MÉTODOS DE ESTIMAÇÃO DOS PARÂMETROS DO MODELO
$$Y = A (1 - 10^{-cx}) 10^{-kx^2} + e$$
APLICAÇÃO A DADOS DE MATURAÇÃO DA CANA-DE-AÇÚCAR

MARIA APARECIDA PERRE DA SILVA

Orientador: Dr. Roberto S. Moraes

Tese apresentada à Escola Superior de Agricultura
"Luiz de Queiroz", da Universidade de São Paulo,
para obtenção do título de Doutor em Estatística e
Experimentação Agronômica.

P I R A C I C A B A
Estado de São Paulo - Brasil
Julho, 1980

Aos meus pais,

Albina e José,

Ao meu esposo,

Jaimem,

Aos meus filhos,

Ana Cristina

Alexandre (in memoriam)

Ana Paula e

Ana Cláudia

DEDICO.

AGRADECIMENTOS

Externamos aqui os nossos sinceros agradecimentos:

- Ao Prof. Dr. Roberto Simionato Moraes, pela segura, firme e decidida orientação na execução do presente trabalho.

- Ao Prof. Dr. Décio Barbin pelas sugestões, co laboração e revisão do texto.

- Ao Prof. Dr. Humberto de Campos, Coordenador do Curso de Pós-graduação em Estatística e Experimentação Agro nômica, pelo apoio.

- Ao Prof. José Carlos Pinotti, Magnífico Reitor da Fundação Universidade Estadual de Londrina (FUEL), pela confiança e apoio a nós dispensados.

- À Fundação Universidade Estadual de Londrina pela oportunidade.

- Ao Prof. Ervino Nesello, presidente da Coorde nadoria de Recursos Humanos Comissão Permanente de Capacitação de Docentes da FUEL, pelo apoio.

- Aos colegas, Prof. José Carani e Dr. Marco An tonio Fiori pelo incentivo.

- Aos colegas do Departamento de Matemática, Es
tatística e Computação da FUEL pela solidariedade.

- Ao Prof. Dr. Evoneo Berti Filho, pela versão
do resumo para o inglês.

- À Sra. Sônia Novaes Rasera pelo trabalho de
datilografia.

- À todos que, direta ou indiretamente, colaboraram
para a realização deste trabalho.

ÍNDICE

	<u>página</u>
1. RESUMO	1
2. INTRODUÇÃO	3
3. REVISÃO DE LITERATURA	5
4. MATERIAL E MÉTODOS	14
4.1. Material	14
4.2. Métodos	16
4.2.1. Introdução	16
4.2.2. Modelo utilizado	17
4.2.3. Esquema iterativo	17
4.2.4. Aceitabilidade	19
4.2.5. Método de Newton	21
4.2.6. Método modificado de Gauss-Newton	25
4.2.7. Método de Marquardt	30
4.2.8. Finalização do processo iterativo	40
4.2.9. Análise de variância	42
5. RESULTADOS E DISCUSSÃO	44
5.1. Valores iniciais das estimativas dos parâmetros do modelo I	44
5.2. Ajustamento do modelo I	45
6. CONCLUSÕES	61

7. SUMMARY	63
8. LITERATURA CITADA	65
APÊNDICE	69

1. RESUMO

No presente trabalho procurou-se verificar o ajustamento da função $Y = A(1 - 10^{-cx}) 10^{kx^2}$ a dados referentes à maturação de cana-de-açúcar (em POL % da cana). É uma função que atinge um máximo e cujo crescimento e decrescimento não são simétricos, o que muito se assemelha aos dados de maturação.

Para esse fim foram analisados dados de ensaios de competição de variedades de cana-de-açúcar realizados na região de Sertãozinho - SP no ano de 1970. São ao todo 19 variedades de cana-de-açúcar.

Por se tratar de uma função não linear seus parâmetros foram estimados pelos métodos de Newton, Gauss Newton (modificado) e Marquardt, com o objetivo primordial de verificar qual o melhor para o modelo em questão. Isso porque em estimação não linear um método pode ser mais vantajoso que outro

dependendo da natureza do problema.

É apresentada uma exposição rápida do desenvolvimento teórico de cada método.

Os resultados obtidos foram considerados satisfatórios e as principais conclusões foram as seguintes:

a. O modelo se adapta bem aos dados de maturação de cana-de-açúcar.

b. Todos os três métodos conduziram a boas estimativas para os casos em que os dados observados crescem até um ponto máximo passando a decrescer sempre. O método de Marquardt, porém, chega a solução com um número menor de iterações.

c. Nos casos em que os dados observados não seguem a ordem relacionada no item b, o método de Marquardt é o melhor, pois conduz a menor soma de quadrados dos desvios.

2. INTRODUÇÃO

Toda pesquisa de caráter aplicado tem como objetivo obter informações sobre os fenômenos em estudo. Uma das situações problemáticas dentre as que o pesquisador se depara é a falta do conhecimento da relação causa-efeito entre os fenômenos observados.

Normalmente o pesquisador procura modelos matemáticos que possam descrever quantitativamente tais fenômenos. Assim os modelos matemáticos constituem uma técnica de grande importância dentro do processo de pesquisa. Através deles torna-se possível recomendar adubações apropriadas, determinar maturações corretas, etc..

É claro que a confiabilidade em tais circunstâncias é tanto maior quanto melhor se ajustar o modelo matemático ao fenômeno em questão.

O fenômeno maturação de cana-de-açúcar, tem sí-

do estudado através do uso do modelo polinomial de 2º grau. Porém, sabemos que a quantidade de POL % da Cana não obedece simetria alguma, isto é, após atingir o máximo há uma queda que não ocorre com a mesma intensidade que seu crescimento.

Nosso interesse é verificar se o modelo proposto por MITSCHERLICH (1928) é apropriado para estudos de maturação da cana-de-açúcar. O comportamento desse modelo muito se assemelha ao fenômeno em questão pois em ambos os casos o crescimento e decrescimento não são simétricos.

Porém, o modelo em estudo é uma função não linear, nos parâmetros, dificultando portanto, a sua estimação. Apesar de extensivo tratamento na literatura não surgiu um único método como sendo o melhor para a resolução de problemas não lineares. Na obtenção das estimativas dos parâmetros podemos ter métodos mais adequados que outros dependendo da natureza do problema. Como é essencial que as estimativas sejam bem determinadas escolhemos entre os vários métodos de estimação não linear os seguintes:

- a. Newton
- b. Gauss-Newton (modificado)
- c. Marquardt,

com o objetivo primordial de verificar qual o melhor para esse modelo específico.

3. REVISÃO DE LITERATURA

Muitos são os autores que tem se preocupado com o estudo da determinação e do ajustamento de modelos matemáticos a dados de produção.

Neste capítulo, far-se-á uma revisão de trabalhos que se relacionem com o ajustamento dos modelos propostos por MITSCHERLICH a dados de produção, pois não vimos na literatura nenhum trabalho referente ao ajuste desses modelos a dados de maturação.

Far-se-á também uma revisão de trabalhos que dizem respeito a métodos de estimação de parâmetros de modelos não lineares.

3.1. Ajustamento da Lei de Mitscherlich a dados de produção

MITSCHERLICH (1909) propôs a função

$$Y = A [1 - 10^{-c(x+b)}], \quad \dots\dots\dots (3.1.1)$$

para representar a produção vegetal; onde x representa a dose de nutriente, aplicada.

MITSCHERLICH (1928) apontou uma objeção importante ao modelo (3.1.1). Verifica-se experimentalmente que, à medida que crescem as doses de nutrientes a produção também cresce, mas só até certo ponto, para daí começar a decrescer, podendo até anular-se quando as doses de nutrientes utilizadas tornam-se excessivamente altas. Esse fato tão importante, não pode ser explicado por (3.1.1), por isso, o autor acrescentou a (3.1.1) um novo fator k (onde k é o "fator de prejuízo"), de modo que o modelo, ao qual chamou de 2a. aproximação, fica:

$$Y = A(1 - 10^{-c(x+b)})10^{-k(x+b)^2} \quad \dots\dots\dots (3.1.2)$$

O autor fornece também a equação diferencial correspondente

$$\frac{1}{y} \cdot \frac{dy}{dx} = c \cdot \frac{10^{-cx}}{1-10^{-cx}} - 2 kx \quad \dots\dots\dots (3.1.3)$$

que deu origem à (3.1.2).

PIMENTEL GOMES e MALAVOLTA (1949a), fazendo al-

gumas considerações matemáticas sobre a 1a. aproximação (3.1.1) de MITSCHERLICH (1909), mostram como esta lei pode ser aplicada a dados experimentais. Discutem também o problema da determinação da dose de nutriente economicamente aconselhável.

PIMENTEL GOMES e MALAVOLTA (1949b), estudando alguns aspectos da Lei de Mitscherlich, observaram que essa função (3.1.1) quando aplicada a ensaios de adubação, ao contrário das demais, não é arbitrária, pois é proveniente de considerações teóricas sobre o crescimento dos vegetais. Os autores falam da 2a. aproximação de Mitscherlich, dada em (3.1.2). Mostram como chegar à equação (3.1.2), a partir da equação diferencial (3.1.3).

Concordam com o fato de (3.1.2) se adaptar melhor que (3.1.1) aos dados colhidos em experimentos de adubação. Mas tem o inconveniente de ser uma função mais complicada e com um parâmetro a mais. Além disso, segundo os autores, o efeito do fator 10^{-kx^2} só começa a aparecer para valores relativamente grandes de x , isto é, para adubações excessivamente pesadas. Por isso, concluem ser preferível, excluindo-se os casos extremos, utilizar-se da 1a. aproximação expressa em (3.1.1). A partir dessa conclusão, os autores desenvolveram então, o estudo apenas de (3.1.1), apresentando o cálculo dos seus três parâmetros, em primeiro lugar pelo método dos mínimos quadrados e em segundo lugar, pelo método dos momentos. Ambos conduzem a um sistema de três equações, sendo possível co-

locá-las, através da aplicação do teorema de Rouché-Cappeli, em uma equação apenas, cuja única incógnita é o parâmetro c:

$$\begin{vmatrix} \sum y & n & \sum 10^{-cx} \\ \sum xy & \sum x 10^{-cx} & \sum 10^{-2cx} \\ \sum y 10^{-cx} & \sum 10^{-cx} & \sum 10^{-2cx} \end{vmatrix} x = 0 \quad \dots (3.1.4)$$

Essa equação é resolvida através de métodos numéricos aproximados, sendo portanto um processo trabalhoso e demorado. Uma vez obtido o valor de $\hat{c}$, que satisfaz (3.1.4), obtêm-se facilmente as estimativas de A e b.

Pelo método dos momentos, o sistema de equações obtido é relativamente mais simples, mas sua resolução também apresenta dificuldades.

STEVENS (1951) descreve um método iterativo para obter estimativas de mínimos quadrados, dos parâmetros do modelo:

$$Y = \alpha + \beta \rho^x + e \quad \dots \dots \dots (3.1.5)$$

onde $0 < \rho < 1$ e x assume os valores 0, 1, 2, ..., ou seja, as doses são equidistantes.

Partindo de uma estimativa preliminar ρ_0 de ρ , o autor obtém estimativas preliminares dos outros dois parâmetros e o valor de uma correção $\Delta\rho$ para ρ . Inicia-se assim o processo iterativo. O ciclo de cálculos será repetido até que

a correção adicional ($\Delta\rho$) seja considerada desprezível. Chega-se assim às estimativas $\hat{\alpha}$, $\hat{\beta}$ e $\hat{\rho}$. O autor apresenta as estimativas das variâncias e covariâncias de $\hat{\alpha}$, $\hat{\beta}$ e $\hat{\rho}$. Esse método tem sido bastante empregado mas o fato de exigir doses equidistantes o limita.

PIMENTEL GOMES (1953) reúne num só trabalho as várias pesquisas sobre a evolução da 1ª. aproximação (3.1.1) de Mitscherlich, relativas a experimentos com fertilizantes. O autor afirma que a estimativa dos parâmetros pelo método dos mínimos quadrados, conduz a uma equação que depende das produções médias e de polinômios em z , sendo z uma variável que depende apenas da estimativa do parâmetro c ($z = 10^{-cq}$). Para o cálculo dessa estimativa, os polinômios foram tabelados para um número de níveis de x igual a quatro e cinco. Após obter o valor de $\hat{c}$ as estimativas dos parâmetros A e b são obtidas com facilidade. O método não exige que as doses x_i , sejam equidistantes. O autor fornece também as fórmulas para as estimativas das variâncias de $\hat{A}$, $\hat{b}$ e $\hat{c}$ a partir das fórmulas fornecidas por STEVENS (1951) para o cálculo das estimativas das variâncias e covariâncias de $\hat{\alpha}$, $\hat{\beta}$ e $\hat{\rho}$.

