

XXIII SIMPÓSIO BRASILEIRO DE RECURSOS HIDRÍCOS

CALIBRAÇÃO AUTOMÁTICA DE UM MODELO DE SEDIMENTOS EM REGIÕES COM ESCASSEZ DE DADOS

Hugo de Oliveira Fagundes^{1} & Juan Martín Bravo²*

RESUMO – A etapa de calibração é uma das mais importantes durante a aplicação de modelos matemáticos que simulam processos relacionados aos recursos hídricos. Esse trabalho investigou a melhor forma de calibrar modelos matemáticos em regiões com escassez de dados observados a partir do uso de diferentes métricas estatísticas. Para isso, utilizou-se o algoritmo de otimização multi-objetivo MOCOM-UA juntamente com o modelo hidrossedimentológico de grandes bacias MGB-SED. 8 métricas (r , NSE, KGE, β , RMSE, BIAS, α e DCPerm), 3 parâmetros do modelo (MUSLE α , MUSLE β e TKS) e 3 conjuntos de dados (4, 12 e ~150 observações/ano) foram utilizados para realizar 58 experimentos de calibração automática. De acordo com os resultados, os valores das métricas foram parecidos para a maioria dos experimentos, apresentando também pouca variação para a mediana. As menores variações ocorreram nos experimentos em que se utilizou 4 dados/ano. O conjunto de métricas utilizados no processo de calibração automática que resultou em melhores valores para as 8 métricas foi o r , BIAS e DCPerm. As estatísticas mostraram que os resultados foram melhores ao usar ~150 dados/ano, mas que os valores das métricas não foram consideravelmente superiores do que quando se usou 4 dados/ano.

ABSTRACT– Calibration is one of the most important steps in the application of mathematical models that simulate processes related to water resources. This work investigated the best way to calibrate mathematical models in regions with observed data scarcity using several statistics metrics. To attend this aim, we used the multi objective optimization algorithm MOCOM-UA coupled to Large-Scale Sediment Model (MGB-SED). 8 metrics (r , NSE, KGE, β , RMSE, BIAS, α e DCPerm), 3 model parameters (MUSLE α , MUSLE β e TKS) and 3 data sets (4, 12 and ~150 measurements/year) were used to perform 58 experiments of automatic calibration. According to results, metric values were similar to the most part of the experiments, with little variation for the median. Smaller variations were observed in the experiments using 4 data/year. The data set used in automatic calibration step that showed the best values for the 8 metrics was the r , BIAS and DCPerm. Statistics showed that results were better when ~150 data/year were used, but that the metric values were not significantly higher than when 4 data/year were used.

Palavras-Chave – Modelagem hidrossedimentológica, MGB-SED, MOCOM-UA.

INTRODUÇÃO

Modelos matemáticos computacionais são ferramentas desenvolvidas com a finalidade de descrever processos e/ou comportamentos que sejam representativos da realidade observada, buscando gerar resultados satisfatórios para as variáveis em análise. Uma das etapas mais importantes na aplicação dos modelos é a calibração, que tem por objetivo melhorar sua performance (Bressiani et al., 2015; Pandey et al., 2016). A calibração consiste no ajuste dos

¹ Instituto de Pesquisas Hidráulicas (IPH) da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, h.o.fagundes@hotmail.com.

² Instituto de Pesquisas Hidráulicas (IPH) da Universidade Federal do Rio Grande do Sul. jumarbra@iph.ufrgs.br

parâmetros do modelo de forma que os resultados das simulações se aproximem aos dados observados sendo utilizadas diferentes métricas estatísticas e/ou a análise visual de gráficos.

No âmbito dos recursos hídricos, variáveis relacionadas a quantidade ou qualidade das águas podem ser simuladas utilizando modelos matemáticos, tais como: vazão, nível, umidade, evapotranspiração e armazenamento de água no solo (Siqueira et al., 2018); concentração de sedimentos em suspensão (Pandey et al., 2016); turbidez (Park et al., 2017); carbono orgânico e inorgânico (Sorribas et al., 2012). Para uma adequada calibração, é requerido que a disponibilidade de dados observados seja compatível com a escala temporal dos processos e variáveis representadas (Sorribas et al., 2012).

A baixa disponibilidade de dados, associada à complexidade no entendimento de alguns processos naturais, confere dificuldades ao processo de calibração manual de alguns modelos matemáticos (e.g. Sorribas et al., 2012). A fim de ajudar os usuários na aplicação de modelos, algoritmos de otimização (e.g. Yapo et al., 1998; Vrugt et al., 2003; Muleta; Nicklow, 2005) desenvolvidos foram acoplados a modelos matemáticos de simulação (e.g. Gupta et al., 1998; Bravo et al., 2009), permitindo a calibração automática de parâmetros. Nesse contexto, o presente trabalho tem como objetivo investigar qual a melhor forma de calibrar modelos matemáticos em regiões com escassez de dados observados a partir do uso de diferentes métricas estatísticas. Para o estudo, foi utilizado o modelo de sedimentos MGB-SED (Buarque, 2015) e o algoritmo de otimização multi-objetivo MOCOM-UA (Yapo et al., 1998).

