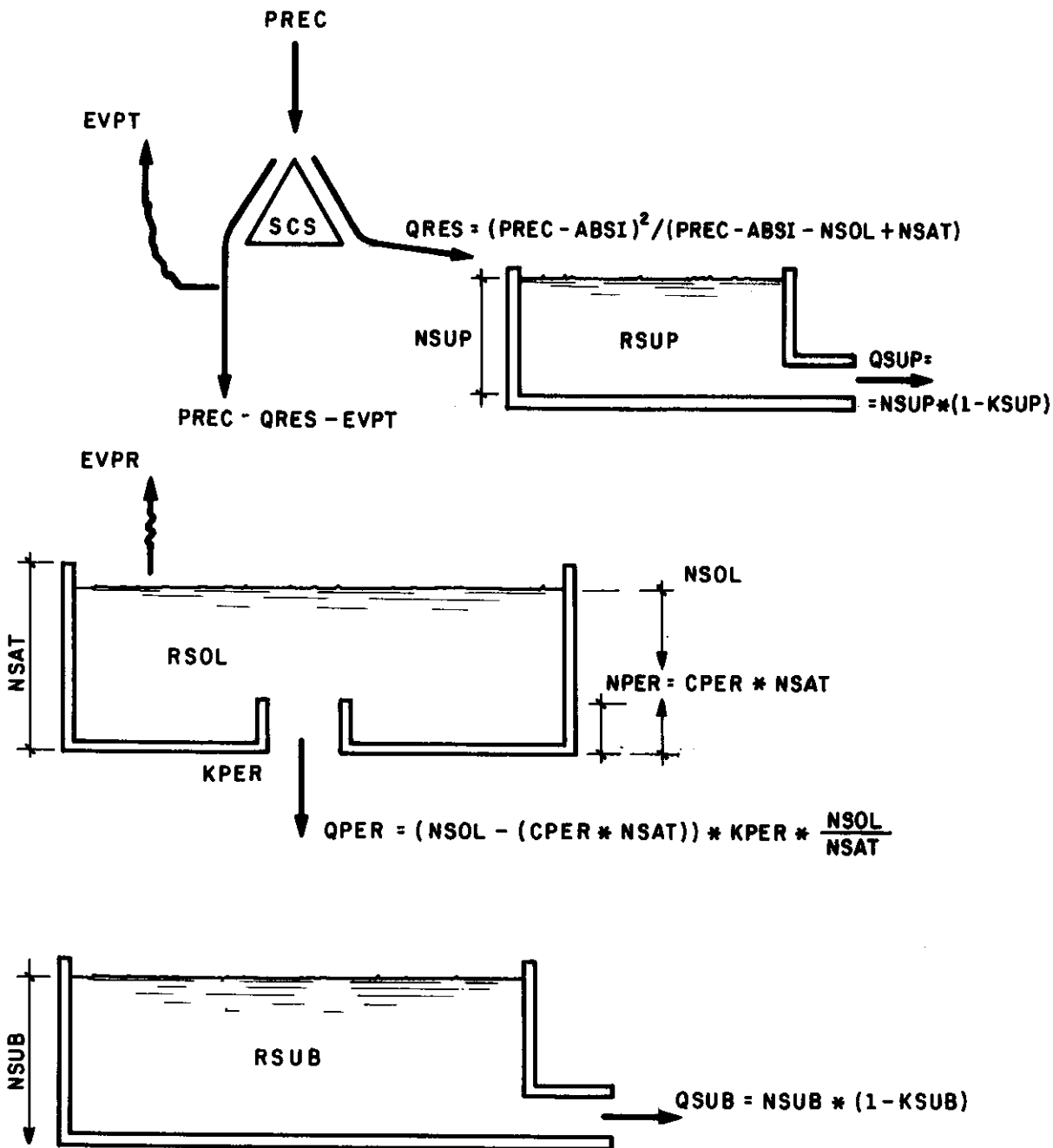


Figura III.1- Esquema do Modelo SMAP

Deve-se ressaltar que a definição da grandeza CNUM em um modelo contínuo implicaria o estabelecimento de uma função para relacionar os valores desta grandeza à precipitação antecedente, tornando possível a obtenção de valores contínuos da abstração potencial (ABSP) através da equação (III.2). No entanto, como um modelo contínuo faz uma atualização automática da umidade do solo a cada intervalo de tempo da simulação, os autores do modelo SMAP sugerem calcular a abstração potencial associada ao espaço disponível no reservatório do solo através da expressão:

$$ABSP = NSAT - NSOL \quad (III.3)$$

Esses conceitos podem ser melhor entendidos através da Figura (III.2).

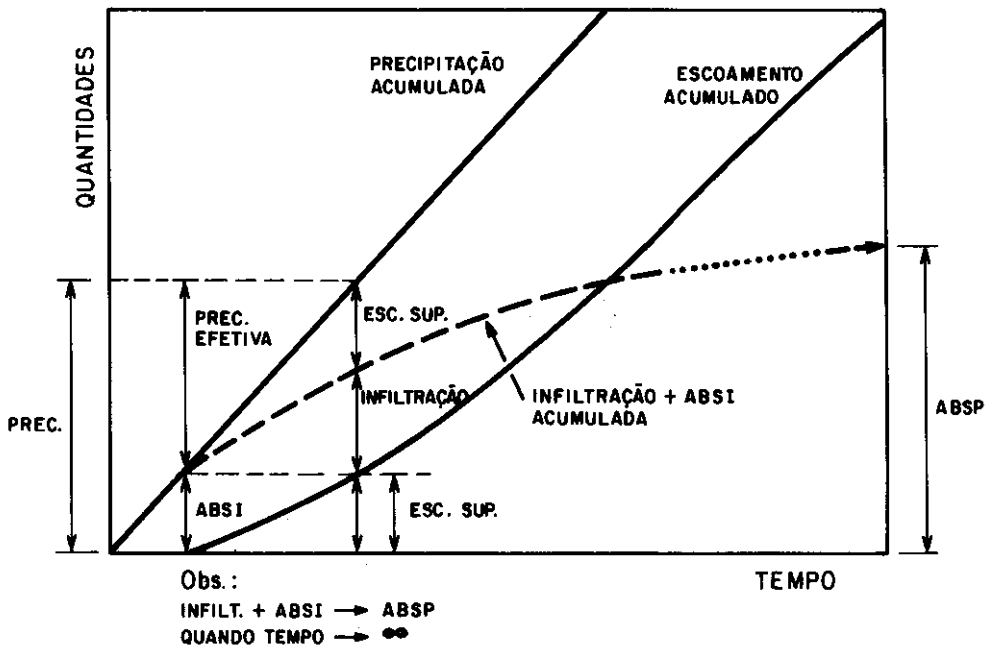


Figura III.2- Conceitos do "Soil Conservation Service"

O nível d'água (NSUP) resultante após o acréscimo de QRES neste reservatório linear é deplecionado a uma taxa constante (KSUP), fornecendo o escoamento direto (QSUP) pela expressão:

$$QSUP = NSUP (1 - KSUP) \quad (III.4)$$

onde:

QSUP - parcela de vazão superficial (mm/dia)

NSUP - nível do reservatório superficial (mm)

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

A lâmina restante (PREC - QRES) sofre perda por evaporação a nível potencial (EVPT), sendo a parcela (QINF = PREC - QRES - EVPT) adicionada a um reservatório (RSOL) que representa a camada superior e não saturada do solo.

Neste reservatório, a umidade é atualizada ao longo do tempo através de perdas por evapotranspiração remanescente a nível real (EVPR), equivalente a parcela não satisfeita da evapotranspiração potencial vezes a taxa de umidade do reservatório (TSOL). Essa taxa é calculada dividindo-se o valor do nível do reservatório (NSOL) pelo seu nível máximo, ou seja, o nível de saturação (NSAT).

Além disso, existe a recarga para o aquífero (QPER), também denominada percolação profunda. Nesta transferência de água é usado o conceito de capacidade de campo, isto é, se o nível do reservatório (NSOL) for maior do que o nível em que se pode reter água por capilaridade no solo (NPER = CPER * NSAT), ocorrerá a recarga para o reservatório subterrâneo por:

$$QPER = (NSOL - CPER * NSAT) * TSOL * KPER \quad (III.5)$$

onde:

QPER - vazão de percolação profunda (mm/dia)

NSOL - nível do reservatório do solo (mm)

CPER - coeficiente ($0 < \text{CPER} < 1$)

NSAT - nível de saturação do solo (mm)

NPER - capacidade de campo do solo ($\text{NPER} = \text{CPER} * \text{NSAT}$)

TSOL - taxa de umidade do solo ($\text{TSOL} = \text{NSOL} / \text{NSAT}$)

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

A parcela QPER irá alimentar o reservatório subterrâneo (RSUB), que é outro reservatório linear do modelo. O nível d'água (NSUB) deste reservatório, uma vez atualizado, é deplecionado a uma taxa constante (KSUB), fornecendo a vazão de base (QSUB) da bacia por:

$$\text{QSUB} = \text{NSUB} * (1 - \text{KSUB}) \quad (\text{III.6})$$

onde:

QSUB - vazão básica (mm/dia)

NSUB - nível do reservatório subterrâneo (mm)

KSUB - constante de recessão do escoamento subterrâneo (1/dia)

Finalmente, a soma dos escoamentos direto e básico fornecem a vazão no ponto de controle da bacia pela expressão:

$$\text{QGER} = (\text{QSUP} + \text{QSUB}) * \text{AREA} / \text{TEMP} \quad (\text{III.7})$$

onde:

QGER - vazão gerada pelo modelo (m^3/s)

AREA - área da bacia (Km^2)

TEMP - constante de ajuste das unidades ($\text{TEMP} = 86.4$)

Para inicializar a operação do modelo, considera-se nulo o nível inicial do reservatório superficial, admitindo-se que a simulação iniciar-se-á após um período de fim de estiagem. Determinam-se os níveis dos reservatórios do solo e subterrâneo por:

$$\text{NSOL} = \text{SOLI} * \text{NSAT} \quad (\text{III.8})$$

onde:

SOLI - taxa de umidade inicial do solo

$$NSUB = SUBI * TEMP / (AREA * (1 - KSUB)) \quad (III.9)$$

O conjunto de parâmetros do modelo para simulações a nível diário é composto por grandezas que podem ser quantificadas a priori (AREA, TEMP, SOLI, SUBI) e grandezas que ficam determinadas no processo de simulação (KSUP, KPER, KSUB, ABSI, CPER, NSAT).

No caso dessa dissertação, optou-se pela determinação de apenas cinco (5) parâmetros através do processo de simulação, passando-se o parâmetro NSAT para o conjunto de parâmetros fixos.

Os cinco (5) parâmetros calibrados foram: KSUP, KPER, KSUB, ABSI e CPER.

O programa do modelo SMAP, elaborado na linguagem de programação FORTRAN por Klaudius da Rocha Dib, é apresentado no Apêndice A dessa dissertação.

As linhas assinaladas por (**) (ver Apêndice A) não constam do programa original. Foram introduzidas com vistas a possibilitar a determinação do caminho percorrido pela água em um dado dia. No capítulo quatro (IV) desse texto, o motivo que obrigou a verificação do caminho percorrido pela água será melhor entendido.

III.2- Dados utilizados

Optou-se por usar séries de chuvas e evaporação reais na bacia do rio Fartura (5 anos de dados) e séries de vazões sintéticas geradas pelo próprio modelo a ser calibrado, de modo a se ter um cenário de modelo potencialmente perfeito. Desse modo, qualquer perturbação

na performance da modelagem deve ser atribuída exclusivamente à calibração. Para geração das séries de vazões sintéticas foram arbitrados valores aos parâmetros do modelo em adequação ao comportamento hidrológico do rio Fartura, previamente estudado.

Os valores adotados foram: $KSUP=0.5$, $KPER=0.05$, $KSUB=0.99985$, $ABSI=0.70$ e $CPER=0.25$.

III.3- Métodos de Otimização Utilizados

Em modelos chuva-vazão é recomendável que os métodos de otimização utilizados incorporem a aplicação de restrições aos valores dos parâmetros. Essa orientação no sentido de se trabalhar com o problema restrito visa, em primeira instância, evitar que se obtenha, ao final de um processo de calibração, valores de parâmetros destituídos de qualquer significação física. Adicionalmente, as restrições são úteis para se evitar a ocorrência de desastres numéricos.

O método de Rosenbrock modificado (IBBITT (1970) e CANEDO (1979)) tem apresentado bons resultados na sua aplicação a modelos hidrológicos determinísticos. Basicamente a modificação consiste na introdução de salvaguardas que impedem a violação às restrições estabelecidas para a variação dos parâmetros do modelo.

Esse método, também chamado de método de rotação de coordenadas, trata-se de uma modificação do método univariacional (Figura III.3-a).

No método univariacional, dada uma função $f(x_i)$, com $i=1,2,\dots,n$ variáveis independentes definindo n eixos ortogonais, estabelece-se como direção de pesquisa os referidos eixos, ou seja, modifica-se uma variável e mantém-se as demais constantes a cada vez. O processo

inicia ao se arbitrar um ponto de partida $P_0(x_i, 0)$, modificando uma variável através de $x_{i,1} = x_{i,0} + S_i$ e mantendo as demais constantes. S_i é o acréscimo ou decréscimo a ser dado a variável i ; $x_{i,0}$ é o antigo valor da variável; $x_{i,1}$ é o novo valor da variável. Se o acréscimo da variável produz uma diminuição na função (minimização), deve-se continuar acrescentando o valor da variável. Se no primeiro passo a variável acrescida não produz uma diminuição na função, o processo é desenvolvido no sentido de diminuir a variável (S_i negativo). Quando o acréscimo ou decréscimo de uma dada variável não produzir mais diminuição na função objetivo, passa-se para a variável seguinte, sempre fixando-se o valor das demais. Depois que todas as variáveis forem otimizadas nas suas respectivas direções, completa-se um ciclo. Repete-se o ciclo até que a função não diminua mais ou que para o problema em estudo se tenha obtido a precisão desejada.

O método de Rosenbrock possui o primeiro ciclo idêntico ao método univariacional. Como ciclo entende-se quando pelo menos um sucesso e uma falha tenham ocorrido em todas as direções. O sucesso ocorre quando a função, anteriormente calculada, após a modificação da variável apresenta uma diminuição no seu valor. Uma falha é quando ocorre o inverso. Na determinação do comprimento dos passos de pesquisa, são usados dois parâmetros α e β . Esses parâmetros multiplicarão uma constante S_i . Se a função anterior for maior que a calculada, ocorreu um sucesso, sendo o próximo incremento de αS_i , onde $\alpha > 1$. Se a função anterior for menor que a calculada, o próximo incremento da variável será $-S_i \beta$ onde $0 < \beta < 1$. Considerando-se $P_{1,0}(x_i, 0)$, para $i=1, 2, \dots, n$, o ponto de partida e $P_{1,1}$ o último ponto, a obtenção das n direções ortogonais para o ciclo posterior se faz da seguinte forma: considera-se a nova direção que antes correspondia à variável x_i como sendo o vetor que liga os pontos $P_{1,0}$ e $P_{1,1}$, sendo as direções seguintes ortogonais à anterior. O vetor que liga $P_{1,0}$ e $P_{1,1}$ assume a forma:

$$A_1 = d_1 e_1^0 + d_2 e_2^0 + \dots + d_n e_n^0 \quad (\text{III.10})$$

Nessa expressão, d_i é a soma algébrica de todos os comprimentos dos passos com sucesso na direção dos respectivos e_i^j , onde i indica uma das n direções e j o ciclo.

A nova direção do primeiro eixo para o ciclo seguinte é dado pelo vetor unitário:

$$e_1^1 = \frac{A_1}{|A_1|} \quad (\text{III.11})$$

A direção seguinte deve ser normal à anterior, resultando:

$$A_2 = d_2 e_2^0 + d_3 e_3^0 + \dots + d_n e_n^0 \quad (\text{III.12})$$

produzindo a nova direção e_2^1 (Figura III.3-b)

$$B_2 = A_2 - (A_2 e_1^1) e_1^1 \quad (\text{III.13})$$

$$e_2^1 = \frac{B_2}{|B_2|} \quad (\text{III.14})$$

O n ésimo elemento fica determinado da seguinte forma:

$$B_n = A_n - \sum_{j=1}^{n-1} (A_n e_j^1) e_j^1 \quad (\text{III.15})$$

$$e_n^1 = \frac{B_n}{|B_n|} \quad (\text{III.16})$$

Obtidas as novas direções, o processo se repete.

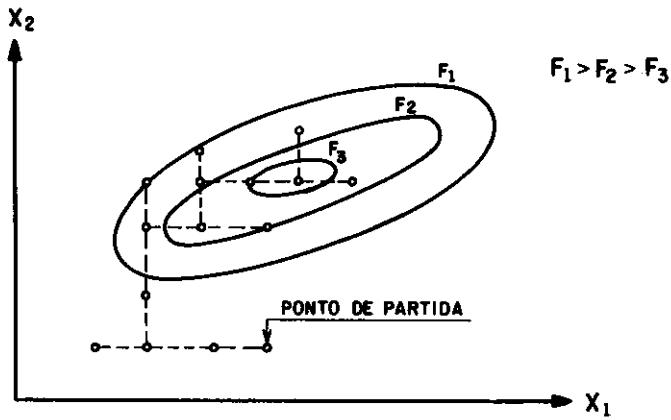


Figura III.3 (a) Método Univariacional

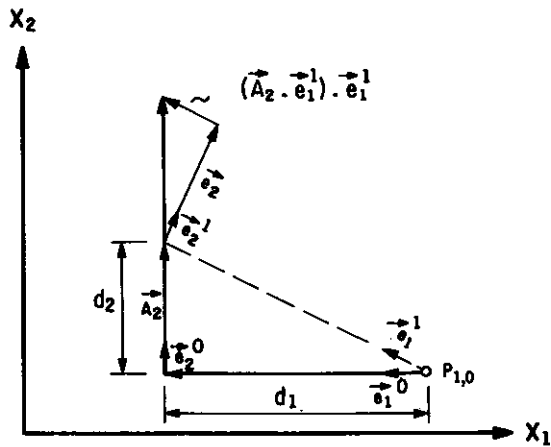


Figura III.3 (b) Método da Rotação de Coordenadas

No entanto, tem-se constatado que, na maioria dos casos, o número de iterações necessárias para que se atinja um ponto de convergência é demasiadamente grande.

Isto implica dizer que se está em presença de um processo de convergência lento.

Tendo em vista esse fato, partiu-se para o uso de um método que fizesse uso de derivadas primeiras e segundas, supostamente mais rápido.

Inicialmente, o primeiro método escolhido, que fazia uso das informações de derivadas da função objetivo em relação aos parâmetros do modelo, foi o método das Direções Viáveis em Duas Etapas (HERSKOVITZ (1982) e CARVALHO (1984)), apropriado para a resolução de problemas não lineares com restrições. Esse método exige continuidade das funções de derivada primeira e segunda. O método de direções viáveis em duas etapas faz parte de uma família de métodos chamados de direções viáveis que, partindo de um ponto inicial viável, geram uma seqüência de configurações também viáveis que convergem ao ponto ótimo. No caso de direções viáveis em duas etapas, determina-se a direção de descida através da resolução de dois sistemas lineares. Na primeira etapa, uma direção de descida inicial é calculada através da resolução de um sistema linear. Em uma segunda etapa, a direção inicial é defletida de forma a se obter um direção de descida viável. Um processo de busca linear determina o passo a ser percorrido na direção calculada de modo a garantir a viabilidade estrita e a convergência global do algoritmo. Desta maneira, transforma-se um problema multi-dimensional em uma seqüência de sub-problemas unidimensionais. Maiores detalhes sobre o assunto podem ser encontrados em CARVALHO (1984). Nesse método, é necessário gerar uma seqüência de matrizes B^k que seja simétrica e definida positiva. Várias seqüências podem ser utilizadas, alterando-se assim a convergência do algoritmo básico. Pode-se assumir B^k constante igual à matriz identidade ou pode também ser aproximada pela hessiana do lagrangeano do problema.

Quando foi feita a aplicação do método de Direções

Viáveis em Duas Etapas ao problema de otimização de parâmetros do modelo hidrológico chuva-vazão SMAP, problemas causados por instabilidades numéricas surgiram no cálculo da matriz hessiana, impedindo a sua inversão. Essas instabilidades têm origem no fato de que a função objetivo do modelo não é bem comportada para garantir continuidade das derivadas primeiras e, por consequência, derivadas segundas no \mathbb{R}^6 . Chegou-se, também, a utilizar a matriz identidade, já que, nesse caso, não seria necessária a sua inversão. Mas, mesmo assim, o processo de convergência ficou perturbado pelas instabilidades numéricas e pelo não atendimento das premissas exigidas pelo método de otimização.

Com isso, procurou-se um método que fosse menos exigente no que diz respeito às derivadas da função objetivo em relação aos parâmetros do modelo. Chegou-se, pois, à escolha do método desenvolvido por NICHOLS e apresentado por KÜESTER e MIZE (1976), baseado no método de Projeção do Gradiente (ROSEN (1960)), que unicamente usa as derivadas primeiras.

Nessa dissertação, o método de otimização escolhido para comparação com Rosenbrock será tratado simplesmente por Rosen. Esse método pode ser aplicado a problemas de otimização de várias variáveis em que a função objetivo é não linear e as restrições são lineares, necessitando somente das derivadas primeiras da função objetivo. Esse procedimento, além de adotar um passo inicial S , calcula a direção em que um determinado parâmetro deve caminhar pela relação:

$$M_{\theta_i} = \pm \frac{\nabla_{\theta_i} F}{\sqrt{\sum_{i=1}^N (\nabla_{\theta_i} F)^2}} \quad (\text{III.17})$$

Assim, o passo dado por um parâmetro θ_i é fornecido

pelo produto entre S e M_{θ_i} . Quando se atinge $\nabla_{\theta_i} F \leq \text{LIMITE}$ para todos os parâmetros, então, a convergência é assumida. Caso haja violação de uma restrição, há um retorno para o último ponto pesquisado dentro da região de validade do modelo e são recalculadas as direções de caminhamento dos parâmetros pela relação:

$$M_{\theta_i} = \frac{[\nabla_{\theta_i} F + \sum_{k=1}^l \lambda_k \nabla_{\theta_i} G_k]}{\left[\sum_{j=1}^N (\nabla_{\theta_i} F + \sum_{k=1}^l (\lambda_k \nabla_{\theta_i} G_k))^2 \right]^{1/2}} \quad (\text{III.18})$$

onde:

$i=1,2,3,\dots,N$

l - número de restrições violadas

λ_k , $k = 1,2,\dots,l$ é determinado pelas seguintes equações:

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^l \lambda_j \nabla_{\theta_i} G_j \nabla_{\theta_i} G_k = - \sum_{i=1}^N (\nabla_{\theta_i} G_k \nabla_{\theta_i} F) \quad (\text{III.19})$$

O critério de convergência, nesse caso, é o seguinte:

$$\nabla_{\theta_i} F + \sum_{k=1}^l (\lambda_k \nabla_{\theta_j} G_k) \leq \text{LIMITE} \quad (\text{III.20})$$

para $j=1,2,\dots,N$

III.4- Função objetivo

A função objetivo utilizada foi a dos mínimos quadrados dada por:

$$F(\theta) = \sum_{t=1}^n (q_{\text{GER}}(\theta) - q_{\text{OBS}})^2 \quad (\text{III.21})$$

onde:

F - valor da função objetivo

q_{GER} - vazão gerada pelo modelo

q_{OBS} - vazão observada

θ - conjunto de parâmetros do modelo a ser calibrado

n - número de intervalos de tempo

CAPITULO IV

IMPLEMENTAÇÃO DO MODELO E RESULTADOS COMPUTACIONAIS

IV.1- Alternativas de funcionamento do modelo e obtenção das expressões analíticas das vazões por ele geradas

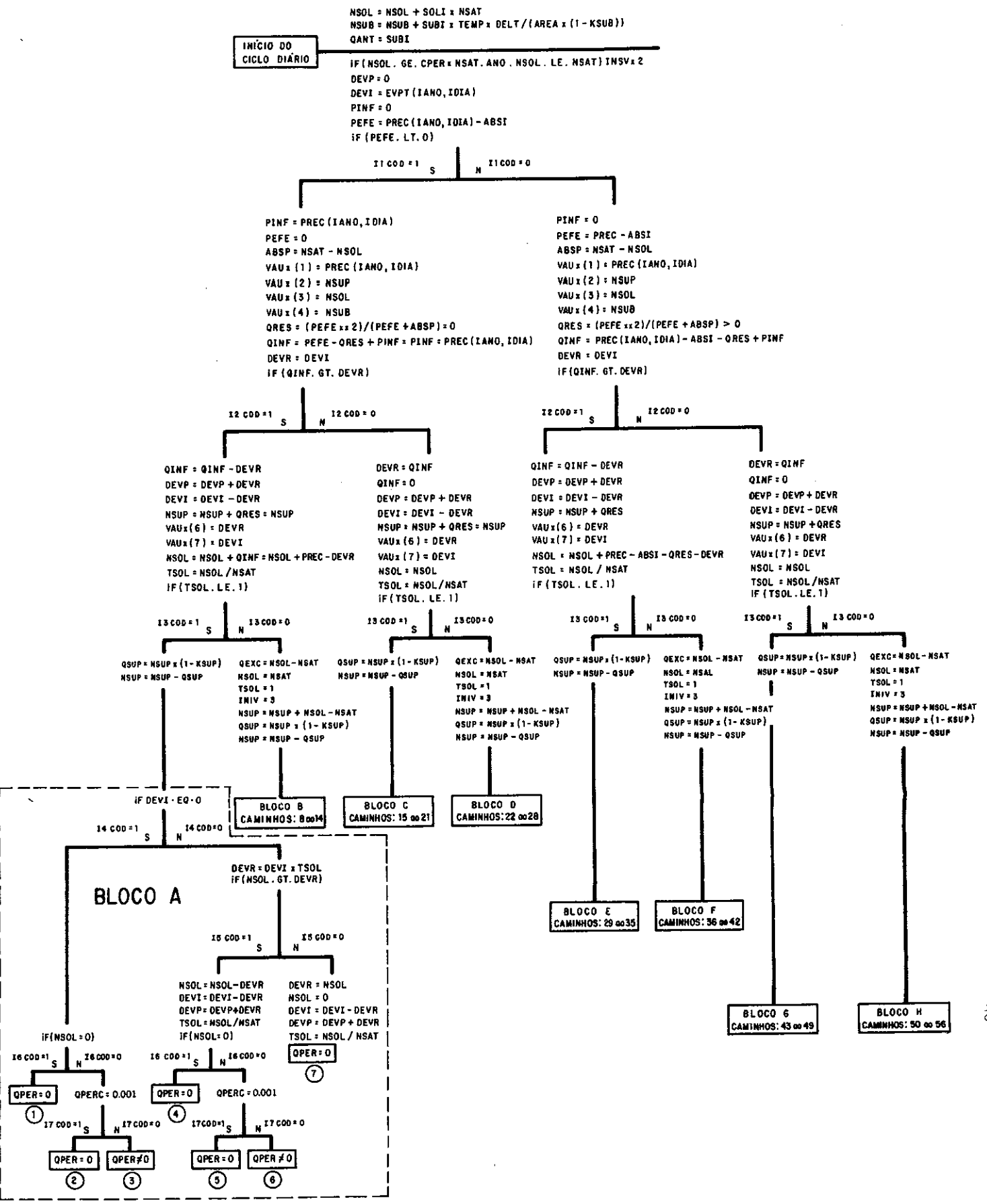
Baseado no programa do modelo SMAP e em algumas instruções adicionais ao programa original, apresentado no Apêndice A, elaborou-se um fluxograma do modelo SMAP (Figura IV.1) que permitiu detectar os possíveis caminhos percorridos pela água no modelo. Todos os caminhos encontrados pela análise desse fluxograma, que correspondem às possíveis formas de funcionamento do modelo, também estão apresentados no Apêndice B.

A identificação dos caminhos é importante, pois irá determinar a expressão analítica da vazão gerada pelo modelo para cada uma das suas ramificações, permitindo a obtenção das derivadas da função objetivo em relação aos parâmetros. Percebeu-se, no entanto, que muitos caminhos identificados a priori conduziam a expressões idênticas da vazão gerada bem como alguns deles nunca seriam percorridos. Assim, reduziram-se os cinquenta e seis (56) caminhos, previamente determinados, para vinte e dois (22) caminhos. Esses caminhos estão apresentados no Apêndice C acompanhados das expressões analíticas das vazões geradas.

Essa redução do número de caminhos demonstra que há problemas provavelmente na estruturação do código do programa do modelo. Reside aí uma das possíveis causas das dificuldades encontradas na literatura sobre otimização, já que não há uma preocupação e um cuidado especial dedicados à ligação entre programação do modelo e utilização de um processo de otimização. Uma forma de se combater os problemas na fase de identificação dos parâmetros está justamente em se procurar diminuir o

número de caminhos percorridos, ou seja, em linguagem de programação de alto nível significa diminuir ao máximo o número de comandos "IF" do programa.

Figura IV.1 - FLUXOGRAMA DO MODELO SMAP



Para uma análise do programa apresentado no Apêndice A, é importante acrescentar nesse ponto, um comentário sobre as variáveis armazenadas no vetor VAUX, úteis tanto no cálculo da vazão gerada como das derivadas da função objetivo. São elas:

VAUX(1)=PRECCIANO, IDIA) (dado de precipitação diário)
 VAUX(2)=NSUP^{t-1} (nível do reservatório superficial no início do ciclo diário)
 VAUX(3)=NSOL^{t-1} (nível do reservatório que simula a zona não saturada do solo no início do ciclo diário)
 VAUX(4)=NSUB^{t-1} (nível do reservatório subterrâneo no início do ciclo diário)
 VAUX(5)=NSUP^{t-1} (nível do reservatório superficial antes de ser subtraído de QSUP)
 VAUX(6)=DEVR (evapotranspiração satisfeita)
 VAUX(7)=DEVI (evapotranspiração não satisfeita)
 VAUX(8)=NSOL^t (nível do reservatório que simula a zona não saturada do solo antes de ser subtraído de QPER)
 VAUX(9)=NSUB^t (nível do reservatório subterrâneo antes de ser subtraído de QSUB)

As complexas expressões analíticas obtidas para a vazão gerada (Apêndice C) foram testadas computacionalmente para se verificar se correspondiam à realidade do programa SMAP (Apêndice A). Comparou-se a vazão resultante da aplicação dessas expressões com a vazão gerada pelo programa do modelo ,dia a dia, para diversas amostras.

