

Aula 1

1. Definições iniciais

1.1. Modelos e modelagem

Na ciência, um *modelo* é uma representação simples de um processo ou fenômeno mais complexo. Assim existem, por exemplo, modelos ecológicos, modelos meteorológicos, modelos hidrológicos, modelos agronômicos, modelos econômicos, modelos fisiológicos, e muitos outros. Todos esses modelos têm em comum que permitem simular uma parte da natureza (um *sistema*) e sua interação com o *meio*. O objetivo de qualquer simulação é a previsão de uma situação (um *cenário*) ainda não experimentada. Assim, pode-se dizer que um modelo permite prever o futuro com base em experiências (dados e observações) do passado. Assim, ele permite analisar sensibilidades e indicar necessidades de pesquisa e experimentação.

Modelos podem ser classificados de várias formas, e variam quanto à escala que abordam, quanto à complexidade utilizada para a descrição do sistema, e quanto ao tipo de abordagem: empírico ou físico-mecânico.

A construção de um modelo é chamada de *modelagem*. A modelagem consiste de cinco etapas principais que serão discutidas mais adiante: (1) Conceituação; (2) Formalização; (3) Calibração; (4) Validação ou teste e (5) Teste de sensibilidade e utilização.

1.2. Dimensões do modelo

Modelos simulam dentro de determinadas dimensões. A dimensão mais comum é a temporal. Modelos temporais simulam algum processo ao longo do tempo para um determinado local (ou ponto).

Modelos temporais-espaciais, além de simular no tempo, simulam também no espaço. A dimensão espacial pode ser 1-D (por exemplo, uma simulação para um local, variando a altura ou a profundidade; ou a simulação de um transecto horizontal sem considerar diferenças de altura), 2-D (simulando uma área) ou 3-D (por exemplo, modelos meteorológicos ou hidrológicos que simulam os respectivos processos ao longo do tempo e em função da altura ou profundidade e, ainda, numa extensão de área superficial). Veja um exemplo das dimensões espaciais na Figura 1.

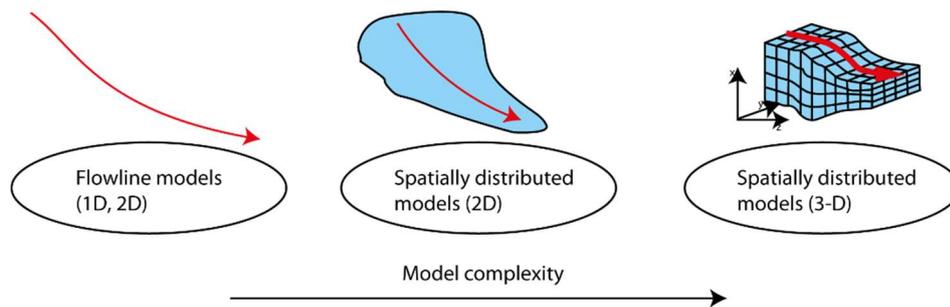


Figura 1 - Exemplo esquemático de dimensões espaciais na modelagem de um processo (fonte: www.AntarcticGlaciers.org)

1.3. Conceitos e Definições importantes

Um modelo formalizado inclui, na sua estrutura, constantes, parâmetros e variáveis. Em modelagem de sistemas agrícolas e biológicos, há uma terminologia convencionada pela comunidade científica que contribui para a comunicação. Os principais termos utilizados são os seguintes:

- **Sistema:** coleção de componentes e suas inter-relações, agrupadas com o propósito de estudar alguma parte do mundo real. A delimitação depende da visão do modelador sobre a realidade e do propósito da modelagem.
- **Meio (“ambiente”) e condições de contorno:** na definição do escopo de um sistema, é necessário definir seus limites e seu conteúdo. O meio representa o universo todo, exceto os componentes do sistema. O meio afeta o sistema, mas o sistema não afeta o meio.
- **Modelo:** Representação algorítmico de um sistema. Conjunto de equações e decisões na forma de códigos de programação que quantifica o conhecimento sobre o sistema. Em agricultura, por exemplo, **sistema** pode ser uma cultura; seus **elementos** podem ser as folhas, raízes, colmos, flores e frutos, e seus **processos**, a transpiração, fotossíntese, respiração, crescimento radicular, partição de carboidratos.
- **Entradas e saídas:** variáveis de entrada (variáveis exógenas) são grandezas do meio que afetam o sistema, mas que não são influenciados por ele. Variáveis de saída representam numericamente a parte do sistema que é de interesse para o modelador.
- **Constantes:** são características dos componentes do sistema que permanecem inalteradas ao longo de uma simulação. Constantes são grandezas com valores suficientemente confiáveis que permanecem fixos ainda que as condições experimentais sejam modificadas.