MITSCHERLICH (1954) volta a ressaltar o fato de que a equação (3.1.2) deve ser utilizada, pois através dela pode-se determinar quando o efeito do adubo torna-se prejudicial à planta tornando assim possível efetuar-se um estudo mais realista para a obtenção de um aumento de produção. O autor dan-

do vários valores k , mostra o seu efeito à equação, valendo-se para isso, de uma equação já calculada (estimativa obtida pela 1a. aproximação). Mostra que a curva de resposta atinge o máximo passando daí a decrescer de maneira lenta, se aproximando pois da realidade. Não faz nenhuma menção de como estimar o parâmetro k .

MESTRE (1965) reúne de maneira integral e resumida os métodos de ajuste da 1a. aproximação (3.1.1) de Mitscherlich. Os métodos são os de Pimentel Gomes, Stevens e Patterson e os aplica a um exemplo particular. Utiliza-se das equações resultantes para calcular as doses ótimas de fertilizantes. O exemplo citado pelo autor é um experimento de adubação cujas doses são relativamente baixas, não havendo queda de produção e portanto, o autor nada comenta sobre esse problema, não se referindo assim à 2a. aproximação de Mitscherlich.

RAMIREZ DÁVILA (1975) analisa vantagens e desvantagens no uso dos modelos: 1a. aproximação (3.1.1) de Mitscherlich, Cobb-Douglas, quadrático e raiz quadrada, para estudos de resposta a fertilizantes. Conclui que:

a. o modelo de Mitscherlich tem limitações no caso de experimentos com fertilizantes, pois não indica a queda de produção causada pelo efeito prejudicial do uso de altas doses de fertilizantes;

b. o modelo Cobb-Douglas só pode ser usado nos

casos de existir resposta sempre crescente ou decrescente;

c. o modelo quadrático é uma função que pode ser aplicada vantajosamente quando se utilizam doses altas de nutrientes, pois ela determina as possíveis quedas de produção. O defeito dessa função é não reproduzir de maneira realista a queda de produção, pois ela é uma função simétrica em relação ao ponto máximo, o que não ocorre na realidade, pois a curva de resposta a fertilizantes não obedece simetria alguma.

SILVA (1978) estuda o ajustamento do modelo (3.1.2), proposto por Mitscherlich, a dados de adubação de trigo e compara os resultados obtidos com os provenientes do ajustamento dos modelos: $Y = A(1 - 10^{-c(x+b)}) + e$ e $Y = A + Bx + Cx^2 + e$ (3.1.6), aos mesmos dados. Obtem as estimativas dos parâmetros dos modelos (3.1.2) e (3.1.1) através do método modificado de Gauss-Newton, e os parâmetros do modelo (3.1.6) pelo método dos mínimos quadrados. Apresenta uma síntese das bases teóricas do método de Gauss-Newton. Determina as doses economicamente recomendáveis para a adubação através do uso dos três modelos já citados. Conclui que a equação (3.1.2) se ajusta muito bem aos dados sendo sua utilização preferível aos outros dois modelos principalmente quando se aplicam altas doses de fertilizantes, caso em que normalmente há uma queda de produção.

3.2. Processos de Estimação de Parâmetros de modelos não lineares

HARTLEY (1961) introduziu o método modificado de Gauss-Newton para a estimação de parâmetros em equações não lineares. Partindo de estimativas preliminares para cada um dos parâmetros e efetuando-se correções convenientes, inicia-se um processo iterativo até se obterem as estimativas eficientes para todos os parâmetros que compõem o modelo. Esse será um dos métodos utilizados para o desenvolvimento deste trabalho.

FLETCHER e M.J.P. POWELL (1963) apresentam um método iterativo eficaz para determinar mínimo em funções de várias variáveis. Esse método tem sido utilizado na resolução de sistemas de equações não lineares.

MARQUARDT (1963) descreve um algoritmo para obter estimativas de quadrados mínimos dos parâmetros de funções não lineares. Trata-se de uma conciliação entre os métodos, "Steepest-Descent" e Linearização. Essa conciliação é baseada sobre a máxima vizinhança na qual a série truncada de Taylor dá uma adequada representação do modelo não linear.

GUTTMAN e MEETER (1965) examinam a validade de se utilizar das medidas de não linearidade, que tem sido desenvolvidas por BEALE (1960), através de exemplos numéricos. Dão também, um desenvolvimento teórico sobre essas medidas.

BARD (1970) compara os métodos gradientes: Newton, Gauss-Newton e Marquardt. Apresenta o desenvolvimento teórico dos mesmos e um exemplo numérico. Comenta sobre vantagens e desvantagens de cada um deles.

HOFFMANN e VIEIRA (1977) apresentam um estudo sobre a equação $y = \alpha + \beta \rho^{x_i}$. Determinam as estimativas de quadrados mínimos de α , β e ρ pelos métodos de Newton, Gauss-Newton e também pelo método proposto por PIMENTEL GOMES e MALAVOLTA (1949).

4. MATERIAL E MÉTODOS

4.1. Material

Os dados utilizados no desenvolvimento deste trabalho são os referentes à maturação da cana-de-açúcar (em POL % da cana) de ensaios de competição de variedades, realizados na região de Sertãozinho - SP, no ano de 1970 e são apresentados na Tabela 1.

Tabela 1. Dados de maturação da cana-de-açúcar em POL % da cana.

Variedades	meses							
	maio	junho	julho	agos.	set.	out.	nov.	dez.
CB-4013	13,98	14,87	16,03	17,04	17,75	17,89	15,93	16,59
CB-4176	9,10	13,07	15,41	15,91	17,32	16,75	15,54	16,43
CB-4677	8,57	12,62	14,83	15,66	17,72	17,76	13,72	17,69

continua -

Tabela 1. (continuação)

Variedades	meses							
	maio	junho	julho	agos.	set.	out.	nov.	dez.
CB-4647	11,64	14,82	16,84	16,80	17,52	18,08	16,47	16,72
CB-49260	10,41	13,83	14,19	16,98	16,75	16,29	16,67	16,40
CB-56121	12,42	13,97	13,19	16,39	15,96	17,51	14,83	15,51
CB-56-126	10,86	14,38	14,86	16,04	16,90	16,36	16,50	16,68
CB-56-164	12,80	14,47	15,12	16,32	16,92	16,08	15,76	16,02
IAC-48-31	10,69	14,41	16,28	17,30	17,53	17,18	14,27	14,57
IAC 51-201	8,90	11,48	14,60	15,71	16,12	15,67	14,12	14,57
IAC 51-264	10,14	12,24	15,81	17,54	16,66	17,57	16,25	15,30
IAC 51-285	9,81	13,21	15,14	17,52	17,34	16,80	14,81	15,14
IAC 52-130	11,18	13,88	15,51	17,36	17,57	15,94	15,84	14,51
IAC 52-172	7,87	11,28	12,71	14,81	15,83	16,28	15,70	14,93
IAC 52-179	8,90	11,16	13,59	15,96	15,61	16,55	16,16	13,97
IAC 80-326	9,20	12,63	15,07	16,41	16,32	16,55	17,42	16,33
CO-178	10,02	12,03	14,11	15,78	15,80	17,07	14,97	15,18
CO-740	9,04	13,33	15,59	17,12	17,30	18,15	17,71	17,64
CO-775	10,70	13,85	15,89	20,42	19,76	18,70	16,54	16,60

4.2. Métodos

4.2.1. Introdução

Consideremos o modelo

$$Y_i = f(X_i, \theta) + E_i \quad \dots\dots\dots (4.2.1.a)$$

para $i = 1, 2, \dots, n$, onde

$$X_i = (x_{1i}, x_{2i}, \dots, x_{mi})$$

$$\theta = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_k)$$

$$E = (e_1, e_2, \dots, e_n)$$

n = número total de observações.

Admitiremos que $e_i \sim N(0, \sigma^2)$ para todo i .

Devemos encontrar valores estimados $\hat{\theta}$ para os parâmetros θ com os quais torna-se mínima a soma de quadrados dos desvios dada por:

$$\phi(\theta) = \sum_{i=1}^n [Y_i - f(X_i, \theta)]^2 \quad \dots\dots\dots (4.2.1.b)$$

Para determinar as estimativas dos parâmetros utilizaremos no presente trabalho os seguintes métodos:

(1) Newton

(2) Gauss-Newton (modificado)

(3) Marquardt

4.2.2. Modelo utilizado

O modelo a ser estudado é a 2a. aproximação de Mitscherlich

$$f(x, A, b, k) = Y_i = A(1 - 10^{-cx_i})10^{-kx_i^2} + e_i$$

o qual chamaremos de modelo I.

4.2.3. Esquema iterativo

Os três modelos de estimação que abordaremos são iterativos. Iniciamos com um dado ponto θ_0 conhecido por valor inicial e geramos uma sequência de pontos $\theta_1, \theta_2, \dots$, que esperamos convergir para o ponto $\hat{\theta}$ com o qual $\phi(\hat{\theta})$ torna-se mínima.

O cálculo de θ_{i+1} é chamado de i-ésima iteração. A sequência termina na prática, após um número, N , finito de iterações e aceitamos θ_N como uma aproximação de $\hat{\theta}$.

O vetor

$$\sigma_i = \theta_{i+1} - \theta_i \quad \dots\dots\dots(4.2.3.a)$$

é chamado de i-ésimo passo.

Nós esperamos que a cada passo nos aproximemos do mínimo. Como não conhecemos onde está o mínimo não podemos

testar essa condição diretamente. Nesse sentido porém, podemos considerar que o i -ésimo passo tenha melhorado nossa situação se:

$$\phi_{i+1}(\hat{\theta}_{i+1}) < \phi_i(\theta_i) \quad \dots\dots\dots (4.2.3.b)$$

Portanto, chamamos de i -ésimo passo aceitável se a desigualdade (4.2.3.b) for satisfeita.

Todos os métodos aqui abordados obedecem ao seguinte esquema:

1. Seja $i = 1$. Um valor inicial, θ_0 , é dado.

2. Determina-se um vetor d_i na direção do i -ésimo passo proposto.

3. Determina-se um escalar ρ_i tal que o passo

$$\sigma_i = \rho_i d_i \quad \dots\dots\dots (4.2.3.c)$$

seja aceitável; tomamos então

$$\theta_{i+1} = \theta_i + \rho_i d_i \quad \dots\dots\dots (4.2.3.d)$$

4. Testamos se o término do critério foi encontrado. Se foi, aceitamos θ_{i+1} como o valor $\hat{\theta}$. Se não foi encontrado aumenta-se i por uma unidade e retornamos ao passo 2.

Os métodos utilizados variam apenas na maneira de escolher ρ_i e d_i . Esses valores são denominados tamanho do passo e passo direcional, respectivamente.

4.2.4. Aceitabilidade

Consideremos a i -ésima iteração como um procedimento de minimização de $\phi(\theta)$.

Suponhamos que temos o valor θ_i e alguma direção d_i , então,

$$\theta(\rho) = \theta_i + \rho d_i ; \quad (\rho \geq 0) \quad \dots\dots\dots (4.2.4.a)$$

é uma função somente de ρ , a qual designaremos por

$$D_i(\rho) = \phi[\theta(\rho)] = \phi(\theta_i + \rho d_i) \quad \dots\dots\dots (4.2.4.b)$$

e sua derivada é dada por

$$D'_i(\rho) = \frac{d}{d\rho} D_i(\rho) = \left(\frac{\partial \phi}{\partial \theta} \right)^T \frac{\partial \theta}{\partial \rho} = \left(\frac{\partial \phi}{\partial \theta} \right)^T \cdot d \quad \dots\dots\dots (4.2.4.c)$$

Por outro lado o gradiente de $\phi(\theta)$ é $\frac{\partial \phi}{\partial \theta}$ que designaremos por $q(\theta)$, então

$$D'_i(\rho) = q_i^T d_i \quad \dots\dots\dots (4.2.4.d)$$

onde q_i representa o vetor gradiente calculado no ponto $\theta = \theta_i$.

Suponhamos que $q_i \neq 0$

Sabemos que $D'_i(\rho)$ é a derivada direcional de ϕ relativa a d e θ_i . Se $D'_i(\rho) < 0$, então $\phi(\theta)$ decresce. Portanto se ρ é um número suficientemente pequeno o passo ρd é acei-

tável. Por outro lado se $D_i^f(\rho) \geq 0$ pode não existir um valor positivo de ρ para o qual ρd seja um passo aceitável.

Portanto, chamamos $\underline{d}$ uma direção aceitável se $D_i^f(\rho) < 0$.

Temos então o seguinte teorema.

Teorema 1. A direção $\underline{d}$ é aceitável se e somente se, existe uma matriz R definida positiva tal que

$$\underline{d} = - R q_i \quad \dots\dots\dots (4.2.4.e)$$

Prova: Seja R uma matriz definida positiva e $\underline{d}$ dada pela equação (4.2.4.e). Então de (4.2.4.d) e da definição de matriz definida positiva

$$D_i^f(\rho) = q_i^T \underline{d} = - q_i^T R q_i < 0$$

Suponhamos agora que $D_i^f(\rho) < 0$. Seja $R = (I - q_i q_i^T / q_i^T q - d d^T / d^T q)$, então a equação (4.2.4.e) se verifica e R é uma matriz definida positiva.

