

Análise de Alterações em Componentes de um Método de Calibração Automática Mono-Objetivo na Qualidade e Eficiência do Ajuste de Parâmetros do Modelo Sacramento

Ângelo Breda

PPGERHA-UFPR

agbreda@yahoo.com.br

José Eduardo Gonçalves, Reinaldo Bonfim Silveira

Instituto Tecnológico SIMEPAR

jgoncalv@simepar.br; rsilveira@simepar.br

Recebido: 25/05/10 - revisado: 15/12/10 - aceito: 01/04/11

RESUMO

O presente estudo avaliou o uso de configurações diferentes de três componentes de um método de calibração automática mono-objetivo, o *Shuffled Complex Evolution* da University of Arizona. Este método foi aplicado para encontrar os melhores parâmetros de um modelo hidrológico de 18 parâmetros, utilizado para simular a vazão da bacia hidrográfica de um afluente do Rio Iguaçu. Os resultados mostraram que a população inicial fornecida ao método interfere no resultado da busca de um ponto de ótimo da função objetivo, de modo que populações iniciais diferentes podem resultar em pontos de ótimo diferentes. Também foi avaliado o critério de convergência, verificando-se que ele está diretamente relacionado com o número de interações que o método realiza até convergir para um ótimo da função objetivo. Foi utilizado um critério de proporção do desvio-padrão em relação ao valor esperado da população de parâmetros. Os resultados mostraram que um critério de 25% gerou resultados próximos ao critério mais restrito, de 5%, sendo que o número de interações realizadas foi reduzido pela metade. O terceiro componente testado foi o tamanho da população de pontos utilizado, representada pelo número de complexos. Ao empregar poucos complexos, o método convergiu após um número relativamente pequeno de interações, porém os parâmetros obtidos não foram satisfatórios. Entretanto ao utilizar 8 e 12 complexos foram obtidos conjuntos de parâmetros satisfatórios e semelhantes. Mas o uso de 8 complexos utilizou pouco menos da metade do número de interações que a calibração com 12 complexos.

Palavras-chave: Calibração automática; modelo hidrológico.

INTRODUÇÃO

O emprego de modelos hidrológicos é de grande utilidade para gestores e planejadores de recursos hídricos, os quais fazem uso das estimativas de vazões futuras para diversos fins, entre eles a operação de reservatórios e prevenção das consequências de eventos extremos. Estes usos são importantes para que autoridades adotem esta ferramenta na tomada das decisões que visam o bem-estar da sociedade e conservação do meio ambiente (Burnash, 1995).

Basicamente, um modelo hidrológico utiliza-se de equações matemáticas, obtidas seja analiticamente ou empiricamente, que buscam representar diversos processos que ocorrem em uma bacia

hidrográfica. Todavia, a complexidade de tais processos é um ponto que dificulta a modelagem, sendo necessário simplificar muitos dos processos envolvidos no fluxo da água em uma bacia. Esta simplificação dos modelos implica em mais um inconveniente, a generalização de parâmetros (constantes) nas equações (Tucci, 1998). Normalmente as características dos processos hidrológicos variam de uma bacia para outra devido ao tipo de solo, inclinação do terreno e outros fatores, sendo que ainda é possível que em uma mesma bacia ocorram regiões com características diferentes entre si. Deste modo, faz-se necessário realizar um ajuste dos valores dos parâmetros para cada bacia hidrológica.

Collischonn e Tucci (2003) descrevem que a etapa de ajuste dos parâmetros exige do usuário um maior grau de conhecimento sobre o comportamento do modelo, o objetivo ao qual se espera

que o modelo atenda, a qualidade e representatividade dos dados hidrológicos. Esta etapa de ajuste dos parâmetros pode ser feita através de um método interativo, de tentativa e erro, ou então através de rotinas computacionais que empregam métodos matemáticos para busca de um conjunto de parâmetros satisfatórios.

O ajuste manual do conjunto de parâmetros é de grande importância para que o operador do modelo adquira experiência sobre a sensibilidade do modelo à variação de cada um dos parâmetros. Contudo, quando o número de parâmetros com grande influência na resposta do modelo é alto, mesmo um operador experiente pode demorar a definir o resultado da calibração manual.

A alternativa para resolver este problema é a utilização de rotinas computacionais de calibração automática. Estas rotinas aplicam variados métodos de otimização para a procura de um conjunto de parâmetros que minimizem – ou maximizem, em alguns casos – o valor de uma determinada função objetivo como, por exemplo, o erro médio. Collischonn e Tucci (2003) comentam que os primeiros algoritmos apresentavam vários problemas, tal como convergência para mínimos locais, podendo estes serem inconsistentes com os processos reais, embora, matematicamente possíveis.

Em Duan *et al.* (1992) há uma breve revisão dos métodos de calibração automática já desenvolvidos, entre eles: (i) sistema de busca aleatória, onde vários conjuntos de parâmetros são escolhidos aleatoriamente, verificando-se qual destes conjuntos obteve o menor valor da função objetivo; (ii) análise da superfície da função objetivo, onde é montado um gráfico do valor da função objetivo versus uma faixa de valores de cada parâmetro; (iii) método combinado de busca aleatória com o *Simplex*. Entretanto, no estudo destes autores todos estes métodos apresentam alguma deficiência, seja por convergir a mínimos locais ou por necessitarem de um grande número de interações para a convergência ao mínimo global.

Com base nestes experimentos, estes pesquisadores desenvolveram o método denominado, em inglês, *Shuffled Complex Evolution* (SCE). Este método combina o que há de mais eficiente em três métodos de calibração: (i) o procedimento *Simplex*, de Nelder e Mead (1965); (ii) os conceitos de busca aleatória controlada, descrita em Price (1987); (iii) e o processo de evolução competitiva do algoritmo genético de Holland (1975). Além destes três processos os autores adicionaram o procedimento de “mistura de complexos”, no qual grupos de conjuntos de parâmetros, após terem passado por um pro-

cesso de evolução, são misturados de forma a distribuir a informação sobre a variação da função objetivo no espaço determinado pelos limites dos parâmetros do modelo a ser calibrado. Esta etapa, segundo os autores, garante que o método convergirá no mínimo global do espaço de busca.

Bravo *et al.* (2009) traz uma experiência de calibração automática utilizando um método de busca multi-objetivo. Esta é uma técnica ainda mais recente aplicada na obtenção de parâmetros ótimos, visando encontrar não apenas um único conjunto de parâmetros satisfatórios que ajustem o comportamento do modelo à uma característica em específico, mas sim, uma família de conjuntos de parâmetros que atendam à várias demandas do uso da simulação hidrológica. Deste modo pode considerar-se o SCE um método para otimização mono-objetivo.

