

UNIDADE 3

CLASSIFICAÇÃO E APLICABILIDADE DE MODELOS MATEMÁTICOS NA SIMULAÇÃO DO TRANSPORTE DE POLUENTES E QUALIDADE DA ÁGUA EM RESERVATÓRIOS EXISTENTES E FUTUROS

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

CURRÍCULO RESUMIDO



Maria Fernanda Mendes Fiedler,

Oceanógrafa, trabalha desde 02/2010 na empresa Applied Science Associates - Latin America. Especialista em análise de dados ambientais, modelagem hidrodinâmica, modelagem de ondas, modelagem de transporte de sedimentos e modelagem de transporte de óleo.

REVISORES TÉCNICOS

Itaipu Binacional:

Caroline Henn

Anderson Braga Mendes

Agência Nacional de Águas – ANA:

Flávia Carneiro da Cunha Oliveira

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

Sumário

LISTA DE FIGURAS.....	04
LISTA DE TABELAS.....	04
1 EMPREGO DE MODELOS COMPUTACIONAIS: PRERROGATIVAS....	05
2 FUNDAMENTOS DO PROCESSO DE MODELAGEM.....	07
3 CLASSIFICAÇÃO E ESCOLHA DO MODELO.....	08
3.1 Classificação.....	10
3.2 Escalas de Interesse.....	14
3.3 Resolução Temporal do Modelo e Passo de Tempo.....	15
3.4 Definição de Contornos.....	16
3.5 Discretização do Domínio.....	18
3.6 Forçantes e Condições Iniciais.....	20
3.7 Calibração e Validação de Modelos.....	22
REFERÊNCIA.....	26

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Diagrama do processo de modelagem hidrodinâmica ambiental

Figura 2 - Área de estudo do Blackston River.

Figura 3 - Imagem de satélite na região de confluência do Rio Negro com o Rio Solimões.

Figura 4 - Carta náutica número 4106b, da Ilha da Grande Eva a Manaus, obtida junto à DHN.

Figura 5 - Exemplo de grade hidrodinâmica, que considera diferentes resoluções ao longo do domínio: elementos que variam de 20 m a 100 km.

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Classificação das diferentes escalas de interesse na modelagem. Adaptado de Shultz (1994).

1 EMPREGO DE MODELOS COMPUTACIONAIS: PRERROGATIVAS

Adaptado de Rosman (2012)

Devido à complexidade dos ambientes em corpos de água (lagos, reservatórios e zona costeira adjacente das bacias hidrográficas) torna-se necessária a aplicação de modelos para estudos. Os modelos são ferramentas integradoras, que permitem uma visão dinâmica de processos em sistemas ambientais complexos.

Os modelos, quando aferidos com dados de campo e analisados por especialistas, se tornam ferramentas indispensáveis à gestão e ao gerenciamento de sistemas ambientais, pois permitem:

Em análises de diagnóstico:

- Otimizar custos de monitoramento e medição, pois integram espacialmente as informações (que são geralmente obtidas pontualmente), auxiliando também a entender o comportamento do ambiente em regiões onde não há medições.
- Entender processos dinâmicos, ajudando na interpretação das medições.

Em análises de prognóstico:

- Prever situações (através da simulação de diferentes cenários).
- Determinar destinos prováveis de contaminantes, mapeando áreas de risco.
- Prever evolução de eventos em tempo real.

Os dados ambientais são em geral escassos, devido ao alto custo envolvido no levantamento destes dados. No entanto, são imprescindíveis para estudos, projetos, diagnósticos e gerenciamento de corpos de água naturais. Geralmente são obtidas séries temporais de valores medidos em poucos pontos da área de interesse, representando uma diminuta fração da área total. Assim, torna-se fundamental

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

utilizar ferramentas (confiáveis) que permitam que os dados sejam interpolados e extrapolados, no espaço e no tempo.

Os modelos permitem que as informações medidas em poucos pontos sejam interpoladas e extrapoladas, espacial e temporalmente.

Espacial - se os modelos calibrados¹ reproduzem os valores nos pontos onde se faz medições, pode-se admitir que nos outros locais (onde não há medições), os valores sejam coerentes.

Temporal - se os modelos representam fielmente as condições para um determinado período, podem ser realizadas simulações para outros períodos (novos cenários), como, por exemplo, prever situações, ou modificações a serem introduzidas no meio.

A dinâmica espacial da dispersão de um contaminante é difícil de obter através de medições pontuais, mas é facilmente obtida através de modelos. Assim, os modelos auxiliam, ainda, no melhor entendimento da dinâmica do sistema.

O uso de modelos como ferramentas de previsão pode ser feito praticamente em tempo real, para planejar operações de limpeza ambiental em decorrência de derrames acidentais de contaminantes tóxicos, por exemplo, ou ainda ser um instrumento eficaz para a elaboração de Planos de Contingência.

¹ O termo calibração será explicado mais adiante neste capítulo.