MATERIAS E MÉTODOS

Dados observados e área de estudo

Para a realização do presente estudo escolheu-se a estação sedimentométrica Fazenda Ouro Fino (42°52'15'', 19°11'33''), de domínio da Companhia Energética de Minas Gerais (CEMIG). A estação apresenta em média cerca de 150 medições por ano, com registros a partir de 1977. A área de estudo foi a sub-bacia hidrográfica que tem como exutório essa estação (área de drenagem de ~6.438 km²), localizada na bacia hidrográfica do rio Doce (Brasil). A bacia possui elevadas declividades, com altitudes que podem chegar a mais de 2.000m. Apresenta um regime pluviométrico fortemente sazonal, com um período chuvoso entre outubro e março e o período seco entre abril e setembro.

MGB-SED e MOCOM-UA

Nesse trabalho foi utilizado o algoritmo de otimização multi-objetivo MOCOM-UA (Yapo et al., 1998) juntamente com o modelo hidrossedimentológico de grandes bacias MGB-SED (Buarque, 2015). O modelo MGB-SED é dividido em dois módulos: módulo hidrológico e módulo

hidrossedimentológico. Fagundes (2018) calibrou e validou o módulo hidrológico do modelo MGB-SED e realizou testes de calibração automática do módulo de sedimentos na bacia do rio Doce, utilizando o algoritmo MOCOM-UA. Nesse trabalho, utilizou-se a estrutura, parâmetros calibráveis do módulo hidrológico e dados de entrada fornecidos por Fagundes (2018), no entanto, com foco na bacia que drena para a estação Fazenda Ouro Fino.

Experimentos

A fim de alcançar o objetivo proposto, foram selecionadas 8 métricas para compor os experimentos realizados, sendo elas: coeficiente de correlação - r (Wohling et al., 2013); coeficiente de eficiência de Nash e Sutcliffe – NSE (Nash e Sutcliffe, 1970); coeficiente de Kling e Gupta (Gupta et al., 2009); viés normalizado pelo desvio padrão – β (Gupta et al., 2009); raiz do erro quadrático médio – RMSE (Romanowicz et al., 2013); erro relativo – BIAS (Romanowicz et al., 2013); variabilidade relativa – α (Gupta et al., 2009); e declividade da curva de permanência entre 10% e 50% - DCPPerm (Kollat et al., 2012). Essas métricas, suas faixas de variação e os valores ótimos estão resumidos na Tabela 1.

Tabela 1 –Estatísticas de performance de modelos, suas variações e valores ótimos.

MÉTRICA	r	NSE	KGE	β	RMSE	BIAS	α	DCPerm
VARIAÇÃO	-1 a 1	-∞ a 1	-∞ a 1	-∞ a ∞	0 a ∞	-∞ a ∞	0 a ∞	-∞ a ∞
ÓTIMO	1	1	1	0	0	0	1	0

Foram utilizados os seguintes parâmetros calibráveis do MGB-SED: MUSLE α , MUSLE β e TKS (que representa um coeficiente de ajuste (adimensional) do tempo de retardo do reservatório linear de sedimentos), que variaram, respectivamente, entre 8 e 15, 0,1 e 1,5, e 0,5 e 2,0. As faixas de variação desses parâmetros foram definidas com base no trabalho de Fagundes (2018).

Os experimentos realizados com o algoritmo MOCOM-UA tiveram 100 indivíduos em sua população com um número máximo de 150 interações, usando 3 funções-objetivo (exceto para 1 experimento). As métricas foram divididas em três grupos, tendo por objetivo reunir métricas que de alguma forma buscam representar elementos parecidos de um gráfico: r , NSE e KGE – Grupo 1; β , RMSE e BIAS – Grupo 2; e α e DCPPerm – Grupo 3.

Os experimentos resultaram de todas as combinações possíveis (18) considerando os três grupos e ainda variando o nº de dados observados em 4, 12 e ~150 por ano (Figura 1). Com isso, foram obtidos 54 experimentos. Além desses experimentos, foi realizado 1 experimento por grupo, utilizando 4 dados por ano, sendo no caso do grupo 3 acrescentada a métrica KGE, para compor o experimento. Essa escolha foi feita pois o α é um componente do KGE e nos experimentos por grupo, teve-se por objetivo verificar se métricas mais semelhantes forneceriam resultados diferentes

de quando usasse métricas que olham pra diferentes aspectos de um gráfico. Por exemplo, o r , o NSE e o KGE, de alguma forma estão relacionados e buscam alcançar um bom ajuste entre os dados, que se aproximem de uma reta. Por fim, se utilizou apenas duas métricas, o RMSE e o BIAS, com 4 dados por ano, para testar se um experimento com apenas duas métricas que buscam reduzir o viés e o valor absoluto entre os dados observados e simulados diariamente apresentaria resultados semelhantes. Na Tabela 2 são apresentados alguns experimentos para exemplificar a metodologia utilizada.