O próprio algoritmo do SCE apresenta alguns parâmetros a serem selecionados pelo usuário, a fim de controlar a eficácia e o custo computacional da busca, tais como o número de complexos e o critério de convergência. Neste ponto encontra-se o objetivo deste artigo que é o de verificar a execução de diversas configurações do SCE no resultado final da busca dos melhores parâmetros de um modelo hidrológico.

MÉTODOS

O SCE consiste em um método de busca dos pontos de mínimo de uma função matemática. Cabe ao usuário desenvolver o procedimento de cálculo desta função, dado o ponto do espaço n-dimensional fornecido pelo SCE.

Simon e Diskin (1977) testaram diferentes funções objetivo, como guia de um método de calibração automático mais simples que o SCE. Os autores concluíram que, conforme o uso desejado para o modelo hidrológico há funções objetivo mais adequadas a um problema, que outras. Esta discussão é mais aprofundada pelo conceito de equifinalidade apresentado em Beven e Binley (1992; citado em Bravo *et al.*, 2009)

Para este estudo a função objetivo utilizada foi a raiz do erro médio quadrático (REM_Q) entre a vazão do modelo hidrológico e a vazão observada, conforme a seguinte equação:

$$REM_Q = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (Q_{OBS,i} - Q_{MOD,i})^2}{N}}, \quad (01)$$

onde $Q_{OBS,i}$ é a vazão observada do i -ésimo dado, $Q_{MOD,i}$ é a vazão do modelo hidrológico para o tempo i , e N é o total de dados da série utilizada para computar o valor do REMQ.

Para gerar as séries de vazões modeladas foi implementado o modelo Sacramento (Burnash, 1995), para uma sub-bacia de cabeceira inserida na bacia hidrológica do Rio Iguaçu (Figura 1). O modelo Sacramento é classificado como um modelo conceitual do tipo chuva-vazão, o qual utiliza informações de chuva, e evapotranspiração potencial, para computar a umidade do solo da bacia e o aporte de água para o canal da mesma. Este modelo simula diversos processos hidrológicos, tais como escoamentos superficiais e subterrâneos, sendo necessário fornecer ao modelo o valor de 16 parâmetros. O equacionamento do modelo e a descrição da função destes parâmetros estão apresentados em Burnash (1995).

Contudo o modelo Sacramento não contempla um procedimento de propagação da água em canal, sendo necessário acoplar um modelo de propagação. Para o caso deste trabalho foi implementado o modelo de propagação por reservatórios conceituais não-lineares, conforme apresentado em Breda (2008). Este modelo de propagação exige o ajuste de outros dois parâmetros à realidade da bacia hidrológica modelada. Deste modo, é preciso ajustar 18 parâmetros ao todo para que a vazão fornecida pelo modelo seja a mais próxima possível da vazão monitorada na exutória da bacia.

O algoritmo do SCE foi implementado em linguagem FORTRAN 90, assim como o modelo Sacramento.

Área de estudo e séries de dados

As simulações de vazão foram realizadas para a porção da bacia do Rio Timbó, afluente do Rio Iguaçu, que contribui para a vazão medida (medição de nível convertido em vazão) no posto hidrológico de Santa Cruz do Timbó (Figura 1).

A bacia de Santa Cruz do Timbó fica no noroeste do estado de Santa Catarina, sendo caracterizada por um relevo muito íngreme e conseqüentemente de rápida resposta a eventos de precipitação. Esta bacia conta com uma área de contribuição de 2.698 Km², sendo a vazão média da ordem de 74 m³/s, atingindo picos por volta dos 200 a 300 m³/s nos eventos mais intensos. Esta bacia tem uma importância especial na previsão de cheias para o município de União da Vitória, que se localiza às margens do Rio Iguaçu, poucos quilômetros a jusante da afluição do Rio Timbó. Devido à sua característica

de rápida resposta aos eventos de chuva, o volume de água produzido nesta bacia que escoar para o Rio Timbó chega rapidamente ao município de União da Vitória.

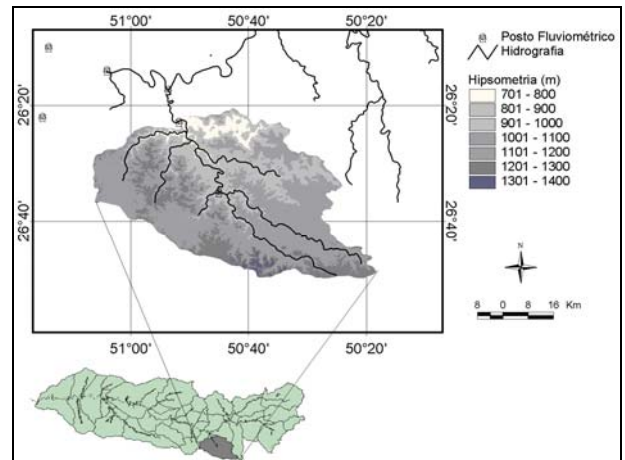


Figura 1 – Localização da bacia hidrográfica de Santa Cruz do Timbó dentre as sub-bacias do Rio Iguaçu

O monitoramento na região de estudo, conta com diversos postos telemétricos sob operação do Instituto Tecnológico SIMEPAR. Ao total, foram utilizadas as séries do monitoramento realizado em 5 postos hidrológicos, além do posto meteorológico de União da Vitória.

O monitoramento realizado nestes postos é registrado com periodicidade horária, sendo que os postos hidrológicos medem apenas nível e chuva, enquanto que o posto meteorológico mede temperatura, umidade relativa, pressão, radiação incidente, velocidade e direção do vento e chuva. A série de nível em Santa Cruz do Timbó foi convertida em vazão a partir da curva-chave fornecida pela Companhia Paranaense de Energia (COPEL). A chuva média na bacia hidrológica foi computada pelo método de Thiessen, conforme demonstrado em Breda (2008). Quanto à evapotranspiração potencial, foi utilizado o método de Penman para estimá-la em intervalo horário, com base nos dados medidos pela estação meteorológica.

Para este estudo foi utilizada a série de dados horários entre 1998 e 2006. Este período foi dividido em outros dois períodos menores, de 1998 a 2002 para a etapa de calibração dos parâmetros do modelo, e de 2003 a 2006 para verificação do ajuste. No estudo de Yapó et al. (1996) foi verificado a necessidade de uma série de no mínimo 8 anos para o período de calibração. Entretanto o estudo avaliou apenas a simulação com dados diários, enquanto

que a aplicação proposta no presente trabalho é de simulação em escala horária. Portanto é aceitável supor que o emprego de um período de cinco anos de dados horários é representativo para o período de calibração.

Algoritmo do SCE

O *Shuffle Complex Evolution* foi desenvolvido em 1992, na Universidade do Arizona (Duan *et al.*, 1992). Este algoritmo procura o ponto de mínimo de uma função matemática, através de uma série de procedimentos. A busca finaliza quando se chega a um critério de convergência pré-determinado pelo usuário.