2 FUNDAMENTOS DO PROCESSO DE MODELAGEM

Adaptado de Rosman (2012)

A utilização de modelos é cada vez mais presente em aplicações visando à gestão e gerenciamento ambiental. No entanto, se estas ferramentas forem utilizadas de modo inadequado podem levar a resultados enganosos. Por isso, é essencial que os usuários tenham entendimento de como utilizar estas ferramentas. A figura 1 apresenta um diagrama que sintetiza o processo de modelagem.

Em primeiro lugar, é essencial que o modelador tenha conhecimento sobre o fenômeno de interesse e tenha capacidade de analisar os dados disponíveis, propiciando um entendimento das causas, efeitos e agentes intervenientes no fenômeno a ser estudado. É importante, ainda, avaliar a qualidade destes dados, para que possam ser utilizados (ou não) na modelagem. Através das medições desenvolvem-se modelos conceptuais (do fenômeno de interesse).

O modelo conceptual trata da compreensão profunda de um fenômeno. A tradução do modelo conceptual para a linguagem matemática origina um modelo matemático.

Os modelos matemáticos podem ser traduzidos em:

- Modelos analíticos: propiciam soluções gerais para situações bastante simplificadas, através de equações diferenciais.
- Modelos analógicos: usados em situações muito peculiares e de cunho mais acadêmico que prático.
- Modelos físicos: protótipos em escala reduzida da situação real. Eram muito utilizados antigamente e vem sendo substituídos, cada vez mais, por modelos numéricos (mais baratos e eficientes).
- Modelos numéricos: traduções dos modelos matemáticos para diferentes métodos de cálculo. Através de computadores, torna-se possível realizar um grande número de contas.

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

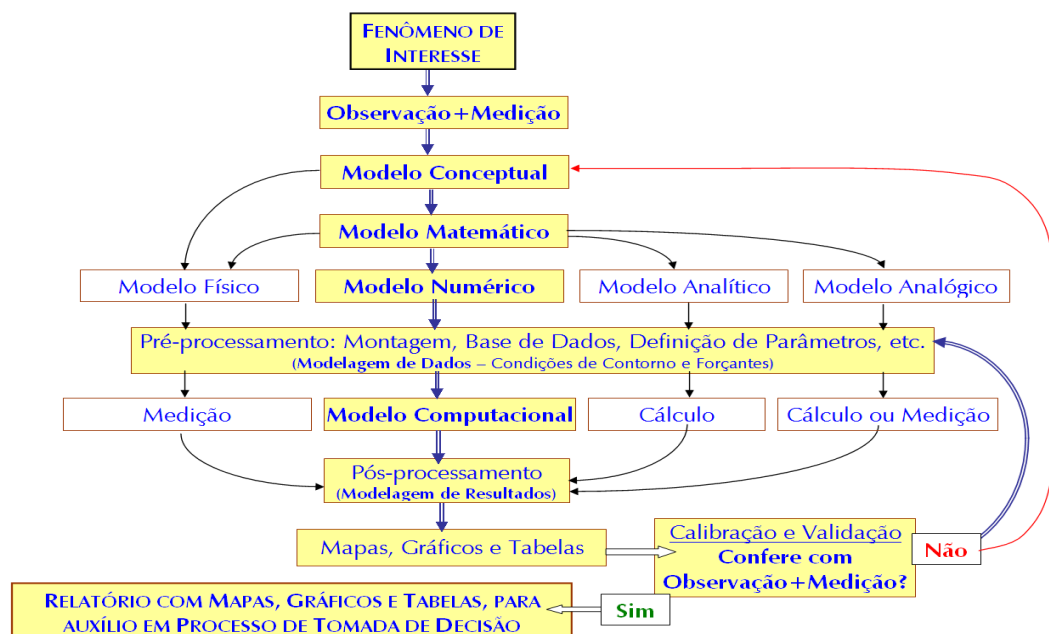
A próxima etapa seria o pré-processamento, onde são organizadas as informações que serão inseridas no modelo, como dados de entrada e forçantes.

Os resultados obtidos desejados serão obtidos via um modelo computacional: tradução de um modelo numérico para uma linguagem computacional, que possa ser compilada e executada por um operador (experiente) em um computador.

Gerados os resultados, o modelador deverá "traduzir" as informações geradas pelo modelo, de forma que possam ser mais facilmente assimiladas. Nesta etapa, a partir dos resultados são construídos mapas, gráficos, tabelas, que facilitam o entendimento da dinâmica do fenômeno.

A qualidade dos resultados deverá ser verificada, de forma a analisar se o modelo representa de forma coerente o que se conhece da região de interesse. Caso os resultados não apresentem o esperado para a região a ser estudada, o usuário deverá alterar os parâmetros e/ou as forçantes do modelo até que se obtenham resultados aceitáveis.

Figura 1 - Diagrama do processo de modelagem hidrodinâmica ambiental



Fonte: Rosman, 2012

O conteúdo deste material pode ser reproduzido desde que citada a fonte.