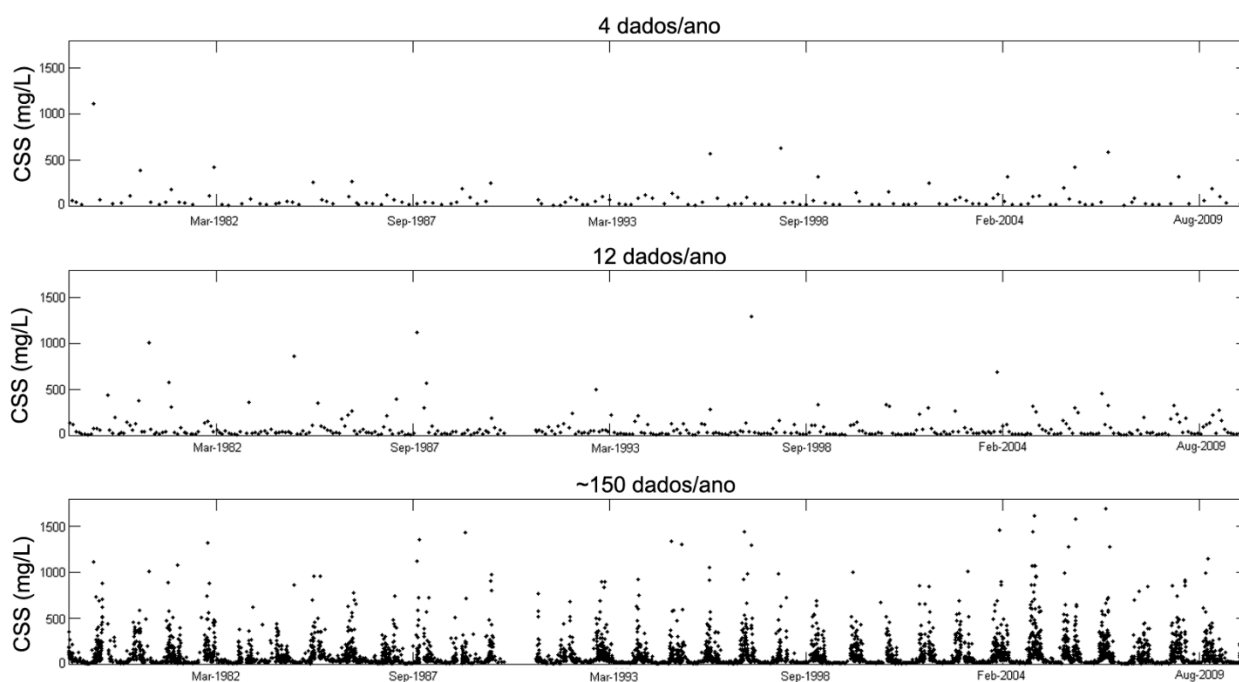


Figura 1 – séries de dados observados de concentração de sedimentos em suspensão na estação Fazenda Ouro Fino.

Tabela 2 – exemplos de alguns experimentos realizados.

Métricas			Dados/ano	Métricas			Dados/ano
NSE	RMSE	α	4	KGE	BIAS	DCPerm	4
			12				12
			150				150
r	NSE	KGE	4	KGE	α	DCPerm	4
β	RMSE	BIAS	4	RMSE	BIAS	-	4

Com 100 indivíduos e 58 experimentos foram geradas 5800 soluções após as calibrações. Para selecionar o melhor conjunto de parâmetro de cada experimento, foi adotado o seguinte procedimento: (i) selecionou-se as soluções não-dominadas; (ii) com o apoio das métricas não utilizadas na calibração, destacou-se em uma tabela os melhores valores das métricas da seguinte maneira: r , NSE e KGE: os 5 valores mais próximos de 1; RMSE: os 5 valores mais próximos de 0; α : os valores entre 0,9 e 1,1; β : os valores entre -0,1 e 0,1; BIAS e DCPerm: os valores entre -10 e 10; (iii) selecionou-se os conjuntos de parâmetros que tinham a maior quantidade de métricas

destacadas; (iv) destacou-se desse novo grupo os melhores valores de cada métrica. O conjunto com o maior número de métricas destacadas foi aquele que representou o melhor resultado da calibração automática. v) em caso de empate, o processo 3 e 4 se repetiram até encontrar o melhor conjunto de parâmetros que resultasse nos valores mais próximos do ótimo de cada métrica.