Neste trabalho o próprio critério de convergência foi analisado para verificar sua influência na eficiência do SCE. O critério empregado consiste em uma comparação percentual entre a média dos valores dos parâmetros com seus respectivos desvios-padrões. A busca converge quando os desvios-padrões dos n parâmetros em calibração ficam abaixo de uma porcentagem, denominada *dpcrit*, das médias dos mesmos.

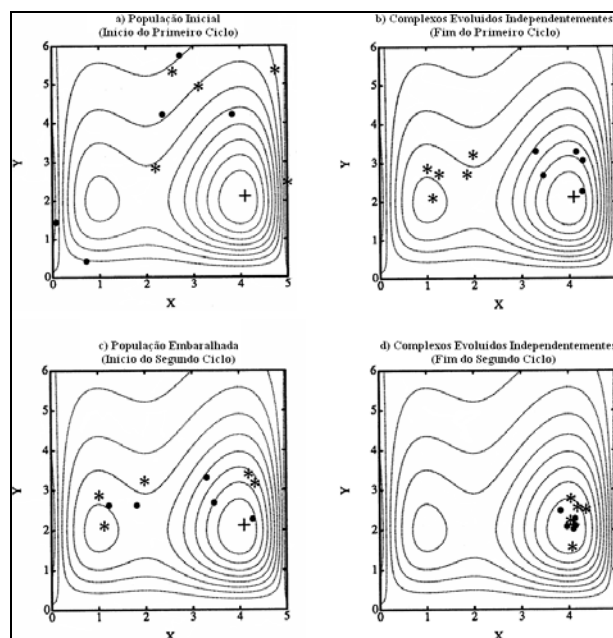
Supondo um exercício de calibração onde se pretende ajustar o valor de três parâmetros, p_1 , p_2 e p_3 , dada uma população inicial de 12 pontos, teria-se então o seguinte conjunto de pontos, $[(p_{1,1}, p_{2,1}, p_{3,1}), (p_{1,2}, p_{2,2}, p_{3,2}), \dots, (p_{1,12}, p_{2,12}, p_{3,12})]$. Ao empregar um *dpcrit* de 25%, por exemplo, a busca encerraria quando o desvio-padrão dos valores de p_1 , p_2 e p_3 fossem menores ou iguais que 25% de suas médias. Contudo, às vezes é possível que o SCE necessite de um número de iterações muito elevado para atingir o *dpcrit* estabelecido. Para evitar este excesso de processamento, é estabelecido um número máximo de iterações que o procedimento pode realizar, denominado K_{STOP} .

A apresentação detalhada do algoritmo do SCE está presente no trabalho de seus criadores, Duan *et al.* (1992), podendo ser encontrado também, em português, em Breda (2008). Contudo, devido a ser um algoritmo relativamente extenso, ele é apresentado aqui apenas de modo superficial.

O SCE é dividido basicamente em dois módulos, um para organização dos complexos e outro para evolução dos mesmos. A Figura 2 dá um exemplo da execução do primeiro módulo, onde um modelo hipotético de apenas dois parâmetros está em calibração.

No exemplo acima são escolhidos 10 pontos aleatórios dentro do espaço permitido para os valores dos parâmetros. Estes pontos são divididos em dois complexos e então cada um é evoluído separa-

damente, notando-se que um dos complexos converge em direção a um mínimo local. Os novos pontos são redistribuídos em dois complexos e uma nova etapa de evolução é aplicada a cada um. O resultado final é a convergência de todos os pontos para o mínimo global da função objetivo.



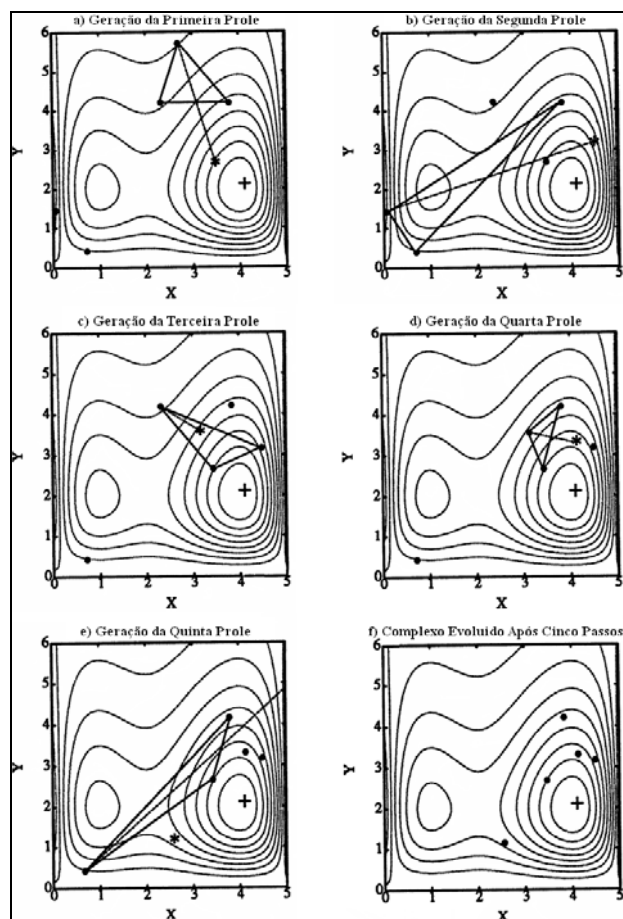
Adaptado de Duan *et al.* (1992)

Figura 2 – Exemplo do processo de mistura dos complexos no SCE-UA

O processo de evolução dos complexos, considerado aqui o segundo módulo do SCE, segue o algoritmo CCE (Competitive Complex Evolution). Seu algoritmo também está minuciosamente descrito em Duan *et al.* (1992) e Breda (2008). A Figura 3 exemplifica de forma mais sintética o funcionamento deste procedimento.

Dentre todos os pontos do complexo, um sub-conjunto menor é escolhido com base na probabilidade de cada ponto ser selecionado, sendo pontos com menor valor da função objetivo os mais prováveis. Escolhido os pontos do sub-complexo é identificado o ponto com maior valor da função objetivo, o qual será evoluído em função dos demais pontos do sub-complexo. O primeiro passo é o de reflexão (Figura 3(a)). Quando o resultado deste passo é um ponto de menor valor da função objetivo, em relação ao pior ponto do sub-complexo, diz-se que houve êxito na evolução do sub-complexo. Do contrário, quando o ponto refletido é pior que o ponto de origem, executa-se um passo de contração,

onde o pior ponto do sub-complexos aproximasse dos demais (Figura 3(c)). Em alguns casos o ponto refletido vai além dos valores permitidos para alguns dos parâmetros. Quando isto ocorre considera-se que houve um estresse da população, sendo necessário gerar um ponto mutante dentro do espaço permitido (Figura 3(e)). O resultado final do procedimento CCE é a movimentação dos pontos do complexo trabalhado rumo a um ponto de mínimo da função objetivo.