3 CLASSIFICAÇÃO E ESCOLHA DO MODELO

A escolha de um modelo para simular as condições de qualidade da água em rios e/ou reservatórios, depende:

- das características do sistema a ser simulado;
- do nível de precisão desejado (em função dos objetivos do projeto);
- dos dados disponíveis sobre o sistema;
- da disponibilidade de metodologia para representar os processos identificados;
- da complexidade dos poluentes de interesse.

A representação dos processos depende das condições hidráulicas e das condições químicas e biológicas do meio. O escoamento do sistema, em geral, determina o tipo de estrutura do modelo a ser utilizado. As condições químicas e biológicas das cargas poluentes determinam o tipo de constituinte que deve ser representado para melhor identificar o nível de qualidade da água do sistema.

Para análise preliminar do problema, podem ser utilizados modelos mais simplificados que identificam os locais mais problemáticos. Identificados os problemas, podem ser utilizados modelos mais complexos que detalham mais os aspectos importantes do processo.

Os tipos de modelos podem ser classificados segundo:

- suas condições de escoamento;
- características dos parâmetros de qualidade da água.

Em um reservatório, a velocidade do escoamento costuma ser pequena e a profundidade grande. Desta forma, os principais processos que se desenvolvem são no sentido vertical e o vento costuma produzir turbulência nas camadas superiores (devido à grande largura do lago).

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

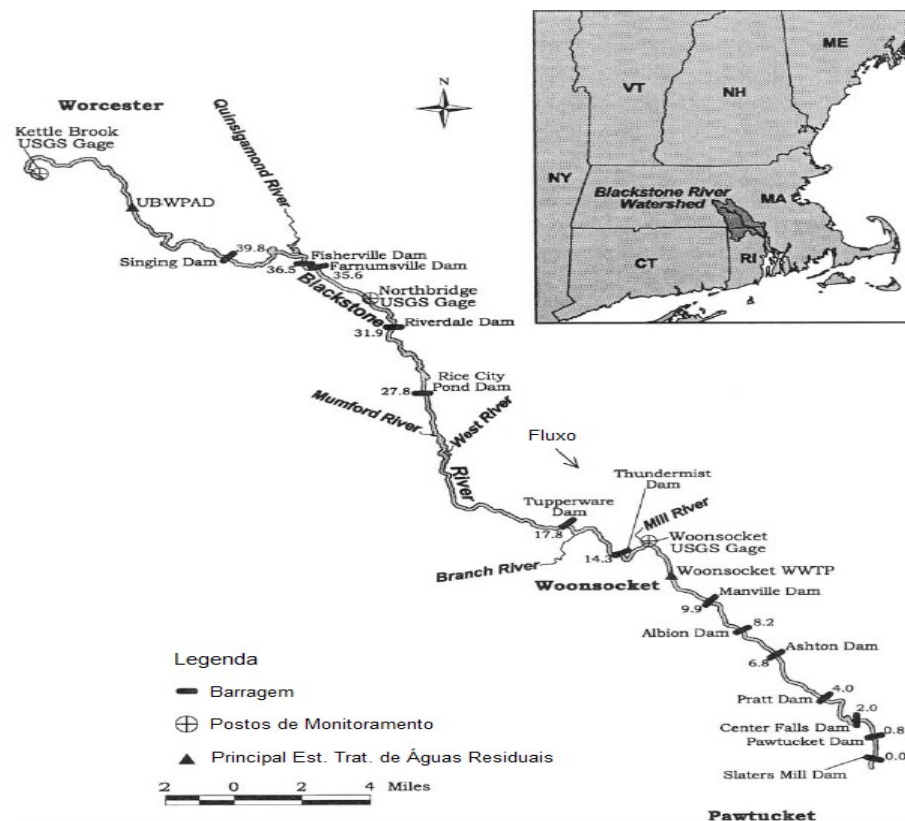
Em um rio a velocidade é maior, produzindo transporte de massa no sentido longitudinal (com menor influência das direções transversal e vertical).

3.1 Classificação

Mesmo que um corpo d'água seja sempre 3D, ele pode ser descrito por um modelo 1D, 2D ou 3D, dependendo das características do sistema. Se a variação em uma dimensão puder ser considerada insignificante o for representada por valores médios, essa dimensão espacial pode ser eliminada do estudo de modelagem.

Por exemplo, o modelo de um rio 1D pode descrever a variação espacial ao longo do rio, mas não irá calcular as variações ao longo de uma seção cruzada e as variações verticais. Um modelo 1D será capaz de representar rios longos e estreitos, como na figura 2, que ilustra a área de estudo de transporte de sedimentos do rio Blackstone, (Ji, 2008).

Figura 2 - Área de estudo do Blackston River.



Fonte: (Ji, 2008).

O conteúdo deste material pode ser reproduzido desde que citada a fonte.