- **Parâmetros** são grandezas com maior incerteza e que podem ser alterados para configurar o modelo a uma situação específica de simulação. Parâmetros são valores que variam, na natureza, mas que, para o fim do modelo em questão, são considerados constantes. Em outras palavras, não variam ao longo de uma simulação ou um grupo de simulações. Segue um exemplo de um parâmetro: Alguns modelos de crescimento vegetal contêm um parâmetro chamado *Specific Leaf Area* (Área Foliar Específica) que descreve quantos metros quadrados de folha existem por kg de folha. Dentro do modelo o valor é tratado como constante, isto é, ele não varia no tempo, porém, entre simulações com diferentes espécies vegetais ou em diferentes condições seu valor pode mudar. Assim, a Área Foliar Específica é, no contexto desse exemplo, um parâmetro do modelo.
- **Variáveis de Estado:** são grandezas que descrevem os componentes do sistema, mudando com o tempo conforme os componentes interagem entre si e com o ambiente. Variáveis são aqueles valores que variam dentro de uma simulação, ao longo do tempo e/ou do espaço. Como exemplos citam-se a massa vegetal num modelo para crescimento de plantas, o teor de água do solo num modelo hidrológico, a umidade do ar num modelo meteorológico. Variáveis são frequentemente os valores de saída do modelo, ou seja, são os valores de interesse do modelador.

Esses termos normalmente precisam ser representados esquematicamente para esclarecer sobre o sistema a ser tratado, mantendo igualmente um padrão de comunicação visual entre os interessados no modelo. Uma das opções neste sentido é o diagrama de Forrester (Figura 2), desenvolvido para aplicações industriais e que foi adotado por modelagem de sistemas biológicos.

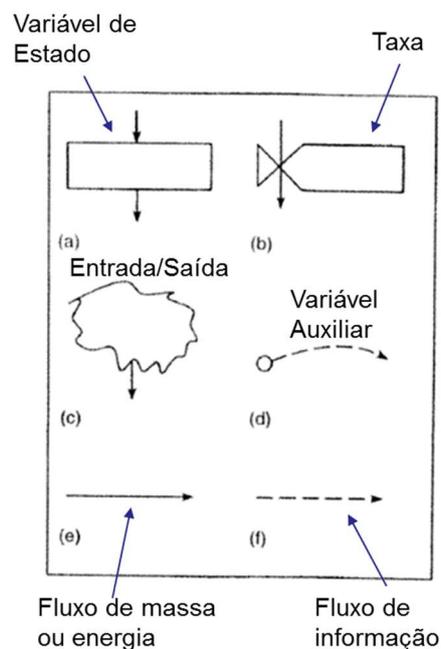


Figura 2 - Representação esquemática da simbologia utilizada nos diagramas de Forrester.

2. Etapas da modelagem

2.1. Conceituação

A etapa da conceituação é descritiva e consiste da definição das finalidades do modelo a ser construído: o que queremos que ele faça, qual será sua resolução temporal e espacial, qual o tipo de dado de entrada e de saída, e eventuais outros detalhes julgados importantes. A etapa da conceituação resulta frequentemente num diagrama conceitual ou *fluxograma* compostos por símbolos convencionados (Figura 3). Um exemplo de um fluxograma simples encontra-se na Figura 4.