Como vimos uma direção é aceitável se $D_i^f(\rho) < 0$, e o teorema diz que essa condição é assegurada se a direção for determinada por operações no gradiente negativo com uma matriz definida positiva.

Um método de minimização no qual as direções são tomadas dessa maneira é chamado de método gradiente aceitá

vel. A equação básica da i -ésima iteração de tal método é

$$\theta_{i+1} = \theta_i - \rho_i R_i q_i \quad \dots\dots\dots (4.2.4.f)$$

Como já foi dito os métodos variam apenas na escolha de R_i e ρ_i .

4.2.5. Método de Newton

Consiste em desenvolver $\phi(\theta)$ através da série de Taylor, até 2a. ordem no ponto $\theta = \theta_i$, ou seja

$$Q_i(\theta) = \phi_i(\theta_i) + q_i^T(\theta - \theta_i) + \frac{1}{2} (\theta - \theta_i)^T H(\theta - \theta_i) \quad \dots(4.2.5.a)$$

onde H é a matriz Hessiana de $\phi(\theta)$, calculada no ponto $\theta = \theta_i$

$$H_{\alpha\beta}(\theta) = \frac{\partial^2 \phi}{\partial \alpha \partial \beta} \quad \dots\dots\dots(4.2.5.b)$$

Devemos encontrar o ponto com o qual $Q_i(\theta)$ é estacionário. Para tal igualamos a zero o gradiente de $Q_i(\theta)$:

$$\frac{\partial Q_i(\theta)}{\partial \theta} = q_i + H_i(\theta - \theta_i) = 0 \quad \dots\dots\dots(4.2.5.c)$$

Se H_i é não singular tem solução

$$\theta_{i+1} = \theta_i - H_i^{-1} q_i \quad \dots\dots\dots(4.2.5.d)$$

A equação (4.2.5.d) define a i -ésima iteração

do método de Newton.

De acordo com a forma geral do método gradiente dada em (4.2.4.f) temos

$$\rho_i = 1 \quad \text{e} \quad R_i = H_i^{-1}$$

Se $\phi(\theta)$ coincide com $Q_i(\theta)$, isto é, se $\phi(\theta)$ é uma função quadrática, então θ_{i+1} é um ponto estacionário de $\phi(\theta)$, que será mínimo se H_i for positiva definida. Quando $\phi(\theta)$ não é uma função quadrática, θ_{i+1} é uma aproximação do ponto estacionário de $\phi(\theta)$.

4.2.5.1. Aplicação do método de Newton ao modelo I

A função correspondente a (4.2.1.b) é

$$\phi(X_i, A, c, k) = \sum_{i=1}^n [Y_i - A(1 - 10^{-cx_i})10^{-kx_i^2}]^2.$$

As equações de Newton dadas em (4.2.5.c) são

$$H_i(\theta - \theta_i) = -q_i, \quad \text{onde}$$

H é a matriz hessiana definida em (4.2.5.b).

Dado um ponto inicial $\theta_0 = (A_0, c_0, k_0)$ podemos calcular o valor de H , q e montar o sistema de equações.

A matriz H pode ser dividida em duas, ou seja,
 $H = N + B$ e são elas:

$$N = \begin{bmatrix} \sum f_1^2 & \sum f_1 f_2 & \sum f_1 f_3 \\ \sum f_1 f_2 & \sum f_2^2 & \sum f_2 f_3 \\ \sum f_1 f_3 & \sum f_2 f_3 & \sum f_3^2 \end{bmatrix} \quad (4.2.5.1.a)$$

onde

$$f_1 = \frac{\partial f}{\partial A} = (1 - 10^{-cx_i}) 10^{-kx_i^2}$$

$$f_2 = \frac{\partial f}{\partial c} = x_i A 10^{-cx_i} \cdot 10^{-kx_i^2} \ln 10 \quad (4.2.5.1.b)$$

$$f_3 = \frac{\partial f}{\partial k} = -x_i^2 \cdot A (1 - 10^{-cx_i}) 10^{-kx_i^2} \ln 10$$

e a matriz B é

$$B = \begin{bmatrix} 0 & -\sum e_i x_i 10^{-cx_i - kx_i^2} \ln 10 & \sum e_i (1 - 10^{-cx_i}) 10^{-kx_i^2} x_i^2 \ln 10 \\ -\sum e_i x_i 10^{-cx_i - kx_i^2} \ln 10 & \sum e_i x_i^2 A 10^{-cx_i - kx_i^2} (\ln 10)^2 & \sum e_i x_i^3 A 10^{-cx_i - kx_i^2} (\ln 10)^2 \\ \sum e_i (1 - 10^{-cx_i}) 10^{-kx_i^2} x_i^2 \ln 10 & \sum e_i x_i^3 A 10^{-cx_i - kx_i^2} (\ln 10)^2 & -\sum e_i x_i^4 A (1 - 10^{-cx_i}) 10^{-kx_i^2} (\ln 10)^2 \end{bmatrix}$$

$$\text{onde } e_i = [Y_i - A(1 - 10^{-cx_i}) 10^{-kx_i^2}] \quad \dots\dots\dots (4.2.5.1.c)$$

O vetor q_i , que corresponde ao gradiente de $\phi(\theta)$ é dado por:

$$q_i = - \sum e_i \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \end{bmatrix}, \quad \dots\dots\dots (4.2.5.1.d)$$

onde e_i e f_i estão definidos acima.

Portanto, de posse do valor inicial $\theta_0 = (A_0, c_0, k_0)$ temos o sistema

$$(N+B) \cdot \begin{bmatrix} A - A_0 \\ c - c_0 \\ k - k_0 \end{bmatrix} = -q_i \quad \dots\dots\dots (4.2.5.1.e)$$

que terá solução.

A matriz H é definida positiva nas proximidades do mínimo de modo que escolhendo um valor inicial adequado o sistema (4.2.5.1.e) terá a seguinte solução:

$$\begin{bmatrix} A - A_0 \\ c - c_0 \\ k - k_0 \end{bmatrix} = -(N + B)^{-1} \cdot q_i$$

Substituindo agora o valor inicial $\theta_0 = (A_0, c_0, k_0)$ por $\theta_1 = (A_0 - qH^{-1}, c_0 - qH^{-1}, k_0 - qH^{-1})$ o processo é repetido até convergir para uma solução de mínimo.

4.2.6. Método modificado de Gauss-Newton

O método de GAUSS (1809) originalmente aplicado em problemas de quadrados mínimos, consiste em simplesmente omitir as derivadas segundas do sistema de equações dado em (4.2.5.d), quando a Hessiana é calculada. Ou seja, desejamos minimizar a soma de quadrados dada em (4.2.1.b)

$$\phi(\theta) = \sum (y_i - f(x_i, \theta))^2 = \sum e_i^2$$

Então

$$q_\alpha = \frac{\partial \phi(\theta)}{\partial \theta_\alpha} = -2 \sum e_i \frac{\partial f_i}{\partial \theta_\alpha}, \quad e$$

$$H_{\alpha\beta} = \frac{\partial^2 \phi(\theta)}{\partial \theta_\alpha \partial \theta_\beta} = -2 \sum e_i \frac{\partial^2 f}{\partial \theta_\alpha \partial \theta_\beta} + 2 \sum \left(\frac{\partial f}{\partial \theta_\alpha} \right) \cdot \left(\frac{\partial f}{\partial \theta_\beta} \right),$$

ou seja

$$H = B + N$$

No método de Gauss-Newton a matriz B é desprezada e a matriz N é tomada no lugar de H .

Os elementos da matriz B , ou são nulos ou são somas ponderadas de desvios. Então os valores absolutos dos elementos dessa matriz devem ser pequenos em comparação com os valores absolutos dos elementos da matriz N . Logo, pode-se dizer que N é uma boa aproximação de H , particularmente nas vizinhanças do mínimo.

Podemos dizer que o método de Gauss-Newton é uma simplificação do método de Newton.

HARTLEY (1961) desenvolveu o método modificado de Gauss-Newton. SILVA (1978) apresenta as bases teóricas de tal método e aqui faremos apenas um breve resumo.

As seguintes condições devem ser satisfeitas:

1a. As funções

$$\frac{\partial}{\partial \theta_{\alpha}} f_i(X, \theta)$$

e

$$\frac{\partial^2}{\partial \theta_{\alpha} \partial \theta_{\beta}} f_i(X, \theta), \text{ devem ser contínuas;}$$

2a. Qualquer que seja o valor u_i ($i = 1, 2, \dots, k$), onde $u_i^2 > 0$ e $u_i \neq 0$ para algum i deve-se ter:

$$\sum_{h=1}^n \left[\sum_i \sum_j \left(u_i \frac{\partial f_i}{\partial \theta_{\alpha}} \cdot \frac{\partial f_j}{\partial \theta_{\beta}} u_j \right) \right] > 0$$

para os vetores X_h e para todo $\theta \in S$, sendo que S é um conjunto convexo e limitado.

Essa hipótese garante que o sistema de equações obtido tenha solução única, e que essa solução é um mínimo.

3a. Seja

$$\Phi = \liminf_{\bar{S}} \phi(X, \theta), \text{ onde } \bar{S} \text{ é o complemento de } S.$$

É sempre possível encontrar um vetor θ_0 pertencente ao interior de S tal que

$$\phi(X, \theta_0) < \phi$$

Tomando-se o desenvolvimento da função $f(X, \theta)$ pela série de Taylor através dos termos lineares no ponto $\theta = \theta_0$, temos

$$f(X, \theta) = f(X, \theta_0) + \sum_{i=1}^k \frac{\partial f_i}{\partial \theta_j} \cdot d_j \quad \dots (4.2.6.a)$$

ou

$$f(X, \theta) = f(X, \theta_0) + P d \quad ,$$

onde

$$n P_k = \left[\frac{\partial f_i}{\partial \theta_j} \right] \quad , \quad i = 1, 2, \dots, n; \\ j = 1, 2, \dots, k.$$

$$d = \theta - \theta_0$$

Substituindo esse resultado em (4.2.1.b) temos:

$$\phi(\theta) = \sum \left[Y - f(X, \theta_0) - P d \right]^2 \quad \dots (4.2.6.b)$$

Agora, d , aparece linearizado e pode ser encontrado pelo método dos quadrados mínimos:

$$\frac{\partial \phi(\theta)}{\partial \theta_j} = 0 \quad , \quad \text{para todo } j.$$

Assim, d é determinado através da resolução do sistema

$$N d = -q \quad \dots (4.2.6.c)$$

onde

$$\begin{aligned} {}_k N_k &= P^T P \\ {}_n P_k &= \frac{\partial f_i}{\partial \theta_j}, \quad i = 1, 2, \dots, n; \quad j = 1, 2, \dots, k. \\ {}_k q_1 &= - \sum (Y_i - f(X, \theta_0)) \frac{\partial f_i}{\partial \theta_j}, \quad j = 1, 2, \dots, k \\ &= -P^T(Y - f(X, \theta)). \end{aligned}$$

Tal sistema sempre admite solução única, uma vez que, pela condição 2, a matriz N tem característica k .

Segundo a equação geral do método do gradiente, dada em (4.2.4.f), temos que $R_i = N^{-1}$ e $\rho_i = 1$. Tal procedimento nos dá a direção d , mas se tomarmos o passo $\rho_i = 1$ pode ocorrer um passo inaceitável. É necessário então, determinar o melhor valor de ρ_i para que ocorra:

$$\phi(\theta_i - \rho_i N^{-1} q_i) \leq \phi(\theta_i)$$

Uma maneira de encontrar o melhor valor para ρ_i é tomá-lo como o mínimo da função

$$a + b \rho_0 + c \rho_0^2 = \beta, \quad \dots\dots\dots (4.2.6.d)$$

onde

$$a = \phi(\theta_i)$$

$$b = -q_i^T N^{-1} q_i = q_i^T d_i$$

$$\beta = \phi(\theta_i + \rho_0 d_i)$$

Trata-se de uma função quadrática cujo ponto estacionário é

$$\rho^* = -\frac{b}{2c} = \frac{-q_i^T d_i \rho_0^2}{2[-q_i^T d_i \rho_0 + \phi(\theta_i) - \phi(\theta_i + \rho_0 d_i)]} \dots\dots$$

(4.2.6.e)

Podemos tomar $\rho_0 = 1$, então

$$\rho^* = \frac{-q_i^T d_i}{2[-q_i^T d_i + \phi(\theta_i) - \phi(\theta_i + d_i)]} \dots\dots\dots$$

(4.2.6.f)

De posse desse valor temos a solução:

$$\theta_{i+1} = \theta_i + \rho^* d_i \dots\dots\dots (4.2.6.g)$$

Como o valor inicial, (θ_0) é tomado na condição

3 teremos

$$\phi(x; \theta_i + \rho^* d_i) \leq \dots \leq \phi(x; \theta_0) < \Phi$$

Essa sequência de vetores θ_r convergirá para θ^* que minimiza (4.2.1.b) e HARTLEY (1961) demonstra que θ^* é um mínimo de $\phi(\theta)$ desde que as 3 condições iniciais sejam satisfeitas.