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

Nos estuários, além das variações na dimensão longitudinal, as variações na vertical também são significativas, pois a salinidade e temperatura costumam acarretar estratificações, devido ao aporte de água doce. Para estuários extensos, com variações significativas ao longo da seção, são necessários modelos 3D (Ji, 2008).

Os modelos podem ser classificados segundo diferentes critérios. Uma das classificações se baseia na (1) **discretização espacial**.

No reservatório (*Wrobel et al*, 1989):

- **Modelo concentrado** (zero dimensão): considera o reservatório totalmente misturado, sem analisar a variabilidade espacial da contração no reservatório; consideram a variação da concentração média no tempo.

Modelos deste tipo permitem uma visão geral do problema.

- **Modelos unidimensionais**: simulam os processos considerando uma dimensão no espaço. Para estudar o fluxo em reservatórios, são utilizados modelos unidimensionais longitudinal ou vertical.

O primeiro considera a variação de velocidade e concentração na direção longitudinal (desprezando as variações transversal e vertical).

O segundo considera a direção vertical e despreza as outras duas.

O modelo unidimensional longitudinal é aplicável para estudar variações ao longo do eixo do reservatório (como desmatamento seletivo). Despreza-se a estratificação vertical, que é marcante em reservatórios com grandes profundidades.

O modelo unidimensional vertical é aplicado quando se quer analisar estratificação vertical de temperatura e concentração.

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

- **Modelos bidimensionais:** simulam os fenômenos, desprezando uma das direções.

Os modelos podem ser bidimensionais no plano e no perfil. O primeiro considera as direções longitudinal e transversal e despreza as variações na vertical. O segundo considera as direções longitudinal e vertical e despreza as variações na transversal.

Modelos bidimensionais permitem uma visualização das velocidades e concentrações no plano formado pelo reservatório, onde pode-se visualizar o campo de velocidades médias verticais.

O modelo bidimensional pode ser útil quando, além da estratificação vertical, existe variação longitudinal devido ao comprimento do reservatório, e necessite a análise setorizada da concentração das substâncias de qualidade de água. No entanto, este tipo de modelo apresenta um grande número de parâmetros a serem estimados, instabilidades numéricas, dados a serem fornecidos, além de considerável volume de cálculo. Estes modelos são utilizados em reservatórios com sérios problemas de qualidade de água (que justifique o investimento).

- **Modelos tridimensionais:** representam todas as direções. Apresentam um grande número de fatores que necessitam ser estimados para que o modelo possa ser utilizado.

Na Unidade 1 foi apresentado o conceito e o cálculo do Número de Froude Densimétrico (N_F). Este parâmetro pode ser utilizado como ferramenta de apoio à decisão na escolha do tipo de modelo a ser implementado:

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

Se $N_F \ll 1/\pi$, o reservatório é fortemente estratificado (permitindo a sua descrição matemática por modelos unidimensionais). Reservatórios com fraca estratificação (para os quais uma representação bidimensional é necessária para descrever as relações entre densidades e velocidades) têm $0,1 < N_F < 1,0$. Sistemas completamente misturados, que não apresentam estratificação, têm como característica $N_F > 1,0$.

A maior utilidade de se conhecer o N_F é antes da existência do próprio lago. O conhecimento sobre o N_F ajuda na escolha adequada do modelo matemático mais compatível com a realidade física futura e que se possam fazer previsões acerca do comportamento do reservatório planejado (Porto et al, 1991).

No rio (Wrobel et al, 1989):

Os modelos de qualidade da água utilizados em rios costumam ser unidimensionais e representam a velocidade e o nível d'água constantes em uma seção transversal. A concentração de uma substância é também admitida média na seção, ou seja, considera-se que na seção ocorra uma mistura completa.

Nos trechos em que ocorre variação de densidade e temperatura marcantes, pode-se utilizar de modelos do tipo bidimensional no perfil.

$$N_F N_F 1/\pi N_F N_F N_F N_F$$

De acordo com Wrobel et al (1989), os modelos também podem ser classificados quanto à (2) **variação no tempo**, em permanente ou não permanente.

Quando são utilizados modelos em regime permanente, desconsidera-se a variação no tempo das variáveis envolvidas; quando se utilizam modelos em regime não permanente, estas variações são levadas em conta.

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

Os modelos em regime permanente podem ser uniformes e não uniformes. Os uniformes consideram a velocidade constante no rio. Quando são não uniformes a velocidade pode variar ao longo do rio.

Os modelos não permanentes são utilizados quando há regime variado de fluxo em estiagens e efeito de maré, cheias urbanas ou enchentes que revolvem o fundo do rio ou reservatório, por exemplo.

Os modelos podem ainda ser classificados de acordo com o (3) **tipo de parâmetro a ser analisado**, podendo ser conservativos ou não conservativos.

Caso o modelo seja conservativo, não irá tratar de reações químicas e biológicas no sistema aquático. Se o modelo for não conservativo, essas reações serão representadas matematicamente.