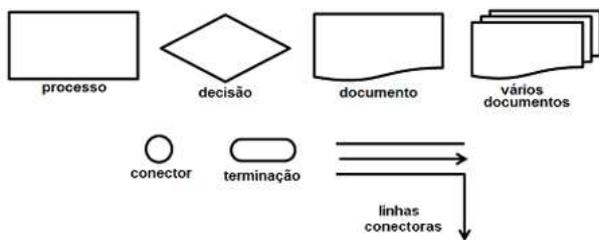


Figura 3 - Símbolos utilizados num fluxograma

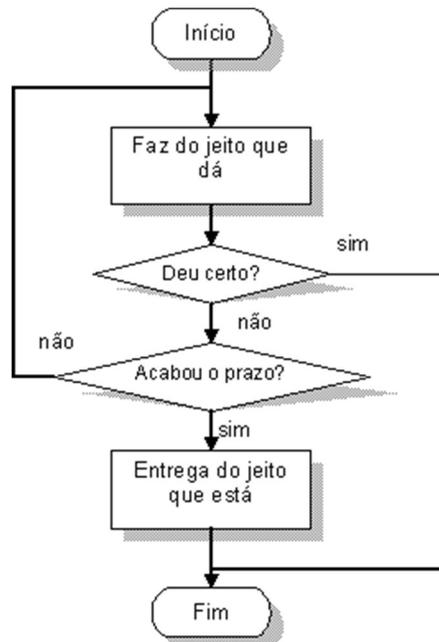


Figura 4 - Exemplo de um fluxograma simples

2.2. Formalização

A formalização do modelo compreende a definição das variáveis de entrada, o algoritmo (a estrutura de cálculo e decisões), e as variáveis de saída. A formalização é normalmente feita

numa linguagem computacional ou na forma de planilha eletrônica. Em ambos os casos se cria um ambiente (“software”) que permite realizar *simulações* com o modelo.

2.3. Calibração

Ao calibrar um modelo, o modelador utiliza dados experimentais para realizar ajustes nos parâmetros do modelo. Os dados experimentais (as medições) devem conter as variáveis de entrada e algumas ou todas as variáveis de saída do modelo. O ajuste é feito objetivando a minimização do erro de predição do modelo, observando as variáveis de saída. Enfim, pode-se estabelecer que a calibração: consiste em ajustar parâmetros para aproximar resultados das simulações a dados observados experimentalmente. A estrutura do modelo, portanto, não é alterada pela calibração. Em alguns casos, a calibração é o único meio prático de estimar o valor de alguns parâmetros considerados em processos biológicos.

Existem várias técnicas para a calibração em função das características e da complexidade do modelo. A forma mais comum é a minimização da soma dos quadrados dos erros. Nesse contexto é importante observar que os parâmetros de calibração muitas vezes possuem um significado real, e que nesses casos o valor calibrado deve fazer sentido real.

2.4. Validação ou teste

Ao calibrar um modelo com base em dados experimentais, os resultados (estatísticos) podem parecer bons ou mesmo excelentes, mas isso não garante que o modelo realmente funciona e pode ser extrapolado para outros cenários. Acontece que a calibração é normalmente um processo estatístico, um ajuste dos parâmetros, e como modelos mais complexos possuem muitos parâmetros calibráveis não é difícil conseguir um resultado bom. A verdadeira validação (ou teste) do modelo, no entanto, deve ser realizado utilizando um ou mais conjuntos de dados diferentes, obtidos em outros locais, outros anos, ou sob condições diversas das que resultaram na calibração. Nessa validação, o erro de predição será, quase sempre, maior do que na calibração e esse erro é um indicador do real poder preditivo do modelo. Em suma, pode-se definir validação como sendo o processo de comparação de variáveis de saída com dados experimentais que não foram utilizados na calibração

2.5. Utilização do modelo e teste de sensibilidade

O desenvolvimento de um modelo visa, obviamente, sua utilização. As etapas anteriores (da calibração e da validação) resultam num determinado nível de confiabilidade. A utilização

sempre consiste da simulação de cenários ainda não experimentadas e, em última análise, permite avaliar como as variáveis de saída do modelo serão influenciadas por modificações nas variáveis de entrada.

A utilização pode ser circunstancial ou sistemática. A utilização circunstancial consiste na execução de cenários de interesse. Exemplos são a análise das alterações hidrológicas causadas por modificações no uso da terra através de um modelo agro-hidrológico; ou a análise do rendimento de culturas em cenários futuros de clima por um modelo agrônômico.

A utilização sistemática é também chamada de teste de sensibilidade, que consiste na exploração do desempenho de um modelo pela variação nos valores dos parâmetros. A finalidade dessa análise é quantificar quanto a variação em um parâmetro influencia nas variáveis de saída de um modelo. Pode-se agrupá-las grosseiramente em dois modos de análise: local e global.

Nesse caso, parâmetros do modelo são alterados, um por um, e o efeito de cada parâmetro nas variáveis de saída é determinado. Através da análise de sensibilidade determina-se a sensibilidade da saída do modelo aos parâmetros.