IV.2- Implementação das derivadas da função objetivo em relação aos parâmetros do modelo

O método para implementação das derivadas tem como primeiro passo a definição dos caminhos percorridos pela

água no modelo. Isso feito, parte-se para a obtenção das expressões analíticas das vazões geradas pelo modelo para cada um dos caminhos identificados anteriormente. De posse das expressões analíticas, é possível, então, obter-se as derivadas da vazão gerada em relação a cada um dos parâmetros. No caso dessa dissertação foram obtidas 110 expressões de derivadas, já que foram identificados 22 caminhos no modelo, conforme mencionado anteriormente, e 5 foram os parâmetros escolhidos para calibração.

Verifica-se que, uma vez obtidas as expressões das derivadas da vazão em relação aos parâmetros do modelo, fica fácil de se obter as derivadas parciais da função objetivo, que é função da vazão gerada.

No caso, adotou-se a função objetivo dos mínimos quadrados dada pela expressão (III.19).

A expressão da derivada da função objetivo em relação a um parâmetro θ_i assume a forma:

$$\nabla_{\theta_i} F(\theta) = 2 \sum_{t=1}^n [(q_{GER}(\theta) - q_{OBS}) \nabla_{\theta_i} q_{GER}(\theta)] \quad (IV.1)$$

O maior problema na utilização dessa metodologia, além de trabalhosa, reside no cálculo correto das derivadas da vazão gerada em relação aos parâmetros do modelo. Isso acontece porque a vazão gerada em um passo de tempo t não depende somente de valores de variáveis do modelo nesse passo. A vazão gerada no tempo t depende de condições ocorridas em tempos anteriores. Como exemplo mais evidente, aparecem os níveis dos reservatórios do modelo.

Inicialmente desprezou-se a influência dos tempos anteriores no cálculo das derivadas da função objetivo em relação aos parâmetros do modelo para o tempo t . Os valores a que se chegava eram bastante errados, havendo inclusive trocas de sinal nos seus valores. Essa

constatação foi feita através do desenho das curvas de variação da função objetivo com cada parâmetro e suas respectivas derivadas. Isso naturalmente impedia que o método de otimização funcionasse adequadamente. Já nesse momento reconheceu-se a importância fundamental de se ter uma boa definição das derivadas. Para tanto era necessário definir com acuidade até que ponto informações do passado eram essenciais no cálculo das derivadas da função objetivo.

Pretendeu-se, então, calcular as derivadas utilizando-se um modelo aqui chamado de regressivo de ordem "n". Determinou-se o número de dias anteriores que conteriam informações relevantes no cálculo da derivada para o passo de tempo t , levando-se em conta que a um aumento de n correspondia um aumento no tempo de processamento.

Após exaustivos testes, optou-se por $n = 4$ dias, o que conduziu aos valores apresentados nos gráficos da Figura (IV.2). Cabe ressaltar que os valores das derivadas relativas ao parâmetro CPER apresentaram imprecisões que implicariam trabalhar com $n > 4$ dias no cálculo das derivadas parciais. No entanto, a adoção de valores maiores para n levavam a substanciais aumentos na etapa de processamento.

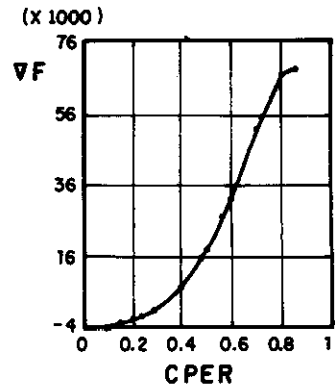
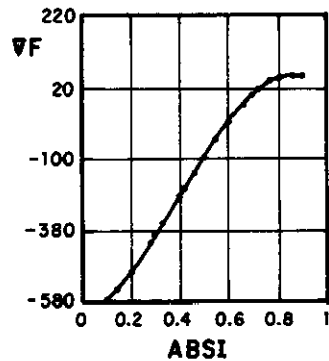
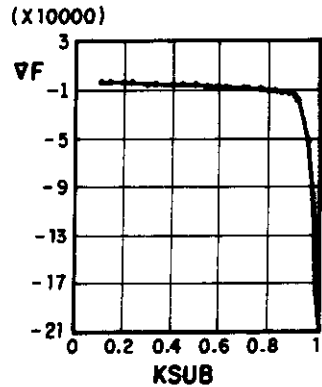
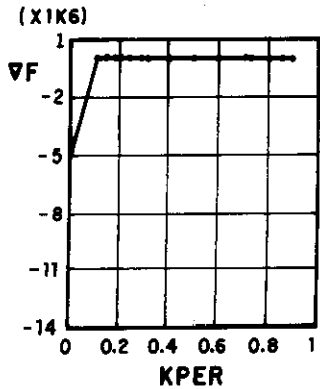
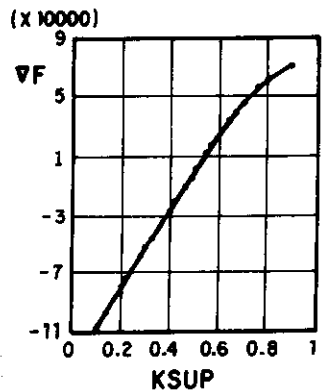
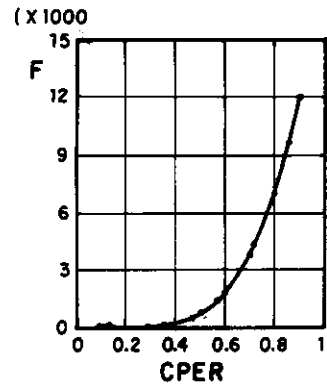
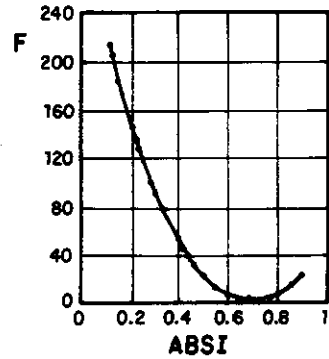
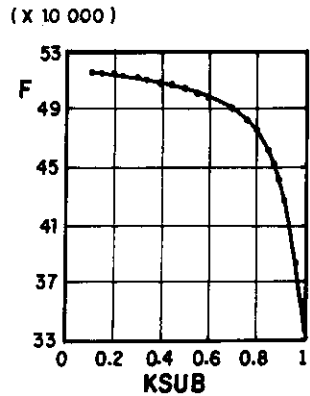
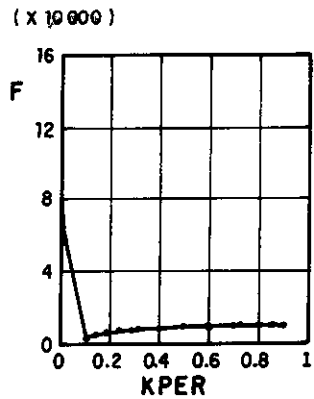
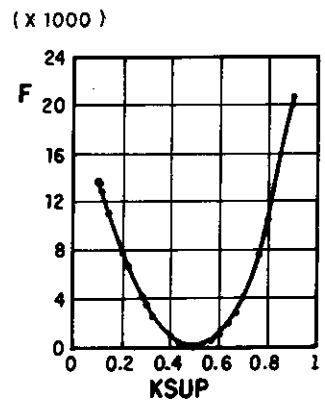
Na verdade, com o método regressivo, não se conseguiu zerar os valores das derivadas da função objetivo em relação a cada um dos parâmetros quando esses parâmetros assumiam os valores ditos verdadeiros que foram utilizados para a geração das vazões sintéticas constituintes da amostra.

Com a aplicação dessas expressões de derivadas, fez-se uma comparação entre os métodos de Rosenbrock e Rosen (ROTUNNO e CANEDO (1987)) em que apenas um parâmetro foi permitido variar, enquanto os demais receberam o valor

arbitrado por ocasião da geração do registro de vazões sintéticas. Nessa situação houve sucesso, pois os dois métodos convergiram para a solução. No entanto, quando se passou para o caso em que 2 parâmetros eram calibrados, houve insucesso no uso do método de Rosen.

Já que os resultados das otimizações envolvendo mais de um parâmetro feitas com o método de Rosen não foram satisfatórios, cogitou-se de calcular as derivadas parciais da vazão gerada de uma outra forma.

Figura IV.2 - Variações de F e ∇F no R^2



Percebeu-se, então, que poder-se-ia calcular as derivadas da vazão gerada em um tempo t levando-se em conta todos os dias anteriores sem onerar o tempo computacional a ser gasto.

Basta seguir os seguintes passos:

- calcular no passo de tempo t as derivadas parciais da vazão gerada $\left[\partial QGER^t / \partial \theta_i\right]$ e, simultaneamente, as derivadas parciais dos níveis dos reservatórios superficial $\left[\partial NSUP^t / \partial \theta_i\right]$, da zona não saturada do solo $\left[\partial NSOL^t / \partial \theta_i\right]$ e da zona saturada do solo $\left[\partial NSUB^t / \partial \theta_i\right]$ onde: θ_i é o i ésimo parâmetro do modelo.

- no passo de tempo seguinte, quando do cálculo de $\partial QGER^{t+1} / \partial \theta_i$, considerar os valores já calculados de $\partial NSUP^t / \partial \theta_i$, $\partial NSOL^t / \partial \theta_i$ e $\partial NSUB^t / \partial \theta_i$

Obs.: Para o passo de tempo $t=1$, onde necessita-se de $\partial NSUP^t / \partial \theta_i$, $\partial NSOL^t / \partial \theta_i$ e $\partial NSUB^t / \partial \theta_i$ do tempo $t=0$, recorre-se a um artifício tal como arbitrar

$$\partial NSUP^{t=0} / \partial \theta_i = \partial NSOL^{t=0} / \partial \theta_i = \partial NSUB^{t=0} / \partial \theta_i = 0$$

Obtidas e implementadas as novas expressões, partiu-se para a comparação dos métodos de otimização de Rosenbrock e Rosen. Mencione-se aqui que, mesmo nesse caso, não foi obtida a anulação perfeita dos valores das derivadas parciais da função objetivo para os valores dos parâmetros verdadeiros.

A causa da ocorrência de valores residuais assumidos pelas derivadas parciais da função objetivo é a utilização de uma amostra constituída de valores de vazões sintéticas geradas pelo próprio modelo SMAP com apenas 1 casa decimal de precisão.

IV.3- Análise dos valores obtidos para as derivadas parciais da função objetivo

Para melhor entendimento do problema da otimização, apresentam-se na Figura (IV.3) as variações da função objetivo F com cada um dos cinco (5) parâmetros considerados no modelo. Atente-se para o fato que esses gráficos mostram o que acontece quando apenas um (1) dos cinco (5) parâmetros é modificado. Isso quer dizer que os outros quatro (4) parâmetros recebem os valores verdadeiros.

No entanto, experiências mostraram que grandes perturbações ocorreram quando dois ou mais parâmetros estavam fora do lugar. Essas perturbações configuavam-se na forma de abismos abruptos, regiões planas ou mesmo descontinuidades. Deve-se ter em mente que a complexidade da superfície de resposta do modelo é bem maior do que a representada na Figura (IV.3). Por outro lado, há dificuldade de se representar visualmente os problemas que surgem quando se aumenta o número de parâmetros passíveis de sofrer variação. No caso de três (3) parâmetros, por exemplo, a representação gráfica é um problema no \mathbb{R}^4 , o que torna impossível a sua visualização.

Um dos principais aspectos a serem observados está relacionado à convexidade das curvas, uma vez que não havendo essa garantia em um eixo, não haveria convexidade no espaço \mathbb{R}^5 . Outro importante aspecto é o comportamento de $\nabla_{\theta_i} F(\theta)$ e $\nabla_{\theta_i}^2 F(\theta)$ nas proximidades do correto valor de cada parâmetro. Em geral, os gráficos mostram $F(\theta)$ como funções razoavelmente bem comportadas e unimodais na maioria das vezes. Em particular, a função objetivo apresenta-se convexa para os parâmetros KSUP, ABSI e CPER, aproximadamente convexa para o parâmetro KPER e côncava para o parâmetro KSUB.

Embora esse bom comportamento univariado da função

$F(\theta)$ seja, em princípio, um bom indicador, não existe qualquer garantia que o mesmo será observado num ponto genérico do \mathbb{R}^5 .

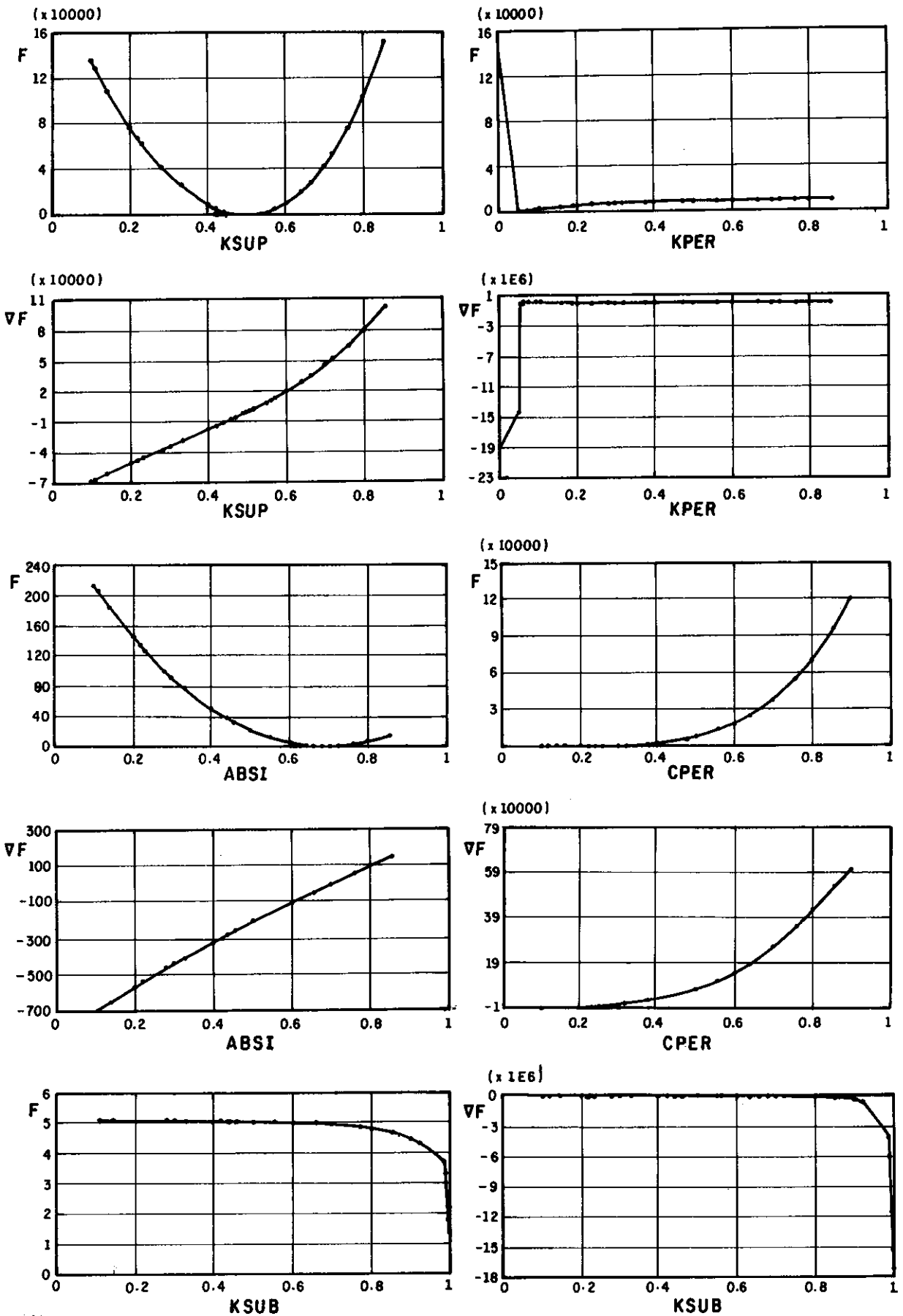
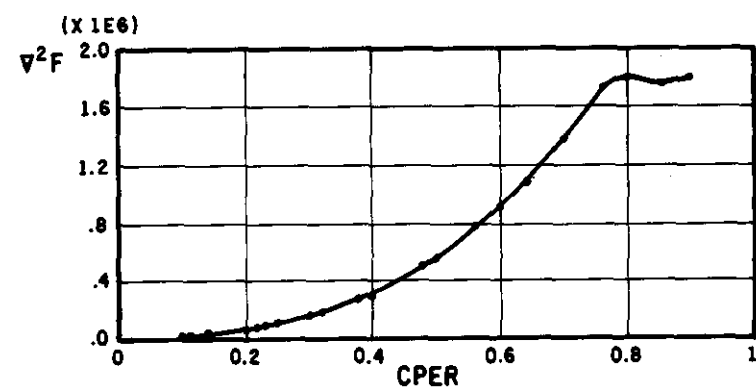
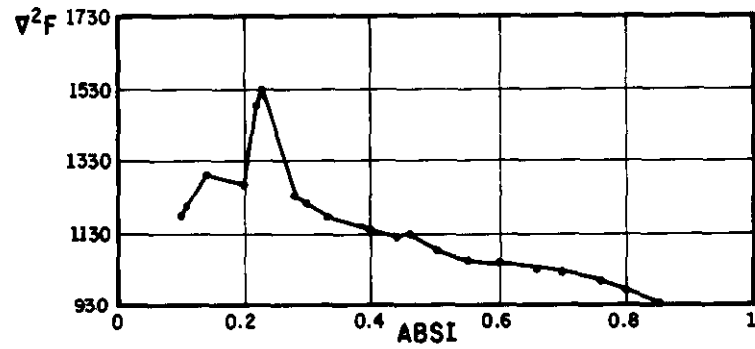
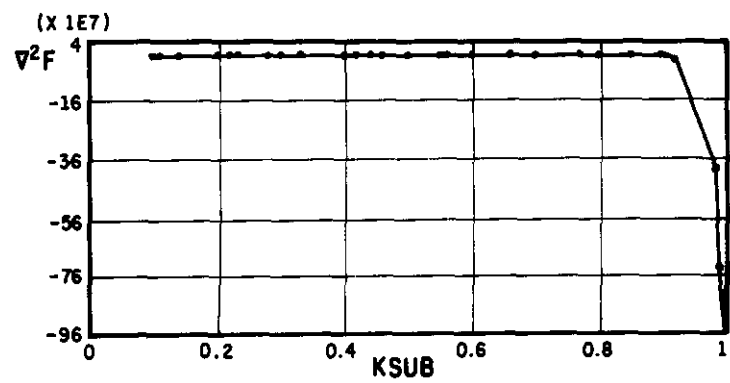
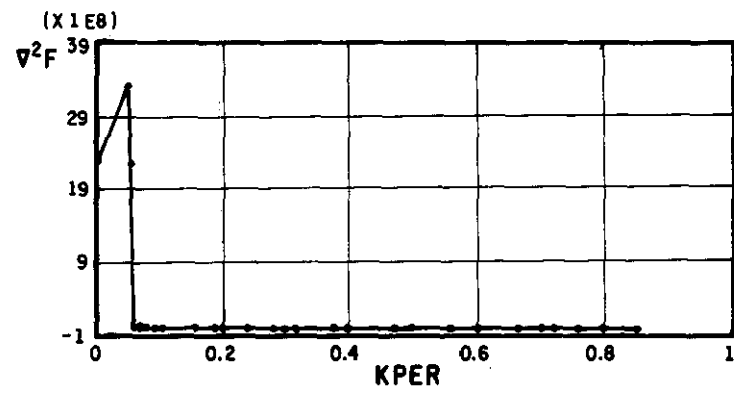
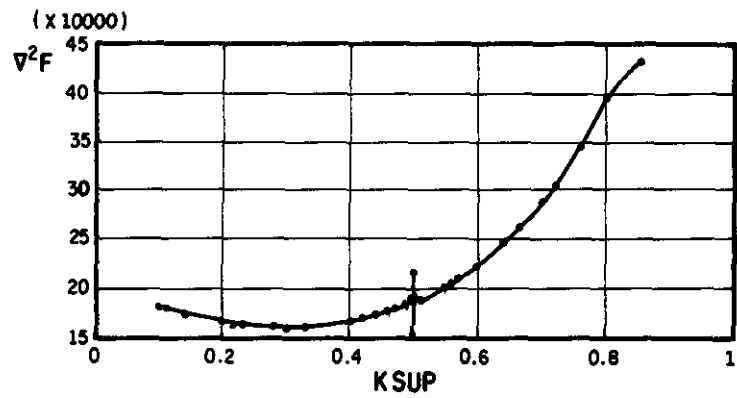


Figura IV.3 - Variações de F e ∇F no \mathbb{R}^2

A curva de $F(\theta)$ para KSUB, além de seu aspecto côncavo, aparece monotonamente decrescente, sem convexidade aparente, devido ao fato do valor correto de KSUB igual a 0.99985 ser próximo a 1.00. A curva para KPER apresenta-se sem descontinuidades e com variação razoavelmente linear por partes. Já com relação a CPER, nota-se a falta de sensibilidade da função objetivo para valores à esquerda do valor verdadeiro. No caso de ABSI verifica-se pouca sensibilidade do modelo para valores tanto à direita como à esquerda do valor verdadeiro. Finalmente, a curva para o parâmetro KSUP é a mais bem definida não oferecendo aparentemente quaisquer problemas para a fase de otimização.

As curvas $\nabla_{\theta_i}^2 F(\theta)$, derivadas segundas em relação a um dado parâmetro θ_i , foram levantadas e estão mostradas na Figura (IV.4). Elas foram obtidas numericamente a partir das curvas $\nabla_{\theta_i} F$. Não apresentam comportamentos anômalos. No entanto, mostram variações significativas nos seus valores, o que mostra nervosismo da superfície de resposta e que pode dificultar o processo de minimização.

Figura IV.4 - Variações de $\nabla^2 F$ no \mathbb{R}^2



IV.4- Comparação dos resultados obtidos pelos métodos de otimização de Rosen e Rosenbrock

Inicialmente, foi efetuada a comparação entre os dois métodos no caso em que apenas um parâmetro foi permitido variar, enquanto os demais receberam o valor arbitrado quando da geração do registro de vazões sintéticas. Para cada um dos métodos utilizados e para cada um dos parâmetros constatou-se o que acontecia quando se dava uma determinada variação percentual em relação à verdade no parâmetro livre, detectando-se o número de iterações que eram necessárias para que esse parâmetro convergisse. Os resultados para o caso em que apenas um parâmetro é permitido variar estão apresentados nas Tabelas (IV.1) a (IV.3).

Otimizações envolvendo todas as combinações possíveis de pares de parâmetros (Tabelas (IV.4) a (IV.13)) e alguns conjuntos de três (3) parâmetros (Tabelas (IV.14) a (IV.19)) são também apresentadas. Na Tabela (IV.20) é apresentada a otimização realizada envolvendo os 5 parâmetros do modelo (KSUP, KPER, KSUB, ABSI e CPER).

A notação adotada nas Tabelas (IV.1) a (IV.20) é mostrada abaixo:

- VV - valor verdadeiro do parâmetro
- VI - valor inicial do parâmetro
- VFRb - valor final do parâmetro pelo método de Rosenbrock
- VFR - valor final do parâmetro pelo método de Rosen
- VFORb- valor final da função objetivo pelo método de Rosenbrock
- VFOR - valor final da função objetivo pelo método de Rosen
- VIFO - valor inicial da função objetivo

Resta apresentar o critério de convergência, muitas vezes conhecido como regra de parada, adotado para os dois

métodos na condução dos trabalhos de otimização dos parâmetros do modelo. Na verdade, foram dois os critérios:

- 0.001 do valor do parâmetro
ou
- não variação do valor da função objetivo até a 4^a casa decimal

Observação: O valor final da função objetivo nunca é zero, pois foram utilizados valores de vazões sintéticas geradas com apenas 1 casa decimal de precisão.

Variação percentual	Algoritmo	Parâmetros			
		KSUP		KPER	
		Nº de iterações	Valores de referência	Nº de iterações	Valores de referência
10%			VV=0.50000 VI=0.45000		VV=0.05000 VI=0.04500
	Rosenbrock	21	VFRb=0.50000 VFORb=1.4997	20	VFRb=0.05000 VFORb=1.4997
	Rosen	14	VFR=0.50000 VFOR=1.4997	25	VFR=0.04999 VFOR=1.4997
20%			VV=0.50000 VI=0.40000		VV=0.05000 VI=0.04000
	Rosenbrock	23	VFRb=0.50000 VFORb=1.4997	22	VFRb=0.05000 VFORb=1.4997
	Rosen	2	VFR=0.50000 VFOR=1.4997	26	VFR=0.04990 VFOR=1.4982
30%			VV=0.50000 VI=0.35000		VV=0.05000 VI=0.03500
	Rosenbrock	29	VFRb=0.50000 VFORb=1.4997	20	VFRb=0.05000 VFORb=1.4997
	Rosen	5	VFR=0.50000 VFOR=1.4997	23	VFR=0.04999 VFOR=1.4985
40%			VV=0.50000 VI=0.30000		VV=0.05000 VI=0.03000
	Rosenbrock	21	VFRb=0.50000 VFORb=1.4997	19	VFRb=0.05000 VFORb=1.4997
	Rosen	18	VFR=0.50000 VFOR=1.4997	23	VFR=0.04997 VFOR=1.4986
50%			VV=0.50000 VI=0.25000		VV=0.05000 VI=0.02500
	Rosenbrock	18	VFRb=0.50000 VFORb=1.4997	25	VFRb=0.05000 VFORb=1.4997
	Rosen	9	VFR=0.50000 VFOR=1.4997	8	VFR=0.05000 VFOR=1.4997

Tabela IV.1- Otimização dos Parâmetros KSUP e KPER
Separadamente

Variação percentual	Algoritmo	Parâmetros			
		KSUB		ABSI	
		Nº de iterações	Valores de referência	Nº de iterações	Valores de referência
10%			VV=0.99985 VI=0.88890		VV=0.70000 VI=0.63000
	Rosenbrock	32	VFRb=0.99985 VFORb=1.4997	17	VFRb=0.70000 VFORb=1.4997
	Rosen	16	VFR=0.99985 VFOR=1.5174	14	VFR=0.69875 VFOR=1.4986
20%			VV=0.99985 VI=0.79990		VV=0.70000 VI=0.56000
	Rosenbrock	33	VFRb=0.99985 VFORb=1.4997	16	VFRb=0.70000 VFORb=1.4997
	Rosen	20	VFR=0.99985 VFOR=1.5174	16	VFR=0.69806 VFOR=1.4987
30%			VV=0.99985 VI=0.69990		VV=0.70000 VI=0.49000
	Rosenbrock	29	VFRb=0.99985 VFORb=1.4997	17	VFRb=0.70000 VFORb=1.4997
	Rosen	21	VFR=0.99985 VFOR=1.5174	17	VFR=0.69937 VFOR=1.4989
40%			VV=0.99985 VI=0.59990		VV=0.70000 VI=0.42000
	Rosenbrock	38	VFRb=0.99985 VFORb=1.4997	17	VFRb=0.70000 VFORb=1.4997
	Rosen	21	VFR=0.99985 VFOR=1.5174	13	VFR=0.69812 VFOR=1.4987
50%			VV=0.50000 VI=0.25000		VV=0.05000 VI=0.02500
	Rosenbrock	34	VFRb=0.99985 VFORb=1.4997	19	VFRb=0.70000 VFORb=1.4997
	Rosen	22	VFR=0.99985 VFOR=1.5174	13	VFR=0.69844 VFOR=1.4986

Tabela IV.2 - Otimização dos parâmetros KSUB e ABSI Separadamente

Variação percentual	Algoritmo	Parâmetro	
		CPER	
		Número de iterações	Valores de referência
10%			VV=0.25000 VI=0.22500
	Rosenbrock	23	VFRb=0.25000 VFORb=1.4997
	Rosen	4	VFR=0.25000 VFOR=1.4997
20%			VV=0.25000 VI=0.20000
	Rosenbrock	25	VFRb=0.25000 VFORb=1.4997
	Rosen	14	VFR=0.25000 VFOR=1.4997
30%			VV=0.25000 VI=0.17500
	Rosenbrock	24	VFRb=0.25000 VFORb=1.4997
	Rosen	8	VFR=0.25000 VFOR=1.4997
40%			VV=0.25000 VI=0.15000
	Rosenbrock	11	VFRb=0.25000 VFORb=1.4997
	Rosen	2	VFR=0.25000 VFOR=1.4997
50%			VV=0.25000 VI=0.12500
	Rosenbrock	19	VFRb=0.25000 VFORb=1.4997
	Rosen	14	VFR=0.25000 VFOR=1.4997

Tabela IV.3- Otimização do Parâmetro CPER

Variação percentual	Algoritmo	Parâmetros			
		KSUP	KPER	Nº de iterações	Valor da função objetivo
		Valores de referência	Valores de referência		
10%		VV=0.50000 VI=0.45000	VV=0.05000 VI=0.04500		VIFO=512.0572
	Rosenbrock	VFRb=0.50006	VFRb=0.04998	53	VFORb=1.4975
	Rosen	VFR=0.49921	VFR=0.05002	182	VFOR=1.5592
20%		VV=0.50000 VI=0.40000	VV=0.05000 VI=0.04000		VIFO=2328.99
	Rosenbrock	VFRb=0.50007	VFRb=0.04998	60	VFORb=1.4975
	Rosen	VFR=0.49927	VFR=0.05002	205	VFORb=1.5515
30%		VV=0.50000 VI=0.35000	VV=0.05000 VI=0.03500		VIFO=6130.632
	Rosenbrock	VFRb=0.50011	VFRb=0.04998	62	VFORb=1.4975
	Rosen	VFR=0.49929	VFR=0.04998	250	VFOR=1.5545
40%		VV=0.50000 VI=0.30000	VV=0.05000 VI=0.03000		VIFO=13126.32
	Rosenbrock	VFRb=0.50008	VFRb=0.04998	71	VFORb=1.4975
	Rosen	VFR=0.49922	VFR=0.05004	257	VFOR=1.5599
50%		VV=0.50000 VI=0.25000	VV=0.05000 VI=0.02500		VIFO=25425.95
	Rosenbrock	VFRb=0.50009	VFRb=0.04998	54	VFORb=1.4975
	Rosen	VFR=0.49888	VFR=0.04979	269	VFOR=1.5598