Tomamos então θ^* como uma aproximação de $\hat{\theta}$.

4.2.6.1. Aplicação do método modificado de Gauss-Newton ao modelo I

O sistema de equações de Gauss-Newton definido em (4.2.6.c) é:

$$N \cdot d = -q$$

A matriz N e o vetor q são os mesmos dados em (4.2.6.1.a) e (4.2.6.1.b).

De posse do valor inicial $\theta_0 = (A_0, c_0, k_0)$ podemos determinar a solução do sistema

$$N \cdot d = -q.$$

Uma vez obtido o valor de d podemos corrigir os parâmetros, isto é, obtemos um novo valor $\theta_1 = (A_0 + \Delta A_0, c_0 + \Delta c_0, k_0 + \Delta k_0)$, que será colocado no lugar de θ_0 e assim uma nova correção será determinada. Vamos, desse maneira, obtendo uma sequência de valores até que o processo tenha convergido para a solução de mínimo.

4.2.7. Método de Marquardt

O método de Marquardt é uma ótima interpolação entre os métodos: Linearização e "Steepest-Descent". Tal interpolação é baseada sobre a máxima proximidade na qual a sé-

rie truncada de Taylor dá uma adequada representação do modelo não linear.

Inicialmente, faz-se o desenvolvimento da função $f(X, \theta)$, pela série de Taylor, no ponto $\theta = \theta_0$, como em (4.2.6.a), obtendo-se o sistema de equações

$$Nd_t = -q \quad \dots\dots\dots(4.2.7.a)$$

O valor d_t é uma pequena correção para θ e o subscrito t é usado para designar que $\underline{d}$ foi calculado usando a série de Taylor.

Uma vez obtida a direção d_t do passo, o parâmetro deve ser corrigido por apenas uma fração de d_t , pois, de outro modo, pode ocorrer um passo inaceitável, fazendo com que saíamos da região onde $f(X, \theta)$ pode ser representada por (4.2.6.a) causando assim, a divergência do processo. Vários métodos tomam o tamanho do passo ρd_t , $0 \leq \rho \leq 1$, como no método de Gauss-Newton. Ainda assim, a divergência não é rara.

O método "Steepest-Descent" simplesmente para confronto, toma a direção do gradiente negativo de $\phi(\theta)$, assim:

$$d_g = -\left(\frac{\partial \phi}{\partial \theta_1}, \frac{\partial \phi}{\partial \theta_2}, \dots, \frac{\partial \phi}{\partial \theta_k}\right)^T \quad \dots(4.2.7.b)$$

Tanto no método de Linearização como no "Steepest-Descent" como em outros é necessário controlar cuidadosa-

mente o tamanho do passo, uma vez estabelecida a direção do vetor correção. Ainda assim, em muitos casos, a convergência é lenta.

Em vista desses problemas é necessário analisar os princípios fundamentais envolvidos. Primeiro, um método próprio deverá resultar no vetor correção cuja direção está dentro de 90° do gradiente negativo de $\phi(\theta)$, pois de outro modo os valores de $\phi(X, \theta)$ podem ser esperados maiores do que menores ao longo do vetor correção. Segundo, por causa do rigoroso alongamento da superfície de $\phi(X, \theta)$, na maioria dos problemas, d_t é usualmente quase sempre 90° afastado de d_g . Dessas considerações é razoável interpolar entre d_t e d_g .

Em ambos os métodos citados, após a determinação da direção do vetor correção deve-se controlar o tamanho do passo nessa direção. No método de Marquardt, a direção e o tamanho do passo são determinados simultaneamente.

4.2.7.1. Bases teóricas do método

As bases teóricas desse método estão nos teoremas que se seguem:

Teorema 2: Seja $\lambda \geq 0$ arbitrário e d_0 satisfazendo a equação:

$$(N + \lambda I) d_0 = -q \quad \dots\dots\dots (4.2.7.1.a)$$

Então d_0 minimizará $\phi(X, \theta)$ na esfera cujo raio $\|d\|$ satisfaz

$$\|d\|^2 = \|d_0\|^2$$

Prova: Devemos encontrar d que minimizará $\phi(\theta)$. Temos que:

$$\phi(d) = \|Y - f(X, \theta_0) - Pd\|^2, \text{ sob a restrição}$$

$$\|d\|^2 = \|d_0\|^2.$$

Sabemos, pelo método de Lagrange, que uma condição necessária para se ter um ponto estacionário é que

$$\frac{\partial u}{\partial d_1} = \frac{\partial u}{\partial d_2} = \dots = \frac{\partial u}{\partial d_k} = 0 \quad (4.2.7.1.b)$$

onde

$$u(d, \lambda) = \|Y - f(X, \theta_0) - Pd\|^2 + \lambda (\|d\|^2 - \|d_0\|^2) \quad (4.2.7.1.c)$$

e λ é um multiplicador de Lagrange.

Tomando as derivadas indicadas em (4.2.7.1.b)

temos:

$$- [P^T(Y - f(X, \theta_0) - Pd)] + \lambda d = 0 \quad \dots (4.2.7.1.d)$$

$$\|d\|^2 - \|d_0\|^2 = 0 \quad \dots \dots \dots (4.2.7.1.e)$$

Para um dado valor λ , a solução d da equação

$$(P^T P + \lambda I)d = P^T(Y - f(X; \theta_0)) \quad \dots \dots \dots (4.2.7.1.f)$$

satisfaz a equação (4.2.7.1.d) como pode ser verificado prẽ multiplicando (4.2.7.1.f) por $(P^T P)^{-1}$, escrevendo na forma

$$d = (P^T P)^{-1} P^T (Y - f(X, \theta)) - (P^T P)^{-1} \lambda d \quad (4.2.7.1.g)$$

e substituindo-a em (4.2.7.1.d)

Portanto, (4.2.7.1.a) e (4.2.7.1.f) sãõ idênticas. Logo, d é um ponto estacionário de (4.2.7.1.a) e ele é um mínimo pois $(N + \lambda I)$ é definida positiva.

Teorema 3: Seja $d(\lambda)$ a solução de (4.2.7.1.a) para um dado valor de λ . Então, $||d(\lambda)||^2$ é uma função monõtona decrescente de λ , tal que quando $\lambda \rightarrow \infty$, $||d(\lambda)||^2 \rightarrow 0$.

Prova: Desde que a matriz simétrica N é definida positiva, ela pode ser transformada em uma matriz diagonal D , através de uma rotação ortonormal, sem alterar a distância entre os pontos. Seja a transformação $S^T N S = D$ onde $S^T S = I$, e todos os elementos da diagonal de D sãõ positivos. Assim, (4.2.7.1.a) toma a forma $(D + \lambda I) \bar{S}^1 d_o = -S^T q$, e então

$$d_o = -S(D + \lambda I)^{-1} S^T q \quad \dots\dots\dots(4.2.7.1.h)$$

Definimos

$$r = S^T q$$

$$\begin{aligned}
||d_o(\lambda)||^2 &= q^T S(D + \lambda I)^{-1} S^T S(D + \lambda I)^{-1} S^T q \\
&= r^T [(D + \lambda I)^2]^{-1} r \\
&= \sum_{j=1}^k \frac{r_j^2}{(D_j + \lambda)^2} \quad (4.2.7.1.i)
\end{aligned}$$

que é claramente uma função decrescente de λ , ($\lambda \geq 0$), tal que $\lambda \rightarrow \infty$, $||d_o(\lambda)||^2 \rightarrow 0$.

Teorema 4: Seja γ o ângulo entre d_o e d_g . Então, γ é uma função monótona decrescente de λ tal que com $\lambda \rightarrow \infty$, $\gamma \rightarrow 0$. Desde que d_g é independente de λ , segue que d_o gira para d_g com $\lambda \rightarrow \infty$.

Prova: Observamos em primeiro lugar que

$$d_g = \left(\sum_{j=1}^n (Y_i - f_i) \frac{\partial f_i}{\partial \theta_j} \right)^T, \quad j=1,2,\dots,k \quad \dots \dots \dots (4.2.7.1.j)$$

Assim, exceto por um escalar, que é irrelevante pois somente a orientação dos vetores nos interessa,

$$d_g = -q = g \quad \dots \dots \dots (4.2.7.1.k)$$

Por definição temos que

$$\cos \gamma = \frac{d_g^T g}{||d|| \cdot ||g||} = \frac{g^T S(D + \lambda I)^{-1} S^T g}{\{r^T [(D + \lambda I)^2]^{-1} r\}^{1/2} (g^T g)^{1/2}}$$

$$\begin{aligned} \cos \gamma &= \frac{r^T (D + \lambda I)^{-1} r}{\{r^T [(D + \lambda I)^2]^{-1} r\}^{1/2} (g^T g)^{1/2}} \\ &= \frac{\sum_{j=1}^k \frac{r_j^2}{D_j + \lambda}}{\left[\sum_{j=1}^k \frac{r_j^2}{(D_j + \lambda)^2} \right]^{1/2} (g^T g)^{1/2}} \end{aligned}$$

Diferenciando e simplificando temos:

$$\frac{d}{d\lambda} \cos \gamma = \left[\frac{\left[\sum \frac{r^2}{D+\lambda} \right] \left[\sum \frac{r^2}{(D+\lambda)^3} \right]}{\left[\sum \frac{r^2}{(D+\lambda)^2} \right]^{1/2} \left[\sum \frac{r^2}{(D+\lambda)^2} \right]^{3/2}} - \left[\sum \frac{r^2}{(D+\lambda)^2} \right]^{3/2} \right] \cdot \frac{1}{\sum \frac{r^2}{(D+\lambda)^2} \cdot (g^T g)^{1/2}}$$

$$= \frac{\left[\sum \frac{r^2}{D + \lambda} \right] \left[\sum \frac{r^2}{(D + \lambda)^3} \right] - \left[\sum \frac{r^2}{(D + \lambda)^2} \right]^2}{\left[\sum \frac{r^2}{(D + \lambda)^2} \right]^{3/2} (g^T g)^{1/2}} \quad (4.2.7.1.\ell)$$

Fazendo,

$$\Pi_{1j} = \prod_{\substack{j'=1 \\ j \neq j'}}^k (D_{j'} + \lambda),$$

$$\Pi_{2j} = \prod_{\substack{j'=1 \\ j \neq j'}}^k (D_{j'} + \lambda)^2,$$

$$\pi_{3j} = \prod_{\substack{j'=1 \\ j \neq j'}}^k (D_{j'} + \lambda)^3,$$

escrevemos a expressão (4.2.7.1.m) da seguinte forma:

$$\frac{d}{d\lambda} \cos \gamma = \frac{\left[\sum_{j=1}^k r_j^2 \pi_{1j} \right] \left[\sum_{j=1}^k r_j^2 \pi_{3j} \right] - \left[\sum_{j=1}^k r_j^2 \pi_{2j} \right]^2}{\left[\sum_{j=1}^k \frac{r_j^2}{(D_j + \lambda)^2} \right]^{3/2} \left[\prod_{j=1}^k (D_j + \lambda)^2 \right]^2 (g^T g)^{1/2}} \dots\dots\dots$$

..... (4.2.7.1.n)

Vemos que o denominador de (4.2.7.1.n) é positivo, desde que cada fator é positivo, então o sinal de (4.2.7.1.n) é o sinal do numerador.

Por outro lado, o numerador pode ser escrito:

$$\left[\sum (r_j \pi_{1j}^{1/2})^2 \right] \left[\sum (r_j \pi_{3j}^{1/2})^2 \right] - \left[\sum (r_j \pi_{1j}^{1/2}) (r_j \pi_{3j}^{1/2}) \right]^2$$

uma vez que

$$\pi_{1j} \cdot \pi_{3j} = (\pi_{2j})^2$$

Pela desigualdade de Schuwarz (4.2.7.1.n) é positivo. Assim $\frac{d \cos \gamma}{d \lambda}$ é sempre positivo ($\lambda > 0$). Consequentemente, γ é uma função de λ monótona decrescente.

Para valores muito grandes de λ , a matriz $(A + \lambda I)$ é dominada pela diagonal λI . Assim, pode ser visto de

(4.2.7.1.a) que como $\lambda \rightarrow \infty$, $d_0 \rightarrow g/\lambda$, donde d_0 e g tornam-se proporcionais no limite e o ângulo entre eles se aproxima de zero.