Para identificar qual foi a melhor combinação de métrica considerando os melhores conjuntos de parâmetros dos 54 primeiros experimentos, utilizou-se o passo (ii) do parágrafo anterior e contabilizou o nº de valores destacados considerando as calibrações com 4, 12 e ~150 dados/ano. Para os três conjuntos de parâmetros resultantes das calibrações com essas métricas, realizou-se um tipo de verificação simulando as concentrações com o MGB-SED e comparando com as outras séries de dados observados. Por exemplo, quando se calibrou com 4 dados/ano, usou-se o mesmo conjunto de parâmetros calibráveis e verificou o valor das métricas com 12 e ~150 dados/ano.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

A partir da seleção dos melhores resultados, com os melhores valores das métricas, foi possível avaliar a variação dos parâmetros calibráveis (Figura 2) e o desempenho individual de cada métrica (Figura 3) dos experimentos que variaram também o número de dados observados disponíveis para a calibração automática. Os parâmetros calibráveis apresentaram pouca variação, com valores próximos de suas médias (Figura 2). A maior amplitude foi observada para os parâmetros MUSLE α utilizando 4 dados/ano, em que os valores variaram de próximo de 8 (limite inferior da faixa de variação) à próximo de 15 (valor superior da faixa de variação). As menores variações ocorreram para o parâmetro MUSLE β , que segundo Fagundes (2018) é o parâmetro mais sensível dentre os demais.

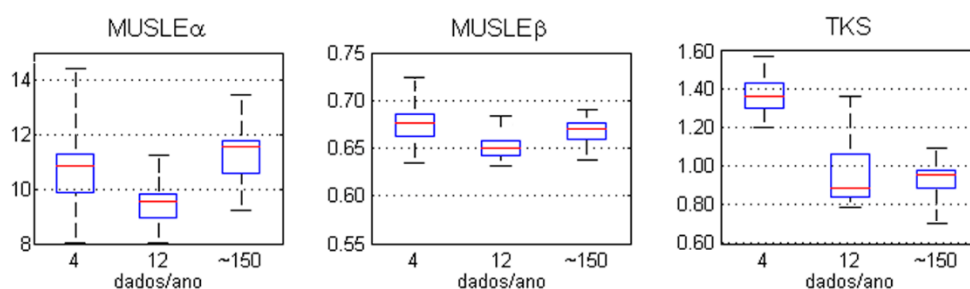


Figura 2 – Resumo dos valores dos parâmetros calibráveis resultantes das 54 calibrações automáticas variando as métricas e quantidade de dados observados.

Avaliando os resultados da Figura 3, nota-se que os valores das métricas em todos os 54 experimentos foram, no geral, parecidos, apresentando pouca variação e medianas parecidas. As menores variações ocorreram nos experimentos em que se utilizaram apenas 4 dados/ano no processo de calibração. Já a métrica que menos variou foi o r , que apresentou valores semelhantes aqueles encontrados com as simulações de referência. Destaca-se que métricas usuais para se medir a performance de modelos de sedimentos como o NSE e o BIAS (Moriassi et al., 2007) apresentaram

melhoria considerável após a calibração automática. Ao usar 4 dados/ano, o NSE melhorou de -0,89 para 0,37 (média) e o BIAS de 115% para 1,79% (média).