Tabela IV.4- Otimização dos Parâmetros KSUP e KPER

Variação percentual	Algoritmo	Parâmetros			
		KSUP	KSUB	Nº de iterações	Valor da função objetivo
		Valores de referência	Valores de referência		
10%		VV=0.50000 VI=0.45000	VV=0.99985 VI=0.88890		VIFO=44898.36
	Rosenbrock	VFRb=0.50003	VFRb=0.99985	117	VFORb=1.4990
	Rosen	VFR=0.49995	VFR=0.99985	29	VFOR=1.4996
20%		VV=0.50000 VI=0.40000	VV=0.99985 VI=0.79990		VIFO=47822.84
	Rosenbrock	VFRb=0.50003	VFRb=0.99985	84	VFORb=1.4990
	Rosen	VFR=0.50750	VFR=0.99985	26	VFOR=6.7463
30%		VV=0.50000 VI=0.35000	VV=0.99985 VI=0.69990		VIFO=49837.56
	Rosenbrock	VFRb=0.50003	VFRb=0.99985	69	VFORb=1.4990
	Rosen	VFR=0.50768	VFR=0.99985	29	VFOR=6.9942
40%		VV=0.50000 VI=0.30000	VV=0.99985 VI=0.59990		VIFO=51757.67
	Rosenbrock	VFRb=0.50003	VFRb=0.99985	136	VFORb=1.4990
	Rosen	VFR=0.50044	VFR=0.99985	38	VFOR=1.5146
50%		VV=0.50000 VI=0.25000	VV=0.99985 VI=0.49990		VIFO=53941.26
	Rosenbrock	VFRb=0.50003	VFRb=0.99985	85	VFORb=1.4990
	Rosen	VFR=0.50473	VFR=0.99985	39	VFOR=3.5644

Tabela IV.5- Otimização dos Parâmetros KSUP e KSUB

Variação percentual	Algoritmo	Parâmetros			
		KSUP	ABSI	N ^o de iterações	Valor da função objetivo
		Valores de referência	Valores de referência		
10%		VV=0.50000 VI=0.45000	VV=0.70000 VI=0.63000		VIFO=251.5508
	Rosenbrock	VFRb=0.50008	VFRb=0.69811	50	VFORb=1.4981
	Rosen	VFR=0.49995	VFR=0.68635	265	VFOR=1.5689
20%		VV=0.50000 VI=0.40000	VV=0.70000 VI=0.56000		VIFO=987.2876
	Rosenbrock	VFRb=0.50007	VFRb=0.69839	60	VFORb=1.4981
	Rosen	VFR=0.50750	VFR=0.60000	96	VFOR=6.0950
30%		VV=0.50000 VI=0.35000	VV=0.70000 VI=0.49000		VIFO=2198.508
	Rosenbrock	VFRb=0.50007	VFRb=0.69822	57	VFORb=1.4981
	Rosen	VFR=0.50768	VFR=0.49692	14	VFOR=21.3191
40%		VV=0.50000 VI=0.30000	VV=0.70000 VI=0.42000		VIFO=3890.150
	Rosenbrock	VFRb=0.50008	VFRb=0.69800	37	VFORb=1.4981
	Rosen	VFR=0.50465	VFR=0.43412	18	VFOR=36.1385
50%		VV=0.50000 VI=0.25000	VV=0.70000 VI=0.35000		VIFO=6062.446
	Rosenbrock	VFRb=0.50009	VFRb=0.69816	55	VFORb=1.4981
	Rosen	VFR=0.50932	VFR=0.43807	54	VFOR=35.0765

Tabela IV.6- Otimização dos Parâmetros KSUP e ABSI

Variação percentual	Algoritmo	Parâmetros			
		KSUP	CPER	Nº de iterações	Valor da função objetivo
		Valores de referência	Valores de referência		
10%		VV=0.50000 VI=0.45000	VV=0.25000 VI=0.22500		VIFO=180.5308
	Rosenbrock	VFRb=0.50013	VFRb=0.25024	59	VFORb=1.4973
	Rosen	VFR=0.50006	VFR=0.25015	29	VFOR=1.4976
20%		VV=0.50000 VI=0.40000	VV=0.25000 VI=0.20000		VIFO=684.0966
	Rosenbrock	VFRb=0.50010	VFRb=0.25020	66	VFORb=1.4973
	Rosen	VFR=0.50750	VFR=0.25014	36	VFOR=1.4976
30%		VV=0.50000 VI=0.35000	VV=0.25000 VI=0.17500		VIFO=1472.180
	Rosenbrock	VFRb=0.50011	VFRb=0.25021	80	VFORb=1.4973
	Rosen	VFR=0.50768	VFR=0.25024	44	VFOR=1.4974
40%		VV=0.50000 VI=0.30000	VV=0.25000 VI=0.15000		VIFO=2514.023
	Rosenbrock	VFRb=0.50011	VFRb=0.25025	71	VFORb=1.4973
	Rosen	VFR=0.50009	VFR=0.25019	44	VFOR=1.4974
50%		VV=0.50000 VI=0.25000	VV=0.25000 VI=0.12500		VIFO=6062.446
	Rosenbrock	VFRb=0.50012	VFRb=0.25024	77	VFORb=1.4973
	Rosen	VFR=0.50014	VFR=0.25023	44	VFOR=1.4974

Tabela IV.7- Otimização dos Parâmetros KSUP e CPER

Variação percentual	Algoritmo	Parâmetros			
		KPER	KSUB	Nº de iterações	Valor da função objetivo
		Valores de referência	Valores de referência		
10%		VV=0.05000 VI=0.04500	VV=0.99985 VI=0.88890		VIFO=44303.60
	Rosenbrock	VFRb=0.04998	VFRb=0.99985	113	VFORb=1.4979
	Rosen	VFR=0.04656	VFR=0.89269	8	VFOR=44328.13
20%		VV=0.05000 VI=0.04000	VV=0.99985 VI=0.79990		VIFO=46423.78
	Rosenbrock	VFRb=0.04998	VFRb=0.99985	99	VFORb=1.4979
	Rosen	VFR=0.04156	VFR=0.80197	8	VFOR=46531.01
30%		VV=0.05000 VI=0.03500	VV=0.99985 VI=0.69990		VIFO=47694.80
	Rosenbrock	VFRb=0.04998	VFRb=0.99985	104	VFORb=1.4979
	Rosen	VFR=0.03344	VFR=0.70085	8	VFOR=47793.11
40%		VV=0.05000 VI=0.03000	VV=0.99985 VI=0.59990		VIFO=49249.19
	Rosenbrock	VFRb=0.04998	VFRb=0.99985	140	VFORb=1.4979
	Rosen	VFR=0.02844	VFR=0.60004	8	VFOR=49738.4
50%		VV=0.05000 VI=0.02500	VV=0.99985 VI=0.49990		VIFO=52023.21
	Rosenbrock	VFRb=0.04998	VFRb=0.99985	130	VFORb=1.4979
	Rosen	VFR=0.03594	VFR=0.49999	10	VFOR=49030.9

Tabela IV.8- Otimização dos Parâmetros KPER e KSUB

Variação percentual	Algoritmo	Parâmetros			
		KPER	ABSI	N ^o de iterações	Valor da função objetivo
		Valores de referência	Valores de referência		
10%		VV=0.05000 VI=0.04500	VV=0.70000 VI=0.63000		VIFO=176.5388
	Rosenbrock	VFRb=0.04994	VFRb=0.70456	78	VFORb=1.5050
	Rosen	VFR=0.05125	VFR=0.63003	6	VFOR=3.2234
20%		VV=0.05000 VI=0.04000	VV=0.70000 VI=0.56000		VIFO=883.7009
	Rosenbrock	VFRb=0.04998	VFRb=0.69987	174	VFORb=1.4981
	Rosen	VFR=0.05271	VFR=0.57791	12	VFOR=11.3995
30%		VV=0.05000 VI=0.03500	VV=0.70000 VI=0.49000		VIFO=2547.668
	Rosenbrock	VFRb=0.04994	VFRb=0.70455	125	VFORb=1.5050
	Rosen	VFR=0.05240	VFR=0.50795	4	VFOR=5.8785
40%		VV=0.05000 VI=0.03000	VV=0.70000 VI=0.42000		VIFO=5939.500
	Rosenbrock	VFRb=0.04994	VFRb=0.70447	164	VFORb=1.5050
	Rosen	VFR=0.05503	VFR=0.41828	8	VFOR=25.0225
50%		VV=0.05000 VI=0.02500	VV=0.70000 VI=0.35000		VIFO=12293.26
	Rosenbrock	VFRb=0.04998	VFRb=0.69982	141	VFORb=1.4981
	Rosen	VFR=0.05315	VFR=0.34832	13	VFOR=14.7270

Tabela IV.9- Otimização dos Parâmetros KPER e ABSI

Variação percentual	Algoritmo	Parâmetros			
		KPER	CPER	Nº de iterações	Valor da função objetivo
		Valores de referência	Valores de referência		
10%		VV=0.05000 VI=0.04500	VV=0.25000 VI=0.22500		VIFO=34.0892
	Rosenbrock	VFRb=0.04996	VFRb=0.24979	462	VFORb=1.4982
	Rosen	VFR=0.04812	VFR=0.22482	7	VFOR=6.4296
20%		VV=0.05000 VI=0.04000	VV=0.25000 VI=0.20000		VIFO=192.0930
	Rosenbrock	VFRb=0.04995	VFRb=0.24972	797	VFORb=1.4983
	Rosen	VFR=0.04468	VFR=0.19976	10	VFOR=8.5484
30%		VV=0.05000 VI=0.03500	VV=0.25000 VI=0.17500		VIFO=635.4053
	Rosenbrock	VFRb=0.04996	VFRb=0.24979	915	VFORb=1.4982
	Rosen	VFR=0.04335	VFR=0.17856	15	VFOR=14.6304
40%		VV=0.05000 VI=0.03000	VV=0.25000 VI=0.15000		VIFO=1699.317
	Rosenbrock	VFRb=0.04997	VFRb=0.24988	1013	VFORb=1.4981
	Rosen	VFR=0.04094	VFR=0.15003	10	VFOR=24.6335
50%		VV=0.05000 VI=0.02500	VV=0.25000 VI=0.12500		VIFO=4086.571
	Rosenbrock	VFRb=0.04997	VFRb=0.24989	1141	VFORb=1.4981
	Rosen	VFR=0.03906	VFR=0.12491	13	VFOR=35.3534

Tabela IV.10- Otimização dos Parâmetros KPER e CPER

Variação percentual	Algoritmo	Parâmetros			
		KSUB	ABSI	Nº de iterações	Valor da função objetivo
		Valores de referência	Valores de referência		
10%		VV=0.99985 VI=0.88890	VV=0.70000 VI=0.63000		VIFO=45411.47
	Rosenbrock	VFRb=0.99985	VFRb=0.69890	105	VFORb=1.4985
	Rosen	VFR=0.99984	VFR=0.77714	30	VFOR=3.9633
20%		VV=0.99985 VI=0.79990	VV=0.70000 VI=0.56000		VIFO=48726.82
	Rosenbrock	VFRb=0.99985	VFRb=0.69901	94	VFORb=1.4985
	Rosen	VFR=0.99984	VFR=0.75474	30	VFOR=2.7548
30%		VV=0.99985 VI=0.69990	VV=0.70000 VI=0.49000		VIFO=50685.78
	Rosenbrock	VFRb=0.99985	VFRb=0.69901	80	VFORb=1.4985
	Rosen	VFR=0.99988	VFR=0.17856	16	VFOR=21.3509
40%		VV=0.99985 VI=0.59990	VV=0.70000 VI=0.42000		VIFO=52072.02
	Rosenbrock	VFRb=0.99985	VFRb=0.69911	143	VFORb=1.4985
	Rosen	VFR=0.99990	VFR=0.34183	19	VFOR=53.0643
50%		VV=0.99985 VI=0.49990	VV=0.70000 VI=0.35000		VIFO=53190.60
	Rosenbrock	VFRb=0.99985	VFRb=0.69880	131	VFORb=1.4985
	Rosen	VFR=0.99990	VFR=0.27931	10	VFOR=72.9267

Tabela IV.11 - Otimização dos Parâmetros KSUB e ABSI

Variação percentual	Algoritmo	Parâmetros			
		KSUB	CPER	N ^o de iterações	Valor da função objetivo
		Valores de referência	Valores de referência		
10%		VV=0.99985 VI=0.88890	VV=0.25000 VI=0.22500		VIFO=44665.58
	Rosenbrock	VFRb=0.99985	VFRb=0.25012	115	VFORb=1.4980
	Rosen	VFR=0.99985	VFR=0.25332	43	VFOR=2.0330
20%		VV=0.99985 VI=0.79990	VV=0.25000 VI=0.20000		VIFO=46933.84
	Rosenbrock	VFRb=0.99985	VFRb=0.25015	91	VFORb=1.4980
	Rosen	VFR=0.80545	VFR=0.20825	13	VFOR=49926.44
30%		VV=0.99985 VI=0.69990	VV=0.25000 VI=0.17500		VIFO=47736.19
	Rosenbrock	VFRb=0.99985	VFRb=0.25016	91	VFORb=1.4980
	Rosen	VFR=0.70255	VFR=0.17656	8	VFOR=47739.62
40%		VV=0.99985 VI=0.59990	VV=0.25000 VI=0.15000		VIFO=47889.03
	Rosenbrock	VFRb=0.99985	VFRb=0.25014	141	VFORb=1.4980
	Rosen	VFR=0.60142	VFR=0.15156	8	VFOR=47906.81
50%		VV=0.99985 VI=0.49990	VV=0.25000 VI=0.12500		VIFO=47772.87
	Rosenbrock	VFRb=0.99985	VFRb=0.25015	114	VFORb=1.4980
	Rosen	VFR=0.50089	VFR=0.12656	8	VFOR=47793.09

Tabela IV.12- Otimização dos Parâmetros KSUB e ABSI

Variação percentual	Algoritmo	Parâmetros			
		ABSI	CPER	Nº de iterações	Valor da função objetivo
		Valores de referência	Valores de referência		
10%		VV=0.70000 VI=0.63000	VV=0.25000 VI=0.22500		VIFO=20.6365
	Rosenbrock	VFRb=0.69964	VFRb=0.25012	122	VFORb=1.4982
	Rosen	VFR=0.62819	VFR=0.24366	10	VFOR=1.9246
20%		VV=0.70000 VI=0.56000	VV=0.25000 VI=0.20000		VIFO=73.4631
	Rosenbrock	VFRb=0.69978	VFRb=0.25013	298	VFORb=1.4982
	Rosen	VFR=0.55648	VFR=0.23733	7	VFOR=3.1164
30%		VV=0.70000 VI=0.49000	VV=0.25000 VI=0.17500		VIFO=153.7717
	Rosenbrock	VFRb=0.69963	VFRb=0.25012	257	VFORb=1.4982
	Rosen	VFR=0.48420	VFR=0.23096	10	VFOR=5.0665
40%		VV=0.70000 VI=0.42000	VV=0.25000 VI=0.15000		VIFO=254.2565
	Rosenbrock	VFRb=0.69961	VFRb=0.25012	341	VFORb=1.4982
	Rosen	VFR=0.41226	VFR=0.22461	8	VFOR=8.0190
50%		VV=0.70000 VI=0.35000	VV=0.25000 VI=0.12500		VIFO=372.0464
	Rosenbrock	VFRb=0.69966	VFRb=0.25012	204	VFORb=1.4982
	Rosen	VFR=0.34244	VFR=0.21749	14	VFOR=11.4572

Tabela IV.13- Otimização dos Parâmetros ABSI e CPER

Variação percentual	Algoritmo	Parâmetros				
		KSUP	KPER	KSUB	Número de iterações	Valor função objetivo
		Valores de referência	Valores de referência	Valores de referência		
10%	Rosenbrock	VV=0.50000 VI=0.45000 VFRb=0.50000	VV=0.05000 VI=0.04500 VFRb=0.04998	VV=0.99985 VI=0.88890 VFRb=0.99985	186	VIFO=44321.06 VFORb=1.4974
	Rosen	VFR=0.45000	VFR=0.04656	VFR=0.89332	8	VFOR=44265.04
20%	Rosenbrock	VV=0.50000 VI=0.40000 VFRb=0.50006	VV=0.05000 VI=0.04000 VFRb=0.04998	VV=0.99985 VI=0.79990 VFRb=0.99985	155	VIFO=47255.88 VFORb=1.4974
	Rosen	VFR=0.40000	VFR=0.05250	VFR=0.87055	5	VFOR=46277.14
30%	Rosenbrock	VV=0.50000 VI=0.35000 VFRb=0.50009	VV=0.05000 VI=0.03500 VFRb=0.04998	VV=0.99985 VI=0.69990 VFRb=0.99985	144	VIFO=50702.58 VFORb=1.4974
	Rosen	VFR=0.35000	VFR=0.03344	VFR=0.70032	8	VFOR=52218.57
40%	Rosenbrock	VV=0.50000 VI=0.30000 VFRb=0.50008	VV=0.05000 VI=0.03000 VFRb=0.04998	VV=0.99985 VI=0.59990 VFRb=0.99985	218	VIFO=56478.97 VFORb=1.4974
	Rosen	VFR=0.30000	VFR=0.02844	VFR=0.59999	8	VFOR=57800.93
50%	Rosenbrock	VV=0.50000 VI=0.25000 VFRb=0.50008	VV=0.05000 VI=0.02500 VFRb=0.04998	VV=0.99985 VI=0.49990 VFRb=0.99985	526	VIFO=66604.79 VFORb=1.4974
	Rosen	VFR=0.25021	VFR=0.03750	VFR=0.49993	5	VFOR=55860.60

Tabela IV.14- Otimização dos Parâmetros KSUP, KPER e KSUB

Os menores valores obtidos para os índices de concentricidade corresponderam aos pares (KSUP, KSUB), (KPER, KSUB), (ABSI, KSUB) e (CPER, KSUB). Repare-se que o parâmetro que aparece em todos esses pares é KSUB. Levando-se em conta o fato de que a todo par em que KSUB está presente está associado um baixo índice de concentricidade, pode-se concluir pelo aspecto de dominância de KSUB em relação aos demais parâmetros.

Esse último resultado ratifica de certa forma a experiência prática dos hidrólogos no processo de calibração manual do modelo SMAP. O primeiro parâmetro submetido a ajustamento nesse tipo de processo é KSUB.

Repare-se que, no caso particular do modelo SMAP, os índices de concentricidade estão a indicar um caminho para futuras alternativas na calibração do modelo SMAP. Esse caminho adquire consistência em vista do aspecto de dominância de alguns parâmetros do modelo.

Já com relação ao índice de sensibilidade, os valores assumidos pelos parâmetros KSUP e KSUB, que correspondem aos coeficientes de recessão dos reservatórios superficial e subterrâneo, foram bem próximos a 1.00. Esses valores indicam que esses parâmetros são essenciais no modelo, uma vez que seus efeitos não podem ser substituídos pelos demais. Se examinarmos os modelos chuva-vazão em geral, notaremos a presença de parâmetros associados à representação da recessão dos reservatórios que compõe esses modelos. Sabe-se, pois, intuitivamente da importância desses tipos de parâmetros. Os resultados obtidos comprovam de uma maneira mais formal essa intuição que os hidrólogos possuem.

Em uma posição intermediária situa-se o parâmetro ABSI, que está ligado à retenção de água na superfície do solo.

Ao contrário, CPER é o que apresenta o maior valor para o índice de sensibilidade. O valor alto indica que esse parâmetro é o que pode ser mais facilmente substituído ou mantido constante. Em outras palavras, significa que tende a ser um parâmetro desnecessário.

O parâmetro KPER que apresenta o segundo valor mais alto para o índice de sensibilidade possivelmente está afetado pelo comportamento de CPER. Note-se que esses 2 parâmetros estão atuando com grande proximidade, ambos presentes na equação de percolação do modelo.

Esses altos valores para o índice de sensibilidade estão a indicar a possibilidade de se fazer uso da técnica de reparametrização (SOROOSHIAN e GUPTA (1985)).

Tendo em vista esse fato, planejou-se a forma com que seria atacado o problema. Primeiramente, gerou-se a superfície de resposta relativa aos parâmetros KPER e CPER para a amostra adotada. Duas outras amostras foram geradas nas quais o valor inicialmente adotado como verdadeiro para CPER foi alterado. Além dessas amostras, uma outra foi utilizada onde os valores dos parâmetros KSUP, KPER, KSUB, ABSI e CPER foram modificados. Para todas essas soluções repetiu-se o traçado da superfície KPER X CPER.

Essas 4 superfícies foram escolhidas para verificar o efeito de se mudar a solução, ou seja, verificar a estabilidade de conformação da superfície de resposta do modelo.

Abaixo estão designadas as amostras utilizadas para plotagem das superfícies de resposta:

Solução 1 - adotada nessa dissertação

KSUP=0.5; KPER=0.05; KSUB=0.99985; ABSI=0.70; CPER=0.25;
NSAT=300

Solução 2

KSUP=0.5; KPER=0.05; KSUB=0.99985; ABSI=0.70; CPER=0.50;
NSAT=300

Solução 3

KSUP=0.5; KPER=0.05; KSUB=0.99985; ABSI=0.70; CPER=0.70;
NSAT=300

Solução 4

KSUP=0.8; KPER=0.15; KSUB=0.993; ABSI=0.70; CPER=0.50;
NSAT=300;

As superfícies geradas para essas amostras estão apresentadas nas Figuras (V.3) a (V.6). Elas mostram que, no caso do modelo SMAP, não pode-se esperar por superfícies de resposta bem comportadas com círculos concêntricos ou elipses pouco deformadas (autovalores da matriz de identificabilidade estrutural do modelo não muito diferentes).

Observações cuidadosas permitem constatar que existe um certo paralelismo nas curvas de resposta do modelo para o par (KPER, CPER), o que indica uma certa interação. Atente-se para o fato de que pode existir mais de uma direção na orientação das curvas de igual valor da função objetivo na região de viabilidade definida conjuntamente por KPER e CPER, o que leva a concluir que há uma relação complexa entre esses parâmetros.

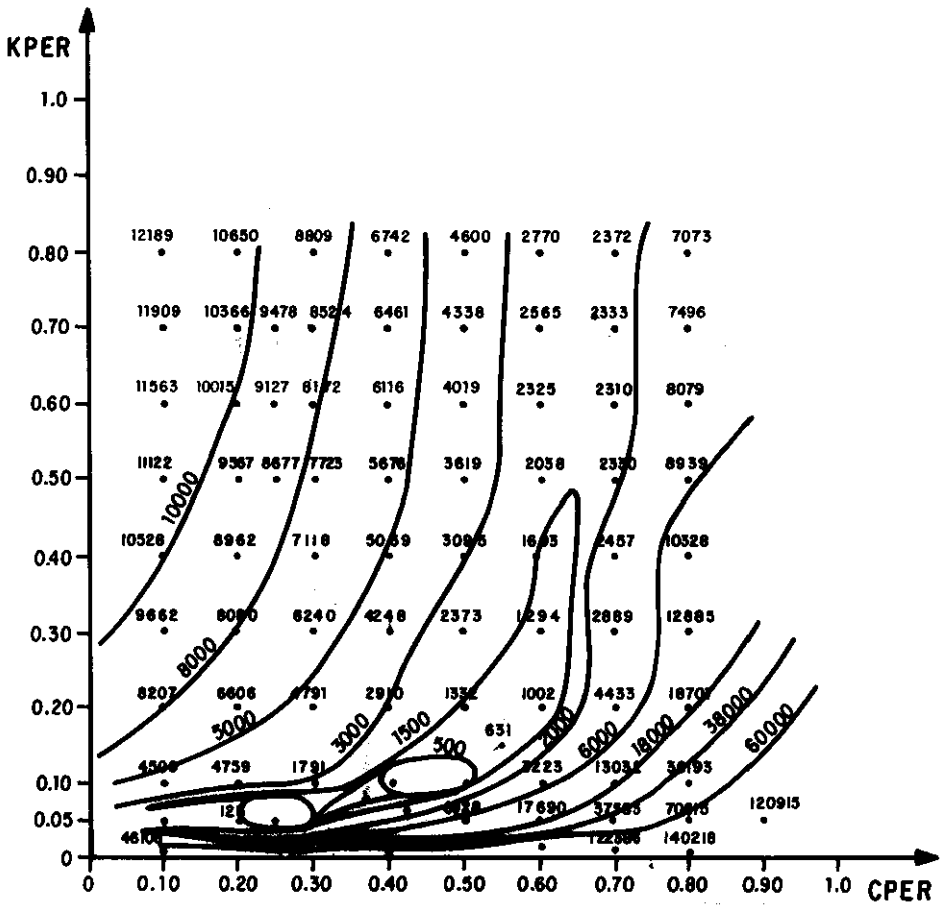


Figura V.3 - Superfície de Resposta para a Solução 1

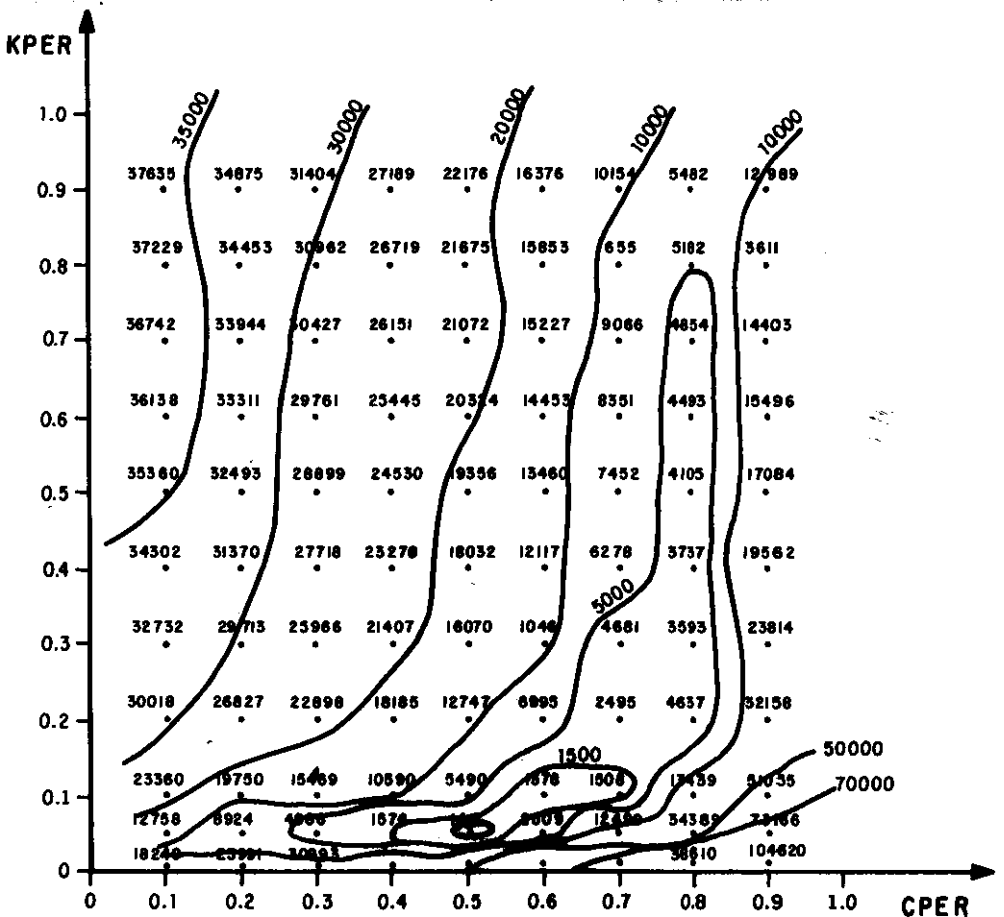


Figura V.4 - Superfície de Resposta para a Solução 2

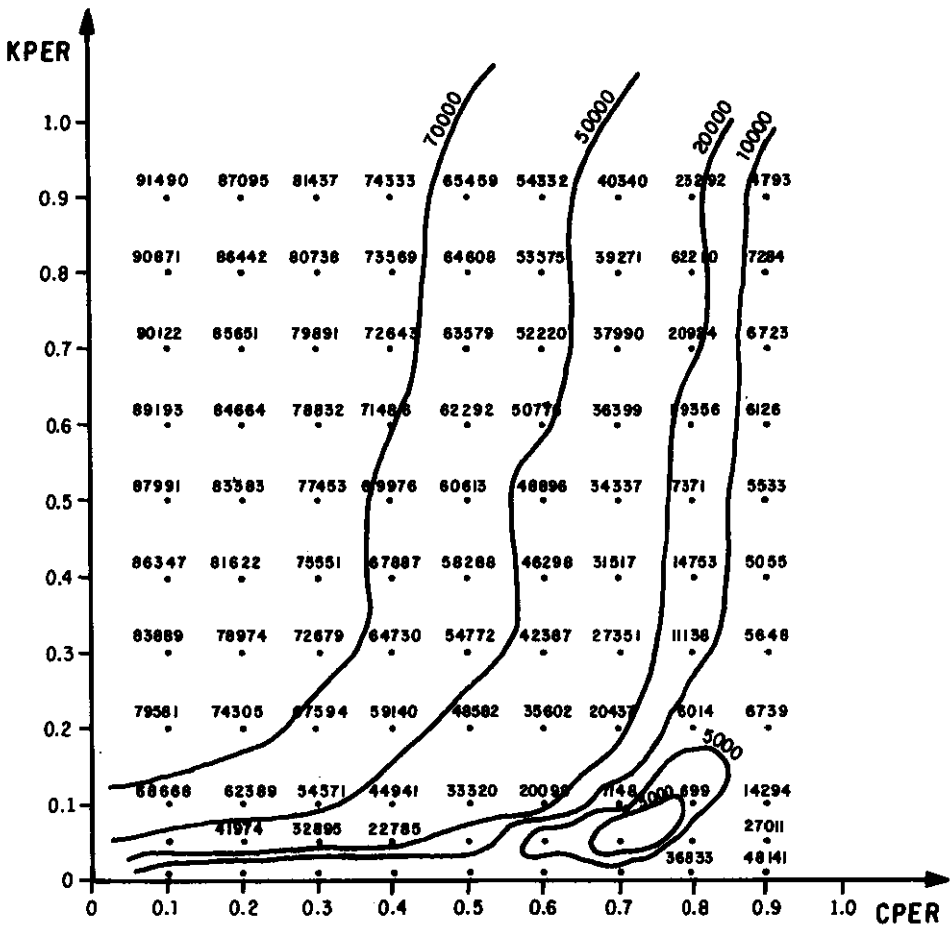


Figura V.5 - Superfície de Resposta para a Solução 3

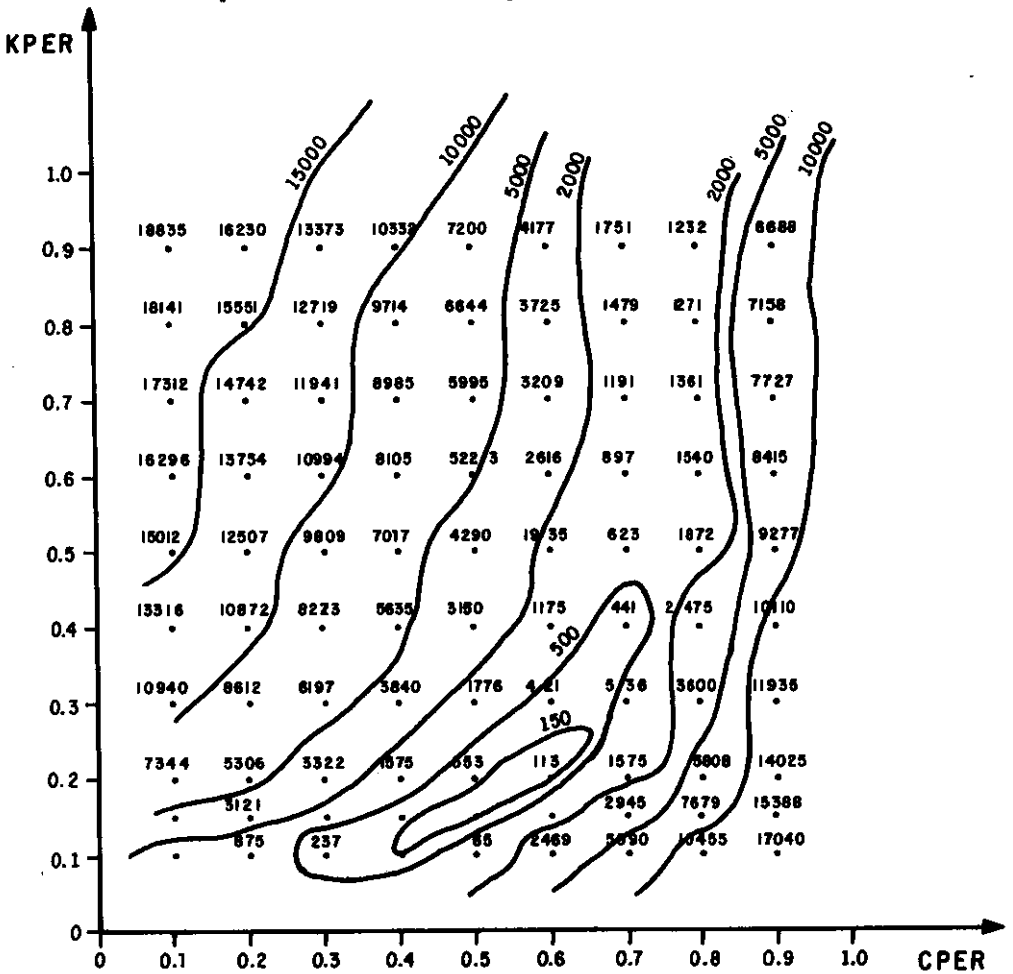


Figura V.6 - Superfície de Resposta para a Solução 4

De qualquer maneira, as superfícies de resposta não são nada uniformes no domínio de validade dos parâmetros. No caso particular da amostra do estudo (Figura V.3), detecta-se inclusive a presença de dois mínimos bastante próximos. Percebe-se a importância do ponto inicial fornecido para começo do trabalho de otimização automática por qualquer método que faz uso de derivadas. Conforme a localização desse ponto, poderemos estar em uma região de maior ou menor sensibilidade do modelo, o que acarretará o menor ou maior sucesso do método. Mais ainda, conforme a região, aumenta a probabilidade de convergência a um dos dois mínimos.