A solução de (4.2.7.a) goza da propriedade de ser invariante sob transformações lineares do espaço dos parâmetros θ , o que não ocorre com o método "Steepest-Descent". Torna-se necessário então escalar o espaço dos parâmetros θ de maneira conveniente. MARQUARDT (1963) sugere a seguinte escolha de escala, ao invés de se tomar o sistema dado em (4.2.7.a), tomamos

$$(N + \lambda B^2)d = g \quad \dots\dots\dots(4.2.7.1.o)$$

onde a matriz B é definida como:

$$B = (b_{ii}) = \begin{cases} (n_{ii})^{1/2} & \text{se } n_{ii} \neq 0 \\ 1 & \text{se } n_{ii} = 0 \end{cases}$$

Pode-se ver que $C = B^{-1}NB^{-1}$ tem elementos $c_{ij} = \frac{n_{ij}}{\sqrt{n_{ii} \cdot n_{jj}}}$, (exceto quando n_{ii} ou $n_{jj} = 0$) e se N é uma matriz de covariâncias então C é uma matriz de correlações.

Para um λ_i suficientemente grande sempre temos um passo aceitável. O algoritmo para selecionar λ_i é o seguinte:

1. Supondo que $i = 1$, iniciamos com

$$\lambda = 0,01$$

2. Calculamos $d = -(N_i + \lambda_i B_i^2)^{-1} q_i$,

$$\theta(1) = \theta_i + d \quad e$$

$$\phi(1) = \phi(\theta(1))$$

3. Se $\phi(1) \leq \phi_i$, aceitamos $\theta_{i+1} = \theta(1)$ e trocamos λ pelo $\max(0, 1 - \lambda; \varepsilon)$ onde ε é um número positivo que pode ser 10^{-7} .

4. Se $(r^T g)^2 / [g^T g] [d^T d] < 1/2$, trocamos λ por 10λ e retornamos ao passo 2.

Entretanto, esse algoritmo pode requerer o cálculo de $\underline{d}$ para muitos valores de λ numa única iteração. Isso pode ser evitado trocando o passo quatro por:

4a. Encontramos um valor ρ_i suficientemente pequeno tal que:

$\phi(\theta_i + \rho_i d) < \phi_i$. Aceitamos $\theta_{i+1} = \theta_i + \rho_i d$, e trocamos λ por 10λ .

A obtenção de ρ_i é feita como em (4.2.6.e), tomando ρ_0 no intervalo $0 < \rho_0 < t$, onde t é um número suficientemente grande.

Com esse algoritmo sempre obtemos uma vizinhança na qual a série de Taylor dá uma adequada representação da função, e conseqüentemente a determinação do mínimo de $\phi(\theta)$.

4.2.7.2. Aplicação do método de Marquardt ao mo delo I

O sistema de equações definido em (4.2.7.1.o):

$$(N + \lambda B^2)d = -q \quad \quad \quad \hat{e}$$

$$\begin{bmatrix} \sum f_1^2(1+\lambda) & \sum f_1 f_2 & \sum f_1 f_3 \\ \sum f_1 f_2 & \sum f_2^2(1+\lambda) & \sum f_2 f_3 \\ \sum f_1 f_3 & \sum f_2 f_3 & \sum f_3^2(1+\lambda) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \end{bmatrix} = \sum e_i \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \end{bmatrix}$$

onde f_i , $i = 1, 2, 3$, e e_i estão definidas em (4.2.5.1.b) e (4.2.5.1.d), respectivamente.

4.2.8. Finalização do processo Iterativo

É necessário idealizar um critério para finalizar o processo iterativo. Como já foi dito esperamos que haja convergência para um ponto estacionário de $\phi(\theta)$. Por isso, pode parecer natural tomar como critério de finalização a anulação do gradiente q_i . Porém, em muitos casos, o computador fornece estimativas dos parâmetros muito próximas do mínimo, e ainda assim o gradiente continua com tamanho considerável, e seu anulamento torna-se inatingível mesmo aproximadamente. Por outro lado, se o algoritmo diverge esse critério de finalização torna o processo iterativo interminável.

Um critério mais prático é finalizar o programa logo que iterações suplementares falham na mudança significativa dos parâmetros. Isto é, dado um conjunto de ε_α ($\alpha = 1, 2, \dots, k$) aceitamos θ_{i+1} como a solução, $\hat{\theta}$, se

$$|\theta_{i+1,\alpha} - \theta_{i,\alpha}| \leq \varepsilon_\alpha \quad \dots\dots\dots (4.2.8.a)$$

onde $\theta_{i,\alpha}$ é o α -ésimo componente de θ_i .

Os números ε_α podem ser pré-estabelecidos ou calculados como sugere MARQUARDT (1963):

$$\varepsilon_\alpha = 10^{-4} (\theta_{i,\alpha} + 10^{-3}) \quad \dots\dots\dots (4.2.8.b)$$

onde o termo aditivo 10^{-3} é colocado para evitar os casos em que $\theta_{i,\alpha}$ são próximos de zero.

Uma vez finalizado o processo iterativo com $\theta = \theta^*$, gostaríamos de saber se θ^* está ou não próximo do mínimo.

Assumimos então que conhecemos o gradiente $q^* = q(\theta^*)$ e a matriz hessiana $H^* = H(\theta^*)$ ou alguma aproximação sua. Se seccionarmos a superfície $\phi(\theta)$ ao longo dos eixos θ_α , temos uma curva cuja equação aproximada nas vizinhanças de θ^* é dada por:

$$S(\theta_\alpha) = \phi^* + q_\alpha^* (\theta_\alpha - \theta_\alpha^*) + \frac{1}{2} (\theta_\alpha - \theta_\alpha^*)^T H_{\alpha\alpha}^* (\theta_\alpha - \theta_\alpha^*)$$

a qual tem um ponto estacionário

$$\theta_\alpha = \theta_\alpha^* - q_\alpha^* / H_{\alpha\alpha}^*.$$

Portanto, o valor $\delta_\alpha = |q_\alpha^*/H_{\alpha\alpha}^*|$ é uma medida do erro na determinação de θ_α^* .

Se cada δ_α é pequeno, na mesma escala na qual θ_α é medido, então θ^* está próximo do mínimo de $\phi(\theta)$.

Neste trabalho esses dois critérios serão utili
zados.

4.2.9. Análise de Variância

As análises de variância utilizadas seguem o es
quema apresentado na Tabela 2.

Tabela 2. Esquema de Análise de Variância.

Causas de Variação	G.L.
Regressão	$p - 1$
Resíduo	$N - p$
Total	$N - 1$

onde

p : número de parâmetros do modelo de regressão.

N : número total de observações.

A soma de quadrados dos desvios da regressão é

$$SQ \text{ desvios} = \sum_{h=1}^n (Y_h - \hat{y}_h)^2$$

O coeficiente de determinação será dado por:

$$R^2 = \frac{SQ \text{ Reg.}}{SQ \text{ Total}}$$

Também será calculado o coeficiente de determinação corrigido para graus de liberdade que é definido por:

$$\bar{R}^2 = R^2 - \frac{p - 1}{N - p} (1 - R^2)$$

4.3. Programação da metodologia para computação eletrônica

Com a finalidade de atingir os objetivos propostos a metodologia foi programada em linguagem FORTRAN e o processamento realizado no computador IBM-1130 do Departamento de Matemática e Estatística da ESALQ. Os programas utilizados constam do Apêndice.

5. RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1. Valores iniciais das estimativas dos parâmetros do modelo I

Todo processo iterativo requer uma seleção de valores iniciais θ_{0i} ($i = 1, 2, \dots, k$) dos parâmetros θ_i ($i = 1, 2, \dots, k$).

Da seleção dos valores iniciais depende o sucesso ou fracasso na determinação do ponto de mínimo ou ainda uma rápida ou lenta convergência para a solução.

Infelizmente, como não existem algoritmos para determinar bons valores iniciais, devemos contar com a intuição ou com algum conhecimento prévio dos parâmetros.

Segundo DRAPER e SMITH (1966) pode ser utilizado como valor inicial toda informação anteriormente obtida de θ .

Neste trabalho a seleção dos valores iniciais foi efetuada através do seguinte critério.

Para cada parâmetro foi fixado um intervalo de variação e dentro desse intervalo fazendo, todas as combinações possíveis, foram calculadas as somas de quadrados de desvios. Tomou-se como valor inicial os valores que conduziram à menor soma de quadrados dos desvios.

Os parâmetros do modelo I devem ser positivos. O parâmetro k determina o decréscimo da função, portanto deve ser necessariamente um valor positivo ou nulo.

5.2. Ajustamento do modelo I

Dividimos as variedades de cana-de-açúcar em dois grupos, de acordo com os resultados obtidos na estimação dos parâmetros do modelo 1.

No primeiro grupo constam as variedades cujas equações estimadas obtidas através dos métodos de Newton, Gauss-Newton e Marquardt, foram exatamente iguais. As que diferiram encontram-se no 2º grupo.

As estimativas dos parâmetros do modelo 1, para o primeiro grupo de variedades constam da Tabela 3.

Tabela 3. Estimativas dos parâmetros do modelo 1, para o 1º grupo de variedades.

Variedades	Métodos	Parâmetros			iteração
		$\hat{A}$	$\hat{c}$	$\hat{k}$	
CB-4176	1-2-3	17,8212	0,3012	0,0007	7-5-5
CB-40-77	1-2-3	17,8547	0,2754	0,0005	8-4-4
CB-46-47	1-2-3	17,5221	0,4879	0,0004	6-4-4
IAC-48-31	1-2-3	19,8859	0,3109	0,0022	6-4-4
IAC-51-201	1-2-3	18,1003	0,2594	0,0012	6-6-5
IAC-51-264	1-2-3	19,9632	0,2570	0,0017	7-5-4
IAC-51-285	1-2-3	19,7983	0,2651	0,0019	7-4-4
IAC-52-130	1-2-3	18,4706	0,3554	0,0015	6-4-4
IAC-52-172	1-2-3	17,4146	0,2307	0,0008	16-6-6
IAC-52-179	1-2-3	18,7610	0,2263	0,0015	10-7-7
IAC-80-326	1-2-3	17,1438	0,3136	0,0002	7-4-5
C0-178	1-2-3	16,4348	0,3430	0,0004	7-7-7
C0-740	1-2-3	18,4876	0,2830	0,0002	9-4-4
C0-775	1-2-3	24,0634	0,2104	0,0025	9-6-6

1- Método de Newton

2- Método de Gaus-Newton

3- Método de Marquardt

De posse das estimativas dos parâmetros podemos escrever as equações estimadas que podem ser vistas na Tabela 4.

Tabela 4. Equações estimadas do modelo I para o 1º grupo de variedades.

Variedade	Método	Equação
CB-41-76	1-2-3	$17,8200(1-10^{-0,30x})10^{-0,0007x^2}$
CB-40-77	1-2-3	$17,8547(1-10^{-0,2754x})10^{-0,0005x^2}$
CB-46-47	1-2-3	$17,5221(1-10^{-0,4879x})10^{-0,0004x^2}$
IAC-48-31	1-2-3	$19,8859(1-10^{-0,3109x})10^{-0,0022x^2}$
IAC-51-201	1-2-3	$18,1003(1-10^{-0,2594x})10^{-0,0012x^2}$
IAC-51-264	1-2-3	$19,9632(1-10^{-0,2570x})10^{-0,0017x^2}$
IAC-51-285	1-2-3	$19,7983(1-10^{-0,2651x})10^{-0,0019x^2}$
IAC-52-130	1-2-3	$18,4706(1-10^{-0,3554x})10^{-0,0015x^2}$
IAC-52-172	1-2-3	$17,4146(1-10^{-0,2307x})10^{-0,0008x^2}$
IAC-52-179	1-2-3	$18,7610(1-10^{-0,2263x})10^{-0,0015x^2}$
IAC-80-326	1-2-3	$17,1438(1-10^{-0,3136x})10^{-0,0002x^2}$
CO-178	1-2-3	$16,4348(1-10^{-0,3430x})10^{-0,0004x^2}$
CO-740	1-2-3	$18,4876(1-10^{-0,2830x})10^{-0,0002x^2}$
CO-775	1-2-3	$24,0634(1-10^{-0,2104x})10^{-0,0025x^2}$

Através das equações estimadas calculamos os valores estimados e seus respectivos desvios que podem ser vistos na Tabela 5.

Tabela 5. Valores observados para POL % de cana, valores estimados e desvios.