Adaptado de Duan *et al.* (1992)
Figura 3 – Exemplo do processo de evolução dos complexos no SCE-UA

Ferramentas de análise dos resultados

Os resultados obtidos para este estudo são avaliados de duas formas diferentes. Primeiramente há uma comparação direta entre os valores dos parâmetros tidos como ótimos em cada experimento de calibração. Posteriormente são estimados parâmetros estatísticos para avaliar a qualidade da simu-

lação de vazão utilizando os parâmetros ótimos, e a eficiência do processo de calibração.

Em cada uma das execuções do SCE foi escolhido o conjunto de 18 parâmetros que apresentava o menor valor da REMQ para o período de calibração. Os melhores conjuntos, ou pontos, obtidos nas calibrações utilizadas para avaliar o mesmo componente do método de calibração (população inicial, critério de convergência ou número de complexos) são apresentados lado a lado em tabelas, a fim de facilitar a comparação entre os valores de cada parâmetro. Assim torna-se mais fácil identificar pontos que obtiveram valores próximos e, portanto, são resultados de calibrações que convergiram para a mesma região.

Conjuntamente com o cômputo da função objetivo, a REMQ, foi estimado o coeficiente de correlação linear de Pearson, r . O próprio valor da REMQ, assim como seu valor em comparação com os obtidos nos demais experimentos, aponta a qualidade da série de vazão modelada e o benefício, ou degradação, do resultado para a configuração estipulada no SCE. O coeficiente de correlação mostra a sintonia da variação temporal entre as séries de vazões. Valores altos deste coeficiente indicam que a vazão simulada apresenta uma oscilação muito semelhante à vazão observada.

A eficiência do método de calibração automático é avaliada pelo número de vezes que a função objetivo foi calculada. Este índice, denominado de NF, dá uma idéia da carga de processamento computacional aplicada na solução do problema, pois grandes valores de NF indicam que o SCE precisou calcular a função objetivo de muitos pontos no hiperespaço, até convergir para uma determinada região.

Uma última análise, apenas para tornar mais visível a diferença entre os resultados, é feita pelas hidrógrafas da vazão observada e das vazões simuladas. Foi escolhido um pequeno período de dados, que apresentasse tanto um intervalo de cheia quanto de recessão do rio, sendo plotados em um mesmo gráfico as séries de vazões em análise.

Objetos de análise e roteiro de experimentos

Em experimentos realizados em Duan *et al.* (1992), o método convergiu para o mínimo global da função objetivo na grande maioria das simulações. Contudo verificaram-se situações em que houve grande uso de tempo computacional, para chegar-se a resultados não muito diferentes de outros que convergiram em muito menos tempo.

Pretende-se aqui, verificar o impacto da configuração do SCE na qualidade e na eficiência da obtenção do ponto de mínimo da equação (01). Para tanto foram avaliados a variação de três itens diferentes: população inicial fornecida ao método; o valor de $dpcrit$; e a quantidade de complexos, p , utilizados.

A população inicial é sorteada aleatoriamente, dado os valores limites de cada parâmetro. Através de uma função linear, o número randômico entre 0 e 1, é convertido a um valor dentro dos valores limites do parâmetro. Ao alterar a população inicial fornecida ao SCE, pretende-se verificar se este método é sensível a esta modificação. Alterações na rapidez da convergência, indicado pelo NF, ou no ponto retornado como o mínimo da função, indicam se o método é sensível à população inicial.

O valor de $dpcrit$ indica o quão próximos deverão estar os pontos evoluídos para considerá-los como presentes em uma mesma região. Empregar valores pequenos de $dpcrit$ direciona o SCE a encontrar pontos mais refinados. O melhor dentre os melhores pontos. Contudo este refinamento ocorre à custa de um processamento computacional mais intenso. Do contrário, grandes valores de $dpcrit$ fazem a busca encerrar rapidamente, retornando pontos menos concentrados na região de mínimo da função objetivo.

A quantidade de complexos implica diretamente no tamanho da população de pontos, com a qual o SCE irá trabalhar na busca do mínimo da função. Supostamente, poucos complexos podem implicar em uma falta de informação sobre o espaço de busca, retardando ou impedindo a convergência para o mínimo global. Por outro lado, fornecer pontos demais ao método provavelmente gerará um excesso de processamento, devido à necessidade de evoluir todos os pontos à região de mínimo.

Neste trabalho foram realizadas 11 simulações de calibração dos parâmetros do modelo Sacramento. Para avaliar o efeito da mudança da população inicial fornecida ao SCE, foram realizadas cinco simulações com populações diferentes. Nestas rodadas manteve-se o valor de $dpcrit$ igual a 5%, empregando-se 8 complexos no processo de busca do ponto de convergência.

Posteriormente foram realizadas outras três simulações, utilizando valores de $dpcrit$ de 25%, 50% e 100%. A população inicial fornecida foi a mesma da primeira simulação, novamente trabalhando-se com 8 complexos.

Por fim, os 18 parâmetros foram calibrados pelo SCE utilizando 2, 4 e 12 complexos. Nestas simulações foi empregado o $dpcrit$ de 25%, e a mes-

ma população inicial utilizada nas simulações de verificação da alteração do $dpcrit$.

RESULTADOS

Os resultados foram divididos em três seções para focar os objetos de análise.

Alterações da população inicial

Os experimentos de simulação utilizando cinco grupos de populações iniciais diferentes convergiram para os conjuntos de parâmetros apresentados na Tabela 1.

Tabela 1 – Conjuntos ótimos de parâmetros resultantes das calibrações para diferentes populações iniciais

Parâmetro	População Inicial (296 pontos)				
	P1	P2	P3	P4	P5
UZWIM	30,5	1,0	1,0	362,9	30,1
UZFWM	499,8	500,0	499,9	196,4	499,3
LZWIM	155,8	181,6	180,8	1,0	140,1
LZFPM	123,0	2000,0	1998,7	2000,0	133,5
LZFSM	903,9	1000,0	999,2	1000,0	927,8
UZK	0,750	0,651	0,571	0,750	0,750
LZPK	0,0205	0,0137	0,0138	0,0126	0,0200
LZSK	0,0809	0,1000	0,1000	0,0126	0,0798
PCTIM	0,037	0,081	0,089	0,506	0,000
ADIMP	0,005	0,614	0,605	0,281	0,057
PFREE	0,538	0,495	0,479	0,483	0,557
ZPERC	331,9	1000,0	868,2	1,0	332,1
REXP	1,30	1,00	1,01	7,83	1,45
RSERV	0,172	0,096	0,157	0,160	0,052
RIVA	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
SIDE	0,000	0,062	0,071	0,000	0,000
β	0,0666	0,0117	0,0114	0,0060	0,0966
η	0,960	0,948	0,954	1,046	0,792

Com base apenas nos valores dos parâmetros que compõem os pontos de mínimo obtidos para cada população inicial, pode-se verificar que o SCE convergiu para mínimos locais. Na bacia testada neste estudo, não ocorreu de os 18 parâmetros fornecidos pelo SCE serem semelhantes em todas as populações iniciais.