Uma das constatações que foi feita nessa dissertação, a partir desses resultados, reside exatamente no fato de porquê dos métodos diretos terem sido, ao longo dos últimos anos, mais correntemente utilizados em conjunto com modelos hidrológicos. Em outras áreas de aplicação de processos de otimização, o uso de métodos diretos não se justifica, já que, nesses casos, se dispõe de uma função objetivo contínua com pelo menos derivadas primeiras e segundas contínuas. Essa situação não acontece em modelos hidrológicos do tipo chuva-vazão.

Considerou-se, então, a idéia de se obter uma função de reparametrização de tal forma que o processo de otimização não fosse perturbado pelo comportamento inadequado de um subconjunto de parâmetros. Conforme vimos na Tabela (V.2), os parâmetros KPER e CPER, pelo cálculo do índice de sensibilidade, foram apontados como de baixa identificabilidade e, portanto, fatores prejudiciais ao processo. Assim o que se tentou fazer foi procurar parâmetros, funções de KPER e CPER, que pudessem ser otimizados em lugar dos próprios KPER e CPER. No entanto, não se conseguiu obter por simples algebrismo matemático uma função que satisfizesse nossos interesses. Esse resultado estava, de alguma forma, sendo previsto, tendo em vista a conformação da superfície de resposta exibida

na Figura (V.3).

Identificou-se, isso sim, a necessidade de um estudo maior do modelo na sua estrutura, de forma que se pudesse fazer uma otimização inteligente do modelo. De qualquer modo, a análise feita com respeito aos valores obtidos para os índices de concentricidade associados ao modelo SMAP caracteriza a importância maior de alguns parâmetros específicos desse modelo. Registra-se, nesse ponto, a possibilidade de se trilhar, na área de calibração de modelos, caminhos mais inteligentes para obtenção dos parâmetros ditos ótimos. Esses caminhos mais inteligentes podem ser obtidos a partir de processos determinísticos ou por meio do uso de sistemas especialistas que estão começando a ser pesquisados e desenvolvidos em várias áreas do conhecimento.

Convém apresentar nesse ponto os resultados obtidos por SOROOSHIAN e GUPTA (1985).

O modelo utilizado foi o SIXPAR. O SIXPAR é uma versão simplificada do modelo SMA-NWSRFS do U.S. National Weather Service. Uma apresentação esquemática do modelo SIXPAR é apresentada abaixo na Figura (V.7).

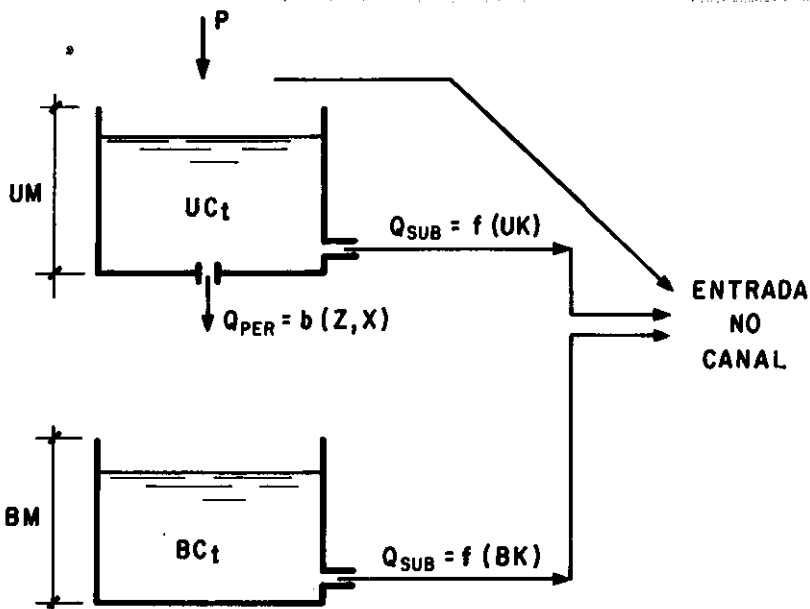


Figura V.7 - Esquema do Modelo SIXPAR

Os parâmetros do modelo são:

- UM - máxima capacidade de armazenamento da zona superior do solo
- UK - constante de recessão da zona superior
- BM - máxima capacidade de armazenamento da zona inferior do solo
- BK - constante de recessão da zona inferior
- Z, X - parâmetros da equação de percolação

São indicados ainda no esquema:

- P - precipitação
- U_t - conteúdo de água da zona superior
- B_t - conteúdo de água da zona inferior

Observe-se que a evaporação foi desprezada. Basicamente as equações do modelo são as seguintes:

Equação de percolação

$$Q_{PER} = \beta [1 + Z (L_t)^X] U_t \quad (V. 28)$$

onde:

$$\beta = BM * BK$$

$$L_t = (BM - B_t) / BM$$

$$U_t = U_t / UM$$

Equação de escoamento superficial

$$Q_{SUP} = UK * U_t \quad (V. 29)$$

Equação de escoamento subterrâneo

$$Q_{SUB} = BK * B_t \quad (V. 30)$$

Em GUPTA e SOROOSHIAN (1983) é estudada a equação de percolação do modelo SIXPAR. Os autores verificam que os parâmetros Z e X pertencentes a essa equação são

responsáveis por problemas que ocorrem no processo de otimização. Fazem essa constatação a partir da superfície de resposta gerada por esse par de parâmetros. Propõem, então, uma função de reparametrização. SOROOSHIAN e GUPTA (1985) testam essa função de reparametrização. Ela consiste na introdução de um novo parâmetro A, função dos parâmetros do modelo, em lugar do parâmetro Z.

$$A = \left[\frac{UM - BM \times BK}{BM \times BK \times Z} \right]^{1/X} \quad (V.31)$$

Para o caso estudado pelos autores, os valores verdadeiros dos parâmetros sem uso da função de reparametrização são:

$$UM = 10 \text{ (L)} ; UK = 0.5 \text{ (T}^{-1}\text{)} ; BM = 20 \text{ (L)} ; BK = 0.2 \text{ (T}^{-1}\text{)} ; Z = 50 \text{ (adimensional)} ; X = 3 \text{ (adimensional)}$$

L - unidade de comprimento

T - unidade de tempo

Com a função de reparametrização o conjunto de parâmetros torna-se o seguinte:

$$UM = 10 \text{ (L)} ; UK = 0.5 \text{ (T}^{-1}\text{)} ; BM = 20 \text{ (L)} ; BK = 0.2 \text{ (T}^{-1}\text{)} ; A = 0.3107 \text{ (adimensional)} ; X = 3 \text{ (adimensional)}$$

Os índices de sensibilidade para os grupos de parâmetros original e modificado são apresentados nas Tabelas (V.3) e (V.4), respectivamente.

Parâmetro	Índice de Sensibilidade
UM	4.866
UK	3.455
BM	5.154
BK	4.200
Z	19.914
X	20.149

Tabela V.3 - Índice de Sensibilidade para o Grupo de Parâmetros Original

Parâmetro	Índice de Sensibilidade
UM	4.803
UK	3.455
BM	5.089
BK	4.200
A	2.162
X	1.959

Tabela V.4 - Índice de Sensibilidade para o Grupo de Parâmetros Modificado

Nota-se que houve uma melhora no índice de sensibilidade. Para provar a melhora e a eficiência da técnica os autores apresentam um quadro comparativo de uma otimização realizada, conforme mostra a Tabela (V.5).

	Grupo de parâmetros original						FOBJ	N ^o de iterações
	UM	UK	BM	BK	Z	X		
Início	10.000	0.500	20.000	0.200	45.000	3.500	0.33	18
Fim	9.635	0.509	19.767	0.208	45.010	3.002	0.01	

	Grupo de parâmetros modificado						FOBJ	N ^o de iterações
	UM	UK	BM	BK	A	X		
Início	10.000	0.500	20.000	0.200	0.3784	3.500	0.33	5
Fim	10.000	0.500	20.000	0.200	0.3107	3.000	10 ⁻⁷	

Tabela V.5 - Quadro Comparativo entre o Grupo de Parâmetros Original e Modificado

Em que pese o resultado obtido na Tabela (V.5) ter sido satisfatório, é importante reparar que o teste comparativo feito não é suficiente para provar que a metodologia utilizada é a melhor forma de se combater os problemas advindos do processo de calibração.

Não se deve excluir essa linha de pesquisa, mas é necessário registrar alguns aspectos pertinentes a essa abordagem. A técnica de reparametrização foi aplicada a uma simulação específica, onde apenas dois parâmetros tiveram seus valores alterados em relação aos ditos verdadeiros. Outra ressalva que deve ser feita é que é desejável que a reparametrização tenha uma base física. Não se recomenda, pois, que reparametrizações sejam feitas por uso de simples algebrismos matemáticos ou processos numéricos particulares.

No caso do SIXPAR foi possível encontrar uma base física para introduzir um reparametrização no modelo. O reservatório superior do SIXPAR possuía uma certa

quantidade de água possível de ser repassada ao reservatório inferior. O reservatório inferior, por sua vez, admitia receber água até um certo nível. Pela composição do que um reservatório poderia fornecer e o outro receber, GUPTA e SOROOSHIAN (1983) chegaram a uma equação de reparametrização.

Já no caso do modelo SMAP, esse tipo de reparametrização não serviria, uma vez que o reservatório inferior, que simula a zona profunda do solo, não possuía um limite físico para absorção de água. Toda a água que é enviada a esse reservatório é aceita.

Com base nos problemas encontrados durante as otimizações feitas e, em parte, não satisfeitos em virtude da falta de uma solução para a questão, decidiu-se fazer uma análise mais apurada dos resultados das otimizações com 2 e 3 parâmetros apresentados nas Tabelas (IV.4) a (IV.19).

Primeiramente, atente-se para a observação que foi feita no capítulo IV com relação ao fato de que os maiores problemas nas otimizações envolvendo o método de Rosen se deram com os pares de parâmetros (KSUB,CPER) e (KPER,KSUB), ou seja, envolve um dos dois (2) parâmetros do processo de percolação com o parâmetro associado à recessão do aquífero.

Os parâmetros KPER e CPER aparecem na equação do modelo que controla a passagem de água do reservatório do modelo que simula a zona não saturada do solo para o reservatório que simula a zona saturada. A equação é a seguinte:

$$QPER = (NSOL - CPER*NSAT)* KPER* NSOL/NSAT \quad (V.32)$$

Uma explicação para os problemas enfrentados pode residir justamente no fato da dependência mais forte que

existe entre os parâmetros KPER e CPER que aparecem na equação (V.32).

A interação entre os parâmetros KPER e CPER pode ser constatada a partir da análise dos resultados computacionais mostrados na Tabela (IV.10) (otimização conjunta de KPER e CPER) e na Tabela (IV.16) (otimização conjunta de KSUP, KPER e CPER). Uma análise cuidadosa permite que se verifique uma compensação de efeitos por parte de KPER e CPER no que diz respeito à vazão gerada pelo modelo.

Assim, se submetermos o modelo SMAP (Figura III.1) a uma análise física podemos constatar o que acontece com a vazão QPER (vazão associada à quantidade de água que pode passar do reservatório que simula a zona superficial do solo para o reservatório que simula a zona profunda) quando os parâmetros KPER e CPER variam na equação (V.32).

Se, por exemplo, CPER diminui, então QPER aumenta. Nesse caso, como mostram as Tabelas (IV.10) e (IV.16), KPER diminui. Quando KPER diminui, QPER também diminui. Demonstra-se nitidamente, pois, a compensação de efeitos existente na atuação dos parâmetros KPER e CPER dentro do modelo.

Esse resultado está novamente a indicar a necessidade de reformulação do modelo, aspecto já levantado no capítulo IV.

A vazão QPER, por sua vez, aumenta o nível do reservatório subterrâneo sob o qual ocorre a atuação do coeficiente de recessão KSUB. Esta forte ligação entre os parâmetros KPER e CPER com KSUB e a ocorrência de dificuldades no processo de otimização permitem supor a existência de uma interação entre esses mesmos parâmetros.

Vamos nos ater agora à análise de qual ou quais os parâmetros foram responsáveis pelo sucesso ou insucesso de uma dada otimização. As Tabelas (V.6) e (V.7) apresentam esses resultados.

Parâmetros calibrados	Diferenças percentuais entre os valores verdadeiros e iniciais dos parâmetros				
	10%	20%	30%	40%	50%
KSUP, KPER	S	S	S	S	S
KSUP, KSUB	S	S	S	S	S
KSUP, ABSI	S	A	A	A	A
KSUP, CPER	S	S	S	S	S
KPER, KSUB	I	I	I	I	I
KPER, ABSI	A	A	A	A	A
KPER, CPER	C	C	C	C	C
KSUB, ABSI	A	A	A	A	A
KSUB, CPER	S	I	I	I	I
ABSI, CPER	A	A	A	A	A

Tabela V.6 - Parâmetros que causaram problemas nas otimizações realizadas (2 parâmetros)

Notação:

S - sucesso na otimização dos 2 parâmetros;

I - insucesso na otimização dos 2 parâmetros;

A - problema na otimização do parâmetro ABSI

C - problema na otimização do parâmetro CPER

Parâmetros calibrados	Diferenças percentuais entre os valores verdadeiros e iniciais dos parâmetros				
	10%	20%	30%	40%	50%
KSUP, KPER, KSUB	I	I	I	I	I
KSUP, KPER, ABSI	A	A	A	A	A
KSUP, KPER, CPER	C,KS	C,KS	C,KS	C,KS	C,KS
KPER, KSUB, ABSI	I	I	I	I	I
KPER, KSUB, CPER	I	I	I	I	I
KSUB, ABSI, CPER	A,C	I	I	I	I

Tabela V.7 - Parâmetros que causaram problemas nas otimizações realizadas(3 parâmetros)

Notação:

S - sucesso na otimização dos 3 parâmetros;

I - insucesso na otimização dos 3 parâmetros;

KS- problema na otimização do parâmetro KSUP

A - problema na otimização do parâmetro ABSI

C - problema na otimização do parâmetro CPER

Pelas Tabelas (V.6) e (V.7) pode-se ver que alguns parâmetros são mais prejudiciais ao processo de otimização. Com exceção de um único caso, os parâmetros CPER e ABSI foram os responsáveis pelo insucesso parcial ou total das otimizações conduzidas.

Os parâmetros KSUP, KSUB e KPER são os coeficientes de recessão do reservatório superficial, reservatório que simula a zona profunda do solo e reservatório que simula a zona superficial do solo, respectivamente. Conforme muito bem registrado por GUPTA e SOROOSHIAN (1985), estes parâmetros não dão origem a descontinuidades no modelo.

De outro lado, os parâmetros ABSI e CPER estão nitidamente ligados a descontinuidades dos processos físicos que ocorrem no reservatório que representa o escoamento superficial e no reservatório que representa a zona superficial do solo, respectivamente, conforme mostra a Figura (III.1). Sendo patamares limitantes, dão origem a diversos caminhos de funcionamento do modelo (Apêndice C) e que por isso geram as descontinuidades nas derivadas.

Como os maiores problemas foram observados com ABSI e CPER, e como as descontinuidades deles decorrem, fica claro que o problema fundamental a ser resolvido é a descontinuidade na superfície gerada pelo modelo SMAP. Isso explica porque o método de Rosenbrock modificado, em princípio mais fraco, comporta-se melhor do que o método de Rosen. As descontinuidades presentes no modelo produzem informações de derivadas incorretas e, dessa forma, Rosen não funciona.

HENDRICKSON, SOROOSHIAN e BRAZIL (1988) efetuam uma comparação análoga à desenvolvida nessa dissertação. Comparam o desempenho do método direto Busca de Trajetórias (CHOOKE e JEEVES, 1961) e do método indireto chamado Marquardt-Gauss Newton quando aplicados ao modelo chamado "Sacramento Soil Moisture Accounting" utilizado pelo "National Weather Service". Uma descrição do modelo é dada em BRAZIL e HUDLOW (1981).

Os resultados obtidos com a utilização dos dois (2) métodos levam a que os autores concluam pela maior robustez do método direto de Busca de Trajetórias em relação ao método indireto, o que está de acordo com as análises feitas nesse trabalho. Apontam também que os problemas encontrados advinham provavelmente das irregularidades na superfície de resposta do modelo. Esse ponto fundamental, como foi claramente possível de ser constatado nessa dissertação, diz respeito ao problema das descontinuidades presentes em um modelo chuva-vazão.

Ressalte-se que os resultados obtidos nessa dissertação com relação às otimizações conduzidas com o método direto de Rosenbrock (ROSENBROCK, 1960) foram sensivelmente superiores aos resultados apresentados por HENDRICKSON, SOROOSHIAN e BRAZIL (1988) decorrentes do uso do método direto Busca de Trajetórias (HOOKE e JEEVES, 1961).

CAPITULO VI

CONCLUSÕES E SUGESTÕES

Nessa dissertação investigou-se mais a fundo uma das fases de utilização de um modelo hidrológico, ou seja, o processo de calibração automática dos parâmetros. O interesse maior residiu em descobrir por que em várias áreas do conhecimento lança-se mão de métodos de otimização sofisticados com completo sucesso, enquanto na área de hidrologia métodos não tão poderosos como o de Rosenbrock são utilizados no dia a dia. Estariam os hidrólogos fadados ao uso de métodos arcaicos ?

Motivados no sentido de responder a essa indagação, passou-se a procurar um outro método de otimização bem mais sofisticado que pudesse ser incorporado ao modelo SMAP para cumprir a etapa de otimização de parâmetros.

VI.1 - Histórico

Nessa dissertação, portanto, pesquisaram-se métodos que fizessem uso, no decorrer do processo de otimização, de outras informações além de valores da função objetivo. São os chamados métodos indiretos que utilizam-se também das derivadas da função objetivo em relação aos parâmetros do modelo.

Nessa classe de métodos indiretos há algoritmos de diferentes graus de sofisticação e capacidade para resolução de processos de otimização. Sucintamente, pode-se dizer que há métodos que utilizam informações de derivadas primeiras (métodos de 1^ª ordem) e outros que, além de informações concernentes a derivadas primeiras, requerem valores de derivadas segundas (métodos de 2^ª ordem). Devem, em princípio, ter uma performance superior

aos métodos ditos diretos.

A escolha recaiu no Método de Direções Viáveis em Duas Etapas pertencente à classe de ordem 2. Uma vez que se tratava de um método bastante poderoso, esperava-se que as dificuldades encontradas fossem superadas.

Para a funcionamento desse método, conforme já foi mencionado, é necessário calcular as derivadas da função objetivo. Em vista disso, discriminaram-se os possíveis caminhos em que o modelo pode atuar.

Foram determinadas as derivadas para um dado tempo t com base somente nas informações desse tempo. Plotou-se para cada parâmetro do modelo o valor da função objetivo e derivadas associadas versus a sua variação contida no domínio de validade do modelo. Com isso percebeu-se graficamente a não concordância do resultados, evidenciando erro não desprezível no cálculo das derivadas.

Com razão, não havia se levado em conta informações relativas aos tempos anteriores que, de uma forma ou outra, influem no cálculo da derivada em um tempo t . Partiu-se para o estabelecimento de um modelo dito regressivo onde informações de tempos anteriores eram consideradas relevantes. Respeitando o compromisso entre a obtenção dos valores corretos para as derivadas e o tempo gasto com o processamento de informações relativas a tempos anteriores, considerou-se quatro (4) passos de tempo para trás suficientes para o cálculo da derivada em um passo de tempo t . Graficamente, os resultados das derivadas correspondiam razoavelmente aos valores obtidos via expressões analíticas.

Passou-se, então, à fase de utilização do Método de

Direções Viáveis em Duas Etapas. Os resultados, no entanto, foram frustrantes.

A despeito de várias tentativas, não houve sucesso na superação dos problemas encontrados na fase de identificação dos parâmetros. O conhecimento que se adquiriu a posteriori permite-nos afirmar que a otimização pelo Método de Direções Viáveis em Duas Etapas foi irremediavelmente afetada pelo não atendimento das hipóteses de continuidade.

Começou-se, nessa fase, a busca por um método que utilizasse apenas informações de derivadas primeiras, pertencentes, pois, à classe de métodos de ordem 1. O escolhido foi o método baseado no de Rosen, aqui chamado simplesmente de Rosen. Esse método ofereceu alguns resultados animadores no princípio quando a otimização foi feita para apenas um parâmetro, não confirmando as expectativas quando da utilização para mais de um parâmetro.

Voltou-se novamente à investigação se as derivadas não poderiam estar causando problemas. Nesse momento da pesquisa, preferiu-se dirimir qualquer dúvida quanto ao correto cálculo das derivadas. Concebeu-se aí o cálculo das derivadas primeiras no tempo t levando-se em conta todos os tempos anteriores, conforme foi exposto no capítulo IV. Novamente os resultados via expressão analítica foram comparados com os resultados extraídos dos gráficos de variação da função objetivo com os parâmetros. Os resultados foram muito bons, embora não tenha sido obtida a anulação perfeita das derivadas no ponto de ótimo. A razão está no fato da amostra utilizada no processo de calibração ser constituída de valores de vazões sintéticas geradas pelo modelo SMAP com apenas 1 casa decimal de precisão.

De posse desses resultados, fez-se uso mais uma vez do método de Rosen. Os resultados computacionais estão apresentados no capítulo IV dessa dissertação e demonstram os problemas encontrados no processo de otimização decorrentes do seu uso.

Quanto aos métodos diretos, foi feita a opção pelo método de Rosenbrock. Esse algoritmo tem sido largamente utilizado na literatura mundial para otimização de modelos chuva-vazão. Registre-se que o método de Rosenbrock está incluso entre os métodos que poderiam se chamar, sem abuso de linguagem, de métodos de ordem 0 (zero), quer dizer, métodos que só fazem uso de valores da função objetivo. Constatou-se nessa dissertação que foi o método que apresentou os melhores resultados, caracterizando a sua robustez mesmo diante dos problemas encontrados na superfície de resposta do modelo.

VI.2 - Conclusões

Antes de mais nada, é preciso relembrar as questões ligadas ao problema de otimização que foram comentados e dissecados no decorrer desse texto: concentricidade, interação entre os parâmetros e descontinuidades na superfície de resposta.

A concentricidade foi medida pelo índice de concentricidade. Os resultados foram mostrados na Tabela (V.1). Em geral, foram valores baixos, o que estavam a indicar possivelmente dificuldades na obtenção da solução ótima. A partir da análise dessas tabelas foi possível concluir pela dominância, no modelo SMAP, do parâmetro KSUB em relação aos demais. Essa dominância vai ao

encontro do conhecimento que se tem sobre o modelo SMAP, ou seja, que o parâmetro KSUB é o mais sensível e o primeiro a ser ajustado em um processo de calibração manual.

A interação entre os parâmetros foi analisada quando da introdução do conceito de índice de sensibilidade. O índice de sensibilidade de um parâmetro reflete a maior ou menor facilidade com que é feita, pelos demais parâmetros do modelo, a compensação de efeitos produzida por uma certa mudança no seu valor. Nesse sentido, o parâmetro que apresentou o maior valor foi CPER, o que denota, segundo esse índice, que o papel desse parâmetro pode ser mais facilmente coberto pela ação dos demais parâmetros. Em outras palavras, isso significa que se pode cogitar sobre a sua eventual eliminação ou substituição. Os parâmetros KSUP e KSUB, coeficientes de recessão dos reservatórios superficial e subterrâneo do modelo SMAP, obtiveram valores para os índices de sensibilidade bem próximos a 1.00, o que caracteriza a essencialidade deles no modelo. Essa essencialidade demonstrada analiticamente confirma o que os hidrólogos já sobejamente conhecem pela experiência no trato com modelos do tipo chuva-vazão.

A última questão analisada foi com relação a descontinuidades na superfície de resposta do modelo. As Tabelas (V.6) e (V.7) permitem avaliar a importância dessa questão. Através delas pode-se perceber que os responsáveis pelo insucesso parcial ou total do método de Rosen foram os parâmetros ABSI e CPER. Conforme foi caracterizado no capítulo V, esses parâmetros estão ligados a descontinuidades dos processos físicos que ocorrem no reservatório que representa o escoamento superficial e no reservatório que representa a zona superficial do solo (Figura III.1).

Os três aspectos avaliados constituem-se em valiosos instrumentos de compreensão dos resultados computacionais obtidos com o uso dos métodos de Rosen e Rosenbrock.

Constatou-se nessa dissertação que o método de Rosenbrock apresentou sem sombra de dúvida os melhores resultados, caracterizando a sua robustez mesmo diante dos aspectos levantados sobre concentricidade, interação dos parâmetros e descontinuidades presentes na superfície de resposta do modelo.

Esses resultados contrariam em princípio as expectativas, já que o método de Rosen é teoricamente superior ao método de Rosenbrock. É superior porque faz uso de um maior número de informações para uma tomada de decisão no processo de minimização. Esperava-se, pois, que Rosen tivesse um desempenho melhor do que Rosenbrock.

Contudo os resultados obtidos por esse método não foram nada animadores em relação aos obtidos por Rosenbrock.

Nesse ponto, a seguinte indagação merece ser feita: afinal de contas, qual é a explicação para um bom funcionamento de Rosenbrock e um mau funcionamento de Rosen ?

A explicação é que a origem dos insucessos obtidos com o uso do método de Rosen decorre fundamentalmente das descontinuidades presentes na superfície de resposta do modelo. Conforme foi dito anteriormente, as Tabelas (V.6) e (V.7) mostram claramente que foram os parâmetros ABSI e CPER, ligados a descontinuidades geradas pela

representação dos processos físicos no modelo SMAP, responsáveis pelo insucesso parcial ou total do método de Rosen. Essas descontinuidades fornecem informações incorretas sobre as quais repousam as decisões tomadas pelo algoritmo de Rosen no decorrer do processo de otimização. Já o algoritmo de Rosenbrock não toma decisões baseado nas informações incorretas provenientes das descontinuidades.

A grande diferença reside, pois, justamente nas descontinuidades presentes no modelo. Com relação aos aspectos de concentricidade e interação dos parâmetros verifica-se que eles afetam igualmente os métodos de Rosen e Rosenbrock. Os problemas advindos desses últimos dois aspectos foram de certa maneira superados por Rosenbrock, não apresentando uma criticidade absoluta.

A partir dessa análise, foi possível concluir que a solução do problema de otimização estava irremediavelmente ligada à remoção das descontinuidades presentes nos processos físicos. A remoção das descontinuidades pode ser feita através da utilização de técnicas de suavização. A aplicação dessas técnicas deve acompanhar o cumprimento de algumas etapas de análise.