Variedade	Método	Meses	Valores		Desvios
			Observados	Estimados	
CB-41-76	1-2-3	1	9,10	8,9008	0,1992
		2	13,07	13,2866	-0,2166
		3	15,41	15,3785	0,0315
		4	15,91	16,2962	-0,3862
		5	17,32	16,6031	0,7169
		6	16,75	16,5825	0,1675
		7	15,54	16,3772	-0,8272
		8	16,43	16,0600	0,3699
CB-4077	1-2-3	1	8,57	8,3745	0,1955
		2	12,62	12,7682	-0,1482
		3	14,83	15,0210	-0,1910
		4	15,66	16,1165	-0,4565
		5	17,72	16,5795	1,1405
		6	17,76	16,6898	1,0702
		7	13,72	16,5967	-2,8767
		8	17,69	16,3801	1,3099

- continua -

Tabela 5. (continuação)

Variedade	Método	Meses	Valores		Desvios
			Observados	Estimados	
CB-46-47	1-2-3	1	11,64	11,2653	0,3747
		2	14,82	15,3364	-0,5164
		3	16,84	16,7609	0,0791
		4	16,80	17,2015	-0,4015
		5	17,52	17,2658	0,2542
		6	18,08	17,1754	0,9046
		7	16,47	17,0118	-0,5418
		8	16,72	16,8049	-0,0849
IAC-48-31	1-2-3	1	10,69	10,1164	0,5736
		2	14,41	14,8322	-0,4222
		3	16,28	16,7798	-0,4997
		4	17,30	17,2873	0,0127
		5	17,53	17,0250	0,5049
		6	17,18	16,3554	0,8446
		7	14,27	15,3989	-1,1289
		8	14,57	14,3175	0,2525
IAC-51-201	1-2-3	1	8,90	8,1110	0,7890
		2	11,48	12,4385	-0,9585
		3	14,60	14,6016	-0,0016
		4	15,71	15,5168	0,1932
		5	16,12	15,7019	0,4181
		6	15,67	15,4503	0,2197
		7	14,12	14,9303	-0,8103
		8	14,57	14,2408	0,3292

- continua -

Tabela 5. (continuação)

Variedade	Método	Meses	Valores		Desvios
			Observados	Estimados	
IAC-51-284	1-2-3	1	10,41	8,8821	1,2579
		2	12,24	13,6373	-1,3973
		3	15,81	16,0118	-0,2018
		4	17,54	17,0026	0,5374
		5	17,57	17,1777	0,3923
		6	16,66	16,8621	-0,2021
		7	16,29	16,2442	0,0458
		8	15,30	15,4361	-0,1361
IAC-51-285	1-2-3	1	9,81	9,0048	0,8053
		2	13,12	13,7138	-0,5938
		3	15,14	15,9804	-0,8404
		4	17,52	16,8469	0,6731
		5	17,34	16,8985	0,4415
		6	16,80	16,4656	0,3344
		7	14,81	15,7379	-0,9279
		8	15,14	14,8285	0,3115
IAC-52-130	1-2-3	1	11,18	10,2878	0,8922
		2	13,88	14,6771	-0,7971
		3	15,51	16,3808	-0,8708
		4	17,36	16,8387	0,5213
		5	17,57	16,6953	0,8747
		6	15,94	16,2407	-0,3007
		7	15,84	15,6094	0,2306
		8	14,51	14,8674	-0,3574

- continua -

Tabela 5. (continuação)

Variedade	Método	Meses	Valores		Desvios
			Observados	Estimados	
CO-775	1-2-3	1	10,79	9,1858	1,6042
		2	13,85	14,5920	-0,7420
		3	15,29	17,5102	-2,2202
		4	20,42	18,7930	1,6270
		5	19,76	19,0019	0,7581
		6	18,70	18,5085	0,1915
		7	16,54	17,5617	-1,0217
		8	16,60	16,3313	0,2687
IAC-52-172	1-2-3	1	7,87	7,1630	0,7070
		2	11,28	11,3152	-0,0352
		3	12,71	13,6585	-0,9485
		4	14,81	14,9106	-0,1006
		5	15,83	15,4986	0,3314
		6	16,28	15,6767	0,6033
		7	15,70	15,5964	0,1036
		8	14,93	15,3484	-0,4184
IAC-52-179	1-2-3	1	8,90	7,5940	1,3060
		2	11,16	11,9788	-0,8188
		3	13,59	14,3788	-0,7888
		4	15,96	15,5455	0,4145
		5	15,61	15,9393	-0,3293
		6	16,55	15,8424	0,7076
		7	16,16	15,4295	0,7305
		8	13,97	14,8101	-0,8401

- continua -

Tabela 5. (continuação)

Variedade	Método	Meses	Valores		Desvios
			Observados	Estimados	
IAC-80-326	1-2-3	1	9,20	8,8142	0,3858
		2	12,63	13,0816	-0,4516
		3	15,07	15,1326	-0,0626
		4	16,41	16,1008	0,3092
		5	16,32	16,5374	-0,2174
		6	16,55	16,7102	-0,1602
		7	17,42	16,7493	0,6707
		8	16,33	16,7180	-0,3880
C0-178	1-2-3	1	10,02	8,9650	1,0550
		2	12,03	12,9972	-0,9672
		3	14,11	14,7678	-0,6578
		4	15,78	15,4947	0,2853
		5	15,80	15,7324	0,0076
		6	17,07	15,7328	1,3372
		7	14,97	15,6109	-0,6409
		8	15,18	15,4193	-0,2393
C0-740		1	9,04	8,8469	0,1932
		2	13,33	13,4347	-0,1047
		3	15,59	15,7887	-0,1987
		4	17,12	16,9675	0,1525
		5	17,30	17,5244	-0,2244
		6	18,15	17,7482	0,4018
		7	17,71	17,7894	-0,0794
		8	17,64	17,7268	-0,0868

Efetuamos as análises de variâncias relativas a cada variedade, calculamos os coeficientes de variação e de determinação que se encontram na Tabela 6.

Tabela 6. Estimativas dos coeficientes de variação, valores do teste F para regressão e coeficientes de determinação.

Variedades	Métodos	C.V.(%)	Teste F para regressão	R^2	$\bar{R}^2$
CB-41-76	1-2-3	3,50	75,27**	0,9675	0,9550
CB-40-77	1-2-3	10,69	11,45*	0,8208	0,7491
CB-46-77	1-2-3	4,00	38,77**	0,9394	0,9152
IAC-48-31	1-2-3	5,12	27,77**	0,9174	0,8844
IAC-51-201	1-2-3	5,15	39,57**	0,9406	0,9168
IAC-51-264	1-2-3	5,95	27,62**	0,9170	0,8838
IAC-51-285	1-2-3	5,53	30,78**	0,9249	0,8949
IAC-52-130	1-2-3	5,50	18,73**	0,8823	0,8352
IAC-52-172	1-2-3	4,70	68,45**	0,9648	0,9507
IAC-52-179	1-2-3	7,16	23,30**	0,9019	0,8627
IAC-80-326	1-2-3	3,17	115,26**	0,9788	0,9703
CO-178	1-2-3	6,83	16,58**	0,8690	0,8165
CO-740	1-2-3	1,65	505,35**	0,9951	0,9931
CO-775	1-2-3	9,56	11,97**	0,8272	0,7581

Pelo teste F verificamos que os efeitos de regressão são significativos ao nível de 1% de probabilidade exceto para as variedades CB-40-77 e Co-775 que são significativos ao nível de 5% de probabilidade.

Essas variedades apresentam uma queda na POL % da cana, no mes 7 seguida de um aumento, como pode ser visto na Tabela 5. Isso dificilmente ocorre pois sabemos que na maturação após o início da inversão o processo continua sem retroceder a não ser em casos de ocorrência de fenômenos meteorológicos raros.

Esse fato influenciou também nos coeficientes de determinação e variação que sofreram diminuição e aumento respectivamente. Porém, para as outras variedades os resultados foram muito bons e podemos dizer que as equações estimadas de regressão se ajustam muito bem aos dados.

Os métodos de estimação utilizados foram eficientes. Todos convergiram após um número pequeno de iterações sendo que o método de Newton sempre necessitou de mais iterações que os outros dois métodos.

Como já dissemos no grupo 2 constam as variedades cujas equações estimadas diferiram de um método para outro. Na Tabela 7 estão os parâmetros estimados e também o número de iterações referentes a cada método.

Tabela 7. Estimativas dos parâmetros do modelo 1, para o grupo de variedades.

Variedades	Método	Parâmetros			Iteração
		$\hat{A}$	$\hat{C}$	$\hat{k}$	
CB-40-13	1	16,6672	0,7178	0,0001	9
	2	16,6976	0,7007	0,0000	11
	3	16,7482	0,7053	0,0000	18
CB-49-260	1	16,4073	0,4089	0,0000	8
	2	16,4048	0,4091	0,0000	12
	3	16,4975	0,4050	0,0000	8
CB-56-126	1	15,8938	0,4894	0,0004	19
	2	15,9698	0,4844	0,0001	10
	3	16,4092	0,4598	0,0000	11
CB-56-164	1	15,8445	0,6693	0,0001	9
	2	15,8481	0,6659	0,0000	16
	3	15,9298	0,6583	0,0000	10
CB-56-121	1	15,0707	0,6906	0,0000	70
	2	15,0772	0,6935	0,0000	44
	3	15,4778	0,6286	0,0000	20

Podemos escrever portanto, as estimativas das equações de regressão, que podem ser vistas na Tabela 8.

Tabela 8. Equações estimadas.

Variedades	Métodos	Equações
CB-40-13	1	$16,6672(1-10^{-0,7178x})10^{-0,0001x^2}$
	2	$16,6976(1-10^{-0,7007x})$
	3	$16,7482(1-10^{-0,7053x})$
CB-49-260	1	$16,4073(1-10^{-0,4089x})$
	2	$16,4048(1-10^{-0,4091x})$
	3	$16,4975(1-10^{-0,4050x})$
CB-56-126	1	$15,8998(1-10^{-0,4894x})10^{-0,0004x^2}$
	2	$15,9698(1-10^{-0,4844x})10^{-0,0001x^2}$
	3	$16,4092(1-10^{-0,4598x})$
CB-56-164	1	$15,8445(1-10^{-0,6693x})10^{-0,0001x^2}$
	2	$15,8481(1-10^{-0,6659x})$
	3	$15,9298(1-10^{-0,6583x})$
CB-56-121	1	$15,0707(1-10^{-0,6906x})$
	2	$15,0772(1-10^{-0,6935x})$
	3	$15,4778(1-10^{-0,6286x})$

Através das equações de regressão estimadas calculamos os valores estimados e os seus respectivos desvios que estão na Tabela 9.

Tabela 9. Valores observados para POL % da cana, valores estimados e desvios.

Variedades	Meses	Valores Observados	Métodos					
			1		2		3	
			Est.	Desvios	Est.	Desvios	Est.	Desvios
CB-40-13	1	13,98	13,4735	0,5065	15,5717	0,6083	13,4474	0,5326
	2	14,87	16,0467	-1,1767	16,0351	-1,1651	16,0980	-1,2280
	3	16,03	16,5285	-0,4985	16,5656	-0,5356	16,6205	-0,5905
	4	17,04	16,6062	0,4338	16,6713	0,3687	16,7234	0,3166
	5	17,75	16,6027	1,1474	16,6993	1,0577	16,7437	1,0063
	6	17,89	16,5796	1,3104	16,6925	1,1935	16,7477	1,1423
	7	15,93	16,5490	-0,6130	16,6044	-0,7674	16,7485	-0,8185
	8	16,59	16,132	0,0768	16,6975	-0,1075	16,7486	-0,1586
CB-56-121	1	12,42	11,9978	0,4222	12,0077	0,4123	11,8962	0,5238
	2	13,97	14,4441	-0,4741	14,4395	-0,4695	14,6114	-0,6414
	3	13,19	14,9429	-1,7529	14,9319	-1,7419	15,2311	-2,0411
	4	16,39	15,0445	1,3455	15,0314	1,3586	15,3725	1,0175
	5	15,96	15,0651	0,8949	15,0513	0,9087	15,4047	0,5553
	6	17,51	15,0691	2,4409	15,0551	2,4549	15,4121	2,0979
	7	14,83	15,0698	-0,2398	15,0555	-0,2255	15,4137	-0,5837
	8	15,51	15,0698	0,4402	15,0552	0,4548	15,4141	0,0959

- continua -

Tabela 9. (continuação)

Varie- dades	Me- ses	Valo- res Obser- vados	Métodos					
			1		2		3	
			Est.	Desvios	Est.	Desvios	Est.	Desvios
CB-40-260	1	10,41	10,0075	0,4025	10,0088	0,4012	10,0045	0,4055
	2	13,83	13,9093	-0,0793	13,9091	-0,0891	13,9420	-0,1120
	3	14,19	15,4288	-1,2388	15,4270	-1,2370	15,4917	-1,3017
	4	16,98	16,0184	0,9616	16,0153	0,9647	16,1016	0,8784
	5	16,75	16,2446	0,5054	16,2404	0,5096	16,3416	0,4084
	6	16,29	16,3284	-0,0384	16,3231	-0,0331	16,4361	-0,1461
	7	16,67	16,3559	0,3141	16,3495	0,3205	16,4732	0,1968
	8	16,40	16,3608	0,0392	16,3531	0,0469	16,4878	-0,0878
CB-56-126	1	10,86	10,7339	0,1261	10,7320	0,1280	10,6374	0,2226
	2	14,38	14,1748	0,3052	14,2404	0,1396	14,3790	0,0010
	3	14,86	15,2317	-0,3717	15,3752	-0,6152	15,6951	-0,8351
	4	16,04	15,4985	0,5414	15,7273	0,3127	16,1580	-0,1180
	5	16,90	15,4920	1,4080	15,8180	1,0820	16,3208	0,5792
	6	16,36	15,3797	0,9803	15,8183	0,5417	16,3781	-0,0181
	7	16,50	15,2165	1,2835	15,7842	0,7158	16,3982	0,1018
	8	16,68	15,0205	1,6595	15,7341	0,9459	16,4053	0,2747
CB-56-164	1	12,80	12,4502	0,3498	12,4279	0,3721	12,4309	0,3691
	2	14,47	15,1096	-0,6396	15,1100	-0,6400	15,1613	-0,6913
	3	15,12	15,6692	-0,5492	15,6888	-0,5688	15,7610	-0,6410
	4	16,32	15,7759	0,5441	15,8137	0,5063	15,8927	0,4273
	5	16,92	15,7822	1,1378	15,8406	1,0794	15,9216	0,9984
	6	16,08	15,7635	0,3165	15,8464	0,2336	15,9280	0,5120
	7	15,76	15,7362	0,0238	15,8477	-0,0877	15,9294	-0,1694
	8	16,02	15,7035	0,3165	15,8479	0,1721	15,9297	0,0903

As análises de variância foram realizadas e os resultados encontram-se na Tabela 10.