Os primeiros modelos simulavam somente OD e DBO. Depois, foram sendo inseridos processos como nitrificação e dinâmica de fitoplâncton.

3.2 Escalas de Interesse

Na modelagem existem, basicamente, três escalas de interesse estudadas: macro, meso e micro escala. Estas três classes são atribuídas conforme sua habilidade em representar uma área geográfica e seu nível de detalhe (precisão).

Os modelos de macro escala são utilizados para representar uma grande área geográfica, porém, sem um grande nível de detalhamento. Já os modelos de micro escala representam áreas muito localizadas e com um grande nível de detalhe. Os modelos de meso escala representam um meio termo entre as duas aproximações (macro e micro).

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

Utilizam-se resultados de modelos de maior escala, por exemplo, para forçar modelos de menor escala. Sabe-se que não se pode transferir resultados de modelos de menor escala para modelos de maior escala, visto que os processos hidrológicos em grandes escalas consideram aspectos totalmente diferentes.

De acordo com Shultz (1994), a divisão das diferentes escalas na hidrologia já foi bastante discutida. Para estudo em micro e meso escala, há um número vasto de modelos. Já para estudos em macro escala, não há muitas opções de modelos a ser utilizados. A tabela 1 ilustra a classificação dos modelos quanto sua escala, de acordo com Shultz (1994).

Tabela 1 - Classificação das diferentes escalas de interesse na modelagem.

Classificação	Escala mínima	Escala máxima
Micro	1 cm ²	1 km ²
Meso inferior	1 km ²	100 km ²
Meso superior	100 km ²	100000 km ²
Macro	100000 km ²	Escala global

Fonte: Adaptado de Shultz (1994).

3.3 Resolução Temporal do Modelo e Passo de Tempo

A resolução temporal do modelo dependerá de uma série de fatores:

- tamanho da área de estudo;
- características do fluxo e transporte;
- quais processos de qualidade de água se quer estudar;
- disponibilidade de dados medidos;
- necessidade de suporte para tomada de decisão.

Um requerimento básico é que a simulação seja longa o suficiente para eliminar os efeitos de condição inicial do modelo. Modelos de qualidade de água podem ser

O conteúdo deste material pode ser reproduzido desde que citada a fonte.

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

simulados por algumas estações ou alguns anos, dependendo do que se quer analisar.

Para executar um modelo, é necessário determinar o **passo de tempo**, o intervalo de tempo no qual o modelo realizará seus cálculos. O passo de tempo (Δt) pode ser determinado através do cálculo do número de Courant. O número de Courant (C_r) é influenciado pelo espaçamento entre nós da grade (Δx e Δy), a velocidade da corrente ($|\vec{V}|$), a aceleração da gravidade (g) e a profundidade local (H):

$$C_r = \Delta t \cdot \sqrt{\left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2}\right)} \cdot (|\vec{V}| + \sqrt{gH})$$

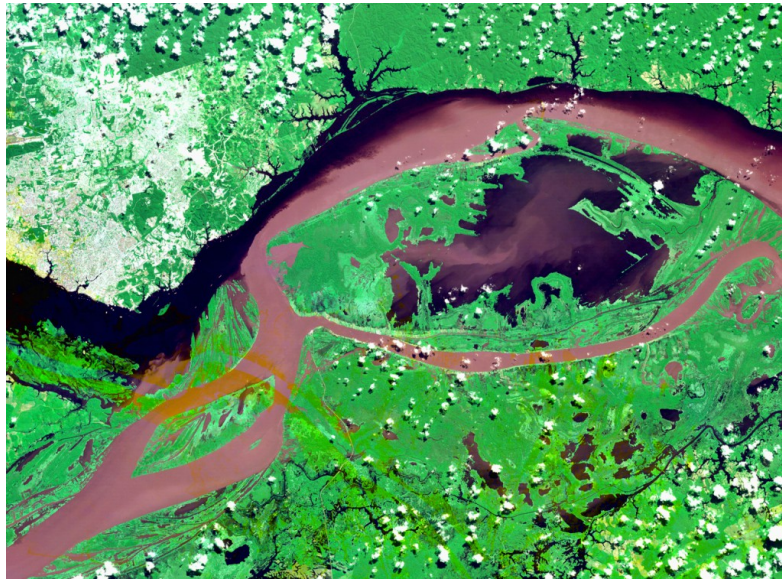
No sistema de modelos SisBAHIA, por exemplo, sugere-se que os valores de Courant fiquem entre 3 e 8 (SisBAHIA).

3.4 Definição de Contornos

A definição dos contornos do corpo d'água a ser modelado deverá estar de acordo com os objetivos do projeto e com a precisão desejada nos resultados. Poderá ser obtida através de diversas bases: imagens de satélite, cartas náuticas, fotos aéreas, etc. Exemplos de imagem de satélite e carta náutica podem ser observados na figura 3 e na figura 4, respectivamente.