Assim, deve-se primeiramente analisar o modelo e a sua programação. Como já foi mencionado, a programação escrita do modelo dá margem ao surgimento de diferentes modos de atuação e, portanto, diferentes caminhos que a água pode percorrer em um dado instante de tempo em função das variáveis de controle do modelo.

Esses diversos caminhos devem ser reduzidos, em última instância, a um único caminho e, portanto, a uma única equação para a vazão gerada pelo modelo. Isso é possível se forem avaliados cuidadosamente os chamados

"IF" da programação escrita do modelo. O que acontece, em geral, é que para um dado "IF" do modelo podem ser tomados dois caminhos distintos em função da variável de controle. Esses caminhos distintos configuram a presença de descontinuidades.

Veja-se, por exemplo, o caso do parâmetro ABSI do modelo SMAP e o código de programa associado à descontinuidade gerada por esse parâmetro (Apêndice A). Estude-se, nesse caso, a influência da variação de $(PREC - ABSI)$, onde PREC é a precipitação em um tempo "t", com relação à parcela de água QRES que é destinada ao reservatório superficial e influencia diretamente na quantidade de água que poderá infiltrar no solo.

$$\begin{aligned} \text{Para } ABSI \geq PREC ; \text{ PEFE} &= PREC - ABSI = 0 \\ QRES &= 0 \\ PINF &= PREC \\ QINF &= PREC \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Para } ABSI < PREC ; \text{ PEFE} &= PREC - ABSI \neq 0 \\ QRES &\neq 0 \\ PINF &= 0 \\ QINF &= PREC - ABSI - QRES \end{aligned}$$

Ora, deve-se aplicar, nessa situação, uma função que suavize a passagem da função QRES ($QRES = f(PREC, ABSI, NSAT, NSOL)$), válida quando $ABSI < PREC$, para função $QRES = 0$, válida quando $ABSI \geq PREC$. É exatamente nessas ocasiões que devem ser aplicadas as funções de suavização, permitindo que se reduzam os diferentes caminhos do modelo a um único. Dessa forma, as dificuldades encontradas com o uso de métodos indiretos na calibração automática de parâmetros em modelos do tipo chuva-vazão devem ser superadas, já que as descontinuidades são eliminadas.

Uma outra questão abordada na tese foi a de reparametrização. Com relação à solução apontada por GUPTA e SOROOSHIAN (1985) no sentido de reparametrização do modelo, verificou-se a sua limitação. No caso do modelo SMAP, a superfície de resposta gerada pelo par (KPER, CPER), mostrada no Capítulo V, ofereceu razões para constatar a dificuldade na aplicação dessa técnica.

VI.3 - Sugestões

Na medida que os resultados mostram que o principal problema é a descontinuidade, o uso de técnicas de suavização é recomendável. Nesse sentido, já vem sendo desenvolvida uma tese de mestrado por Luciene Pimentel da Silva com resultados bastante animadores.

Uma proposta que surgiu como tema de pesquisa, foi a otimização inteligente dos parâmetros baseado no perfeito entendimento do modelo. A orientação nessa direção surgiu em função dos valores calculados para os índices de concentricidade e índice de sensibilidade e que, no caso do modelo SMAP, apontaram a importância do parâmetro KSUB e a fácil substituição ou eliminação do parâmetro CPER. Essa tese está sendo conduzida por Paulo José Furtado Tavares, também com resultados estimulantes.

Como recomendações finais, cabem ainda algumas palavras sobre modelos hidrológicos. Embora a fase de formulação do modelo, que compreende definição das variáveis e equações, deva ser feita de forma mais independente buscando a máxima aderência à realidade, é desejável que não se perca do horizonte a sua resolução. Há, pois, um compromisso entre a modelagem e a resolução. Um último aspecto a ser mencionado, convém ressaltar, é que se modelam os processos físicos separadamente, enquanto em modelos chuva-vazão esses processos atuam

conjuntamente. Em princípio, a articulação de um conjunto de processos modelados corretamente sob o ponto de vista individual pode se degenerar quando os diversos módulos entram em interação.

Finalmente, respondendo à pergunta lançada no começo desse capítulo sobre se os hidrólogos estariam fadados ao uso de métodos de otimização arcaicos, a resposta é não. Para tanto, basta que se removam as discontinuidades presentes na superfície de resposta do modelo através de técnicas de suavização.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AITKEN, A. P. (1973), "Assessing Systematic Errors in Rainfall-Runoff Models", J. of Hydrology, n° 20, pp. 121-136.
- BARD, Y. (1974), "Nonlinear Parameter Estimation", Academic, Orlando, Fla.
- BOX, G. E. P. e JENKINS, G. M. (1976), "Time Series Analysis : Forecasting and Control", Holden-Day, San Francisco.
- CALVER, A. (1988), "Calibration, Sensitivity and Validation of a Physically-Based Rainfall Runoff Model", J. of Hydrology, n° 103, pp. 103-115.
- CANEDO, P. M. (1979), "The Reliability of Conceptual Catchment Model Calibration", PhD. Thesis, University of Lancaster, U.K.
- CARVALHO, L. A. V. (1984), "O Método de Direções Viáveis em Duas Etapas para Programação Não-Linear e Aplicações a Programação Não-Quadrática", Tese de mestrado, COPPE/UFRJ.
- CLARKE, R. T. (1973), "A Review of Some Mathematical Models Used in Hydrology with Observations on their Calibration and Use", J. of Hydrology, n° 19, pp. 1-20.
- CHOW, V. T. (1984), "Handbook of Applied Hydrology", McGraw Hill, New York, N. Y.
- COOLEY, R. L. (1977), "A Method of Estimating Parameters and Assessing Reliability of Models of Steady-State Groundwater flow, 1- Theory and Numerical Properties", Water Resour. Res., 13(2), pp. 318-324.

- COOLEY, R. L. (1979), "A Method of Estimating Parameters and Assessing Reliability for Models of Steady-State Groundwater Flow , 2- Application of Statistical Analysis", Water Resour. Res., 15(3), pp. 603-617.
- COOLEY, R. L. (1982), "Incorporation of Prior Information on Parameters into Nonlinear Regression Groundwater Flow Models, 1- Theory", Water Resour. Res., 18(4), pp. 965-976.
- COOLEY, R. L. (1983), "Incorporation of Prior Information on Parameters into Nonlinear Regression Groundwater Flow Models , 2- Applications", Water Resour. Res., 19(3), pp. 662-676.
- CRAWFORD, N. H. e LINSLEY, R. K. (1966), "Digital Simulation in Hydrology: Stanford Watershed Model", Tech. Report n° 39, Department of Civil Engineering, Stanford University, USA
- DAWDY, D. R. e O'DONNELL, T. (1965), "Mathematical Models of Catchment Behaviour", J. of Hydraul. Div. Am. Soc. Civ Eng., 91, pp. 123-137.
- DIB, K. R. e CANEDO, P. M. (1985), "Modelos Chuva-Vazão, Uma Nova Abordagem", VI Simpósio Brasileiro de Hidrologia e Recursos Hídricos, Volume 3.
- DICKINSON, W. T., HOLLAND, M. E. e SMITH, G. L., (1967), "An Experimental Rainfall-Runoff Facility", Hydrology Papers, Colorado State University, Fort Collins, Colorado.
- DISKIN, M. H. (1970), "Definition and Uses of The Linear Regression Model", Water Resour. Res., 6, pp. 1668-1673.
- DISKIN, M. H. e SIMON, E. (1977), "A Procedure for the Selection of Objective Functions for Hydrologic Simulation Models", J. of Hydrology, n° 20, pp. 129-149.

- GILL, P. E. e MURRAY, W. (1974), "Numerical Methods for Constrained Optimization"
- GUPTA, V. K. e SOROOSHIAN, S. (1983), "Uniqueness and Observability of Conceptual Rainfall-Runoff Model Parameters: The Percolation Process Examined, Water Resour. Res., 19(1), pp. 269-276.
- GUPTA, V. K. e SOROOSHIAN, S. (1985), "The Automatic Calibration of Conceptual Catchment Models using Derivative-Based Optimization Algorithms", Water Resour. Res., 21(4), pp. 473-485.
- HENDRICKSON, J. D., SOROOSHIAN, S. e BRAZIL, L. E. (1988), "Comparison of Newton-Type and Direct Search Algorithms for Calibration of Conceptual Rainfall-Runoff Models", Water Resour. Res., 24(5), pp. 691-700.
- HERSKOVITS, J. N. (1982), A Two Stage Feasible Direction Algorithm for Nonlinearly Constrained Optimization, Rapp. de Rech., Number 103, INRIA, BP 105, 78153, Le Chesnay 1, France.
- HOOKE, R. e JEEVES, T. A. (1961), "Direct Search Solutions of Numerical and Statistical Problems", J. Assoc. Comput. Mach., 8(2), pp. 212-229.
- IBBITT, R. P. (1970), "Systematic Parameter Fitting for Conceptual Models of Catchment Hydrology", PhD. dissertation, 400 pp., Univ. of London.
- IBBITT, R. P. e O'DONNELL, T. (1971), "Fitting Methods for Conceptual Catchment Models", J. Hydraul. Eng., 97 (HY9), pp. 1331-1342.
- JARBOE, J. E. e HAAN, C. T. (1974), "Calibrating a Water Yield Model for Small Ungaged Watersheds", Water Resour. Res., 10(2), pp. 256-262.

Variação percentual	Algoritmo	Parâmetros				
		KSUP	KPER	ABSI	Número de iterações	Valor função objetivo
		Valores de referência	Valores de referência	Valores de referência		
10%		VV=0.50000 VI=0.45000	VV=0.05000 VI=0.04500	VV=0.70000 VI=0.63000		VIFO=575.9785
	Rosenbrock	VFRb=0.50010	VFRb=0.04995	VFRb=0.70334	103	VFORb=1.5044
	Rosen	VFR=0.49927	VFR=0.05061	VFR=0.64493	185	VFOR=1.8786
20%		VV=0.50000 VI=0.40000	VV=0.05000 VI=0.04000	VV=0.70000 VI=0.56000		VIFO=2644.322
	Rosenbrock	VFRb=0.50009	VFRb=0.04994	VFRb=0.70434	149	VFORb=1.5044
	Rosen	VFR=0.49853	VFR=0.05132	VFR=0.57536	197	VFOR=3.2041
30%		VV=0.50000 VI=0.35000	VV=0.05000 VI=0.03500	VV=0.70000 VI=0.49000		VIFO=7025.655
	Rosenbrock	VFRb=0.50009	VFRb=0.04994	VFRb=0.70392	257	VFORb=1.5044
	Rosen	VFR=0.49875	VFR=0.05213	VFR=0.50398	199	VFOR=5.4953
40%		VV=0.50000 VI=0.30000	VV=0.05000 VI=0.03000	VV=0.70000 VI=0.42000		VIFO=15213.57
	Rosenbrock	VFRb=0.50008	VFRb=0.04994	VFRb=0.70357	143	VFORb=1.5044
	Rosen	VFR=0.49739	VFR=0.05305	VFR=0.42005	198	VFOR=9.9667
50%		VV=0.50000 VI=0.25000	VV=0.05000 VI=0.02500	VV=0.70000 VI=0.35000		VIFO=26690.42
	Rosenbrock	VFRb=0.50009	VFRb=0.04998	VFRb=0.70000	252	VFORb=1.4974
	Rosen	VFR=0.49721	VFR=0.05352	VFR=0.37980	198	VFOR=12.2948

Tabela IV.15- Otimização dos Parâmetros KSUP, KPER e ABSI

Variação percentual	Algoritmo	Parâmetros				
		KSUP	KPER	CPER	Número de iterações	Valor de função objetivo
		Valores de referência	Valores de referência	Valores de referência		
10%	Rosenbrock	VV=0.50000 VI=0.45000 ----- VFRb=0.50009	VV=0.05000 VI=0.04500 ----- VFRb=0.04998	VV=0.25000 VI=0.22500 ----- VFRb=0.25000	1026	VIFO=316.2472 ----- VFORb=1.4974
	Rosen	VFR=0.45973	VFR=0.04880	VFR=0.22423	12	VFOR=118.6239
20%	Rosenbrock	VV=0.50000 VI=0.40000 ----- VFRb=0.50009	VV=0.05000 VI=0.04000 ----- VFRb=0.04998	VV=0.25000 VI=0.20000 ----- VFRb=0.25000	1498	VIFO=1395.67 ----- VFORb=1.4974
	Rosen	VFR=0.41472	VFR=0.05023	VFR=0.19915	16	VFOR=500.2540
30%	Rosenbrock	VV=0.50000 VI=0.35000 ----- VFRb=0.50009	VV=0.05000 VI=0.03500 ----- VFRb=0.04998	VV=0.25000 VI=0.17500 ----- VFRb=0.25001	1069	VIFO=3600.409 ----- VFORb=1.4974
	Rosen	VFR=0.41016	VFR=0.04739	VFR=0.17273	39	VFOR=535.3348
40%	Rosenbrock	VV=0.50000 VI=0.30000 ----- VFRb=0.50010	VV=0.05000 VI=0.03000 ----- VFRb=0.04998	VV=0.25000 VI=0.15000 ----- VFRb=0.25000	1671	VIFO=7662.553 ----- VFORb=1.4974
	Rosen	VFR=0.42728	VFR=0.04474	VFR=0.16810	74	VFOR=354.5443
50%	Rosenbrock	VV=0.50000 VI=0.25000 ----- VFRb=0.50009	VV=0.05000 VI=0.02500 ----- VFRb=0.04998	VV=0.25000 VI=0.12500 ----- VFRb=0.25000	1734	VIFO=15069.86 ----- VFORb=1.4974
	Rosen	VFR=0.39104	VFR=0.04673	VFR=0.13596	54	VFOR=775.7246

Tabela IV.16- Otimização dos Parâmetros KSUP, KPER e CPER

Variação percentual	Algoritmo	Parâmetros				
		KPER	KSUB	ABSI	Número de iterações	Valor função objetivo
		Valores de referência	Valores de referência	Valores de referência		
10%	Rosenbrock	VV=0.05000 VI=0.04500 VFRb=0.04907	VV=0.99985 VI=0.88890 VFRb=0.99984	VV=0.70000 VI=0.63000 VFRb=0.80000	266	VIFO=44680.79 VFORb=2.0554
	Rosen	VFR=0.04656	VFR=0.89287	VFR=0.63000	8	VFOR=44688.58
20%	Rosenbrock	VV=0.05000 VI=0.04000 VFRb=0.04907	VV=0.99985 VI=0.79990 VFRb=0.99984	VV=0.70000 VI=0.56000 VFRb=0.80000	235	VIFO=47375.23 VFORb=2.0554
	Rosen	VFR=0.04156	VFR=0.80196	VFR=0.56000	8	VFOR=47467.46
30%	Rosenbrock	VV=0.05000 VI=0.03500 VFRb=0.04993	VV=0.99985 VI=0.69990 VFRb=0.99985	VV=0.70000 VI=0.49000 VFRb=0.70565	641	VIFO=49311.00 VFORb=1.5045
	Rosen	VFR=0.03344	VFR=0.70008	VFR=0.48999	6	VFOR=49456.05
40%	Rosenbrock	VV=0.05000 VI=0.03000 VFRb=0.04993	VV=0.99985 VI=0.59990 VFRb=0.99985	VV=0.70000 VI=0.42000 VFRb=0.70608	703	VIFO=51736.81 VFORb=1.5045
	Rosen	VFR=0.02844	VFR=0.59993	VFR=0.41999	6	VFOR=52309.80
50%	Rosenbrock	VV=0.05000 VI=0.02500 VFRb=0.04993	VV=0.99985 VI=0.49990 VFRb=0.99985	VV=0.70000 VI=0.35000 VFRb=0.70652	859	VIFO=55643.36 VFORb=1.5045
	Rosen	VFR=0.03750	VFR=0.49991	VFR=0.49991	3	VFOR=51941.24

Tabela IV.17- Otimização dos Parâmetros KPER, KSUB e ABSI

Variação percentual	Algoritmo	Parâmetros				
		KPER	KSUB	CPER	Número de iterações	Valor função objetivo
		Valores de referência	Valores de referência	Valores de referência		
10%		VV=0.05000 VI=0.04500	VV=0.99985 VI=0.88890	VV=0.25000 VI=0.22500		VIFO=43845.01
	Rosenbrock	VFRb=0.04996	VFRb=0.99985	VFRb=0.24980	1613	VFORb=1.4980
	Rosen	VFR=0.04578	VFR=0.89243	VFR=0.22517	20	VFOR=43796.08
20%		VV=0.05000 VI=0.04000	VV=0.99985 VI=0.79990	VV=0.25000 VI=0.20000		VIFO=45186.08
	Rosenbrock	VFRb=0.04996	VFRb=0.99985	VFRb=0.24981	1678	VFORb=1.4980
	Rosen	VFR=0.04010	VFR=0.80118	VFR=0.20003	18	VFOR=45177.41
30%		VV=0.05000 VI=0.03500	VV=0.99985 VI=0.69990	VV=0.25000 VI=0.17500		VIFO=45333.91
	Rosenbrock	VFRb=0.04996	VFRb=0.99985	VFRb=0.24980	1783	VFORb=1.4980
	Rosen	VFR=0.03506	VFR=0.70112	VFR=0.17508	18	VFOR=45329.36
40%		VV=0.05000 VI=0.03000	VV=0.99985 VI=0.59990	VV=0.25000 VI=0.15000		VIFO=45359.32
	Rosenbrock	VFRb=0.04996	VFRb=0.99985	VFRb=0.24981	2336	VFORb=1.4980
	Rosen	VFR=0.03000	VFR=0.59995	VFR=0.15000	15	VFOR=45359.32
50%		VV=0.05000 VI=0.02500	VV=0.99985 VI=0.49990	VV=0.25000 VI=0.12500		VIFO=46065.04
	Rosenbrock	VFRb=0.04996	VFRb=0.99985	VFRb=0.24981	2310	VFORb=1.4980
	Rosen	VFR=0.02499	VFR=0.49991	VFR=0.12500	13	VFOR=46069.61

Tabela IV.18- Otimização dos Parâmetros KPER, KSUB e CPER

Variação percentual	Algoritmo	Parâmetros				
		KSUB	ABSI	CPER	Número de iterações	Valor de função objetivo
		Valores de referência	Valores de referência	Valores de referência		
10%		VV=0.99985 VI=0.88890	VV=0.70000 VI=0.63000	VV=0.25000 VI=0.22500		VIFO=45028.15
	Rosenbrock	VFRb=0.99985	VFRb=0.70742	VFRb=0.25074	831	VFORb=1.5042
	Rosen	VFR=0.99987	VFR=0.44599	VFR=0.23380	59	VFOR=5.3305
20%		VV=0.99985 VI=0.79990	VV=0.70000 VI=0.56000	VV=0.25000 VI=0.20000		VIFO=47809.90
	Rosenbrock	VFRb=0.99985	VFRb=0.77371	VFRb=0.25632	2394	VFORb=1.7239
	Rosen	VFR=0.80699	VFR=0.56002	VFR=0.20714	21	VFOR=47782.82
30%		VV=0.99985 VI=0.69990	VV=0.70000 VI=0.49000	VV=0.25000 VI=0.17500		VIFO=49146.95
	Rosenbrock	VFRb=0.99985	VFRb=0.70742	VFRb=0.25074	838	VFORb=1.5042
	Rosen	VFR=0.70310	VFR=0.49001	VFR=0.17661	15	VFOR=49144.72
40%		VV=0.99985 VI=0.59990	VV=0.70000 VI=0.42000	VV=0.25000 VI=0.15000		VIFO=49894.10
	Rosenbrock	VFRb=0.99985	VFRb=0.70742	VFRb=0.25074	919	VFORb=1.5042
	Rosen	VFR=0.60186	VFR=0.42001	VFR=0.15039	19	VFOR=49891.55
50%		VV=0.99985 VI=0.49990	VV=0.70000 VI=0.35000	VV=0.25000 VI=0.12500		VIFO=50384.60
	Rosenbrock	VFRb=0.99985	VFRb=0.70742	VFRb=0.25074	855	VFORb=1.5042
	Rosen	VFR=0.50126	VFR=0.35000	VFR=0.12520	18	VFOR=50384.35

Tabela IV.19- Otimização dos Parâmetros KSUB, ABSI e CPER

Variação percentual	Algoritmo	Parâmetros				
		KSUP	KPER	KSUB	ABSI	CPER
		Valores de referência	Valores de referência	Valores de referência	Valores de referência	Valores de referência
10%		VV=0.50000 VI=0.45000	VV=0.05000 VI=0.04500	VV=0.99985 VI=0.88890	VV=0.70000 VI=0.63000	VV=0.25000 VI=0.22500
	Rosenbrock	VFRb=0.49944	VFRb=0.04997	VFRb=0.9998	VFRb=0.5000	VFRb=0.2330
	Rosen	VFR=0.47533	VFR=0.06474	VFR=0.99973	VFR=0.64974	VFR=0.29470
20%		VV=0.50000 VI=0.40000	VV=0.05000 VI=0.04000	VV=0.99985 VI=0.79990	VV=0.70000 VI=0.56000	VV=0.25000 VI=0.20000
	Rosenbrock	VFRb=0.49944	VFRb=0.04997	VFRb=0.9998	VFRb=0.5000	VFRb=0.2330
	Rosen	VFR=0.39936	VFR=0.04997	VFR=0.99969	VFR=0.63052	VFR=0.28042
30%		VV=0.50000 VI=0.35000	VV=0.05000 VI=0.03500	VV=0.99985 VI=0.69990	VV=0.70000 VI=0.49000	VV=0.25000 VI=0.17500
	Rosenbrock	VFRb=0.49944	VFRb=0.04997	VFRb=0.9998	VFRb=0.5000	VFRb=0.2330
	Rosen	VFR=0.35160	VFR=0.03340	VFR=0.74941	VFR=0.48840	VFR=0.17660
40%		VV=0.50000 VI=0.30000	VV=0.05000 VI=0.03000	VV=0.99985 VI=0.59990	VV=0.70000 VI=0.42000	VV=0.25000 VI=0.15000
	Rosenbrock	VFRb=0.49281	VFRb=0.02732	VFRb=0.9629	VFRb=0.9999	VFRb=0.0001
	Rosen	VFR=0.30036	VFR=0.02964	VFR=0.64570	VFR=0.41964	VFR=0.15036
50%		VV=0.50000 VI=0.25000	VV=0.05000 VI=0.02500	VV=0.99985 VI=0.49999	VV=0.70000 VI=0.35000	VV=0.25000 VI=0.12500
	Rosenbrock	VFRb=0.49281	VFRb=0.02732	VFRb=0.9629	VFRb=0.9999	VFRb=0.0001
	Rosen	VFR=0.35018	VFR=0.02482	VFR=0.54515	VFR=0.34982	VFR=0.12518

Tabela IV.20- Otimização dos Parâmetros KSUP, KPER, KSUB, ABSI e CPER

Obs.: Continuação na próxima folha

Variação percentual	Algoritmo	Parâmetros: KSUP, KPER, KSUB, ABSI e CPER	
		Número de iterações	Valor da função objetivo
10%			VIFO=44157.85
	Rosenbrock	3680	VFORb=3.18
	Rosen	400	VFOR=228.50
20%			VIFO=46570.01
	Rosenbrock	3525	VFORb=3.18
	Rosen	392	VFOR=2594.63
30%			VIFO=48881.40
	Rosenbrock	3763	VFORb=3.18
	Rosen	399	VFOR=48716.48
40%			VIFO=52807.65
	Rosenbrock	767	VFORb=33843.70
	Rosen	399	VFOR=52675.02
50%			VIFO=60113.76
	Rosenbrock	706	VFORb=33843.70
	Rosen	399	VFOR=60061.90

Tabela IV.20- Otimização dos Parâmetros KSUP, KPER, KSUB, ABSI e CPER (Continuação)

No caso da variação de apenas 1 parâmetro, o parâmetro livre converge para a verdade (Tabelas (IV.1) a (IV.3)). Saliente-se que esses resultados respeitam as curvas apresentadas na Figura (IV.3), bem como configuram, em geral, uma maior rapidez de convergência por parte do método de Rosen, em função do menor número de iterações necessárias para que os parâmetros atinjam seus valores verdadeiros.

Com o intuito de conferir um maior poder de síntese aos resultados apresentados nas Tabelas (IV.4) a (IV.20), estabeleceu-se o cálculo de um índice que fornece uma medida de quão próximo os valores finais dos parâmetros, procedentes de uma calibração, estão dos seus valores verdadeiros. Esse índice que será chamado de índice de convergência é dado por:

$$I_c = \sum_{i=1}^s \frac{|e_i^* - \hat{e}_i|}{e_i^*} \quad (IV.2)$$

onde:

s - é o número de parâmetros calibrados

e_i^* - é o valor verdadeiro do parâmetro e_i

\hat{e}_i - é o valor obtido pelo processo de calibração para o parâmetro e_i

Repare que se todos os parâmetros calibrados partirem de seus valores iniciais e convergirem para a verdade, então, $I_c=0$. Quanto maior for o valor de I_c , maiores serão os indícios de um insucesso no processo de minimização.

A seguir estão apresentadas as Tabelas (IV.21) (2 parâmetros), (IV.22) (3 parâmetros) e (IV.23) (5 parâmetros) com os respectivos índices de convergência e valores obtidos para a função objetivo.

Parâmetros	%	Índice de Convergência		Função objetivo	
		Rosenbrock	Rosen	Rosenbrock	Rosen
KSUP, KPER	10	0.001	0.002	1.50	1.56
	20	0.001	0.002	1.50	1.55
	30	0.001	0.002	1.50	1.55
	40	0.001	0.002	1.50	1.56
	50	0.001	0.006	1.50	1.56
KSUP, KSUB	10	0.000	0.000	1.50	1.50
	20	0.000	0.015	1.50	6.75
	30	0.000	0.015	1.50	6.99
	40	0.000	0.001	1.50	1.51
	50	0.000	0.009	1.50	3.56
KSUP, ABSI	10	0.003	0.020	1.50	1.57
	20	0.002	0.158	1.50	6.10
	30	0.003	0.305	1.50	21.32
	40	0.003	0.389	1.50	36.14
	50	0.003	0.393	1.50	35.08
KSUP, CPER	10	0.001	0.001	1.50	1.50
	20	0.001	0.016	1.50	1.50
	30	0.001	0.016	1.50	1.50
	40	0.001	0.001	1.50	1.50
	50	0.001	0.001	1.50	1.50
KPER, KSUB	10	0.000	0.176	1.50	44328.13
	20	0.000	0.367	1.50	46531.01
	30	0.000	0.630	1.50	47793.11
	40	0.000	0.831	1.50	49738.40
	50	0.000	0.781	1.50	49030.90
KPER, ABSI	10	0.008	0.125	1.50	3.22
	20	0.001	0.229	1.50	11.40
	30	0.008	0.322	1.50	5.88
	40	0.008	0.503	1.50	25.02
	50	0.001	0.565	1.50	14.73

Tabela IV.21 - Índice de Convergência e Valor Final da Função Objetivo para Otimizações de Pares de Parâmetros
Obs.: Continuação na próxima página

Parâmetros	%	Índice de Convergência		Função objetivo	
		Rosenbrock	Rosen	Rosenbrock	Rosen
KPER, CPER	10	0.002	0.138	1.50	6.43
	20	0.002	0.307	1.50	8.55
	30	0.002	0.419	1.50	14.63
	40	0.001	0.581	1.50	24.63
	50	0.001	0.719	1.50	35.35
KSUB, ABSI	10	0.002	0.110	1.50	3.96
	20	0.001	0.078	1.50	2.75
	30	0.001	0.745	1.50	21.35
	40	0.001	0.513	1.50	53.06
	50	0.002	0.602	1.50	72.93
KSUB, CPER	10	0.000	0.013	1.50	2.03
	20	0.001	0.369	1.50	49926.44
	30	0.001	0.591	1.50	47739.62
	40	0.001	0.792	1.50	47906.81
	50	0.001	0.993	1.50	47793.09
ABSI, CPER	10	0.001	0.128	1.50	1.92
	20	0.001	0.256	1.50	3.12
	30	0.001	0.384	1.50	5.07
	40	0.001	0.513	1.50	8.02
	50	0.001	0.641	1.50	11.46

Tabela IV.21 - Índice de Convergência e Valor Final da Função Objetivo para Otimizações de Pares de Parâmetros (Continuação)

Parâmetros	%	Índice de Convergência		Função objetivo	
		Rosenbrock	Rosen	Rosenbrock	Rosen
KSUP,	10	0.000	0.275	1.50	44265.04
KPER,	20	0.001	0.379	1.50	46277.14
KSUB	30	0.001	0.931	1.50	52218.57
	40	0.001	1.231	1.50	57800.93
	50	0.001	1.250	1.50	55860.60
KSUP,	10	0.006	0.092	1.50	1.88
KPER,	20	0.008	0.207	1.50	3.20
ABSI	30	0.007	0.325	1.50	5.50
	40	0.006	0.466	1.50	9.97
	50	0.001	0.533	1.50	12.29
KSUP,	10	0.001	0.208	1.50	118.62
KPER,	20	0.001	0.379	1.50	500.25
CPER	30	0.001	0.541	1.50	535.33
	40	0.001	0.578	1.50	354.54
	50	0.001	0.739	1.50	775.72
KPER,	10	0.161	0.276	2.05	44688.58
KSUB,	20	0.161	0.567	2.05	47467.46
ABSI	30	0.009	0.931	1.50	49456.05
	40	0.010	1.231	1.50	52309.80
	50	0.010	1.231	1.50	51941.24
KPER,	10	0.002	0.291	1.50	43796.08
KSUB,	20	0.002	0.597	1.50	45177.41
CPER	30	0.002	0.897	1.50	45329.36
	40	0.002	1.200	1.50	45359.32
	50	0.002	1.500	1.50	46069.61
KSUB,	10	0.014	0.428	1.50	5.33
ABSI,	20	0.131	0.564	1.72	47782.82
CPER	30	0.014	0.890	1.50	49144.72
	40	0.014	1.196	1.50	49691.55
	50	0.014	1.498	1.50	50384.35

Tabela IV.22- Índice de Convergência e Valor Final da Função Objetivo para Otimizações de Três Parâmetros

Parâmetros	%	Índice de Convergência		Função objetivo	
		Rosenbrock	Rosen	Rosenbrock	Rosen
KSUP,	10	0.355	0.595	3.18	228.50
KPER,	20	0.355	0.423	3.18	2594.63
KSUB,	30	0.355	1.459	3.18	48716.48
ABSI,	40	1.933	1.960	33843.70	52675.02
CPER	50	1.933	2.258	33843.70	60061.90

Tabela IV.23 - Índice de Convergência e Valor Final da Função Objetivo para Otimizações de Cinco Parâmetros

A análise dos resultados das otimizações feitas com pares de parâmetros permitiu detectar alguns dos problemas que ocorrem em otimizações de parâmetros e notar a grande suscetibilidade de um método que faz uso de derivadas ao se deparar com essas dificuldades. O método de Rosenbrock apresentou decididamente um comportamento mais satisfatório na obtenção dos valores dos parâmetros que geraram a amostra utilizada. Vejam-se os índices de convergência e os valores finais obtidos para a função objetivo correspondentes ao emprego de Rosenbrock apresentados na Tabela (IV.21). Os índices de convergência assumem valores quase que invariavelmente iguais ou próximos a zero.