A partir dos conjuntos de parâmetros apresentados na Tabela 1 verificam-se três pontos de convergência. Um obtido nas calibrações com P1 e P5, outro nas que utilizaram P2 e P3, e um terceiro

ponto obtido ao inicializar com P4. Entretanto houve parâmetros em que a convergência foi semelhante em duas regiões de mínimo, como no caso do UZFWM em que somente o ponto da convergência por P4 foi diferente dos demais. O parâmetro UZK obtido no ponto retornado para P1 e P5 e no ponto obtido para P4 foi idêntico. Para o parâmetro LZFPM, P1 e P5 convergiram para um valor da ordem de 120, enquanto que para as outras três populações iniciais o valor obtido foi próximo dos 2000.

O desempenho computacional do procedimento de calibração, e a qualidade da simulação de vazão utilizando os parâmetros otimizados, são refletidos nos valores de NF, REMQ e da correlação. A Tabela 2 exibe os valores destes índices para o período de calibração, e de verificação.

Tabela 2 – Índices de desempenho das séries de vazões modeladas utilizando parâmetros calibrados com diferentes populações iniciais

Índice	População Inicial				
	P1	P2	P3	P4	P5
REMQ ¹	47,42	49,08	49,09	48,06	47,42
REMQ ²	43,38	49,87	49,95	51,74	43,38
r ¹	0,81	0,79	0,79	0,80	0,81
r ²	0,80	0,71	0,71	0,67	0,80
NF	64.242	53.247	34.022	68.524	64.242

¹ Calculado para o período de calibração (1998 – 2002)

² Calculado para o período de verificação (2003 – 2006)

Os pontos de mínimos encontrados pelo SCE para as diferentes populações iniciais apresentaram uma variação muito pequena da REMQ entre si no período de calibração. Entretanto, a similaridade entre os pontos de convergência ao empregar as populações P1 e P5, e P2 e P3, foi evidenciada pela REMQ do período de calibração. No ponto obtido por P1 e P5 este índice foi de 47,42 m³/s, enquanto que para o ponto resultante da otimização por P2 e P3 contabilizou uma REMQ de 49,08 m³/s. O ponto obtido por P4 obteve um valor intermediário, 48,06 m³/s.

No período de verificação houve redução da REMQ para os pontos das populações P1 e P5, enquanto que para os demais pontos o erro no período de verificação foi maior. Entretanto, estas variações, entre a REMQ da calibração e a da verificação, foram pequenas, sendo a maior diferença de aproximadamente 9%, obtido para P5.

O coeficiente de correlação linear não captou diferenças significativas entre os pontos de convergência. Em todos eles obteve-se um valor em

torno de 0,80 no período de calibração. Contudo, no período de verificação, houve notável redução da correlação para as simulações com os pontos obtidos para P2, P3 e P4. Para P2 e P3, que são pontos resultantes da convergência para uma mesma região, a correlação diminuiu de 0,79 no período de calibração para 0,71 no período de verificação. Para a simulação com P4 a redução foi ainda maior, de 0,80 para 0,67.

O desempenho computacional do SCE na otimização dos parâmetros foi bastante oneroso. Observando a Tabela 2 nota-se que dentre as cinco simulações de calibração, três empregaram mais de 60 mil cálculos da função objetiva, até que houvesse convergência dos pontos da população inicial para uma mesma região. Entretanto, a rodada com o conjunto inicial P3 encerrou a busca após 34022 cálculos da função objetivo, obtendo o maior erro contabilizado para o período de calibração. Os pontos P1 e P5, localizados na mesma região de convergência apresentaram NF iguais, exatamente 64242 cálculos. Porém o conjunto P2 e P3, que também são oriundos de um mesmo mínimo local mostraram valores bastante diferentes do NF.

Os hidrogramas da Figura 4 para Santa Cruz do Timbó, exibem um pequeno período da série de vazão observada no ano de 2005, e as séries de vazões modeladas com os parâmetros otimizados pelo SCE.

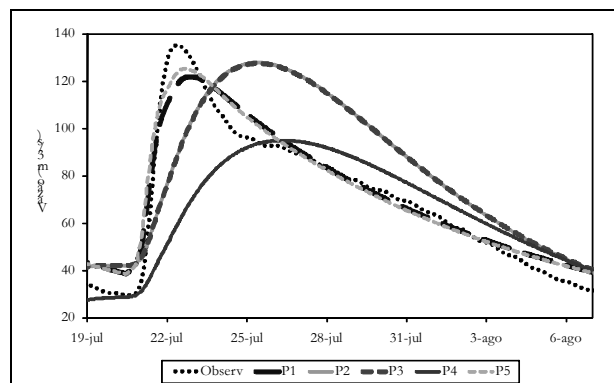


Figura 4 – Vazões modeladas para Santa Cruz do Timbó, com parâmetros otimizados para cada população inicial

A semelhança do ponto de convergência para as diferentes populações iniciais é mais facilmente notada no gráfico da Figura 4. As séries de vazões modeladas com parâmetros calibrados a partir de P1 e P5 ficaram bastante próximas entre si durante todo o período apresentado, ocorrendo o mesmo para as séries de P2 e P3. O ponto obtido

por P4, que já havia demonstrado um resultado ruim em relação à REMQ, apresentou também a maior diferença e defasagem em relação à série de vazão observada. Do contrário, o melhor resultado no período foi a simulação utilizando os parâmetros calibrados por P1 ou P5.

Alterações do critério de convergência

A utilização do critério de convergência, *dpcrit*, mais, ou menos, restritivo foi testado empregando-se os valores de 5%, 25%, 50% e 100%. O conjunto de parâmetros resultante da otimização do SCE são exibidos na Tabela 3.