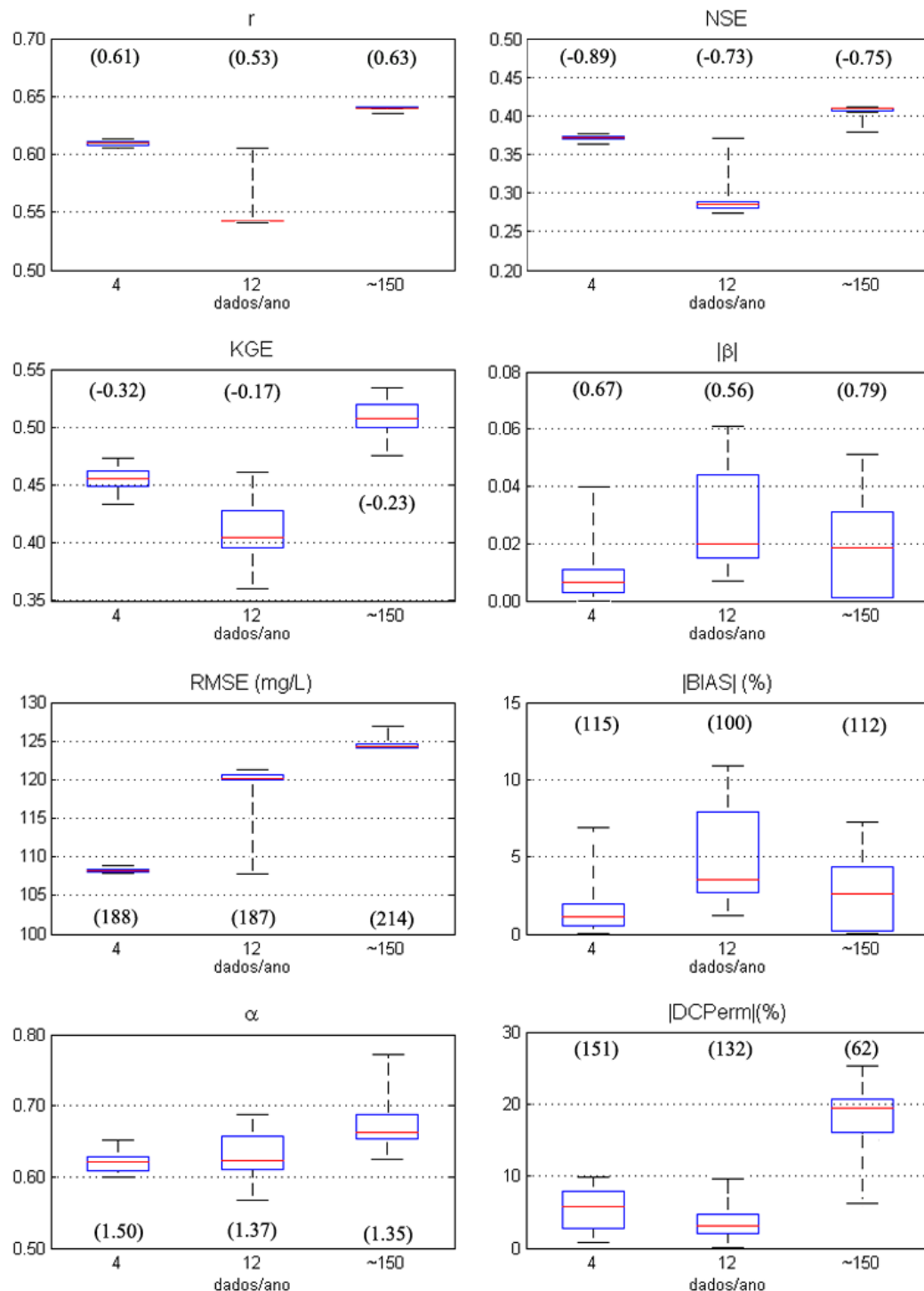


Figura 3 – Resumo dos valores das métricas dos 54 experimentos de calibração automática utilizando três diferentes séries observadas, com 4, 12 e ~150 dados por ano. Entre parênteses estão os valores das métricas para as simulações de referência em que se utilizou os seguintes valores dos parâmetros calibráveis: $MUSLE\alpha=11,8$; $MUSLE\beta=0,56$ e $TKS=1$.

Exceto para o RMSE e a DCPerm, os melhores valores das métricas foram encontrados ao se utilizar ~150 dados/ano, indicando assim a importância do monitoramento de dados in situ para o processo de calibração dos modelos. Dentre todas as soluções encontradas, aquelas que

apresentaram os melhores valores das métricas usaram ~150 dados/ano no processo de calibração. Destaca-se aqui que ao usar ~150 dados/ano, tanto a combinação das métricas r , BIAS e DCPPerm, como das métricas NSE, RMSE e α foram capazes de encontrar o mesmo conjunto de parâmetros (MUSLE α = 11,689, MUSLE β =0,677 e TKS=0,959) que resultaram nas melhores performances das métricas.

Dentre os 18 grupos de experimentos, aquele em que mais métricas apresentaram um melhor desempenho foi o grupo das métricas r , BIAS e DCPPerm. A Figura 4 apresenta os resultados encontrados ao se utilizar um conjunto de dados obtido na calibração automática para realizar verificações usando as demais séries de dados observados para calcular as métricas. A Figura 4 mostra que, semelhantemente aos resultados da Figura 3, melhores performances são encontradas quando se utilizou 4 e ~150 dados/ano. Além disso, para algumas métricas, os valores encontrados na verificação foram semelhantes àqueles encontrados na calibração. Esse é o caso do NSE, que ao utilizar o conjunto de parâmetros obtidos com 12 dados/ano apresentou um valor de 0,41 na verificação com ~150 dados/ano, mesmo valor encontrado na calibração com ~150 dados/ano.