Já com relação ao método de Rosen, os resultados mostram que, quando as otimizações envolvem parâmetros com pouca sensibilidade no valor da função objetivo, como é o caso do parâmetro ABSI, perturbações na obtenção dos valores ótimos dos parâmetros ocorrem. Observe-se os conjuntos de parâmetros que incluem o ABSI apresentados na Tabela (IV.21). Verifique-se também as Tabelas (IV.6), (IV.9), (IV.11) e (IV.13).

Além disso, constata-se que as otimizações que revelaram os maiores problemas quando do emprego do método

de Rosen foram as que envolveram os pares de parâmetros KSUB e CPER e KPER e KSUB.

As otimizações envolvendo o parâmetro KSUP e, em especial, os pares (KSUP,KPER), (KSUP,KSUB) e (KSUP,CPER) foram bem sucedidas. No caso do par (KSUP, ABSI) ocorrem perturbações no processo de minimização, conforme ressalva feita anteriormente.

É interessante registrar que o método de Rosen, em que pese a dificuldade de chegar aos valores verdadeiros dos parâmetros, apresentou uma característica marcante: a rapidez na diminuição da função objetivo nas primeiras iterações. Nesse sentido, poder-se-ia pensar em utilizar os algoritmos de Rosen e Rosenbrock seqüencialmente. Os valores finais dos parâmetros obtidos com Rosen seriam assim os valores iniciais no uso de Rosenbrock. Essa alternativa de se combinar o uso de diferentes métodos de otimização já foi inclusive anteriormente sugerida (JOHNSTON e PILGRIM (1976); IBBITT e O'DONNELL (1971)). Essa proposição leva a que sejam eventualmente superados alguns problemas encontrados no decorrer do processo de minimização. No entanto, não fornece uma solução definitiva para a resolução das dificuldades encontradas na calibração.

A investigação dos problemas encontrados na fase de calibração e a sua superação, conforme recomendam GUPTA e SOROOSHIAN (1985), pode estar no estudo da estruturação do processo e na tentativa da sua reestruturação. O capítulo seguinte aborda com um pouco mais de detalhe como pode ser tentada a reestruturação do processo.

De qualquer forma, pelo exposto, fica evidente que estimar os parâmetros de um modelo hidrológico não é uma tarefa trivial e exige um trabalho de investigação profundo.

O fato de problemas nas otimizações já terem sido detectados no âmbito do \mathbb{R}^2 com o uso de um método indireto sugeria que dificuldades também seriam encontradas quando das otimizações envolvendo 3, 4 ou cinco parâmetros, o que foi efetivamente comprovado.

O método de Rosenbrock, nessas situações, continuou apresentando resultados muito bons, superando invariavelmente os resultados obtidos com o uso do método de Rosen. Caracterizou-se inegavelmente por sua robustez. Nota-se, no entanto, que quando foram otimizados os cinco (5) parâmetros do modelo, também o método direto apresentou problemas nos casos em que os valores iniciais dos parâmetros diferiam percentualmente de 40% e 50% em relação aos valores verdadeiros. Os valores percentuais de 40% e 50% indicam valores iniciais para os parâmetros mais afastados da solução. Logo o resultado obtido com Rosenbrock nessas situações não é anormal. Ao contrário, é natural porque as dificuldades devem aumentar com afastamentos maiores em relação à solução.

CAPITULO V

INVESTIGAÇÃO SOBRE AS CAUSAS DOS PROBLEMAS
ENCONTRADOS NA FASE DE CALIBRAÇÃO

A origem dos problemas que se encontra no uso de uma rotina de otimização automática de parâmetros na fase de calibração de um modelo chuva-vazão está intimamente ligada ao mau comportamento da superfície de resposta desse tipo de modelo.

Tal comportamento ocasiona dificuldades na obtenção do conjunto de parâmetros ótimo quando da utilização de métodos de otimização automática, sejam eles diretos (não utilizam derivadas parciais da função objetivo em relação aos parâmetros, sejam eles indiretos (utilizam as derivadas parciais da função objetivo em relação aos parâmetros).

Os métodos indiretos, no entanto, têm uma sensibilidade maior em relação ao comportamento da superfície de resposta.

V.1- Problemas encontrados com o uso de derivadas

Como pode ser percebido através dos resultados mostrados no capítulo anterior, obstáculos foram encontrados na otimização dos parâmetros do modelo SMAP. Em alguns casos houve sucesso enquanto em outros, insucesso. A medida que aumentávamos o número de parâmetros a serem calibrados, maiores eram os obstáculos para se chegar aos parâmetros ditos verdadeiros.

Inicialmente procurou-se verificar e analisar, seguindo procedimento sugerido por GUPTA e SOROOSHIAN (1985), a matriz positiva definida ou positiva semidefinida chamada de matriz de identificabilidade estrutural do modelo, $\nabla_{\theta}^2 SI$, dada pela aproximação:

$$\nabla_{\theta}^2 SI = 2 \sum_{t=1}^n \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (\nabla_{\theta_i} q_{GER}(\theta) * \nabla_{\theta_j} q_{GER}(\theta)) \quad (V.1)$$

onde:

- $\nabla_{\theta}^2 SI$ - matriz de reestruturação
 n - número de intervalos de tempo
 N - número de parâmetros a otimizar
 θ - vetor de parâmetros do modelo
 q_{GER} - vazão gerada pelo modelo

É importante nesse ponto caracterizar as possíveis maneiras de classificar uma matriz simétrica. Diz-se que uma matriz é definida positiva se todos os seus autovalores são estritamente positivos. Se todos os autovalores são não negativos está-se diante de uma matriz semi-definida positiva. Se, por outro lado, a matriz possui autovalores positivos e negativos simultaneamente, então, recebe o nome de matriz indefinida.

A exigência para que a matriz de identificabilidade estrutural do modelo seja definida positiva ou positiva semi-definida encontra resposta na forma com que se dispõem as curvas de nível. A Figura (V.1) mostra as possíveis situações com que se pode deparar.

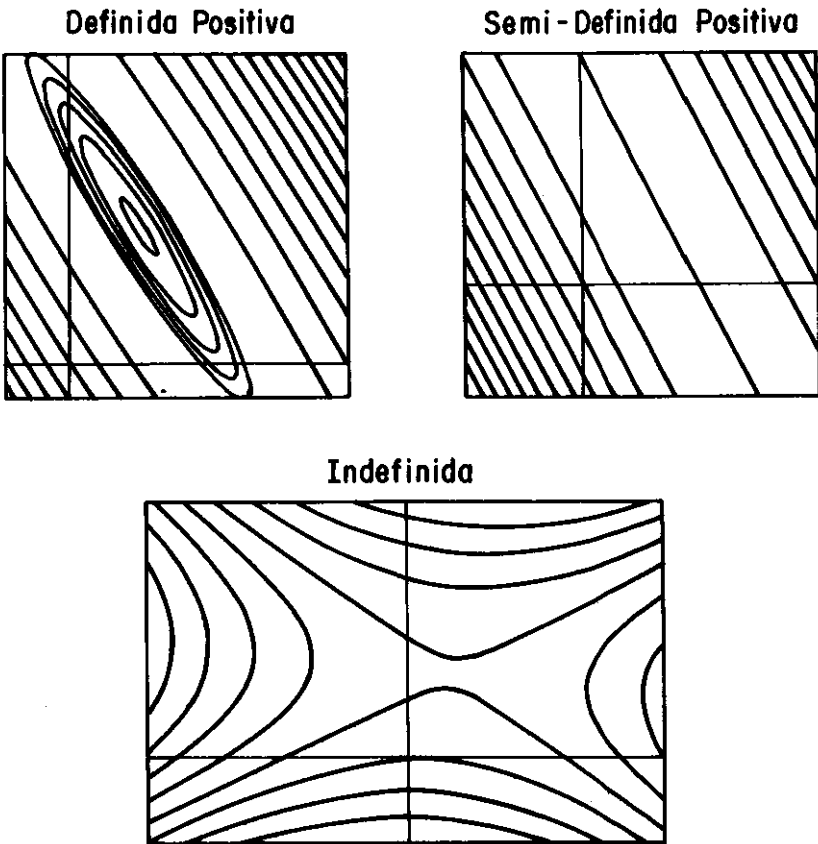


Figura V.1 - Superfície de resposta para as seguintes situações: matriz definida positiva, matriz semi-definida positiva e matriz indefinida

A obtenção dessa matriz seria, conforme GUPTA e SOROOSHIAN (1985), o passo inicial para a reestruturação do processo. O cálculo dessa matriz foi possível em virtude de se dispor dos valores das derivadas da vazão

gerada em relação aos parâmetros do modelo. Assim pode-se calcular vários índices de análise bidimensional e o índice de sensibilidade, para análise de modelos com mais de 2 parâmetros. Um dos importantes índices de análise bidimensional é o índice de concentricidade X_{ij} , calculado para o par de parâmetros i e j . Esse índice fornece uma medida de quão próximo as curvas de mesmo valor da F se aproximam da forma circular. A faixa de variação desse índice está compreendida entre 0 e 1, sendo que $X_{ij} = 1$ representa o círculo. Essa medida, embora válida para o \mathbb{R}^n , foi calculada para cada par de parâmetros, o que permite uma melhor análise dos problemas encontrados nas otimizações conduzidas com o modelo SMAP. É bom lembrar que foram realizadas otimizações envolvendo todos os possíveis pares de parâmetros (Tabelas (IV.4) a (IV.13)).

O índice de concentricidade é dado pela expressão:

$$X_{ij} = \left[\frac{\lambda_{\min}^{ij}}{\lambda_{\max}^{ij}} \right]^{1/2} \quad (V.2)$$

onde λ_{\min}^{ij} e λ_{\max}^{ij} são o menor e maior autovalores da submatriz de reestruturação, formada pela intersecção das linhas e colunas referentes aos dois parâmetros.

Para entender melhor o porquê de se desejar que as superfícies de resposta para um par de parâmetros sejam concêntricas, é preciso recordar a estreita ligação que existe entre a resolução de um problema de minimização e a resolução de um sistema de equações lineares. Essa ligação pode ser facilmente mostrada através do uso da aproximação por Séries de Taylor de 2^ª ordem da função objetivo a ser minimizada.

Seja $f(x)$ a função a ser minimizada. A sua aproximação é dada por:

$$f(x) \cong f(x_0) + \nabla f(x_0) (x-x_0) + 1/2 (x-x_0)^T H(x_0) (x-x_0) \quad (V.3)$$

No ponto de mínimo deve-se ter o gradiente anulado:

$$\nabla f(x) \cong \nabla f(x_0) + H(x_0) (x-x_0) = 0 \quad (V.4)$$

A equação (V.4) configura um sistema de equações lineares onde o vetor de incógnitas é x . Um sistema de equações lineares pode ser apresentado na forma:

$$Ax = b \quad (V.5)$$

Se forem provocadas perturbações na matriz A ou vetor b , pode-se verificar que perturbações aparecem na solução do sistema. Pela teoria das perturbações chega-se à definição do que se chama número condição da matriz A .

O número condição como o próprio nome indica refere-se ao condicionamento da matriz A . Em outras palavras, indica o efeito máximo de perturbações em b ou em A sobre a solução do sistema. Assim se o número condição for grande, pequenas perturbações podem provocar mudanças muito grandes na solução exata. Uma matriz A é, pois, dita mal condicionada se o número condição de A é grande e é dita bem condicionada se o número condição de A é pequeno.

Para a obtenção do número condição supõe-se primeiramente que o lado direito de (V.5) seja perturbado para $(b + \Delta b)$ e que a solução exata do sistema perturbado é $(x + \Delta x)$. Assim vem:

$$A(x + \Delta x) = b + \Delta b \quad (V.6)$$

$$\Delta x = A^{-1} \Delta b \quad (V.7)$$

Para medir Δx , invocam-se as propriedades de normas vetoriais e matriciais compatíveis:

$$\| \Delta x \| \leq \| A^{-1} \| \| \Delta b \| \quad (V.8)$$

$$\| b \| \leq \| A \| \| x \| \quad (V.9)$$

Reunindo (V.8) e V.9) obtém-se:

$$\frac{\| \Delta x \|}{\| x \|} \leq \| A \| \| A^{-1} \| \frac{\| \Delta b \|}{\| b \|} \quad (V.10)$$

Por outro lado, se a matriz A presente em (V.5) for perturbada para (A + ΔA) vem:

$$(A + \Delta A) (x + \Delta x) = b \quad (V.11)$$

$$\Delta x = - A^{-1} \Delta A (x + \Delta x) \quad (V.12)$$

Utilizando novamente as propriedades de normas vetoriais e matriciais obtém-se:

$$\| \Delta x \| \leq \| A^{-1} \| \| \Delta A \| \| x + \Delta x \| \quad (V.13)$$

Pode-se obter, então:

$$\frac{\| \Delta x \|}{\| x + \Delta x \|} \leq \| A \| \| A^{-1} \| \frac{\| \Delta A \|}{\| A \|} \quad (V.14)$$

Nota-se que, tanto no caso em que se provocam perturbações em b como no caso em que se provocam perturbações em A, mudanças relativas nas soluções são limitadas pelo fator $\| A \| \| A^{-1} \|$ multiplicado pelas perturbações relativas nos dados.

Em vista dessa exposição, o número condição assume a forma:

$$\text{CONDCA} = \| A \| \cdot \| A^{-1} \| \quad (V.15)$$

onde:

CONDCA) - número condição da matriz A

$\| A \|$ - norma matricial de A

$\| A^{-1} \|$ - norma matricial de A^{-1}

Pela definição de norma matricial subordinada a norma vetorial tem-se:

$$\| A \| = \max_{\|x\|=1} \| Ax \| \quad (V.16)$$

onde x representa um vetor.

Supondo que a matriz A tenha "n" diferentes autovetores u_i , $i=1, \dots, n$, podemos representar qualquer vetor "x" como uma combinação linear dos u_i 's, já que formam um sistema ortonormal que pode ser tomado como base.

Tem-se, então:

$$x = \sum \alpha_i u_i \quad (V.17)$$

$$\text{onde } \sum \alpha_i^2 = 1 \text{ e } \| x \| = 1$$

Logo:

$$\| A \| = \max_{\sum \alpha_i^2 = 1} \| \sum A \alpha_i u_i \| = \max_{\sum \alpha_i^2 = 1} \| \sum \alpha_i \lambda_i u_i \| \quad (V.18)$$

onde λ_i são os autovalores associados aos autovetores da matriz A. Se for feito uso da norma Euclidiana e do conhecimento de que para um vetor y vale a relação:

$$\| y \|_{p=2}^2 = y^T y \quad (V.19)$$

onde o valor de $p = 2$ indica norma euclidiana.

Pode-se escrever:

$$\| A \|_2^2 = \max_{\sum \alpha_i^2 = 1} \left(\sum_i \alpha_i \lambda_i u_i \right) \left(\sum_j \alpha_j \lambda_j u_j \right) = \max_{\sum \alpha_i^2 = 1} \sum_i \alpha_i^2 \lambda_i^2 \quad (V.20)$$

Uma vez que o máximo será atingido quando o α_i associado ao maior autovalor da matriz A ($\lambda_{\max}(A)$) for igual a um (1) e os demais forem iguais a zero (0), chega-se a:

$$\| A \|_2^2 = \lambda_{\max}^2(A) \quad (V.21)$$

$$\| A \| = \lambda_{\max}(A) \quad (V.22)$$

Para o cálculo de $\| A^{-1} \|$, faz-se uso do seguinte enunciado:

se $\langle \lambda_i, i=1, \dots, n \rangle$ são os autovalores da matriz A, os autovalores da matriz A^{-1} serão $\langle 1/\lambda_i, i=1, \dots, n \rangle$.

Obtém-se, então:

$$\lambda_{\max}(A^{-1}) = 1/\lambda_{\min}(A) \quad (V.23)$$

$$\| A^{-1} \| = 1/\lambda_{\min}(A) \quad (V.24)$$

Vé-se assim que o número condição pode ser escrito da seguinte forma:

$$\text{cond}(A) = \lambda_{\max}(A) / \lambda_{\min}(A) \quad (V.25)$$

Repare-se a analogia entre a equação (V.25) e a equação (V.2) que exprime o índice de concentricidade. Pode-se escrever a partir dessas equações o seguinte:

$$X_{ij} = \sqrt{1/\text{cond}(A)} \quad (V.26)$$

Para se visualizar o número condição no \mathbb{R}^3 , observe-se a Figura (V.2).

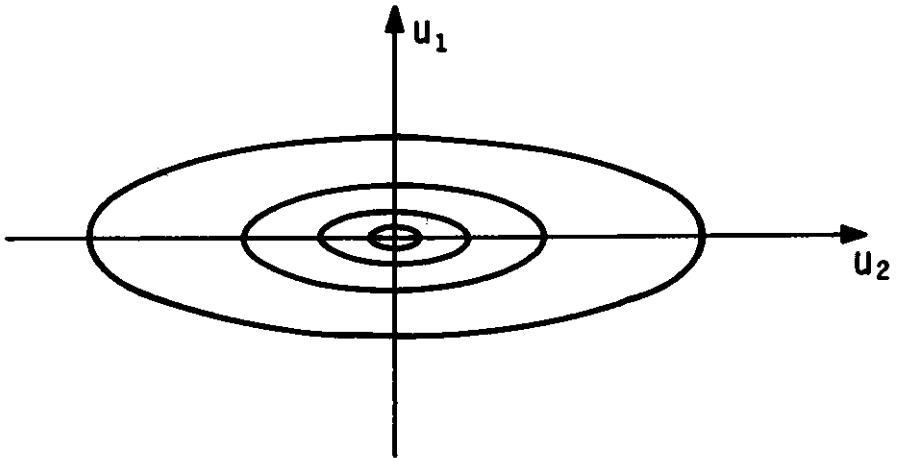


Figura V.2 - Superfície de Resposta de uma Função Quadrática

Os autovalores de uma função quadrática estão associados aos seus eixos. A superfície assume a forma de uma elipse no caso da matriz ser definida positiva. Ao maior autovalor corresponde o menor eixo da elipse e ao menor autovalor corresponde o maior eixo. Depreende-se, pois, que o número condição nada mais é do que a relação entre os eixos maior e menor da elipse configurada na Figura (V.2).

O índice de sensibilidade, assim como o índice de concentricidade, pode fornecer elementos valiosos para a análise de eventuais problemas encontrados no processo de otimização, sendo dado por:

$$n_i = \left[\frac{S_{ii}}{S_{ii} - g_i^T * G_i^{-1} * g_i} \right]^{1/2} \quad (V.27)$$

onde:

S_{ii} - elemento da diagonal da matriz de reestruturação correspondente ao parâmetro θ_i

g_i - vetor correspondente a i ésima coluna da matriz de reestruturação deletando-se o i ésimo elemento

G_i - submatriz de reestruturação, obtida eliminando-se a i ésima linha e coluna

Quando $n_i=1$, não há compensação pelos demais parâmetros para os efeitos do parâmetros θ_i na vazão gerada pelo modelo. Quanto maior for o índice, maior a compensação. Em outras palavras, um alto índice de sensibilidade para um parâmetro indica sua pequena identificabilidade, porque eventuais desvios em relação ao seu correto valor podem ser facilmente compensados por movimentos nos demais parâmetros.

Tendo sido explicados o que significam os índices de concentricidade e sensibilidade, que são perfeitamente possíveis de serem calculados para um modelo chuva-vazão desde que se disponha dos valores das derivadas parciais da função objetivo, pode-se passar à apresentação e análise dos resultados obtidos para esses índices. Os resultados estão mostrados nas Tabelas (V.1) e (V.2).

	KSUP	KPER	KSUB	ABSI	CPER
KSUP	-	0.1010	0.0002	0.0693	0.6353
KPER		-	0.0014	0.0028	0.0177
KSUB			-	0.0000	0.0001
ABSI				-	0.0323
CPER					-

Tabela V.1 - Índice de concentricidade para cada par de parâmetros

Parâmetro	n_i
KSUP	1.14
KPER	5.00
KSUB	1.19
ABSI	3.40
CPER	6.38

Tabela V.2 - Índice de sensibilidade para cada um dos parâmetros

Tenha-se clareza que os índices de concentricidade e sensibilidade, calculados com base na matriz de identificabilidade estrutural do modelo, dizem respeito ao ponto tomado como ótimo, onde os parâmetros assumem os valores que deram origem à série sintética utilizada no estudo.

Os resultados apresentados na Tabela (V.1) mostram que, de uma maneira geral, os índices de concentricidade assumiram valores bastante baixos. Esses valores baixos significam altas excentricidades das elipses que representam a superfície de resposta do modelo. As altas excentricidades, por sua vez, estão associadas a valores altos para o número condição. Em síntese, esses valores baixos indicam possivelmente dificuldades na obtenção da solução ótima.

Contudo um par de parâmetros (KSUP,CPER) constituiu exceção. O índice de concentricidade para o par (KSUP,CPER) sugere um efeito relativamente equilibrado por parte desses parâmetros. O valor de 0.63, próximo a 1.00, confirma os bons resultados obtidos na condução da otimização desse par como atestam as Tabelas (IV.7) e (IV.21).

- JOHNSTON, P. R. e PILGRIM, D. H. (1973), "A Study of Parameter Optimization for a Rainfall-Runoff 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 Resour. Res., 12(3), pp. 477-486.
- KUCZERA, G. (1982), "On The Relationship Between The Reliability of Parameter Estimates and Hydrologic Time Series Data Used in Calibration", Water Resour. Res., 18(1), pp. 146-155.
- KUCZERA, G. (1983a), "Improved Parameter Inference in Catchment Models, 1 -Evaluating Parameter Uncertainty", Water Resour. Res., 19(5), pp. 1151-1162.
- KUCZERA, G. (1983b), "Improved Parameter Inference in Cachment Models, 2, "Combining Different Kinds of Hydrologic Data and Testing Their Compatibility", Water Resour. Res., 19(5), pp. 1163-1172.
- KÜESTER, J. L. e MIZE, J. H. (1976), "Optimization Techniques with FORTRAN", McGrawHill Book Company.
- HINO, M. e HASEBE, M. (1981), "Analysis of Hidrologic Characteristics from Runoff Data -A Hydrologic Inverse Problem", J. of Hydrol., 49, pp. 287-313.
- LIN, A. C. e YEH, W. W-G (1974), "Identification of Parameters in an Inhomogeneous Aquifer by Use of The Maximum Principle of Optimal Control and Quasi-Linearization", Water Resour. Res., 10(4), pp. 829-838.
- LOPES, J. E., BRAGA, B. P. F. e CONEJO, J. G. L. (1981), "SMAP - Simplified Hydrological Model", Applied Modelling in Catchment Hydrology, Water Resources Pub.

- MAGETTE, W. L., SHANHOLTZ, V. O. e CARR, J. C. (1976), "Estimating Selected Parameters for The Kentucky Watershed Model from Watershed Characteristics", Water Resour. Res., 12(3), pp. 472-476.
- MANDEVILLE, A. N., O'CONNEL, P. E., SUTCLIFFE, J. V. e NASH, J. E. (1970), "River Flow Forecasting Through Conceptual Models , Part III - The Ray Catchment at Grendon UnderWood", J. of Hydrol., 11, pp. 109-128.
- MEIN, R. G. e BROWN, B. M. (1978), "Sensitivity of Optimized Parameters in Watershed Models", Water Resour. Res., 14(2), pp. 299-303.
- MOORE, R. J., CLARKE, R. T.(1981), "A Distribution Function Approach to Rainfall-Runoff Modeling, Water Resour. Res., 17(5), pp. 1367-1382.
- MUFTUOGLU, R. F. (1984), "New Models for Nonlinear Catchment Analysis", J. of Hydrol., 73, pp. 335-357.
- NASH, J. E. e SUTCLIFFE (1970), J. V., "River Flow Forecasting Through Conceptual Models, Part I - A Discussion of Principles", J. of Hydrol., 10, pp. 282-290.
- NELDER, J. A. e MEAD, R. (1965), "A Simplex Method for Function Minimization" , Computer. J., 7(4), pp. 308-313.
- O'DONNELL, T. e CANEDO, P. M. (1980), "The Reliability of Conceptual Basin Model Calibration", Proceedings of the Oxford Symposium on Hydrological Forecasting, IAHS, Publ. n^o 129.
- OGUNKOYA, O. O., ADEJUWON, J. O. e JEFE, L. K. (1984), "Runoff Response to Basin Parameters in Southwestern Nigeria", J. of Hydrol., 72, pp. 67-84.

- ROTUNNO FILHO, O. C. e CANEDO, P. M. (1987), "Comparação de Dois Métodos de Otimização em Modelo Hidrológico do Tipo Chuva-Vazão", VII Simpósio de Hidrologia e Recursos Hídricos, Salvador-BA
- ROSEN, J. B. (1960), "The Gradient Projection Method for Non-Linear Programming, Part I: linear constraints", J. Appl. Math., 8, pp. 181-217.
- ROSENBROCK, H. H. (1960), "An Automatic Method for Finding The Greatest or Least Value of a Function, Computer J., 3, pp. 175-184.
- SOROOSHIAN, S. (1981), "Parameter Estimation of Rainfall-Runoff Models with Heteroscedastic Streamflow Errors - The Noninformative Data Case", J. of Hydrol., 52, pp. 127-138.
- SOROOSHIAN, S. e ARFI, F. (1982), "Response Surface Parameter Sensitivity Analysis Methods for Postcalibration Studies", Water Resour. Res., 18(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 Resour. Res., 16(2), 430-442.
- SOROOSHIAN, S., GUPTA, V. K. e FULTON, J. C. (1983), "Evaluation of Maximum Likelihood Parameter Estimation Techniques for Conceptual Rainfall-Runoff Models: Influence of Calibration Data Variability and Length of Model Credibility", Water Resour. Res., 10(1), pp. 251-259.
- TROUTMAN, B. M. (1982), "An Analysis of Input Errors in Precipitation-Runoff Models Using Regression with Errors in the Independent Variables", Water Resour. Res., 18(4), pp. 947-964.

- TROUTMAN, B. M. (1983), "Runoff Prediction Errors and Bias in Parameter Estimation Induced by Spatial Variability of Precipitation", Water Resour. Res., 19(3), pp. 791-810.
- TROUTMAN, B. M. (1985a), "Errors and Parameter Estimation in Precipitation-Runoff Modeling, 1, Theory", Water Resour. Res., 21(8), pp. 1195-1213.
- TROUTMAN, B. M. (1985b), "Errors and Parameter Estimation in Precipitation-Runoff Modeling, 2, A Case Study", Water Resour. Res., 21(8), pp. 1214-1222.
- YEH, W. W-G (1986), "Review of Parameter Identification Procedures in Groundwater Hydrology - The Inverse Problem", Water Resour. Res., 22(2), pp. 95-108.
- YEVJEVICH, V (1974), "Determinism and Stochasticity in Hydrology", J. of Hydrol., 22, pp. 225-238.