Tabela 3 – Conjuntos ótimos de parâmetros resultantes das calibrações para diferentes valores do critério de convergência

Parâmetro	<i>dpcrit</i>			
	5 %	25 %	50 %	100 %
UZWIM	30,5	31,1	222,6	80,4
UZFWM	499,8	498,7	287,4	472,7
LZWIM	155,8	159,8	613,4	821,5
LZFPM	123,0	117,9	1088,7	311,7
LZFSM	903,9	952,1	561,4	42,0
UZK	0,750	0,748	0,542	0,291
LZPK	0,0205	0,0198	0,0217	0,0055
LZSK	0,0809	0,0805	0,0583	0,0101
PCTIM	0,037	0,042	0,444	0,389
ADIMP	0,005	0,001	0,200	0,017
PFREE	0,538	0,537	0,475	0,449
ZPERC	331,9	373,7	393,1	857,0
REXP	1,30	2,02	4,48	4,62
RSERV	0,172	0,108	0,195	0,169
RIVA	0,000	0,000	0,747	0,737
SIDE	0,000	0,000	0,362	0,698
β	0,0666	0,0674	0,0191	0,0229
η	0,960	0,949	0,787	0,657

Os parâmetros obtidos com o critério de 25% são semelhantes aos obtidos com critério de 5%. Entretanto não há argumento para afirmar que os pontos obtidos no *dpcrit* de 50% são mais próximos aos de 25%, que os obtidos com o critério de convergência em 100%. Por exemplo, o parâmetro LZPK para *dpcrit* de 5% foi de 0,0205, de 0,0217 para 50% e de 0,0055 para o critério de 100%, mostrando que o uso do *dpcrit* de 50% foi mais próximo ao *dpcrit* de 5%. Contudo, para o parâmetro UZFWM, o valor obtido no critério de 100%, 472,7, foi mais próximo dos 499,8 obtidos com *dpcrit* de 5%, que os 287,4 fornecido no critério de 50%.

A análise da REMQ obtida entre as séries modeladas e a série observada retrata melhor a disparidade entre os conjuntos de parâmetros obtidos para cada valor do critério de convergência. A Tabela 4 reúne o valor dos índices estatísticos referentes às simulações utilizando os conjuntos de parâmetros apresentados na Tabela 3.

Tabela 4 – Índices de desempenho das séries de vazões modeladas utilizando parâmetros calibrados com diferentes valores do critério de convergência

Índice	<i>dpcrit</i>			
	5 %	25 %	50 %	100 %
REMQ ¹	47,42	47,43	52,99	58,74
REMQ ²	43,38	43,33	45,99	55,22
r ¹	0,81	0,81	0,75	0,69
r ²	0,80	0,80	0,75	0,65
NF	64.242	28.054	3.324	0

¹ Calculado para o período de calibração (1998 – 2002)

² Calculado para o período de verificação (2003 – 2006)

A alteração do valor de *dpcrit* tem grande importância, não só na qualidade do parâmetro obtido, como também na eficiência do SCE. Nota-se uma diferença desprezível entre os valores da REMQ e da correlação, para as séries modeladas com os parâmetros obtidos em *dpcrit* de 5% e de 25%. Todavia, ao diminuir a restrição da convergência para 25%, o SCE empregou pouco menos da metade do número de cálculos da função objetivo para chegar à mesma região. O método foi ainda mais rápido em 50%, onde empregou pouco mais de um décimo da quantidade de cálculos utilizado no critério de 25%. Quando foi determinado o *dpcrit* de 100%, o SCE sequer foi acionado, pois o conjunto de pontos sorteados para a população inicial já satisfazia este critério de convergência.

Os números da REMQ e da correlação mostram uma degradação destes índices, para as séries de vazões modeladas que utilizaram os parâmetros otimizados com *dpcrit* de 50% e de 100%. Entretanto, ao aplicar o critério de convergência de 25%, as alterações nos indicadores foram mínimas. A REMQ em período de calibração subiu de 47 m³/s para 53 e 59 m³/s, nas séries utilizando *dpcrit* de 25%, 50% e 100%, respectivamente. No período de verificação este aumento foi, na mesma ordem, de 43 m³/s para 46 e 55 m³/s, aproximadamente. A degradação dos coeficientes de correlação também foi constatada. Este índice variou de 0,80 no *dpcrit* de 25%, para 0,75 no de 50%, e para 0,65 quando foi selecionado o valor de 100%.

Uma última análise, do impacto da mudança do critério de convergência, na qualidade da calibração foi realizada pelos gráficos das séries de vazões modeladas em Santa Cruz do Timbó (Figura 5).

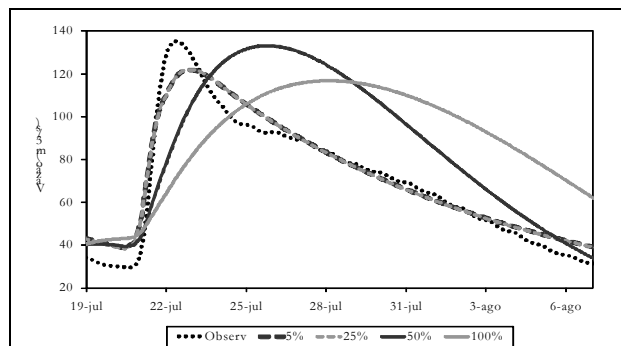


Figura 5 – Vazões modeladas para Santa Cruz do Timbó, com parâmetros otimizados para cada valor de $dpcrit$

Durante o período apresentado na Figura 5, verifica-se um aumento da degradação do resultado do modelo, com o aumento do $dpcrit$ de 25% para 50%, e depois para 100%. Enquanto as séries de vazões modeladas, pelos parâmetros obtidos com o critério de convergência em 5% e 25% foram semelhantes à vazão observada, a série referente ao uso do $dpcrit$ de 50% mostrou-se defasada e com um período de pico da vazão mais extenso que o registrado. Para a série referente ao $dpcrit$ de 100% o modelo apresentou uma defasagem ainda maior, além de uma oscilação bastante atenuada em relação à oscilação da vazão observada.

Alterações no número de complexos

O terceiro componente avaliado do método de calibração automática em estudo é o número de complexos empregados no processo de busca e convergência do mínimo da função objetivo.

Os conjuntos de parâmetros apresentados na Tabela 5 são resultantes dos processos de calibração automática utilizando 2, 4, 8 e 12 complexos. Os conjuntos resultantes da calibração com 8 e 12 complexos apresentam valores próximos entre si em 13 dos 18 parâmetros, como por exemplo para UZFWM, PFREE e β , indicando que são pontos bastante próximos, provavelmente localizados na mesma região de mínimo da função objetivo. Entretanto, o conjunto obtido na calibração com 4 complexos assemelha-se ao de 8 complexos em 12 parâmetros, porém em apenas 7 com o de 12 complexos. Mas nestes sete parâmetros (LZTWM, LZSK, PC-

TIM, PFREE, RSERV, RIVA e SIDE) os valores para o ponto obtido com 8 complexos também são semelhantes aos obtidos com 12 complexos. Portanto, embora as regiões para onde cada calibração convergiu não sejam exatamente as mesmas, porém, próximas. O conjunto de parâmetros obtidos com apenas 2 complexos apresentou divergências aos demais conjuntos na maioria dos parâmetros, podendo-se supor que trata-se de uma região de mínimo bastante diferente das demais.