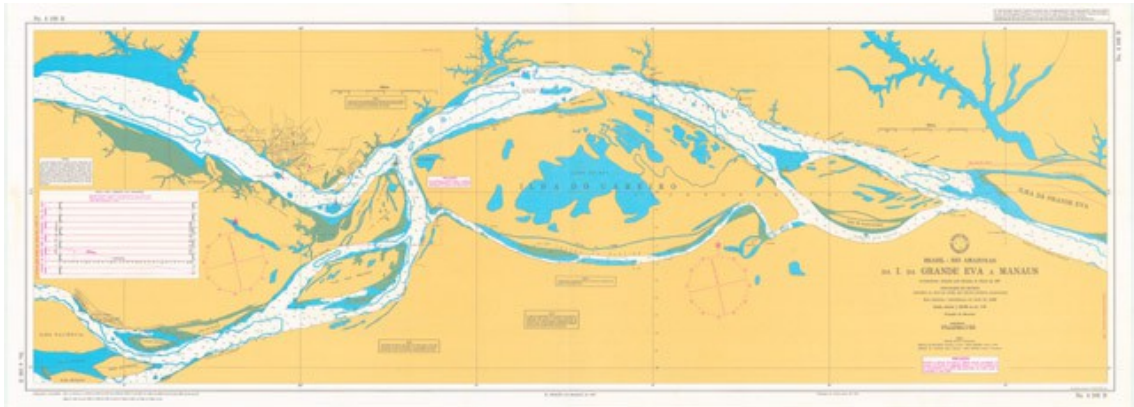
Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

Figura 3 - Imagem de satélite na região de confluência do Rio Negro com o Rio Solimões.



Fonte: Nota do Autor

Figura 4 - Carta náutica número 4106b, da Ilha da Grande Eva a Manaus, obtida junto à DHN².



Fonte: Nota do Autor

Dependendo da área a ser estudada e dos objetivos do estudo, torna-se importante observar a data em que a base foi gerada, a fim de analisar se a situação continua a mesma (no caso de ser uma base antiga). Em algumas regiões costeiras, por

² <https://www.mar.mil.br/dhn/chm/cartas/cartas.html>

O conteúdo deste material pode ser reproduzido desde que citada a fonte.

exemplo, pode ter ocorrido uma retrogradação ou engordamento da praia, ou o acúmulo de sedimentos em certas regiões, causando variação da linha da costa. Podem ter sido instaladas estruturas que podem alterar o fluxo, como pontes ou regiões aterradas (SisBAHIA). Ainda, em regiões onde há grande variação do nível d'água entre períodos de seca e cheia, por exemplo, deverá se ter conhecimento de em qual situação a imagem foi obtida e se esta é a situação que se quer simular.

3.5 Discretização do Domínio

Para que o modelo possa resolver o problema a ser estudado, é necessário discretizar um domínio, reduzindo o problema físico a um problema discreto (com um número finito de incógnitas, que possam ser resolvidas em um computador). Existem vários métodos para resolver estas incógnitas, sendo que os mais conhecidos são (Wrobel, 1989):

- Método das Diferenças Finitas: a região de interesse é representada por uma série de pontos, ou nós, e a relação entre os valores nestes pontos é geralmente obtida através de expansão truncada em série de Taylor;
- Método dos Elementos Finitos: a relação entre os valores nodais é obtida por meio de polinômios de interpolação, válidos para cada sub-região ou elemento.

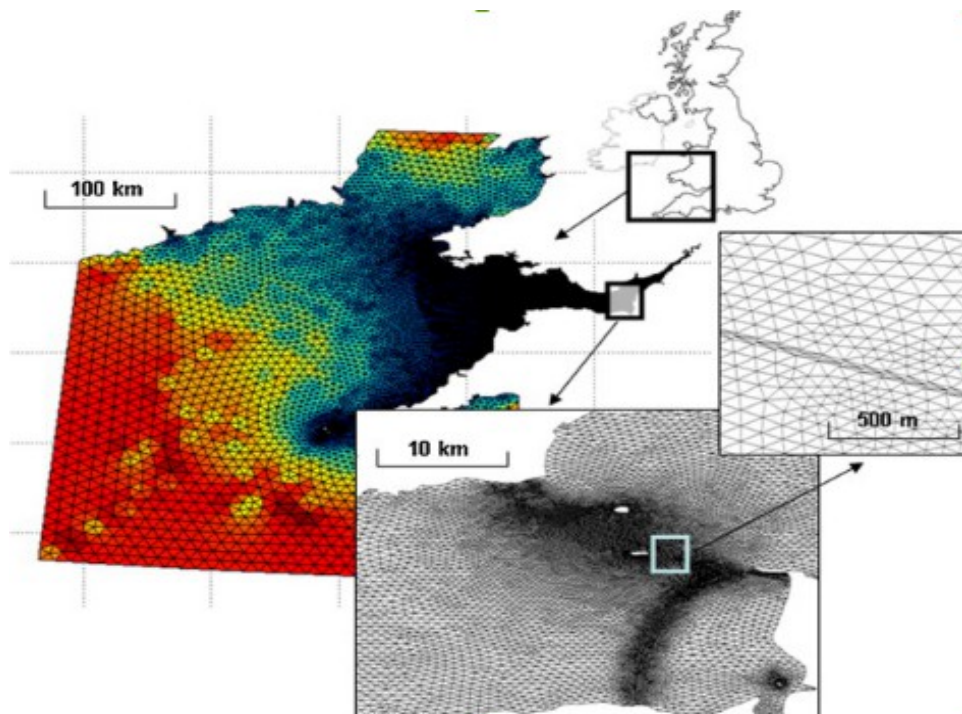
A discretização do domínio é geralmente feita com auxílio de uma malha (ou grade) numérica.