Tabela 10. Estimativas dos coeficientes de variação, valores do teste F para regressão e coeficientes de determinação.

Variedades	Métodos	C.V.(%)	Teste F para regressão	R^2	$\bar{R}^2$
CB-4013	1	6,45	3,36	0,5731	0,4024
	2	6,33	3,59	0,5892	0,4249
	3	6,30	3,63	0,5924	0,4293
CB-49-260	1	5,16	27,82**	0,9176	0,8846
	2	5,17	27,73**	0,9173	0,8842
	3	5,07	28,95**	0,9205	0,8887
CB-56-126	1	8,17	6,54*	0,7234	0,6128
	2	5,28	19,15**	0,8845	0,8384
	3	3,17	57,38**	0,9583	0,9416
CB-56-164	1	4,69	8,76**	0,7781	0,6893
	2	4,47	9,90**	0,7983	0,7177
	3	4,36	10,56**	0,8085	0,7320
CB-56-121	1	10,47	1,66	0,3984	0,1578
	2	10,51	1,63	0,3940	0,1516
	3	9,88	2,17	0,4642	0,2499

Para as variedades CB-40-13 e CB-56-121 os efeitos de regressão não foram significativos. Para as demais houve significância ao nível de 1% de probabilidade. Com exceção destas duas variedades os valores de R^2 e C.V. são muito bons e podemos dizer que o modelo se adapta muito bem aos dados.

A diferença encontrada na estimação dos parâmetros e consequentemente na SQ Resíduo é devida ao fato dos valores observados apresentarem uma grande variação. Em todas as variedades podemos observar diminuições de POL % seguidas de acréscimos e esse fato não é muito normal. Apesar dessa variação, obtivemos bons resultados e o método de Marquardt sempre conduziu a menor soma de quadrados de desvios.

6. CONCLUSÕES

Considerando as condições de realização deste trabalho e os resultados obtidos, podemos tirar as seguintes conclusões:

- 6.1. Nos casos em que o comportamento da maturação das diversas variedades foi normal, os três métodos de estimação dos parâmetros do modelo 1 apresentaram os mesmos resultados.
- 6.2. O Método de Newton tem o inconveniente de requerer o cálculo das derivadas de segunda ordem e ainda em muitos casos diverge porque $H(\theta)$ não é necessariamente positiva definida, exceto próximo do mínimo. E o número de iterações necessárias à convergência foi quase sempre maior que para os outros dois métodos.

- 6.3. O método de Gauss-Newton nos proporcionou bons resultados. Sua aplicação é fácil, dispensa o uso das derivadas de segunda ordem e não é necessário estar muito próximo do mínimo para garantia de convergência.
- 6.4. Nos casos em que o comportamento da maturação das diversas variedades não foi normal, os três métodos de estimação dos parâmetros do modelo 1 apresentaram resultados diferentes.
- 6.5. As estimativas dos parâmetros encontradas através dos métodos de Newton e Gauss Newton não foram adequadas nos casos das variedades que apresentam pontos intermediários de decréscimo.
- 6.6. O método de Marquardt apresentou sempre bons resultados. Nos casos em que os dados observados não são muito discrepantes necessitou de um número menor de iterações para convergir. Onde ocorreram pontos intermediários de decréscimo foi o que apresentou menor soma de quadrados de desvios. Portanto, sua aplicação para obtenção de estimativas dos parâmetros do modelo 1 é plenamente viável.

7. SUMMARY

This research was carried out to verify the fitting of the function $Y = A(1-10^{-cx})10^{-kx^2}$ to the data concerning the maturation of sugar cane (in POL % of cane). This is a function that reaches a maximum and whose increasing and decreasing are not simetrical, being therefore very similar to the data of sugar cane maturation. The data obtained from an experiment of competition among 19 varieties of sugar cane were analyzed. The experiment was set in the region of Sertãozinho, State São Paulo, Brazil, in 1970. Once the function is a non-linear one, its parameters were estimated by the methods of Newton, Gauss Newton (modified) and Marquardt, with the chief objective of verifying which one was the best for the function studied. This was done because in a non-linear estimation one method may be more advantageous than the other, depending on the nature of the problem. A brief exposition of the theoretical development of each method

is presented.

The results were considered satisfactory and the main conclusions were as follows:

- 7.1. The function is suitable for the data of maturation of sugar cane;
- 7.2. All the three methods have led to good estimations for the cases in which the data obtained have increased to a maximum point, decreasing afterwards. The method of Marquardt, however, solves the problem with a lower number of iterations;
- 7.3. In cases where the data do not follow the order indicated in the item 7.2, the method of Marquardt is the best one, because it leads to a smaller sum of square errors.

8. LITERATURA CITADA

- DRAPER, N. e H. SMITH, 1966. *Applied regression analysis*. Nova York, John Wiley, 407 pp.
- FLETCHER e M.J.P. POWELL, 1963. A rapidly convergent descent method for minimization, *The Computer Journal*, 6:163.
- HARTLEY, H.O., 1958. The estimation of non-linear parameters by "Internal Least Squares". *Biometrika*. Londres, 35:32-45.
- HARTLEY, H.O., 1961. The modified Gauss-Newton method for the fitting on non-linear regression functions by least squares. *Technometrics*. Richmond, 3:269-280.
- HOFFMAN, R. e S. VIEIRA, 1977. *Análise de regressão: Uma introdução à Econometria*. 1a. ed. São Paulo, HUCITEC, Ed. da USP, 339 pp.

- IRWIN GUTTMAN e DUANE A. MEETER, 1965. On beale's measures of non-linearity. *Technometrics*. Richmon, 7:623-637.
- JENNRICH, R.I. e P.F. SAMPSON, 1968. Application of stepwise regression to non-linear estimation. *Technometrics*. Richmond, 10:63-72.
- MARQUARDT, D.W., 1963. An algorithm for least-square estimation of non-linear parameters. *J. Soc. Indust. Appl. Math.*, 11: 431-441.
- MESTRE, A., 1965. Ajuste de la Ecuación de Mitscherlich para la interpretacion Económica de Experimentos con Fertilizantes. CENICAFÉ. Caldas, 16:77-91.
- MITSCHERLICH, E.A., 1909. Das gezezt des minimuns und das gesetx des abnehmenden bodenertrages. *Landwirtschaftlich Jahrbücher*, Berlim, 38:537-552.
- MITSCHERLICH, E.A., 1928. Die zweite annäherung des wirkungsgesetz der wachstumsfaktoren. *Zertschrift für Pflanzenernährung, Dungung und Bodenkunde*, Berlim 12:273-282.
- MITSCHERLICH, E.A., 1954. Das wirkungsgesetz der wachstumsfaktoren. *Bodenkunde für Landwirte Forstwirte und Gärtner*, Paul Parey, Berlim, 7:167-174.

- PATTERSON, H.D., 1956. A simple method for fitting an asymptotic regression curve. *Biometrics*, Raleigh, 12:323-329.
- PIMENTEL GOMES, F. e E. MALAVOLTA, 1949a. Considerações matemáticas sobre a Lei de Mitscherlich. *Boletim nº 3*, E.S.A. "Luiz de Queiroz", Piracicaba, 24 pp.
- PIMENTEL GOMES, F. e E. MALAVOLTA, 1949b. Aspectos matemáticos e estatísticos da Lei de Mitscherlich. *Anais da E.S.A. "Luiz de Queiroz"*, Piracicaba, 6:198-229.
- PIMENTEL GOMES, F., 1951. A Lei de Mitscherlich e a análise de variância em experimentos de adubação. *Anais da E.S.A. "Luiz de Queiroz"*, Piracicaba, 8:355-368.
- PIMENTEL GOMES, F., 1953. The use of Mitscherlich regression law in the analysis of experiments with fertilizers. *Biometrics*, Raleigh, 9:498-516.
- PIMENTEL GOMES, F., 1978. Curso de Estatística Experimental. 8a. edição, Livraria Nobel, São Paulo.
- RAMIRES DA VILA, L.E. e J. BENITEZ, 1975. Vantajas e desventajas del modelo polinomial cuadrático a los fertilizantes. (mimeografado). Trabalho apresentado à Reunião Comemorativa do 20º Aniversário da Região Brasileira da Sociedade Internacional de Biometria (The Biometric Society), Piracicaba.

SILVA, M.A.P., 1978. Segunda aproximação de Mitscherlich, $Y = A [1 - 10^{-c(x+b)}] 10^{-k(x+b)^2}$ aplicada à adubação mineral. E. S.A.L.Q., U.S.P., 96 pp. (Dissertação de Mestrado).

STEVENS, W.L., 1951. Asymptotic regression. *Biometrics*.
Raleigh, 7:247-267.

THEIL, H., 1971. Principles of econometrics. John Wiley,
Nova York. 736 pp.

APENDICE

PROGRAMA 1

```

C          VALORES INICIAIS PARA OS PARAMETROS
C           $Y=A*(1-10**(-CX))*10**(-KX**2)$ 
C          INTERVALOS DE VARIAÇÃO DOS PARAMETROS
C          AO - (1,40) varia de 2 em 2
C          CO - (0.05,1), varia de 0.05 em 0.05
C          KO - (0.001,0.01), varia de 0.001 em 0.001
C          N - número de observações
          DIMENSION X(50), Y(50), YEST(50), DESV(50)
          READ(2,99)N
99  FORMAT(15)
          READ (2,100) (X(I),I=1,N)
100 FORMAT(10F8.0)
          READ (2,100) (Y(I),I=1,N)
101 FORMAT(10F8.0)
          AO=1.0
          40 CO=0.05
          30 PKO=0.001
          20 SQD=0
          DO 1 I=1,N
            YEST(I)=AO*(1-10**(-CO*X(I)))*10**(PKO*K(I)**2)
            DESV(I)=Y(I)-YEST(I)
          1  SQD=SQD+DESV(I)**2
          WRITE(3,200)AO,CO,PKO,SQD
200  FORMAT(5X,F5.2,5X,F5.3,5X,F7.5,5X,F15.5)
          PKO=PKO*0.001
          IF(PKO-0.01)20,20,21
          21 CO=CO+0.05
          IF(CO-1)30,30,31
          31 AO=AO+2
          IF(AO-30)40,40,41
          41 CONTINUE
          STOP
          END