APÊNDICE A - PROGRAMA DO MODELO SMAP (FORTRAN)

```

C.....INICIALIZACAO DAS VARIAVEIS
C.....DETERMINE O NIVEL INICIAL DO RESERVATORIO DO SOLO
      NSOL= NSOL + SOLI*NSAT
C.....DETERMINE O NIVEL DO RESERVATORIO SUBTERRANEO
      NSUB= NSUB + SUBI*(TEMP*DELTD)/(AREA*(1-KSUB))
C.....DETERMINE A VAZAO DO INSTANTE ANTERIOR
      QANT=SUBI
C.....INICIO DO CICLO ANUAL
      DO 400 IANO = 1,NANO
C.....VERIFICA SE O ANO E BISSEXTO
      IAUX=0
      IF (MODCLANOCIANO),4).EQ.0) IAUX=1
      ICCI=1
      ICCF=31
C.....INICIO DO CICLO MENSAL
      DO 390 IMES=1.12
C.....TESTE DO ANO BISSEXTO
      IF (IMES.EQ.KMES.AND.IAUX.EQ.1) ICCF=ICCF+1
C.....INICIO DO CICLO DIARIO
      DO 310 IDIA=ICCI,ICCF
      IF (NSOL.GE.CPER*NSAT.AND.NSOL.LE.NSAT) INIV=2 (**)
C.....DETERMINE A EVAPOTRANSPIRACAO SATISFEITA E A NAO
C.....SATISFEITA
      DEVP=0
      DEVI=EVPTCIANO,IDIA)
C.....CALCULO DA PARCELA DE PRECIPITACAO EFETIVA NO DIA
C.....(PREC-ABSI)
C.....SE FOR NEGATIVA INDICA QUE O VALOR DE PRECIPITACAO
C.....OU E NULO OU E INFERIOR A ABSI, DEVENDO SER
C.....ADICIONADA AO RESERVATORIO DO SOLO
      PINF=0
      PEFE=PRECCIANO,IDIA)- ABSI
      IF (PEFE.LT.0) PINF=PRECCIANO,IDIA)
      IF (PEFE.LT.0) PEFE=0
      IF (PEFE.EQ.0) I1COD=1
      IF (PEFE.NE.0) I1COD=0

```

(**)

(**)

C. ATUALIZACAO DE ABSP EM FUNCAO DO ESTADO DO SOLO DA
C. BACIA

ABSP=NSAT-NSOL

C. CRIACAO DE UM VETOR AUXILIAR VAUX COM 9 POSICOES

C. QUE SERA UTIL NO CALCULO DAS DERIVADAS DA FUNCAO

C. OBJETIVO EM RELACAO A CADA UM DOS PARAMETROS. NESSE

C. PONTO SAO PREENCHIDAS APENAS 5 POSICOES (***)

VAUX(1)= PRECCINO, IDIA) (***)

VAUX(2)= NSUP (***)

VAUX(3)= NSOL (***)

VAUX(4)= NSUB (***)

VAUX(5)= ABSP (***)

C. CALCULO DA PARCELA QUE ENTRA NO RESERV. SUPERF.

C. (SCS)

QRES= (PEFE**2)/(PEFE+ABSP)

C. CALCULO DA PARCELA QUE ENTRA NO RESERV. DO SOLO

QINF=PEFE-QRES+PINF

IF (QINF.LE.0) QINF=0

C. PERMITA QUE OCORRA EVAPOTRANSPIRACAO A NIVEL

C. POTENCIAL

C. NA PARCELA QUE VAI PARA O RESERVATORIO DO SOLO

DEVR= DEVI

IF (QINF.GT.DEVR) I2COD=1 (***)

IF (QINF.LE.DEVR) I2COD=0 (***)

IF (QINF.GT.DEVR) GO TO 190

DEVR= QINF

QINF=0

GO TO 200

190 QINF= QINF - DEVR

200 DEVP= DEVP + DEVR

DEVI= DEVI - DEVR

C. ATUALIZE O NIVEL DO RESERVATORIO SUPERFICIAL

NSUP= NSUP + QRES

C. PREENCHIMENTO DE 2 POSICOES DO VETOR VAUX (***)

VAUX(6)= DEVR (***)

VAUX(7)= DEVI (***)

C. ATUALIZE O NIVEL DO RESERVATORIO DO SOLO

NSOL= NSOL + QINF

```

C. .... DETERMINE A TAXA DE UMIDADE ATUAL DO SOLO
      TSOL= NSOL/NSAT
      IF (TSOL.LE.1) I3COD=1                      (***)
      IF (TSOL.GT.1) I3COD=0                      (***)
      IF (TSOL.LE.1) GO TO 210
C. .... DETERMINE A PARCELA QUE RETORNA PARA O RESERV.
C. .... SUPERFICIAL
      QEXC= NSOL - NSAT
C. .... ATUALIZE O RESERV. DO SOLO E A SUA UMIDADE
      NSOL=NSAT
      TSOL=1
      INIV=3                                       (***)
C. .... ATUALIZE O RESERVATORIO SUPERFICIAL
      NSUP= NSUP + QEXC
C. .... CALCULE A VAZAO DE ESCOAMENTO SUPERFICIAL
      210 QSUP= NSUP*(1-KSUP)
C. .... ATUALIZE O NIVEL DO RESERVATORIO SUPERFICIAL
      NSUP= NSUP - QSUP
C. .... PERMITA QUE OCORRAM AS PERDAS POR EVAPOTRANSPIRACAO
C. .... NO SOLO
      IF (DEVI.EQ.0) I4COD=1                      (***)
      IF (DEVI.NE.0) I4COD=0                      (***)
      IF (DEVI.EQ.0) GO TO 240
      DEVR=DEVI*TSOL
      IF (NSOL.GT.DEVR) GO TO 220
      DEVR=NSOL
      NSOL=0
      GO TO 230
      220 NSOL= NSOL-DEVR
      230 DEVI= DEVI-DEVR
      DEVP= DEVP+DEVR
C. .... DETERMINE A NOVA TAXA DE UMIDADE DO SOLO
      TSOL= NSOL/NSAT
C. .... CALCULE A PERCOLACAO PROFUNDA PARA O RESERV.
C. .... SUBTERRANEO
      240 QPER= (NSOL-(C*PER*NSAT))*TSOL*KPER
      IF (QPER.LE.0) QPER=0
      IF (QPER.EQ.0) INIV=1                       (***)

```

C. ATUALIZE O NIVEL DO RESERVATORIO DO SOLO
VAUX(8) = NSOL (**)
NSOL = NSOL - QPER

C. DETERMINE A TAXA DE UMIDADE ATUAL DO SOLO
TSOL = NSOL / NSAT

C. ATUALIZE O NIVEL DO RESERVATORIO SUBTERRANEO
NSUB = NSUB + QPER

C. CALCULE A VAZAO DO RESERVATORIO SUBTERRANEO
QSUB = NSUB * (1 - KSUB)

C. ATUALIZE O NIVEL DO RESERVATORIO SUBTERRANEO
VAUX(9) = NSUB (**)
NSUB = NSUB - QSUB

C. CALCULE A PARCELA DE AGUA QUE CHEGA AO CANAL
QGER = (QSUP + QSUB) * AREA / TEMP

C. TERMINO DO CICLO DIARIO
310 CONTINUE

C. TERMINO DO CICLO MENSAL
390 CONTINUE

C. TERMINO DO CICLO ANUAL
400 CONTINUE

APÊNDICE B - DEFINIÇÃO DOS POSSÍVEIS CAMINHOS NO MODELO SMAP

Nesse apêndice são mostrados os possíveis caminhos do modelo SMAP. Esses caminhos correspondem aos possíveis modos de atuação do modelo. Para cada caminho são apresentados os níveis dos reservatórios que compõe o SMAP em um instante de tempo t .

Na definição dos caminhos aparece a variável INIV. Essa variável pode assumir os seguintes valores:

INIV=1	NSOL < NPER
INIV=2	NPER \leq NSOL \leq NSAT
INIV=3	NSOL > NSAT

As variáveis I1COD, I2COD, I3COD, I4COD, I5COD, I6COD e I7COD que também são apresentadas correspondem às "flags" necessárias para a identificação dos diversos caminhos.

Ao final desse apêndice é mostrado o fluxograma do modelo SMAP, a partir do qual foram obtidos os diferentes modos de atuação do modelo SMAP.

1- NSUP^t=NSUP^{t-1}
 NSUB^t=NSUB^{t-1}
 INIV=1
 I1COD=1; I2COD=1; I3COD=1; I4COD=1; I5COD=1; I6COD=1;
 I7COD=1;

 2- NSUP^t=NSUP^{t-1}
 NSUB^t=NSUB^{t-1}
 INIV=1
 I1COD=1; I2COD=1; I3COD=1; I4COD=1; I5COD=1; I6COD=1;
 I7COD=1;

$$3- \text{NSUP}^t = \text{NSUP}^{t-1}$$

$$\text{NSOL}^t = \text{NSOL}^{t-1} + \text{PREC} - \text{DEVR}$$

$$\text{NSUB}^t = \text{NSUB}^{t-1} + \text{QPER}$$

$$\text{INIV} = 2$$

I1COD=1; I2COD=1; I3COD=1; I4COD=1; I5COD=1; I6COD=0;
I7COD=1;

$$4- \text{NSUP}^t = \text{NSUP}^{t-1}$$

$$\text{NSUB}^t = \text{NSUB}^{t-1}$$

$$\text{INIV} = 1$$

I1COD=1; I2COD=1; I3COD=1; I4COD=1; I5COD=1; I6COD=1;
I7COD=1;

$$5- \text{NSUP}^t = \text{NSUP}^{t-1}$$

$$\text{NSUB}^t = \text{NSUB}^{t-1}$$

$$\text{INIV} = 1$$

I1COD=1; I2COD=1; I3COD=1; I4COD=0; I5COD=1; I6COD=0;
I7COD=1;

$$6- \text{NSUP}^t = \text{NSUP}^{t-1}$$

$$\text{NSOL}^t = \text{NSOL}^{t-1} + \text{PREC} - \text{DEVR} - \text{DEVI} * \text{TSOL}$$

$$\text{NSUB}^t = \text{NSUB}^{t-1} + \text{QPER}$$

I1COD=1; I2COD=1; I3COD=1; I4COD=0; I5COD=1; I6COD=0;
I7COD=0;

$$7- \text{NSUP}^t = \text{NSUP}^{t-1}$$

$$\text{NSUB}^{t-1} = \text{NSUB}^{t-1}$$

$$\text{INIV} = 1$$

I1COD=1; I2COD=1; I3COD=1; I4COD=0; I5COD=0; I6COD=0 ou 1;
I7COD=1;

$$8- \text{NSUP}^t = \text{NSUP}^{t-1} + \text{NSOL}^{t1} - \text{NSAT}$$

$$\text{NSOL}^{t1} = \text{NSOL}^{t-1} + \text{PREC} - \text{DEVR}$$

$$\text{NSUB}^t = \text{NSUB}^{t-1}$$

$$\text{INIV} = 1$$

Obs.: caminho impossível

$$9- \text{NSUP}^t = \text{NSUP}^{t-1} + \text{NSOL}^{t1} - \text{NSAT}$$

$$\text{NSUB}^t = \text{NSUB}^{t-1}$$

INIV=1

Obs.: caminho impossivel

$$10- \text{NSUP}^t = \text{NSUP}^{t-1} + \text{NSOL}^{t1} - \text{NSAT}$$

$$\text{NSOL}^{t1} = \text{NSOL}^{t-1} + \text{PREC} - \text{DEVVR}$$

$$\text{NSOL}^t = \text{NSAT}$$

INIV=3

I1COD=1; I2COD=1; I3COD=0; I4COD=1; I5COD=1; I6COD=0;
I7COD=0;

$$11- \text{NSUP}^t = \text{NSUP}^{t-1} + \text{NSOL}^{t1} - \text{NSAT}$$

$$\text{NSUB}^t = \text{NSUB}^{t-1}$$

INIV=1;

Obs.: caminho impossivel

$$12- \text{NSUP}^t = \text{NSUP}^{t-1} + \text{NSOL}^{t1} - \text{NSAT}$$

$$\text{NSUB}^t = \text{NSUB}^{t-1}$$

INIV=1

I1COD=1; I2COD=1; I3COD=0; I4COD=0; I5COD=1; I6COD=0;
I7COD=1;

$$13- \text{NSUP}^t = \text{NSUP}^{t-1} + \text{NSOL}^{t1} - \text{NSAT}$$

$$\text{NSOL}^{t1} = \text{NSOL}^{t-1} + \text{PREC} - \text{DEVVR}$$

$\text{NSOL}^t = \text{NSAT} - \text{DEVI}$

$\text{NSUB}^t = \text{NSUB}^{t-1} + \text{QPER}$

INIV=3

I1COD=1; I2COD=1; I3COD=0; I4COD=0; I5COD=1; I6COD=0;
I7COD=0;

$$14- \text{NSUP}^t = \text{NSUP}^{t-1} + \text{NSOL}^{t1} - \text{NSAT}$$

$$\text{NSUB}^t = \text{NSUB}^{t-1}$$

INIV=1

I1COD=1; I2COD=1; I3COD=0; I4COD=0; I5COD=0; I6COD=0 ou 1;
I7COD=1;

$$15- \text{NSUP}^t = \text{NSUP}^{t-1}$$

$$\text{NSUB}^t = \text{NSUB}^{t-1}$$

$$\text{INIV} = 1$$

I1COD=1; I2COD=0; I3COD=1; I4COD=1; I5COD=1; I6COD=1;
I7COD=1;

$$16- \text{NSUP}^t = \text{NSUP}^{t-1}$$

$$\text{NSUB}^t = \text{NSUB}^{t-1}$$

$$\text{INIV} = 1$$

I1COD=1; I2COD=0; I3COD=1; I4COD=1; I5COD=1; I6COD=0;
I7COD=0;

$$17- \text{NSUP}^t = \text{NSUP}^{t-1}$$

$$\text{NSOL}^t = \text{NSOL}^{t-1}$$

$$\text{NSUB}^t = \text{NSUB}^{t-1} + \text{QPER}$$

$$\text{INIV} = 2$$

I1COD=1; I2COD=0; I3COD=1; I4COD=0; I5COD=1; I6COD=0;
I7COD=1;

$$18- \text{NSUP}^t = \text{NSUP}^{t-1}$$

$$\text{NSOL}^t = \text{NSOL}^{t-1}$$

$$\text{NSUB}^t = \text{NSUB}^{t-1}$$

$$\text{INIV} = 1$$

I1COD=1; I2COD=0; I3COD=1; I4COD=0; I5COD=1; I6COD=1;
I7COD=1;

$$19- \text{NSUP}^t = \text{NSUP}^{t-1}$$

$$\text{NSOL}^t = \text{NSOL}^{t-1}$$

$$\text{NSUB}^t = \text{NSUB}^{t-1}$$

$$\text{INIV} = 1$$

I1COD=1; I2COD=0; I3COD=1; I4COD=0; I5COD=1; I6COD=0;
I7COD=1;

$$20- \text{NSUP}^t = \text{NSUP}^{t-1}$$

$$\text{NSOL}^t = \text{NSOL}^{t-1} - \text{DEVI} * \text{NSOL}^{t-1} / \text{NSAT}$$

$$\text{NSUB}^t = \text{NSUB}^{t-1} + \text{QPER}$$

$$\text{INIV} = 2$$

I1COD=1; I2COD=0; I3COD=1; I4COD=0; I5COD=1; I6COD=0;
I7COD=0;

$$21 - \text{NSUP}^t = \text{NSUP}^{t-1}$$

$$\text{NSOL}^t = \text{NSOL}^{t-1}$$

$$\text{NSUB}^t = \text{NSUB}^{t-1}$$

$$\text{INIV} = 1$$

I1COD=1; I2COD=0; I3COD=1; I4COD=0; I5COD=0; I6COD=0 OU 1;
I7COD=1;

$$22 - \text{NSUP}^t = \text{NSUP}^{t-1} + \text{NSOL}^{t-1} - \text{NSAT}$$

$$\text{NSOL}^t = \text{NSOL}^{t-1}$$

$$\text{NSUB}^t = \text{NSUB}^{t-1}$$

$$\text{INIV} = 1$$

Obs.: caminho impossível

$$23 - \text{NSUP}^t = \text{NSUP}^{t-1} + \text{NSOL}^{t-1} - \text{NSAT}$$

$$\text{NSOL}^t = \text{NSOL}^{t-1}$$

$$\text{NSUB}^t = \text{NSUB}^{t-1}$$

$$\text{INIV} = 1$$

Obs.: caminho impossível

$$24 - \text{NSUP}^t = \text{NSUP}^{t-1} + \text{NSOL}^{t-1} - \text{NSAT}$$

$$\text{NSOL}^t = \text{NSAT}$$

$$\text{NSUB}^t = \text{NSUB}^{t-1} + \text{QPER}$$

$$\text{INIV} = 3$$

I1COD=1; I2COD=0; I3COD=0; I4COD=1; I5COD=1; I6COD=0;
I7COD=0;

$$25 - \text{NSUP}^t = \text{NSUP}^{t-1} + \text{NSOL}^{t-1} - \text{NSAT}$$

$$\text{NSOL}^t = \text{NSOL}^{t-1}$$

$$\text{NSUB}^t = \text{NSUB}^{t-1}$$

$$\text{INIV} = 1$$

Obs.: caminho impossível

$$26 - \text{NSUP}^t = \text{NSUP}^{t-1} + \text{NSOL}^{t-1} - \text{NSAT}$$

$$\text{NSOL}^t = \text{NSOL}^{t-1}$$

$$\text{NSUB}^t = \text{NSUB}^{t-1}$$

$$\text{INIV} = 1$$

I1COD=1; I2COD=0; I3COD=0; I4COD=0; I5COD=1; I6COD=0;
I7COD=1;

$$27- \text{NSUP}^t = \text{NSUP}^{t-1} + \text{NSOL} - \text{NSAT}$$

$$\text{NSOL}^t = \text{NSAT} - \text{DEVI}$$

$$\text{NSUB}^t = \text{NSUB}^{t-1} + \text{QPER}$$

$$\text{INIV} = 3$$

I1COD=1; I2COD=0; I3COD=0; I4COD=0; I5COD=1; I6COD=0;
I7COD=0;

$$28- \text{NSUP}^t = \text{NSUP}^{t-1} + \text{NSOL}^{t-1} - \text{NSAT}$$

$$\text{NSUB}^t = \text{NSUB}^{t-1}$$

$$\text{INIV} = 1$$

I1COD=1; I2COD=2; I3COD=0; I4COD=0; I5COD=0; I6COD=0 ou 1;
I7COD=1;

$$29- \text{NSUP}^t = \text{NSUP}^{t-1} + \text{QRES}$$

$$\text{NSOL}^t = \text{NSOL}^{t-1}$$

$$\text{NSUB}^t = \text{NSUB}^{t-1}$$

$$\text{INIV} = 1$$

I1COD=0; I2COD=1; I3COD=1; I4COD=1; I5COD=1; I6COD=1;
I7COD=1;

$$30- \text{NSUP}^t = \text{NSUP}^{t-1} + \text{QRES}$$

$$\text{NSOL}^t = \text{NSOL}^{t-1}$$

$$\text{NSUB}^t = \text{NSUB}^{t-1}$$

$$\text{INIV} = 1$$

I1COD=0; I2COD=1; I3COD=1; I4COD=1; I5COD=1; I6COD=0;
I7COD=1;

$$31- \text{NSUP}^t = \text{NSUP}^{t-1} + \text{QRES}$$

$$\text{NSOL}^t = \text{NSOL}^{t-1} + \text{PREC} - \text{ABSI} - \text{DEVR} - \text{QRES}$$

$$\text{NSUB}^t = \text{NSUB}^{t-1} + \text{QPER}$$

$$\text{INIV} = 2$$

I1COD=0; I2COD=1; I3COD=1; I4COD=1; I5COD=1; I6COD=0;
I7COD=0;

$$32- \text{NSUP}^t = \text{NSUP}^{t-1} + \text{QRES}$$

$$\text{NSOL}^t = \text{NSOL}^{t-1}$$

$$\text{NSUB}^t = \text{NSUB}^{t-1}$$

$$\text{INIV} = 1$$

I1COD=0; I2COD=1; I3COD=1; I4COD=0; I5COD=1; I6COD=1;
I7COD=1;

33- $NSUP^t = NSUP^{t-1} + QRES$

$NSOL^t = NSOL^{t-1}$

$NSUB^t = NSUB^{t-1}$

INIV=1

I1COD=0; I2COD=1; I3COD=1; I4COD=0; I5COD=1; I6COD=0;
I7COD=1;

34- $NSUP^t = NSUP^{t-1} + QRES$

$NSOL^t = NSOL^{t-1} + PREC - ABSI - DEVR - QRES - DEVI * NSOL^{t4} / NSAT$

$NSOL^{t4} = NSOL^{t-1} + PREC - ABSI - DEVR - QRES$

$NSUB^t = NSUB^{t-1} + QPER$

INIV=2

I1COD=0; I2COD=1; I3COD=1; I4COD=0; I5COD=1; I6COD=0;
I7COD=0

35- $NSUP^t = NSUP^{t-1} + QRES$

$NSOL^t = NSOL^{t-1}$

$NSUB^t = NSUB^{t-1}$

INIV=1

I1COD=0; I2COD=1; I3COD=1; I4COD=0; I5COD=0; I6COD=0 OU 1;
I7COD=1;

36- $NSUP^t = NSUP^{t-1} + QRES + NSOL^{t4} - NSAT$

$NSOL^{t4} = NSOL^{t-1} + PREC - ABSI - DEVR - QRES$

$NSUB^t = NSUB^{t-1}$

INIV=1

Obs.: caminho impossível

37- $NSUP^t = NSUP^{t-1} + QRES + NSOL^{t4} - NSAT$

$NSOL^{t4} = NSOL^{t-1} + PREC - ABSI - DEVR - QRES$

$NSUB^t = NSUB^{t-1}$

INIV=1

Obs.: caminho impossível

38- $NSUP^t = NSUP^{t-1} + QRES + NSOL^{t4} - NSAT$

$$\text{NSOL}^t = \text{NSAT}$$

$$\text{NSOL}^{t^1} = \text{NSOL}^{t-1} + \text{PREC} - \text{ABSI} - \text{DEV} - \text{QRES}$$

$$\text{NSUB}^t = \text{NSUB}^{t-1} + \text{QPER}$$

$$\text{INIV} = 3$$

I1COD=0; I2COD=1; I3COD=0; I4COD=1; I5COD=1; I6COD=0;
I7COD=0

$$39- \text{NSUP}^t = \text{NSUP}^{t-1} + \text{QRES} + \text{NSOL}^{t^1} - \text{NSAT}$$

$$\text{NSOL}^{t^1} = \text{NSOL}^{t-1} + \text{PREC} - \text{ABSI} - \text{DEV} - \text{QRES}$$

$$\text{NSUB}^t = \text{NSUB}^{t-1}$$

$$\text{INIV} = 1$$

Obs.: caminho impossível

$$40- \text{NSUP}^t = \text{NSUP}^{t-1} + \text{QRES} + \text{NSOL}^{t^1} - \text{NSAT}$$

$$\text{NSOL}^{t^1} = \text{NSOL}^{t-1} + \text{PREC} - \text{ABSI} - \text{DEV} - \text{QRES}$$

$$\text{NSUB}^t = \text{NSUB}^{t-1}$$

$$\text{INIV} = 1$$

I1COD=0; I2COD=1; I3COD=0; I4COD=0; I5COD=1; I6COD=0;
I7COD=1;

$$41- \text{NSUP}^t = \text{NSUP}^{t-1} + \text{QRES} + \text{NSOL}^{t^1} - \text{NSAT}$$

$$\text{NSOL}^{t^1} = \text{NSOL}^{t-1} + \text{PREC} - \text{ABSI} - \text{DEV} - \text{QRES}$$

$$\text{NSOL}^t = \text{NSAT} - \text{DEVI}$$

$$\text{NSUB}^t = \text{NSUB}^{t-1} + \text{QPER}$$

$$\text{INIV} = 3$$

I1COD=0; I2COD=1; I3COD=0; I4COD=0; I5COD=1; I6COD=0;
I7COD=0;

$$42- \text{NSUP}^t = \text{NSUP}^{t-1} + \text{QRES} + \text{NSOL}^{t^1} - \text{NSAT}$$

$$\text{NSOL}^{t^1} = \text{NSOL}^{t-1} + \text{PREC} - \text{ABSI} - \text{DEV} - \text{QRES}$$

$$\text{NSUB}^t = \text{NSUB}^{t-1}$$

$$\text{INIV} = 1$$

I1COD=0; I2COD=1; I3COD=0; I4COD=0; I5COD=0; I6COD=0 ou 1;
I7COD=1;

$$43- \text{NSUP}^t = \text{NSUP}^{t-1} + \text{QRES}$$

$$\text{NSUB}^t = \text{NSUB}^{t-1}$$

$$\text{INIV} = 1$$

I1COD=0; I2COD=0; I3COD=1; I4COD=1; I5COD=1; I6COD=1;
I7COD=1;

44- $NSUP^t = NSUP^{t-1} + QRES$

$NSUB^t = NSUB^{t-1}$

INIV=1

I1COD=0; I2COD=0; I3COD=1; I4COD=1; I5COD=1; I6COD=0;
I7COD=0;

45- $NSUP^t = NSUP^{t-1} + QRES$

$NSOL^t = NSOL^{t-1}$

$NSUB^t = NSUB^{t-1}$

INIV=2;

I1COD=0; I2COD=0; I3COD=1; I4COD=1; I5COD=1; I6COD=0;
I7COD=0;

46- $NSUP^t = NSUP^{t-1} + QRES$

$NSOL^t = NSOL^{t-1}$

$NSUB^t = NSUB^{t-1}$

INIV=1

I1COD=0; I2COD=0; I3COD=1; I4COD=0; I5COD=1; I6COD=1;
I7COD=1;

47- $NSUP^t = NSUP^{t-1} + QRES$

$NSOL^t = NSOL^{t-1}$

$NSUB^t = NSUB^{t-1}$

INIV=1

I1COD=0; I2COD=0; I3COD=1; I4COD=0; I5COD=1; I6COD=0;
I7COD=1;

48- $NSUP^t = NSUP^{t-1} + QRES$

$NSOL^t = NSOL^{t-1} - DEVI * NSOL^{t-1} / NSAT$

$NSUB^t = NSUB^{t-1} + QPER$

INIV=2;

I1COD=0; I2COD=0; I3COD=1; I4COD=0; I5COD=1; I6COD=0;
I7COD=0;

49- $NSUP^t = NSUP^{t-1} + QRES$

$$NSOL^t = NSOL^{t-1}$$

$$NSUB^t = NSUB^{t-1}$$

$$INIV=1$$

I1COD=0; I2COD=0; I3COD=1; I4COD=0; I5COD=0; I6COD=0 ou 1;
I7COD=1;

$$50- NSUP^t = NSUP^{t-1} + QRES + NSOL^{t1} - NSAT$$

$$NSOL^t = NSOL^{t-1}$$

$$NSUB^t = NSUB^{t-1}$$

$$INIV=1$$

Obs.: caminho impossível

$$51- NSUP^t = NSUP^{t-1} + QRES + NSOL^{t1} - NSAT$$

$$NSOL^{t1} = NSOL^{t-1}$$

$$NSUB^t = NSUB^{t-1}$$

$$INIV=1$$

Obs.: caminho impossível

$$52- NSUP^t = NSUP^{t-1} + QRES + NSOL^{t1} - NSAT$$

$$NSOL^t = NSAT$$

$$NSOL^{t1} = NSOL^{t-1}$$

$$NSUB^t = NSUB^{t-1} + QPER$$

$$INIV=3$$

I1COD=0; I2COD=0; I3COD=0; I4COD=1; I5COD=1; I6COD=0;
I7COD=0;

$$53- NSUP^t = NSUP^{t-1} + QRES + NSOL^{t1} - NSAT$$

$$NSUB^t = NSUB^{t-1}$$

$$INIV=1$$

Obs.: caminho impossível

$$54- NSUP^t = NSUP^{t-1} + QRES + NSOL^{t1} - NSAT$$

$$NSUB^t = NSUB^{t-1}$$

$$INIV=1$$

I1COD=0; I2COD=0; I3COD=0; I4COD=0; I5COD=1; I6COD=0;
I7COD=1;

$$55- NSUP^t = NSUP^{t-1} + QRES + NSOL^{t1} - NSAT$$

$$\text{NSOL}^t = \text{NSAT} - \text{DEVI}$$

$$\text{NSUB}^t = \text{NSUB}^{t-1} + \text{QPER}$$

$$\text{INIV} = 3$$

I1COD=0; I2COD=0; I3COD=0; I4COD=0; I5COD=1; I6COD=0;
I7COD=0;

$$56- \text{NSUP}^t = \text{NSUP}^{t-1} + \text{QRES} + \text{NSOL}^t - \text{NSAT}$$

$$\text{NSUB}^t = \text{NSUB}^{t-1}$$

$$\text{INIV} = 1$$

I1COD=0; I1COD=0; I3COD=0; I4COD=0; I5COD=0; I6COD=0 OU 1;
I7COD=1;

APENDICE C - EXPRESSÕES ANALITICAS DAS VAZÕES GERADAS
PELO MODELO SMAP PARA OS DIVERSOS CAMINHOS
DEFINIDOS

Caminho 48

$$\begin{aligned}
 QGER(\theta) = & [NSUP^{t-1} * (1 - KSUP) & + \\
 (PREC - ABSI) ** 2 / & (PREC - ABSI - NSOL^{t-1} + NSAT) * (1 - KSUP) & + \\
 NSUB^{t-1} * (1 - KSUB) & + NSOL^{t-1} ** 2 / NSAT * KPER * (1 - KSUB) & - \\
 NSOL^{t-1} ** 2 * DEVI / & NSAT ** 2 * KPER * (1 - KSUB) & - \\
 DEVI * NSOL^{t-1} ** 2 / & NSAT ** 2 * KPER * (1 - KSUB) & + \\
 DEVI^2 * NSOL^{t-1} ** 2 / & NSAT ** 3 * KPER * (1 - KSUB) & - \\
 CPER * NSOL^{t-1} * & KPER * (1 - KSUB) & + \\
 NSOL^{t-1} / NSAT * & CPER * KPER * DEVI * (1 - KSUB)] * AREA / TEMP
 \end{aligned}$$

Caminho 3

$$\begin{aligned}
 QGER(\theta) = & [NSUP^{t-1} * (1 - KSUP) & + & NSUB^{t-1} * (1 - KSUB) & + \\
 NSOL^{t-1} ** 2 * & KPER / NSAT * (1 - KSUB) & + \\
 NSOL^{t-1} * PREC * & KPER / NSAT * (1 - KSUB) & - \\
 NSOL^{t-1} * DEVR * & KPER / NSAT * (1 - KSUB) & + \\
 PREC * NSOL^{t-1} * & KPER / NSAT * (1 - KSUB) & + \\
 PREC ** 2 * KPER / & NSAT * (1 - KSUB) - PREC * DEVR * & KPER / NSAT * (1 - KSUB) & - \\
 - & DEVR * NSOL^{t-1} * KPER / NSAT * (1 - KSUB) & - \\
 DEVR * PREC * KPER / & NSAT * (1 - KSUB) + DEVR ** 2 * & KPER / NSAT * (1 - KSUB) & + \\
 - CPER * KPER * & NSOL^{t-1} * (1 - KSUB) - CPER * & KPER * PREC * (1 - KSUB) & + \\
 CPER * KPER * & DEVR * (1 - KSUB)] * AREA / TEMP
 \end{aligned}$$