A resolução espacial da grade irá variar conforme o fenômeno de interesse, lembrando que quanto maior o refinamento da grade (quanto mais resolvida, com mais elementos), maiores serão os custos computacionais, ou seja, mais o modelo vai demorar para rodar. No entanto, quanto mais resolvido um modelo, menores os erros numéricos envolvidos.

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

Quando não se utiliza um espaçamento regular, é comum observarmos uma maior resolução na região de interesse, porém uma mais baixa resolução nas partes mais afastadas dessa região, a fim de minimizar custos computacionais. A figura 5 apresenta uma grade hidrodinâmica onde há variação da resolução espacial ao longo do domínio, onde os elementos apresentam de 20 m a 100 km de extensão.

Figura 5 - Exemplo de grade hidrodinâmica, que considera diferentes resoluções ao longo do domínio: elementos que variam de 20 m a 100 km.



Fonte: Disponível em <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304380011004893>

Quando o domínio for discretizado, devem-se aferir valores de profundidade (ou cota) para cada nó do domínio. Os modelos hidrodinâmicos costumam permitir que se importe um arquivo de batimetria, cujas medições ou registros não precisam apresentar o espaçamento da grade em questão e, assim, o próprio modelo interpola os valores nos seus pontos de cálculo. No entanto, o ideal é que se tenha

O conteúdo deste material pode ser reproduzido desde que citada a fonte.

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

registros com uma resolução suficientemente grande para representar a região a ser estudada, principalmente nas regiões onde há maior interesse.

Os arquivos de batimetria lidos pelo modelo costumam ser no formato XYZ, o que significa que se importam as coordenadas X e Y do ponto e o valor Z (profundidade) medido.

Além dos arquivos de batimetria é necessário fornecer ao modelo as informações de rugosidade do fundo. Cada modelo pode utilizar uma formulação diferente. No entanto, os coeficientes de rugosidade de Manning e Chezy são bastante utilizados.

3.6 Forçantes e Condições Iniciais

As condições iniciais e as condições de contorno são necessárias para resolver as equações hidrodinâmicas e de qualidade de água.

Em um estudo de modelagem seleciona-se uma área de interesse e realiza-se a definição dos contornos do corpo d'água, como já visto anteriormente. São, então, inseridas condições nas bordas, ou contornos, e estas condições devem ser propagadas para dentro do domínio pelo modelo.

As condições podem ser: vazão, elevação do nível d'água, fluxos, entre outros. Em uma modelagem de rio, por exemplo, pode-se inserir um dado de vazão na borda localizada mais à montante e, ainda, dados de vazão ao longo do rio, representando os afluentes. Na borda localizada a jusante, poderia ser inserida uma curva Q_h (vazão x elevação do nível d'água), por exemplo, e desta forma, a elevação dentro do domínio seria controlada pela curva Q_h e dados de vazão.

O modelo pode ainda ser forçado com constituintes, como a temperatura e a salinidade, que podem alterar o fluxo. Podem ainda ser inseridas no modelo descargas de efluentes, que contêm cargas de nutrientes que interferem na qualidade da água, pois sofrem reações ao longo do domínio.

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

Dados atmosféricos também podem forçar os modelos. O vento, por exemplo, pode ter grande influência na dinâmica de alguns sistemas. Ainda, pode-se considerar a temperatura do ar, a radiação solar, precipitação. Neste caso, a diferença é que este tipo de forçante não é implementado em uma borda, mas sim no domínio como um todo.

As forçantes utilizadas irão depender da disponibilidade de dados existentes. Quando não são realizadas medições em campo, pode-se buscar informações na literatura ou em órgãos especializados.

A nível nacional, a Hidroweb³, da Agência Nacional de Águas (ANA), disponibiliza dados hidrológicos para inúmeras estações, no formato de séries temporais históricas.



A forçantes, de maneira geral, devem ser inseridas longe da região de interesse. Assim, haverá certa distância para que possíveis instabilidades, geradas por conta das forçantes utilizadas, sejam dispersas ao longo do domínio e não se propaguem até as regiões de interesse.