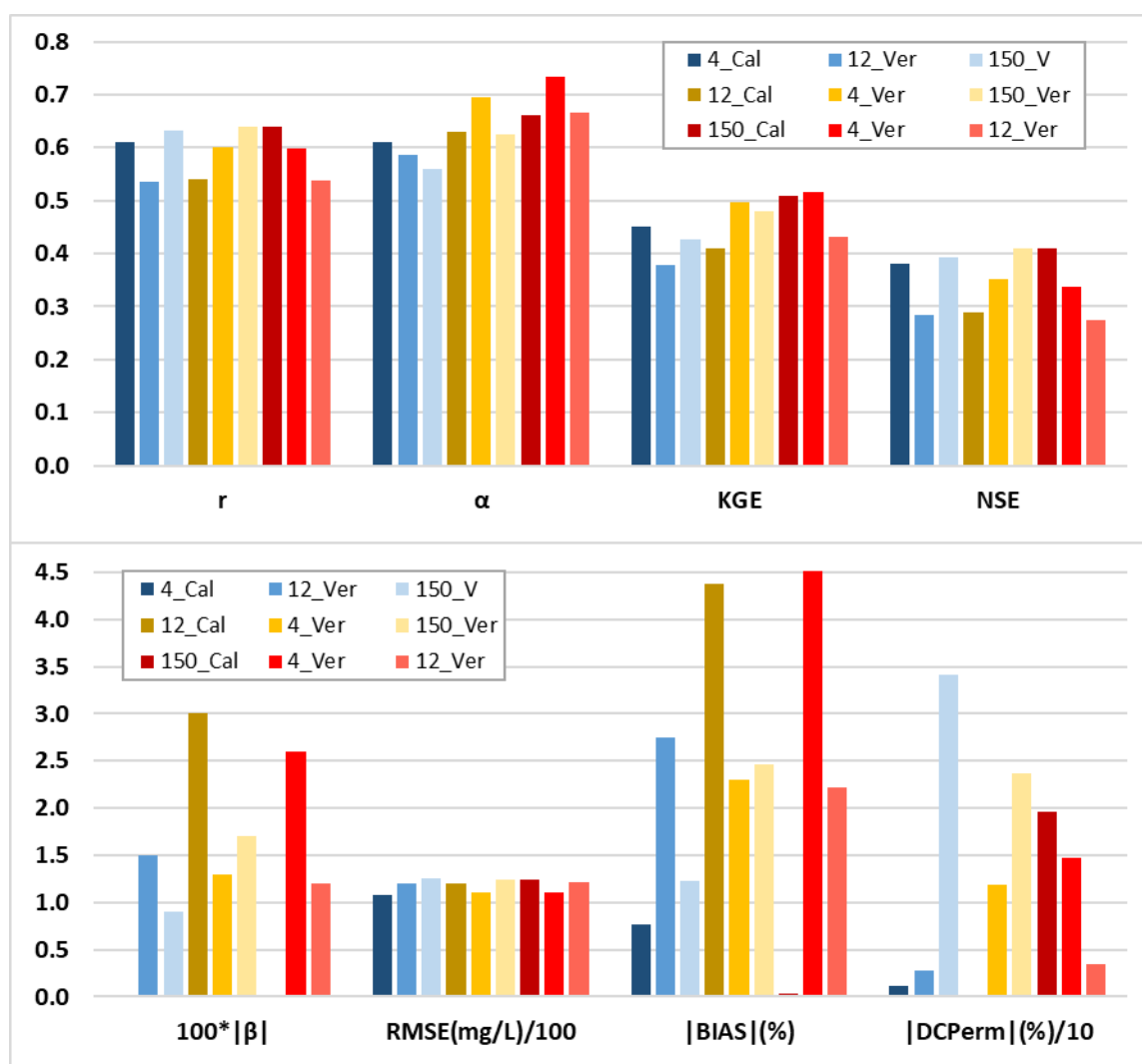


Figura 4 – Calibrações (Cal) e verificações (Ver) dos valores das métricas de performance utilizando os conjuntos de parâmetros obtidos a partir das calibrações automáticas com as métricas r , BIAS e DCPPerm. Os valores 4, 12 e 150 se referem ao número de dados/ano.

As soluções encontradas com o algoritmo MOCOM-UA, mesmo com poucos dados, foram capazes de representar a dinâmica dos sedimentos, verificada com muitos dados. Ao analisar os gráficos da Figura 5, nota-se pequenas subestimativas dos picos de CSS, o que faz com que as CSS na descida do gráfico sejam maiores, quando utilizados 4 dados/ano em comparação com 12 e ~150 dados/ano. Os valores sem calibração são consideravelmente maiores que aqueles após a calibração.