Tabela 5 – Conjuntos ótimos de parâmetros resultantes das calibrações com diferentes número de complexos

Parâmetro	Número de complexos			
	2	4	8	12
UZWWM	448,4	1,5	31,1	27,2
UZFWM	270,8	366,5	498,7	500,0
LZTWM	716,1	169,8	159,8	161,7
LZFPM	1561,4	1255,6	117,9	1,0
LZFSM	271,5	998,9	952,1	759,1
UZK	0,685	0,585	0,748	0,050
LZPK	0,0081	0,0145	0,0198	0,0343
LZSK	0,0114	0,1000	0,0805	0,0729
PCTIM	0,433	0,066	0,042	0,055
ADIMP	0,032	0,514	0,001	0,005
PFREE	0,749	0,487	0,537	0,533
ZPERC	265,1	451,7	373,7	999,9
REXP	7,42	1,04	2,02	5,46
RSERV	0,145	0,137	0,108	0,147
RIVA	0,628	0,000	0,000	0,000
SIDE	0,288	0,000	0,000	0,000
β	0,0104	0,0155	0,0674	0,0524
η	0,955	0,908	0,949	1,032

Os valores da REMQ, correlação linear e número de vezes que a função objetivo foi calculada, conforme o número de complexos usado na calibração, são apresentados na Tabela 6.

Tabela 6 – Índices de desempenho das séries de vazões modeladas utilizando parâmetros calibrados com diferentes número de complexos

Índice	Número de complexos			
	2	4	8	12
REMQ ¹	49,00	49,06	47,43	47,46
REMQ ²	49,90	48,71	43,33	42,70
r^1	0,79	0,79	0,81	0,81
r^2	0,69	0,72	0,80	0,81
NF	2.069	12.093	28.054	66.020

¹ Calculado para o período de calibração (1998 – 2002)

² Calculado para o período de verificação (2003 – 2006)

A partir dos valores da REMQ obtidos para o período de calibração poder-se-ia supor que houve a conversão para apenas duas regiões, dados os valores muito próximos entre as simulações que utilizaram os parâmetros calibrados com o uso de apenas 2 e 4 complexos, e entre os que utilizaram 8 e 12 complexos. Para a primeira região ter-se-ia uma REMQ de $49 \text{ m}^3/\text{s}$ e uma correlação linear de 0,79, enquanto que a segunda região seria caracterizada por uma REMQ de aproximadamente $47,45 \text{ m}^3/\text{s}$ e correlação de 0,81. Contudo, ao se comparar os valores estimados para o período de verificação vê-se que os obtidos com os parâmetros resultantes de 2 complexos distanciam-se dos obtidos com 4 complexos. Entre os valores para 8 e 12 complexos há também uma separação entre os valores, porém muito pequena.

Em termos de qualidade das séries simuladas com os diferentes conjuntos de parâmetros, vê-se claramente pelos resultados obtidos no período de verificação que o incremento do número de complexos reflete em uma melhoria dos índices estatísticos. Contudo o maior ganho está na mudança de 4 para 8 complexos, pois os índices para este último e para o de 12 complexos são muito semelhantes.

A eficácia do SCE também apresenta-se diretamente relacionada com o número de complexos, o que já era esperado. Com menos complexos a serem trabalhados a convergência para algum mínimo é realizada com um menor número de interações, ao passo que ao trabalhar com uma população muito grande, torna-se necessário um grande número de interações até que todos os pontos sejam deslocados para a mesma região de mínimo e atendam ao critério de convergência.

Um pequeno período das séries de vazão observada em Santa Cruz do Timbó e de vazões simuladas com os conjuntos de parâmetros da Tabela 5 são apresentados na Figura 6.

No período apresentado na Figura 6 nota-se facilmente a semelhança entre as vazões simuladas com os parâmetros otimizados com 8 e 12 complexos. Além de semelhantes, estas duas séries de vazões simuladas estão mais próximas à série de vazão observada do que as séries simuladas com parâmetros obtidos nas calibrações com 2 e 4 complexos. Estas séries, provenientes do uso de parâmetros ajustados com poucos complexos, representaram com atraso o período de subida da vazão, resultando em vazões subestimadas durante o aumento da vazão real e, do oposto, em vazões superestimadas quando o monitoramento indicava um período de recessão.

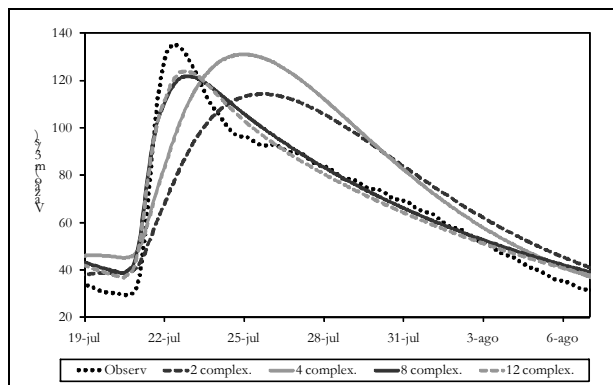


Figura 6 – Vazões modeladas para Santa Cruz do Timbó, com parâmetros otimizados com diferentes números de complexos

CONCLUSÕES

O presente trabalho buscou avaliar o impacto da escolha de três componentes do método de calibração automática, *Shuffled Complex Evolution* (SCE), no seu desempenho. Ao total foram realizados 11 experimentos onde o SCE foi empregado para ajustar os 18 parâmetros do modelo hidrológico Sacramento para uma bacia de cabeceira de um afluente do Rio Iguaçu.

O primeiro componente testado foi a população inicial fornecida ao SCE. Cinco populações iniciais diferentes foram utilizadas, mantendo-se o mesmo critério de convergência e o número de complexos (tamanho da população) em todos os experimentos. Para a bacia em estudo chegou-se a conclusão que foram obtidos 3 diferentes regiões de mínimo, dada a semelhança dos valores dos parâmetros obtidos para a calibração com a primeira e a quinta população, com a segunda e a terceira, enquanto que a calibração com a quarta população gerou um conjunto diferente dos demais.

Embora no período de calibração as vazões simuladas com os diferentes parâmetros apresentaram valores similares da REMQ e da correlação linear viu-se que, ao computar estas estatísticas para o período de verificação, os conjuntos de parâmetros obtidos com a primeira e a quinta população inicial resultaram em menores erros e maior correlação, em relação às séries simuladas com os demais conjuntos de parâmetros.

Outro componente testado neste trabalho foi a flexibilidade do critério de convergência utilizado. Designado pela variável *dpcrit*, o critério de convergência estabelece uma razão porcentual do

desvio-padrão em relação ao valor esperado na família de pontos evoluídos no processo de calibração. Os valores testados para esse parâmetros foram de 5%, 25%, 50% e 100%, sendo empregada a mesma população inicial e o número de complexos em todos os testes. Um resultado obtido, que já era esperado, foi o aumento de processamento conforme o aumento da restrição do critério de convergência. Para o *dp_{crit}* mais restritivo, 5%, foram utilizadas pouco mais de 60.000 cálculos da função objetivo, enquanto que para o *dp_{crit}* de 25% e 50% foram necessários aproximadamente 28.000 e 3.300 cálculos, respectivamente.