³ <http://hidroweb.ana.gov.br/>

As condições iniciais devem ser fornecidas ao modelo para todo o domínio. Este pode ser um valor constante ou pode variar no espaço. Em um modelo onde se deseja simular a temperatura do ambiente, deve-se aferir um valor inicial de temperatura para todo o domínio.

Alguns exemplos de estudos envolvendo modelagem serão abordados no próximo capítulo, onde serão abordadas condições de contorno e condições iniciais.

3.7 Calibração e Validação de Modelos

A calibração consiste em variar os parâmetros do modelo a fim de obter a melhor concordância possível entre os resultados gerados pelo modelo e os dados coletados em campo (Chapra, 1997).

São necessários levantamentos de campo para calibrar os parâmetros hidrodinâmicos.

Os dados devem ser coletados com uma boa resolução espacial e de acordo com a sazonalidade, para que as características dos modelos possam ser testadas (Fragoso et al, 2009).

No processo de calibração, os parâmetros do modelo são ajustados para que a saída do modelo, ou seja os resultados gerados por ele, sejam próximos dos dados observados. A calibração do modelo poderá ser realizada por tentativa ou erro ou, ainda, existem alguns algoritmos que calibram automaticamente os parâmetros (Fragoso et al, 2009).

Alguns parâmetros são utilizados para comparar os resultados gerados pelo modelo com os dados coletados em campo, a fim de mensurar qual o erro do modelo.

De acordo com Ji (2008), embora existam diversos métodos de se analisar a performance do modelo, não há um consenso na comunidade de modelagem sobre

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

uma medida padrão da avaliação do modelo. Alguns dos parâmetros mais utilizados são:

- **Erro médio:** diferença média entre os valores observados e previstos:

$$ME = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (O^n - P^n)$$

onde:

N = número de observações;

O^n = o valor do dado observado n ;

P^n = o valor previsto n .

O ideal é que se obtenha o valor zero.

- **Erro médio absoluto:** diferença média absoluta entre os valores observados e previstos:

$$MAE = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N |O^n - P^n|$$

Elimina os efeitos de erros considerando valores negativos e positivos que podem gerar um falso zero.

- **Erro quadrático médio:** média do quadrado das diferenças entre os valores previstos e observados:

$$RMS = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (O^n - P^n)^2}$$

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

O ideal é que se obtenha o valor zero.

- **Erro relativo:** fornece uma medida de quão bem as previsões se assemelham aos valores médios das observações:

$$RE = \frac{MAE}{\text{média}_{\text{observada}}} \times 100$$

Fornece, em porcentagem, qual o erro obtido na comparação.

Se os resultados indicarem valores baixos de erro, pode-se dizer que o modelo está validado, ou seja, ao avaliarmos a qualidade do modelo (comparando-o com dados medidos em campo), verificou-se que este modelo consegue representar de forma coerente o padrão observado nos dados medidos em campo.

Em geral, quanto maior a disponibilidade de dados coletados em campo, que possam ser comparados com os resultados do modelo, melhor será a validação deste modelo. Por exemplo, se sabemos que a região a ser estudada apresenta comportamento bastante diferente entre as épocas de cheia e seca, o ideal é que se tenha dados coletados para estes dois períodos, a fim de verificar se o modelo consegue reproduzir esta variabilidade sazonal. Ainda, se temos uma região muito grande a ser modelada, onde se sabe que há uma variabilidade espacial dos parâmetros de interesse, o ideal é que tenhamos dados disponíveis para diversos pontos dentro da área de estudo.

Bons resultados do modelo durante o processo de calibração não asseguram automaticamente que o modelo tenha um desempenho igualmente bom para outros períodos de tempo, porque o processo de calibração envolve a manipulação de alguns valores de parâmetro. Portanto, as validações do modelo baseado em conjuntos de dados independentes são necessárias. Na medida do possível, limitada pela disponibilidade de dados, os modelos validados demonstram a capacidade de

O conteúdo deste material pode ser reproduzido desde que citada a fonte.

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

reproduzir os dados medidos para um período fora do período de calibração (Lucas et al, 2010).

REFERÊNCIA

ALMEIDA, A. B.; Eiger, S.; Rosman, P. C. C. **Métodos Numéricos em Recursos Hídricos 3**. 1997.

ROSMAN, P. C. C. 2012. **Referência Técnica do SisBAHIA**. Disponível em: http://www.sisbahia.coppe.ufrj.br/SisBAHIA_RefTec_V85.pdf. Acesso em: 20/jul/2012.

WROBEL, L. C. et al. 1989. **Métodos Numéricos em Recursos Hídricos**. Associação Brasileira de Recursos Hídricos. 380 p.

XAVIER, C. M. 2008. **Análise de Modelos Submalha em Elementos Finitos**. Dissertação para obtenção do grau de mestre em Engenharia. Universidade Federal do Rio Grande do Sul. 92 p.