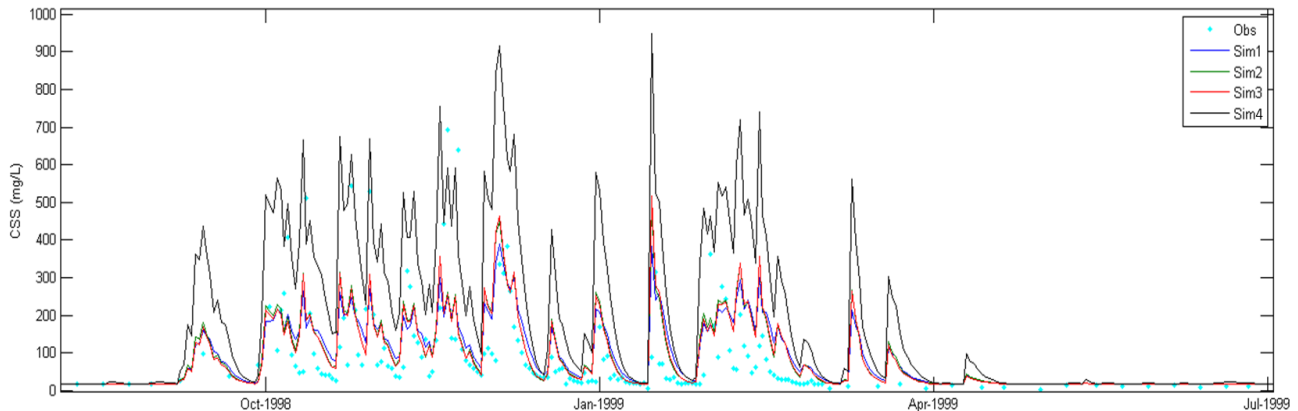


Figura 5 – Valores observados e simulados de CSS. As simulações de 1, 2 e 3 usaram os conjuntos de parâmetros obtidos das calibrações automáticas com as métricas r , BIAS e DCPerm para 4, 12 e ~150 dados/ano, respectivamente. A simulação 4 usou os valores de referência dos parâmetros calibráveis: $MUSLE\alpha=11,8$; $MUSLE\beta=0,56$ e $TKS=1$.

Na Figura 6 apresenta os resultados das CSS simuladas usando 5 conjuntos de parâmetros calibráveis, obtidos com calibrações usando 4 dados/ano e diferentes combinações de métricas. Nota-se que os resultados alcançados são muito semelhantes e que mesmo com métricas que apresentem alta correlação ou utilizando apenas duas funções-objetivo o algoritmo MOCOM-UA acoplado ao modelo MGB-SED apresentou resultados bem parecidos com aquele considerado como um dos melhores (usando as métricas r , BIAS e DCPerm).

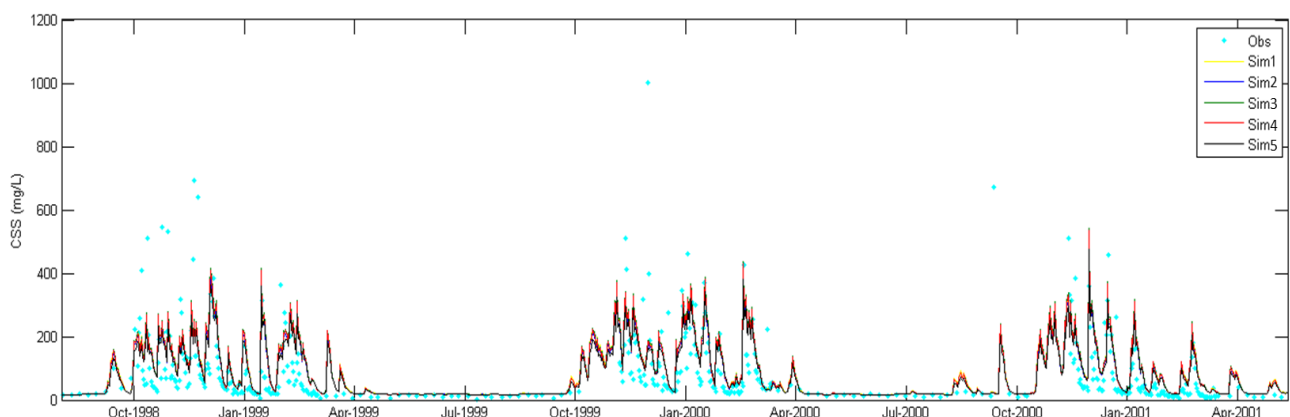


Figura 6 – Valores observados e simulados de CSS. Todas as simulações usaram conjuntos de parâmetros resultantes da calibração automática com 4 dados/ano. As métricas utilizadas para se obter cada conjunto foram: Sim1: r , BIAS e DCPerm; Sim2: r , NSE e KGE; Sim3: β , RMSE e BIAS; Sim4: KGE, α e DCPerm; e Sim5: RMSE e BIAS.

As Figuras 6 e 7 mostram que diferentes formas de calibrar e com diferentes métricas, resultados gráficos semelhantes puderam ser encontrados. O MGB-SED é um modelo de sedimentos que propaga as cargas geradas nas encostas e essas tendem a variar mais com a vazão do que com outros processos dinâmicos em curta escala temporal, como é o caso do carbono (Sorribas et al., 2012). Além disso, os parâmetros calibráveis, embora como demonstrado por Fagundes (2018) possam ter grandes variações e provocar aumento ou redução considerável na magnitude das CSS simuladas, tem menor capacidade de moldar a forma dos sedimentogramas do que a vazão.

CONCLUSÃO

Foi realizada nesse trabalho uma investigação sobre a melhor forma de realizar a calibração automática de modelos matemáticos. Para tal, utilizou-se o algoritmo de otimização multi-objetivo MOCOM-UA e o modelo hidrossedimentológico de grandes bacias MGB-SED. Foram realizados 58 experimentos de calibração automática, utilizando 8 métricas estatísticas e 3 séries de dados observados.

A partir dos experimentos, observou-se que o conjunto de métricas que resultou nas melhores performances para as 8 métricas avaliadas foi o r , BIAS e DCPerm. As estatísticas mostraram que os resultados foram melhores ao usar ~150 dados/ano, mas que resultados relativamente próximos poderiam ser encontrados usando 4 dados/ano. No geral, os resultados das métricas resultantes dos experimentos foram bem semelhantes, bem como os sedimentogramas, mesmo quando apenas duas métricas (RMSE e BIAS) foram usadas.