Caminho 6

$$\begin{aligned}
 QGER(\theta) = & [NSUP^{t-1} * (1 - KSUP) & + & NSUB^{t-1} * (1 - KSUB) & + \\
 NSOL^{t-1} ** 2 / & NSAT * KPER * (1 - KSUB) & + \\
 NSOL^{t-1} / NSAT * & KPER * PREC * (1 - KSUB) & - \\
 NSOL^{t-1} / NSAT * & KPER * DEVR * (1 - KSUB) & - \\
 NSOL^{t-1} ** 2 / & NSAT ** 2 * KPER * DEVI * (1 - KSUB) & - \\
 NSOL^{t-1} / NSAT * & ** 2 * KPER * DEVI * PREC * (1 - KSUB) & + \\
 (NSOL^{t-1} / NSAT * & ** 2 * KPER * DEVI * DEVR * (1 - KSUB) & + \\
 NSOL^{t-1} / NSAT * & KPER * PREC * (1 - KSUB) & + \\
 PREC ** 2 / NSAT * & KPER * (1 - KSUB) - PREC / NSAT * & KPER * DEVR * (1 - KSUB) & - \\
 - & NSOL^{t-1} / NSAT * ** 2 * KPER * & PREC * DEVI * (1 - KSUB) & -
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \text{PREC}^{**2} / \text{NSAT}^{**2} * \text{KPER} * \text{DEVI} * (1 - \text{KSUB}) & + \\
& \text{PREC} / \text{NSAT}^{**2} * \text{KPER} * \text{DEVI} * \text{DEVR} * (1 - \text{KSUB}) & - \\
& \text{NSOL}^{t-1} / \text{NSAT} * \text{DEVR} * \text{KPER} * (1 - \text{KSUB}) & - \\
& \text{PREC} / \text{NSAT} * \text{DEVR} * \text{KPER} * (1 - \text{KSUB}) + \text{DEVR}^{**2} / \text{NSAT} * \text{KPER} * (1 - \text{KSUB}) & + \\
& + \text{NSOL}^{t-1} / \text{NSAT}^{**2} * \text{DEVR} * \text{KPER} * \text{DEVI} * (1 - \text{KSUB}) + & + \\
& \text{PREC} / \text{NSAT}^{**2} * \text{DEVR} * \text{DEVI} * (1 - \text{KSUB}) & - \\
& \text{DEVR}^{**2} / \text{NSAT}^{**2} * \text{KPER} * \text{DEVI} * (1 - \text{KSUB}) & - \\
& \text{NSOL}^{t-1} **2 / \text{NSAT}^{**2} * \text{DEVI} * \text{KPER} * (1 - \text{KSUB}) & - \\
& \text{PREC} / \text{NSAT}^{**2} * \text{NSOL}^{t-1} * \text{DEVI} * \text{KPER} * (1 - \text{KSUB}) & + \\
& \text{NSOL}^{t-1} / \text{NSAT}^{**2} * \text{DEVI} * \text{DEVR} * \text{KPER} * (1 - \text{KSUB}) & + \\
& \text{NSOL}^{t-1} **2 / \text{NSAT}^{**3} * \text{DEVI} **2 * \text{KPER} * (1 - \text{KSUB}) & + \\
& \text{NSOL}^{t-1} / \text{NSAT}^{**3} * \text{DEVI} **2 * \text{KPER} * \text{PREC} * (1 - \text{KSUB}) & - \\
& \text{NSOL}^{t-1} / \text{NSAT}^{**3} * \text{DEVI} **2 * \text{KPER} * \text{DEVR} * (1 - \text{KSUB}) & - \\
& \text{NSOL}^{t-1} / \text{NSAT}^{**2} * \text{DEVI} * \text{PREC} * \text{KPER} * (1 - \text{KSUB}) & - \\
& \text{DEVI} / \text{NSAT}^{**2} * \text{PREC}^{**2} * \text{KPER} * (1 - \text{KSUB}) & + \\
& \text{DEVI} / \text{NSAT}^{**2} * \text{PREC} * \text{KPER} * \text{DEVR} * (1 - \text{KSUB}) & + \\
& \text{NSOL}^{t-1} / \text{NSAT}^{**3} * \text{DEVI} **2 * \text{KPER} * \text{PREC} * (1 - \text{KSUB}) & + \\
& \text{PREC}^{**2} / \text{NSAT}^{**3} * \text{DEVI} **2 * \text{KPER} * (1 - \text{KSUB}) & - \\
& \text{DEVI} **2 / \text{NSAT}^{**3} * \text{PREC} * \text{KPER} * \text{DEVR} * (1 - \text{KSUB}) & + \\
& \text{NSOL}^{t-1} / \text{NSAT}^{**2} * \text{DEVI} * \text{DEVR} * \text{KPER} * (1 - \text{KSUB}) & + \\
& \text{PREC} / \text{NSAT}^{**2} * \text{DEVI} * \text{DEVR} * \text{KPER} * (1 - \text{KSUB}) & - \\
& \text{DEVR}^{**2} / \text{NSAT}^{**2} * \text{DEVI} * \text{KPER} * (1 - \text{KSUB}) & - \\
& \text{NSOL}^{t-1} / \text{NSAT}^{**3} * \text{DEVI} **2 * \text{DEVR} * \text{KPER} * (1 - \text{KSUB}) & - \\
& \text{PREC} / \text{NSAT}^{**3} * \text{DEVI} **2 * \text{DEVR} * \text{KPER} * (1 - \text{KSUB}) & + \\
& \text{DEVI} **2 / \text{NSAT}^{**3} * \text{DEVR}^{**2} * \text{KPER} * (1 - \text{KSUB}) & - \\
& \text{CPER} * \text{KPER} * \text{NSOL}^{t-1} * (1 - \text{KSUB}) - \text{CPER} * \text{KPER} * \text{PREC} * (1 - \text{KSUB}) & + \\
& \text{CPER} * \text{KPER} * \text{DEVR} * (1 - \text{KSUB}) & + \\
& \text{CPER} * \text{KPER} * \text{DEVI} * \text{NSOL}^{t-1} / \text{NSAT} * (1 - \text{KSUB}) & + \\
& \text{CPER} * \text{DEVI} * \text{KPER} * \text{PREC} / \text{NSAT} * (1 - \text{KSUB}) & - \\
& \text{CPER} * \text{KPER} * \text{DEVI} * \text{DEVR} / \text{NSAT} * (1 - \text{KSUB})] * \text{AREA} / \text{TEMP}
\end{aligned}$$

Caminho 17

$$\begin{aligned}
\text{QGER}(\theta) &= [\text{NSUP}^{t-1} * (1 - \text{KSUP}) + \text{NSUB}^{t-1} * (1 - \text{KSUB})] & + \\
& \text{NSOL}^{t-1} **2 / \text{NSAT} * \text{KPER} * (1 - \text{KSUB}) & - \\
& \text{CPER} * \text{KPER} * \text{NSOL}^{t-1} * (1 - \text{KSUB})] * \text{AREA} / \text{TEMP}
\end{aligned}$$

Caminho 20

$$\text{QGER}(\theta) = [\text{NSUP}^t * (1 - \text{KSUP}) + \text{NSUB}^{t-1} * (1 - \text{KSUB})] +$$

$$\begin{aligned}
& \text{NSOL}^{t-1} **2 / \text{NSAT} * \text{KPER} * (1 - \text{KSUB}) & - \\
& 2 * \text{NSOL}^{t-1} **2 / \text{NSAT} **2 * \text{DEVI} * \text{KPER} * (1 - \text{KSUB}) & + \\
& \text{NSOL}^{t-1} **2 / \text{NSAT} **3 * \text{DEVI} **2 * \text{KPER} * (1 - \text{KSUB}) & - \\
& \text{NSOL}^{t-1} * \text{CPER} * \text{KPER} * (1 - \text{KSUB}) & + \\
& \text{NSOL}^{t-1} / \text{NSAT} * \text{CPER} * \text{DEVI} * \text{KPER} * (1 - \text{KSUB})] * \text{AREA} / \text{TEMP}
\end{aligned}$$

Caminho 31

$$\begin{aligned}
& \text{QGER}(\theta) = [\text{NSUP}^{t-1} * (1 - \text{KSUP}) & + \\
& (\text{PREC} - \text{ABSI}) **2 * (1 - \text{KSUP}) / (\text{PREC} - \text{ABSI} - \text{NSOL}^{t-1} + \text{NSAT}) & + \\
& (\text{NSUB}^{t-1} + \text{NSOL}^{t-1} **2 * \text{KPER} / \text{NSAT} + \text{PREC} **2 * \text{KPER} / \text{NSAT} & + \\
& \text{ABSI} **2 * \text{KPER} / \text{NSAT} + \text{DEVR} **2 * \text{KPER} / \text{NSAT} & + \\
& (\text{PREC} - \text{ABSI}) **4 / (\text{PREC} - \text{ABSI} - \text{NSOL}^{t-1} + \text{NSAT}) **2 * \text{KPER} / \text{NSAT} & - \\
& \text{CPER} * \text{KPER} * \text{NSOL}^{t-1} - \text{CPER} * \text{KPER} * \text{PREC} + \text{CPER} * \text{KPER} * \text{ABSI} & + \\
& \text{CPER} * \text{KPER} * \text{DEVR} & + \\
& \text{CPER} * \text{KPER} * (\text{PREC} - \text{ABSI}) **2 / (\text{PREC} - \text{ABSI} - \text{NSOL}^{t-1} + \text{NSAT}) & + \\
& 2 * (\text{NSOL}^{t-1} * \text{PREC} * \text{KPER} / \text{NSAT} - \text{NSOL}^{t-1} * \text{ABSI} * \text{KPER} / \text{NSAT} & - \\
& \text{NSOL}^{t-1} * \text{DEVR} * \text{KPER} / \text{NSAT} & - \\
& \text{NSOL}^{t-1} * \text{KPER} / \text{NSAT} * (\text{PREC} - \text{ABSI}) **2 / (\text{PREC} - \text{ABSI} - \text{NSOL}^{t-1} + \text{NSAT}) & - \\
& - \text{PREC} * \text{KPER} / \text{NSAT} * \text{ABSI} - \text{PREC} * \text{KPER} / \text{NSAT} * \text{DEVR} & - \\
& \text{PREC} * \text{KPER} / \text{NSAT} * (\text{PREC} - \text{ABSI}) **2 / (\text{PREC} - \text{ABSI} - \text{NSOL}^{t-1} + \text{NSAT}) & + \\
& \text{ABSI} * \text{KPER} / \text{NSAT} * \text{DEVR} & + \\
& \text{ABSI} * \text{KPER} / \text{NSAT} * (\text{PREC} - \text{ABSI}) **2 / (\text{PREC} - \text{ABSI} - \text{NSOL}^{t-1} + \text{NSAT}) & + \\
& \text{DEVR} * \text{KPER} / \text{NSAT} * (\text{PREC} - \text{ABSI}) **2 / (\text{PREC} - \text{ABSI} - \text{NSOL}^{t-1} + \text{NSAT})) * & \\
& (1 - \text{KSUB})] * \text{AREA} / \text{TEMP}
\end{aligned}$$

Caminho 34

$$\begin{aligned}
& \text{QGER}(\theta) = [\text{NSUP}^{t-1} * (1 - \text{KSUP}) & + \\
& (\text{PREC} - \text{ABSI}) **2 * (1 - \text{KSUP}) / (\text{PREC} - \text{ABSI} - \text{NSOL}^{t-1} + \text{NSAT}) & + \\
& (\text{NSUB}^{t-1} + \text{NSOL}^{t-1} **2 * \text{KPER} / \text{NSAT} + \text{PREC} **2 * \text{KPER} / \text{NSAT} & + \\
& \text{ABSI} **2 * \text{KPER} / \text{NSAT} + \text{DEVR} **2 * \text{KPER} / \text{NSAT} & + \\
& + (\text{PREC} - \text{ABSI}) **4 / (\text{PREC} - \text{ABSI} - \text{NSOL}^{t-1} + \text{NSAT}) **2 * \text{KPER} / \text{NSAT} & + \\
& \text{DEVI} **2 / \text{NSAT} **3 * \text{NSOL}^{t-1} **2 + \text{DEVI} **2 / \text{NSAT} **3 * \text{PREC} **2 & + \\
& \text{DEVI} **2 / \text{NSAT} **3 * \text{ABSI} **2 + \text{DEVI} **2 / \text{NSAT} **3 * \text{DEVR} **2 & + \\
& \text{DEVI} **2 / \text{NSAT} **3 * (\text{PREC} - \text{ABSI}) **4 / (\text{PREC} - \text{ABSI} - \text{NSOL}^{t-1} + \text{NSAT}) **2 & + \\
& - \text{CPER} * \text{KPER} * \text{NSOL}^{t-1} - \text{CPER} * \text{KPER} * \text{PREC} + \text{CPER} * \text{KPER} * \text{ABSI} & + \\
& \text{CPER} * \text{KPER} * \text{DEVR} & + \\
& \text{CPER} * \text{KPER} * (\text{PREC} - \text{ABSI}) **2 / (\text{PREC} - \text{ABSI} - \text{NSOL}^{t-1} + \text{NSAT}) & + \\
& + \text{CPER} * \text{KPER} * \text{DEVI} / \text{NSAT} * \text{NSOL}^{t-1} + \text{CPER} * \text{KPER} * \text{DEVI} / \text{NSAT} * \text{PREC} & -
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \text{CPER} * \text{KPER} * \text{DEVI} / \text{NSAT} * \text{ABSI} - \text{CPER} * \text{KPER} * \text{DEVI} / \text{NSAT} * \text{DEVR} - \\
& \text{CPER} * \text{KPER} * \text{DEVI} / \text{NSAT} * (\text{PREC} - \text{ABSI}) ** 2 / (\text{PREC} - \text{ABSI} - \text{NSOL}^{t-1} + \text{NSAT} \\
&) + 2 * \text{NSOL}^{t-1} * \text{PREC} * \text{KPER} / \text{NSAT} - \text{NSOL}^{t-1} * \text{ABSI} * \text{KPER} / \text{NSAT} - \\
& \text{NSOL}^{t-1} * \text{DEVR} * \text{KPER} / \text{NSAT} - \\
& \text{NSOL}^{t-1} * \text{KPER} / \text{NSAT} * (\text{PREC} - \text{ABSI}) ** 2 / (\text{PREC} - \text{ABSI} - \text{NSOL}^{t-1} + \text{NSAT}) \\
& - \\
& \quad \text{DEVI} / \text{NSAT} ** 2 * \text{NSOL}^{t-1} ** 2 * \text{KPER} - \\
& \text{DEVI} / \text{NSAT} ** 2 * \text{NSOL}^{t-1} * \text{PREC} * \text{KPER} + \\
& \text{DEVI} / \text{NSAT} ** 2 * \text{ABSI} * \text{NSOL}^{t-1} * \text{KPER} + \\
& \text{DEVI} / \text{NSAT} ** 2 * \text{DEVR} * \text{NSOL}^{t-1} * \text{KPER} + \\
& \text{DEVI} / \text{NSAT} ** 2 * \text{NSOL}^{t-1} * \text{KPER} * (\text{PREC} - \text{ABSI}) ** 2 / \\
& (\text{PREC} - \text{ABSI} - \text{NSOL}^{t-1} + \text{NSAT}) - \text{PREC} * \text{KPER} / \text{NSAT} * \text{ABSI} - \\
& \text{PREC} * \text{KPER} / \text{NSAT} * \text{DEVR} - \\
& \text{PREC} * \text{KPER} / \text{NSAT} * (\text{PREC} - \text{ABSI}) ** 2 / (\text{PREC} - \text{ABSI} - \text{NSOL}^{t-1} + \text{NSAT}) - \\
& \text{PREC} * \text{KPER} / \text{NSAT} ** 2 * \text{DEVI} * \text{NSOL}^{t-1} - \text{PREC} ** 2 * \text{KPER} / \text{NSAT} ** 2 * \text{DEVI} \\
& + \\
& \quad \text{DEVI} / \text{NSAT} ** 2 * \text{KPER} * \text{PREC} * \text{ABSI} + \\
& \text{DEVI} / \text{NSAT} ** 2 * \text{KPER} * \text{PREC} * \text{DEVR} + \\
& \text{DEVI} / \text{NSAT} ** 2 * \text{KPER} * \text{PREC} * (\text{PREC} - \text{ABSI}) ** 2 / (\text{PREC} - \text{ABSI} - \text{NSOL}^{t-1} + \text{N} \\
& \text{SAT}) + \\
& \quad \text{ABSI} * \text{KPER} / \text{NSAT} * \text{DEVR} + \\
& \text{ABSI} * \text{KPER} / \text{NSAT} * (\text{PREC} - \text{ABSI}) ** 2 / (\text{PREC} - \text{ABSI} - \text{NSOL}^{t-1} + \text{NSAT}) + \\
& \text{DEVI} / \text{NSAT} ** 2 * \text{KPER} * \text{ABSI} * \text{NSOL}^{t-1} + \\
& \text{DEVI} / \text{NSAT} ** 2 * \text{KPER} * \text{ABSI} * \text{PREC} - \text{DEVI} / \text{NSAT} ** 2 * \text{KPER} * \text{ABSI} ** 2 - \\
& \text{DEVI} / \text{NSAT} ** 2 * \text{KPER} * \text{ABSI} * \text{DEVR} - \\
& \text{DEVI} / \text{NSAT} ** 2 * \text{ABSI} * \text{KPER} * (\text{PREC} - \text{ABSI}) ** 2 / (\text{PREC} - \text{ABSI} - \text{NSOL}^{t-1} + \text{N} \\
& \text{SAT}) + \\
& \text{DEVR} * \text{KPER} / \text{NSAT} * (\text{PREC} - \text{ABSI}) ** 2 / (\text{PREC} - \text{ABSI} - \text{NSOL}^{t-1} + \text{NSAT}) + \\
& \text{DEVI} / \text{NSAT} ** 2 * \text{KPER} * \text{DEVR} * \text{NSOL}^{t-1} + \\
& \text{DEVI} / \text{NSAT} ** 2 * \text{KPER} * \text{PREC} * \text{DEVR} - \text{DEVI} / \text{NSAT} ** 2 * \text{KPER} * \text{DEVR} * \text{ABSI} \\
& - \\
& \quad \text{DEVI} / \text{NSAT} ** 2 * \text{KPER} * \text{DEVR} ** 2 - \\
& \text{DEVI} / \text{NSAT} ** 2 * \text{KPER} * \text{DEVR} * (\text{PREC} - \text{ABSI}) ** 2 / (\text{PREC} - \text{ABSI} - \text{NSOL}^{t-1} + \text{N} \\
& \text{SAT}) + \\
& \quad \text{DEVI} / \text{NSAT} ** 2 * \text{KPER} * \text{NSOL}^{t-1} * (\text{PREC} - \text{ABSI}) ** 2 / \\
& (\text{PREC} - \text{ABSI} - \text{NSOL}^{t-1} + \text{NSAT}) + \\
& \text{DEVI} / \text{NSAT} ** 2 * \text{KPER} * \text{PREC} * (\text{PREC} - \text{ABSI}) ** 2 / (\text{PREC} - \text{ABSI} - \text{NSOL}^{t-1} + \text{N} \\
& \text{SAT}) - \\
& \text{DEVI} / \text{NSAT} ** 2 * \text{KPER} * \text{ABSI} * (\text{PREC} - \text{ABSI}) ** 2 / (\text{PREC} - \text{ABSI} - \text{NSOL}^{t-1} + \text{N} \\
& \text{SAT}) - \\
& \text{DEVI} / \text{NSAT} ** 2 * \text{KPER} * \text{DEVR} * (\text{PREC} - \text{ABSI}) ** 2 / (\text{PREC} - \text{ABSI} - \text{NSOL}^{t-1} + \text{N} \\
& \text{SAT}) - \\
& \text{DEVI} / \text{NSAT} ** 2 * \text{KPER} * (\text{PREC} - \text{ABSI}) ** 4 / (\text{PREC} - \text{ABSI} - \text{NSOL}^{t-1} + \text{NSAT}) *
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& *2 + DEVI **2 / NSAT **3 * KPER * NSOL^{t-1} * PREC - \\
& DEVI **2 / NSAT **3 * KPER * ABSI * NSOL^{t-1} - \\
& DEVI **2 / NSAT **3 * KPER * DEVR * NSOL^{t-1} - \\
& DEVI **2 / NSAT **3 * KPER * NSOL^{t-1} * (PREC - ABSI) **2 / \\
& (PREC - ABSI - NSOL^{t-1} + NSAT) - DEVI **2 / NSAT **3 * KPER * PREC * ABSI \\
& - DEVI **2 / NSAT **3 * KPER * PREC * DEVR - \\
& DEVI **2 / NSAT **3 * KPER * PREC * (PREC - ABSI) **2 / \\
& (PREC - ABSI - NSOL^{t-1} + NSAT) + DEVI **2 / NSAT **3 * KPER * DEVR * ABSI \\
& + DEVI **2 / NSAT **3 * KPER * ABSI * (PREC - ABSI) **2 / \\
& (PREC - ABSI - NSOL^{t-1} + NSAT) + \\
& DEVI **2 / NSAT **3 * KPER * DEVR * (PREC - ABSI) **2 / \\
& (PREC - ABSI - NSOL^{t-1} + NSAT) * (1 - KSUB)] * AREA / TEMP
\end{aligned}$$

Caminho 45

$$\begin{aligned}
QGER(\theta) = [& NSUP^{t-1} * (1 - KSUP) + (PREC - ABSI) **2 / \\
& (PREC - ABSI - NSOL^{t-1} + NSAT) * (1 - KSUP) + NSUB^{t-1} * (1 - KSUB) + \\
& NSOL^{t-1} **2 / NSAT * KPER * (1 - KSUB) - \\
& CPER * NSOL^{t-1} * KPER * (1 - KSUB)] * AREA / TEMP
\end{aligned}$$

Caminhos 1, 2, 4, 5 e 7

$$QGER(\theta) = [NSUP^{t-1} * (1 - KSUP) + NSUB^{t-1} * (1 - KSUB)] * AREA / TEMP$$

Caminhos 12 e 14

$$\begin{aligned}
QGER(\theta) = [& NSUP^{t-1} * (1 - KSUP) + NSOL^{t-1} * (1 - KSUP) + \\
& PREC * (1 - KSUP) - DEVR * (1 - KSUP) - NSAT * (1 - KSUP) + \\
& NSUB^{t-1} * (1 - KSUB)] * AREA / TEMP
\end{aligned}$$

Caminhos 26 e 28

$$\begin{aligned}
QGER(\theta) = [& NSUP^{t-1} * (1 - KSUP) + NSOL^{t-1} * (1 - KSUP) - \\
& NSAT * (1 - KSUP) + NSUB^{t-1} * (1 - KSUB)] * AREA / TEMP
\end{aligned}$$

Caminhos 40 e 42

$$\begin{aligned}
QGER(\theta) = [& NSUP^{t-1} * (1 - KSUP) + NSOL^{t-1} * (1 - KSUP) + \\
& PREC * (1 - KSUP) - ABSI * (1 - KSUP) - DEVR * (1 - KSUP) - \\
& NSAT * (1 - KSUP) + NSUB^{t-1} * (1 - KSUB)] * AREA / TEMP
\end{aligned}$$

Caminhos 54 e 56

$$QGER(\theta) = [NSUP^{t-1} * (1 - KSUP) + NSOL^{t-1} * (1 - KSUP) -$$

$$\begin{aligned} & \text{NSAT} \times (1 - \text{KSUP}) \quad + \quad \text{NSUB}^{t-1} \times (1 - \text{KSUB}) \quad + \\ & (\text{PREC} - \text{ABSI}) \times \times 2 / (\text{PREC} - \text{ABSI} - \text{NSOL}^{t-1} + \text{NSAT}) \times (1 - \text{KSUP}) \} \times \text{AREA} / \\ & \text{TEMP} \end{aligned}$$

Caminho 29, 30 e 32

$$\begin{aligned} \text{QGER}(\theta) &= [\text{NSUP}^{t-1} \times (1 - \text{KSUP}) \quad + \\ & (\text{PREC} - \text{ABSI}) \times \times 2 / (\text{PREC} - \text{ABSI} - \text{NSOL}^{t-1} + \text{NSAT}) \times (1 - \text{KSUP}) \quad + \\ & \text{NSUB}^{t-1} \times (1 - \text{KSUB}) \} \times \text{AREA} / \text{TEMP} \end{aligned}$$

Caminho 55

$$\begin{aligned} \text{QGER}(\theta) &= [\text{NSUP}^{t-1} \times (1 - \text{KSUP}) \quad + \\ & (\text{PREC} - \text{ABSI}) \times \times 2 / (\text{PREC} - \text{ABSI} - \text{NSOL}^{t-1} + \text{NSAT}) \times \times 2 \times (1 - \text{KSUP}) \quad + \\ & \text{NSOL}^{t-1} \times (1 - \text{KSUP}) \quad - \quad \text{NSAT} \times (1 - \text{KSUP}) \quad + \quad \text{NSUB}^{t-1} \times (1 - \text{KSUB}) \quad + \\ & \text{NSAT} \times \text{KPER} \times (1 - \text{KSUB}) \quad - \quad 2 \times \text{DEVI} \times \text{KPER} \times (1 - \text{KSUB}) \quad + \\ & \text{DEVI} \times \times 2 \times \text{KPER} / \text{NSAT} \times (1 - \text{KSUB}) \quad - \quad \text{CPER} \times \text{KPER} \times \text{NSAT} \times (1 - \text{KSUB}) \quad + \\ & \text{CPER} \times \text{KPER} \times \text{DEVI} \times (1 - \text{KSUB}) \} \times \text{AREA} / \text{TEMP} \end{aligned}$$

Caminho 10

$$\begin{aligned} \text{QGER}(\theta) &= [\text{NSUP}^{t-1} \times (1 - \text{KSUP}) \quad + \quad \text{NSOL}^{t-1} \times (1 - \text{KSUP}) \quad + \\ & \text{PREC} \times (1 - \text{KSUP}) \quad - \quad \text{DEVR} \times (1 - \text{KSUP}) \quad - \quad \text{NSAT} \times (1 - \text{KSUP}) \quad + \\ & \text{NSUB}^{t-1} \times (1 - \text{KSUB}) \quad + \\ & \text{NSAT} \times \text{KPER} \times (1 - \text{KSUB}) \quad - \quad \text{CPER} \times \text{NSAT} \times \text{KPER} \times (1 - \text{KSUB}) \} \times \text{AREA} / \text{TEMP} \end{aligned}$$

Caminho 13

$$\begin{aligned} \text{QGER}(\theta) &= [\text{NSUP}^{t-1} \times (1 - \text{KSUP}) \quad + \quad \text{NSOL}^{t-1} \times (1 - \text{KSUP}) \quad + \\ & \text{PREC} \times (1 - \text{KSUP}) \quad - \quad \text{DEVR} \times (1 - \text{KSUP}) \quad - \quad \text{NSAT} \times (1 - \text{KSUP}) \quad + \\ & \text{NSUB}^{t-1} \times (1 - \text{KSUB}) \quad + \quad \text{NSAT} \times \text{KPER} \times (1 - \text{KSUB}) \quad - \\ & 2 \times \text{DEVI} \times \text{KPER} \times (1 - \text{KSUB}) \quad + \quad \text{DEVI} \times \times 2 \times \text{KPER} / \text{NSAT} \times (1 - \text{KSUB}) \quad - \\ & \text{CPER} \times \text{NSAT} \times \text{KPER} \times (1 - \text{KSUB}) \quad + \\ & \text{CPER} \times \text{DEVI} \times \text{KPER} \times (1 - \text{KSUB}) \} \times \text{AREA} / \text{TEMP} \end{aligned}$$

Caminho 24

$$\begin{aligned} \text{QGER}(\theta) &= [\text{NSUP}^{t-1} \times (1 - \text{KSUP}) \quad + \quad \text{NSOL}^{t-1} \times (1 - \text{KSUP}) \quad - \\ & \text{NSAT} \times (1 - \text{KSUP}) \quad + \quad \text{NSUB}^{t-1} \times (1 - \text{KSUB}) \quad + \quad \text{NSAT} \times \text{KPER} \times (1 - \text{KSUB}) \quad - \\ & \text{CPER} \times \text{NSAT} \times \text{KPER} \times (1 - \text{KSUB}) \} \times \text{AREA} / \text{TEMP} \end{aligned}$$

Caminho 27

$$\text{QGER}(\theta) = [\text{NSUP}^{t-1} \times (1 - \text{KSUP}) \quad + \quad \text{NSOL}^{t-1} \times (1 - \text{KSUP}) \quad -$$

$$\begin{aligned}
 & \text{NSAT} \times (1 - \text{KSUP}) + \text{NSUB}^{t-1} \times (1 - \text{KSUB}) + \text{NSAT} \times \text{KPER} \times (1 - \text{KSUB}) \\
 & - 2 \times \text{DEVI} \times \text{KPER} \times (1 - \text{KSUB}) + \text{DEVI} \times 2 \times \text{KPER} / \text{NSAT} \times (1 - \text{KSUB}) - \\
 & \text{CPER} \times \text{NSAT} \times \text{KPER} \times (1 - \text{KSUB}) + \\
 & \text{CPER} \times \text{DEVI} \times \text{KPER} \times (1 - \text{KSUB})] \times \text{AREA} / \text{TEMP}
 \end{aligned}$$

Caminho 38

$$\begin{aligned}
 \text{QGER}(\theta) &= [\text{NSUP}^{t-1} \times (1 - \text{KSUP}) + \text{NSOL}^{t-1} \times (1 - \text{KSUP}) + \\
 & \text{PREC} \times (1 - \text{KSUP}) - \text{ABSI} \times (1 - \text{KSUP}) - \text{DEVR} \times (1 - \text{KSUP}) - \\
 & \text{NSAT} \times (1 - \text{KSUP}) + \text{NSUB}^{t-1} \times (1 - \text{KSUB}) + \text{NSAT} \times \text{KPER} \times (1 - \text{KSUB}) - \\
 & \text{CPER} \times \text{NSAT} \times \text{KPER} \times (1 - \text{KSUB})] \times \text{AREA} / \text{TEMP}
 \end{aligned}$$

Caminho 41

$$\begin{aligned}
 \text{QGER}(\theta) &= [\text{NSUP}^{t-1} \times (1 - \text{KSUP}) + \text{NSOL}^{t-1} \times (1 - \text{KSUP}) + \\
 & \text{PREC} \times (1 - \text{KSUP}) - \text{ABSI} \times (1 - \text{KSUP}) - \text{DEVR} \times (1 - \text{KSUP}) - \\
 & \text{NSAT} \times (1 - \text{KSUP}) + \text{NSUB}^{t-1} \times (1 - \text{KSUB}) + \text{NSAT} \times \text{KPER} \times (1 - \text{KSUB}) - \\
 & 2 \times \text{DEVI} \times \text{KPER} \times (1 - \text{KSUB}) + \text{DEVI} \times 2 \times \text{KPER} / \text{NSAT} \times (1 - \text{KSUB}) - \\
 & \text{CPER} \times \text{KPER} \times \text{NSAT} \times (1 - \text{KSUB}) + \\
 & \text{CPER} \times \text{KPER} \times \text{DEVI} \times (1 - \text{KSUB})] \times \text{AREA} / \text{TEMP}
 \end{aligned}$$

Caminho 52

$$\begin{aligned}
 \text{QGER}(\theta) &= [\text{NSUP}^{t-1} \times (1 - \text{KSUP}) + \\
 & (\text{PREC} - \text{ABSI}) \times 2 / (\text{PREC} - \text{ABSI} - \text{NSOL}^{t-1} + \text{NSAT}) \times (1 - \text{KSUP}) + \\
 & \text{NSOL}^{t-1} \times (1 - \text{KSUP}) - \text{NSAT} \times (1 - \text{KSUP}) + \text{NSUB}^{t-1} \times (1 - \text{KSUB}) + \\
 & \text{NSAT} \times \text{KPER} \times (1 - \text{KSUB}) - \text{CPER} \times \text{NSAT} \times \text{KPER} \times (1 - \text{KSUB})] \times \text{AREA} / \text{TEMP}
 \end{aligned}$$