Avaliando os índices estatísticos das simulações hidrológicas com os parâmetros obtidos em cada experimento observou-se uma degradação da qualidade da vazão simulada com a diminuição da restrição. Entretanto, o aumento da REMQ e diminuição da correlação linear ao usar os parâmetros calibrados com *dp_{crit}* de 25% ao invés de 5% foi muito pequena. No período de verificação, a REMQ para 5% foi de 43,38 m³/s e de 43,33 m³/s para o critério de 25%, enquanto que a diferença entre os coeficientes de correlação foi inferior a dois dígitos decimais. Entretanto no *dp_{crit}* de 50% a REMQ aumentou para 46 m³/s e para 55 m³/s na calibração com *dp_{crit}* de 100%, havendo também grande deterioração da correlação linear.

O terceiro componente avaliado foi o número de complexos, que indica o tamanho da população de pontos que tiveram de ser evoluídos no processo de calibração. O SCE foi executado com dois, quatro, oito e doze complexos, utilizando-se a mesma população inicial nestes experimentos assim como o mesmo fator de restrição para a convergência. A finalização do processo de busca do mínimo da função objetivo ocorreu mais rapidamente nos experimentos com menos complexos, sendo que para o uso de dois complexos foram necessárias 2.069 cálculos da função objetivo, enquanto que para o uso de quatro, oito e doze complexos foram necessários aproximadamente 12.000, 28.000 e 66.000 cálculos, respectivamente. Entretanto, o conjunto de parâmetros obtidos nas calibrações com apenas dois e quatro complexos apresentaram uma REMQ e uma correlação linear significativamente inferior aos obtidos com as simulações hidrológicas que utilizaram os parâmetros resultantes da calibração com oito e doze parâmetros. Tomando-se as estatísticas obtidas para o período de verificação, nota-se uma REMQ da ordem de 49 m³/s nas simulações com os parâmetros obtidos com dois e quatro complexos, enquanto que para as simulações que utilizaram os parâmetros da calibração com oito e

doze complexos foi obtida uma REMQ de 43,3 m³/s e 42,7 m³/s respectivamente. Esta proximidade da REMQ nos dois últimos experimentos demonstra a proximidade dos pontos obtidos como ótimo da função objetivo. De fato, 13 dos 18 parâmetros obtidos como ótimo da calibração com oito complexos assemelham-se bastante aos parâmetros obtidos na calibração com doze. Contudo, o ponto obtido com quatro complexos assemelha-se ao de doze em apenas 7 parâmetros. Portanto, o uso de oito complexos para o ajuste automático de parâmetros testados neste estudo é suficiente para obter um resultado acurado.

Com base em todos os resultados obtidos neste trabalho pode-se concluir que, para o modelo hidrológico Sacramento com propagação por reservatórios conceituais não-lineares, a melhor configuração do SCE é o uso de um *dp_{crit}* de 25% para convergir um grupo de oito complexos, sendo necessário repetir o experimento para, pelo menos, três diferentes populações iniciais.

REFERÊNCIAS

- BEVEN, K.; BINLEY, A. The future of distributed models: model calibration and uncertainty prediction. *Hydrological Processes*, v 6, p. 279-298, 1992.
- BRAVO, J.M.; COLLISCHONN, W.; TUCCI, C. E. M. Verificação da eficiência e eficácia de um algoritmo evolucionário multi-objetivo na calibração do modelo hidrológico IPH II. *Revista Brasileira de Recursos Hídricos*, v 14, n 3, p 37-50, 2009.
- BREDA, A. Avaliação de melhorias para um sistema de previsão hidrológica horária. Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Paraná, 142 p., 2008.
- BURNASH, R.J.C. The NWS river forecast system catchment modelling. In Singh, V. J. (editor) *Computer models of watershed hydrology*. Water Resources Publications, Highlands Ranch. 1130 p. 1995.
- COLLISCHONN, W.; TUCCI, C.E.M. Ajuste multi-objetivo dos parâmetros de um modelo hidrológico. *Revista Brasileira de Recursos Hídricos*, v 8, n 3, p. 27-39, 2003.
- DUAN, Q.; SOROOSHIAN, S.; GUPTA, V. Optimal use of the SCE-UA global optimization method for calibrating watershed models. *Journal of Hydrology*, n 158, p. 265-284, 1994.
- HOLLAND, J.H. *Adaptation in Natural and Artificial Systems*. University of Michigan Press, Ann Arbor, 1975.
- NELDER, J. A.; E MEAD, R.: A simplex method for function minimization. *Computer Journal*, v. 7, p. 308-313, 1965.

- PRICE, W. L.: Global optimization algorithms for a CAD workstation. J. Optim. Theory Appl., 55, 133-146, 1987.
- SIMON, E.; DISKIN, M. H.: A procedure for the selection of objective functions for hydrologic simulation models. Journal of Hydrology, nº 34, p. 129-149, 1977.
- TUCCI, C. E. M. Modelos hidrológicos. ABRH Editora da UFRGS. Porto Alegre. 669 p., 1998.
- YAPO, P.O.; GUPTA, H.V.; SOROOSHIAN, S. Automatic calibration of conceptual rainfall-runoff models: sensitivity to calibration data. Journal of Hydrology, v 181, p. 23-48, 1996.

Analysis of Changes in Components of a Mono-Objective Automatic calibration Method in the Quality and Efficiency of Sacramento Model Parameter Adjustment .

ABSTRACT

The study evaluated the use of different three-component configurations of a mono-objective calibration method, the Shuffled Complex Evolution, at the University of Arizona. This method was applied to find the best parameters of an 18-parameter hydrologic model used to simulate flow in the river basin of an Iguacu River tributary. The results showed that the initial population supplied to the method interferes in the result of seeking an optimum objective function point, so that different initial populations can result in different optimal points. The criterion of convergence was also evaluated, and it was found to be directly related to the number of interactions performed by the method, until it converges to an optimum of the objective function. A criterion of the proportion of standard deviation was used in relation to the expected value of the parameter population. The results showed that a 25% criterion generated results close to the most restricted criterion, 5%, and the number of interactions performed was reduced by half. The third component tested was the size of the population of points used, represented by the number of complexes. Using few complexes, the method converged after a relatively small number of interactions, but the parameters obtained were not satisfactory. However, on using 8 and 12 complexes, satisfactory and similar sets of parameters were obtained. But the use of 8 complexes utilized slightly less than half the number of interactions of the 12—complex calibration.

Key-words: Calibration method; hydrologic model.