As soluções encontradas com o algoritmo MOCOM-UA, mesmo com poucos dados, foram capazes de representar a dinâmica dos sedimentos, verificada com muitos dados. Usar poucos dados, desde que esses representem de forma adequada a dinâmica dos sedimentos foi melhor do que usar muitos dados que representem uma tendência, por exemplo, com muitos valores no período de baixas concentrações de sedimentos em suspensão.

AGRADECIMENTOS

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pela bolsa concedida ao primeiro autor durante a pesquisa. À CEMIG, pelos dados disponibilizados.

REFERÊNCIAS

BRAVO, J. M.; COLLISCHONN, W.; TUCCI, C. E. M. (2009). Verificação da eficiência e eficácia de um algoritmo evolucionário multi-objetivo na calibração automática do modelo hidrológico IPH II. Revista Brasileira de Recursos Hídricos, v. 14, n. 3, p. 37-50.

BRESSIANI, D. DE A.; GASSMAN, P. W.; FERNANDES, J. G.; GARBOSSA, L. H. P.; SRINIVASAN, R.; BONUMÁ, N. B.; MENDIONDO, E. M. (2015). A review of soil and water assessment tool (SWAT) applications in Brazil: Challenges and prospects. *International Journal of Agricultural and Biological Engineering*, v. 8, n. 3, p. 1–27.

BUARQUE, D. C. (2015). Simulação da Geração e do Transporte de Sedimentos em Grandes Bacias : Estudo de caso do rio Madeira. *Tese* (Doutorado em Recursos Hídricos e Saneamento Ambiental): Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.

FAGUNDES, H. O. (2018). Modelagem hidrossedimentológica de grandes bacias com o apoio de dados in situ e sensoriamento remoto. *Dissertação* (Mestrado em Recursos Hídricos e Saneamento Ambiental): Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

GUPTA, H. V.; KLING, H.; YILMAZ, K. K.; MARTINEZ, G. F. (2009). Decomposition of the mean squared error and NSE performance criteria: Implications for improving hydrological modelling. *Journal of Hydrology*, v. 377, Issues 1-2, p. 80-91.

GUPTA, H.V.; SOROOSHIAN, S.; YAPO, P.O. (1998). Toward improved calibration of hydrologic models: Multiple and noncommensurable measures of information. *Water Resources Res.*, v 34, n 4 p. 751-763.

MORIASI, D. N.; ARNOLD, J. G.; VAN LIEW, M. W.; BINGNER, R. L.; HARMEL, R. D.; VEITH, T. L. (2007). Model evaluation guidelines for systematic quantification of accuracy in watershed simulations. *Trans. Asabe* 50 (3), pp. 885-900.

MULETA, M. K.; NICKLOW, J. W. (2005). Sensitivity and uncertainty analysis coupled with automatic calibration for a distributed watershed model. *Journal of hydrology*, v. 306, n. 1-4, p. 127-145.

PANDEY, A.; HIMANSHU, S. K.; MISHRA, S. K.; SINGH, V. P. (2016). Physically based soil erosion and sediment yield models revisited. *Catena* 147, pp. 595–620.

PARK, J. C.; UM, M. J.; SONG, Y. I.; HWANG, H. D.; KIM, M. M.; PARK, D. (2017). Modeling of Turbidity Variation in Two Reservoirs Connected by a Water Transfer Tunnel in South Korea. *Sustainability*, nº 9, v. 6, p. 993.

SIQUEIRA, V. A., PAIVA, R. C. D. D., FLEISCHMANN, A. S., FAN, F. M., RUHOFF, A. L., PONTES, P. R. M., PARIS, A.; STEPHANE, C.; COLLISCHONN, W. (2018). Toward continental hydrologic–hydrodynamic modeling in South America. *Hydrology and Earth System Sciences*. Göttingen: Copernicus. Vol. 22, n. 9 (set. 2018), p. 4815-4842.

SORRIBAS, M. V.; COLLISCHONN, W.; MARQUES, D.; FRAGOSO JÚNIOR, J. R.; CASTRO, N.; SOUZA, R. (2012). Modelagem distribuída do carbono em bacias hidrográficas. *Revista Brasileira de Recursos Hídricos*, nº17, v. 3, p. 225-240.

VRUGT, J.A.; GUPTA, H.V.; BOUTEN, W.; SOROOSHIAN, S. A. (2003). Shuffled Complex Evolution Metropolis algorithm for optimization and uncertainty assessment of Hydrologic model parameters. *Water Resour. Res.*, v 39, n 8.

YAPO, P. O.; GUPTA, H. V.; SOROOSHIAN, S. (1998). Multi-objective global optimization for hydrologic models. *Journal of hydrology*, v. 204, n. 1-4, p. 83-97.