```

PROGRAMA 2

```

C                               SUBROTINA    PIRI 1
C    INTERPOLA O VALOR DE RO PARA OBTENÇÃO DE UM PASSO
C    ACEITÁVEL.
C    SUBROUTINE PIRI 1 (SQ,SOL,X,Y,N,V1,VAL1,RMAX,RMIN,J,
    *RQ1)
    DIMENSION VAL1(10),BETAO(10),BETA1(10),SOL(10),X(50
    *),Y(50)
    ROO=1./2.**J
    DO 1 I=1,10
1    BETAO(I)=VAL1(I)+ROO*SOL(I)
    IF(BETAO(3))50,51,51
50    BETAO(3)=VAL1(3)-0.1*VAL1(3)
51    CONTINUE
    SQO=0
    DO2 1=1,N
2    SQO=SQO+(Y(I)-BETAO(1)*(1-10**(-BETAO(2)*X(I)))*10*
    **(-BETAO(3)*X(I)**2))**2
    ROAST=V1*ROO**2/(2*(V1*ROO+SQ-SQO))
    IF(SQO-SQ)3,4,4
4    RO1=ROO
20    IF(0.75*RO1-ROAST)5,5,6
5    IF(0.25*RO1-0.75*RO1)7,7,8
7    RO2=0.75*RO1
    FO TO 11
6    IF(0.25*RO1-ROAST)9,9,10
9    RO2=0.25*RO1
    GO TO 11
10    RO2=0.25*RO1
    GO TO 11
8    RO2=0.25*RO1
11    IF (RO2-RMIN)12,12,13
13    DO 14 I=1,10
14    BETA1(I)=VAL1(I)+RO2*SOL(I)
    IF(BETA1(3))52,53,53
52    BETA1(3)=VAL1(3)-0.1*VAL1(3)
53    CONTINUE
    SO2=0
    DO 15 I=1,N
15    SO2=SO2+(Y(I)-BETA1(1)*(1-10**(-BETA1(2)*X(I)))*10*
    **(-BETA1(3)*X(I)**2))**2
    J=J+1
    IF(SQ2-SQ)16,17,17
17    RO1=RO2
    ROAST=V1*RO1**2/(2*(V1+RO1+SQ-SQ2))
    GO TO 20
16    RO1=RO2

```

PROGRAMA 2 (continuação)

```
12 RETURN
 3 J=J/2
   IF (ROAST)21,21,22
21 ROAST=2*ROO
23 RO1=ROAST
   GO TO 25
24 RO1=RMAX
25 B=ABS(RO1-ROO)
   IF(B-0.1*ROO)26,26,27
27 SQ1=0
   DO 28 I=1.10
28 BETA1(I)=VAL1(I)*RO1*SOL(I)
   IF(BETA1(3))54,55,55
54 BETA1(3)=VALI(3)-0.1*VALI(3)
55 CONTINUE
   DO 29 I=1.N
29 SQ1=SQ1+(Y(I)-BETA1(1)*(1-10**(-BETA1(2)*X(I)))*10*
  **(-BETA1(3)*X(I)**2))**2
   IF(SQ1-SQ0)30,30,26
30 RO1=RO1
   GO TO 40
26 RO1=ROO
40 RETURN
   END
```

PROGRAMA 3

```

C                               MÉTODO DE NEWTON
C                               CALCULA ESTIMATIVAS DOS PARAMETROS DA FUNÇÃO-
C                                $Y=A*(1-10**(-CX))*10**(-KX**2)$ 
C                               N=NÚMERO DE OBSERVAÇÕES
C                               N1= NUMERO DE EQUAÇÕES
C                               AO,CO,PKO SÃO OS VALORES INICIAIS DOS PARAMETROS
C                               N NÚMERO DE OBSERVAÇÕES.
C                               N1 NÚMERO DE EQUAÇÕES
C                               DIMENSION A(49),L(7),M(7),TOT(10),X1(10),X(50),Y(50)
C                               *) ,YEST(50),DESV(50),B(50)
C                               LE OS VALORES INICIAIS, O NÚMERO DE OBSERVAÇÕES E O
C                               NÚMERO DE EQUAÇÕES
1001  READ(2,100)N,N1,AO,CO,PKO
100   FORMAT(215,3F10.0)
C                               LE AS VARIÁVEIS INDEPENDENTES
C                               LE AS VARIÁVEIS DEPENDENTES
C                               READ(2,102)(Y(I),I=1,N)
102   FORMAT(10F8.0)
C                               N2=N1*N1
C                               ITER=0
C                               IP=1
500   SQ=0
      DO 1 I=1,N
1     SQ=SQ+(Y(I)-AO*(1-10**(-CO*X(I)))*10**(-PKO*X(I)**2
      *))*2
      WRITE(3,200)SQ,ITER
200   FORMAT(5X,'SQ=',F15.8,5X,'ITER=',14)
      WRITE(3,201)AO,CO,PKO
201   FORMAT(5X,'AO=',F15.8,'CO=',F15.9,'PKO=',F15.10)
      DO 2 J=1,N1
2     TOT(J)=0
      DO 3 J=1,N2
3     A(J)=)
      DO 4 I=1,N
C.....CALCULO DA MATRIZ      H
      CIDA=10**(-CO*X(I))
      CASO=10**(-PKO*X(I)**2)
      PERRE=1-CIDA
      F1=PERRE*CASO
      F2=X(I)*AO*CIDA*CASO*ALOG(10.)
      F3=-X(I)**2*AO*CASO*ALOG(10.)*PERRE
      A(1)=A(1)+F1**2
      A(2)=A(2)+F1*F2+(Y(I)-AO*F1)*(CIDA*(-X(I))*CASO*ALO
      *G(10.))
      A(3)=A(3)+F1*F3+(Y(I)-AO*F1)*(PERRE*X(I)**2*CASO*AL
      *OG(10.))
      A(4)=A(2)

```

PROGRAMA 3 (continuação)

```

      A(5)=A(5)+F2**2+(Y(I)-AO*F1)*(X(I)**2*AO*CIDA*CASO*
      *ALOG(10.))**2)
      A(6)=A(6)+F2*F3+(Y(I)-AO*F1)*(X(I)**3*AO*CIDA*CASO*
      *ALOG(10.))**2)
      A(7)=A(3)
      A(8)=A(6)
      A(9)=A(9)+F3**2*(Y(I)-AO*F1)*((-AO)*PERRE*X(I)**4*C
      *ASO*ALOG(10.))**2)
C .....CALCULO DO VETOR Q
      TOT(1)=TOT(1)+(Y(I)-AO*F1)*F1
      TOT(2)=TOT(2)+(Y(I)-AO*F1)*F2
      4  TOT(3)=TOT(3)+(Y(I)-AO*F1)*F3
      DO 1008 I=1.9
      1008 B(I)=A(I)
C .....INVERSO DA MATRIZ H
      CALL MINV (A,N1,D,L,M)
      GO TO (501,502),IP
      501 I1=0
      DO 5 I=1.N1
C .....CALCULO DO VETOR SOLUÇÃO D
      X1(I)=0
      I1=I1+N1
      DO 5 J=1,N1
      I2=I1-N1
      I3=J+I2
      5  X1(I)=X1(I)+A(I3)*TOT(J)
C .....VERIFICA SE D E UM PASSO ACEITAVEL
      V1=-2*X1(1)*TOT(1)-2*X1(2)*TOT(2)-2*X1(3)*TOT(3)
      IF(V1)6,7,7
      6  CONTINUE
C .....DETERMINA NOVAS ESTIMATIVAS DOS PARAMETROS
      AA1=AO+X1(1)
      CC1=CO+X1(2)
      PPK1=PKO+X1(3)
      IF(PPK1)88,89,89
      88  PPk1=PKO-0.1*PKO
      89  CONTINUE
C .....TESTE DE FINALIZAÇÃO DO PROCESSO
      ERRO1=(AO+0.001)*0.0001
      ERRO2=(CO+0.001)*0.0001
      ERRO3=(PKO+0.001)*0.0001
      TEST1=ABS(AA1-AO)
      TEST2=ABS(CC1-CO)
      TEST3=ABS(PPK1-PKO)
      IF(TEST3-ERRO3)51,51,52
      51  IF(TEST2-ERRO2)53,53,52

```


PROGRAMA 3 (continuação)

```

      53  IF(TEST1-ERRO1)54,54,52
C.....INICIO DE NOVA ITERAÇÃO
      52  AO=AA1
          CO=CC1
          PKO=PPK1
          ITER=ITER+1
          GO TO 500
C .....SOLUÇÃO FINAL
      54  IP=2
          AO=AA1
          CO=CC1
          PKO=PPK1
          GO TO 500
      502  CONTINUE
          SQD=0
          SQTOT=0
          DO 60 I=1,N
              YEST(I)=AA1*(1-10**(-CC1*X(I))*10**(-PPK1*X(I)**2))
              DESV(I)=Y(I)-YEST(I)
              SQD=SQD+DESV(I)**2
      60  SQTOT=SQTOT+Y(I)**2
          SQPAR=SQTOT-SQD
          R2=SQPAR/SQTOT
          WRITE(3,6521)
      6521  FORMAT(20X,'MATRIZ INVERSA',/)
          WRITE(3,1010) (A(I),I=1,9)
      1010  FORMAT(5X,3E17.10)
      8787  FORMAT(1X,/)
          WRITE(2,6548)
      6548  FORMAT(20X,'MATRIZ HESSIANA',/)
          WRITE(3,1010) (B(I),I=1,9)
          WRITE(3,8787)
          WRITE(3,7865) (TOT(I),I=1,3)
      7865  FORMAT(5X,E17.9)
          WRITE(3,1040) SQTOT, SQPAR, SQD
      1040  FORMAT(5X,'SQTOT=',F10.3,2X,'SQPAR=',F10.3,2X,'SQD=
          *',F10.3,/)
          WRITE(3,1050) R2
      1050  FORMAT(10X,'R2=',F15.6,/)
          WRITE(3,9876)
      9876  FORMAT(20X,'METHODO DE NEWTON',/)
          WRITE(3,150) AA1, CC1, PPK1, ITER
      150  FORMAT(5X,'A=',F15.5,2X,'C=',F15.7,2X,'K=',F15.7,2X,
          *'ITER=',I3,/)
          WRITE(3,750)

```

PROGRAMA 3 (continuação)

```
750  FORMAT(5X,'X',11X,'Y',15X,'YEST',13X,'DESV')
      WRITE(3,850)
850  FORMAT(2X,52('-'))
      DO 72 I=1,N
72   WRITE(3,950)X(I),Y(I),YEST(I),DESV(I)
950  FORMAT(2X,F6.1,2X,F15.5,2X,F15.5,2X,F15.8)
      WRITE(3,850)
7    CONTINUE
      GO TO 1001
      END
```

PROGRAMA 4

```

C           MÉTODO DE GAUSS-NEWTON

C           CALCULA ESTIMATIVAS DOS PARAMETROS DA FUNÇÃO-
C            $Y=A*(1-10**(-CX))*10**(-KX**2)$ 
C           N=NUMERO DE OBSERVAÇÕES
C           N1=NÚMERO DE EQUAÇÕES
C           AO,CO,PKO SÃO OS VALORES INICIAIS DOS PARAMETROS
C           UTILIZA SUBROTINA PIRI 1
C           N NUMERO DE OBSERVAÇÕES.
C           N1 NUMERO DE EQUAÇÕES
C           DIMENSION A(49),L(7),M(7),TOT(10),X1(10),X(50),Y(50
*) ,V(10),A1(10),C1(10),PK1(10),Q(10),YEST(50),DESV(5
*) ,VALI(10),SN(50)
C           LE OS VALORES INICIAIS, O NUMERO DE OBSERVAÇÕES E O
C           NUMERO DE EQUAÇÕES
1001  READ(2,100)N,N1,AO,CO,PKO
100   FORMAT(2I5,3F10.0)
C           LE AS VARIÁVEIS INDEPENDENTES
      READ(2,101)(X(I),I=1,N)
101   FORMAT(10F8.0)
C           LE AS VARIÁVEIS DEPENDENTES
      READ(2,103)(Y(I),I=1,N)
103   FORMAT(10F8.0)
      N2=N1*N1
      ITER=0
      IP=1
500   CONTINUE
      DO 96 I=1,3
        PK1(I)=0
        C1(I)=0
        Q(I)=0
        V(I)=0
96    A1(I)=0
        SQ=0
      DO 77 I=1,N
77    SQ=SQ+(Y(I)-AO*(1-10**(-CO*X(I)))*10**(-PKO*X(I)**2
*) )**2
      WRITE(3,8585)SQ,ITER
8585  FORMAT(3X,'SQ=',F15.6,5X,'ITER=',I5./)
      WRITE(3,313)AO,CO,PKO
3131  FORMAT(5X,'AO=',F15.5,5X,'CO=',F15.6,'PKO=',F15.6)
      DO 4 J=1,N2
4     A(J)=0
      DO 3 J=1,N1
3     TOT(J)=0
C.....CALCULO DA MATRIZ N
      DO 5 I=1,N
        CIDA=10.**(-CO*X(I))

```

PROGRAMA 4 (continuação)

```

      CASO=10.**(-PKO*X(I)**2)
      F1=(1-CIDA)*CASO
      F2=X(I)*AO*CASO*ALOG(10.)
      F3=-X(I)**2*AO*CASO*ALOG(10.)*(1-CIDA)
      A(1)=A(1)+F1**2
      A(2)=A(2)+F1*F2
      A(3)=A(3)+F1*F3
      A(4)=A(2)
      A(5)=A(5)+F2**2
      A(6)=A(6)+F2*F3
      A(7)=A(3)
      A(8)=A(6)
      A(9)=A(9)+F3**2
C .....CALCULO DO VETOR Q
      TOT(1)=TOT(1)+(Y(I)-AO*F1)*F1
      TOT(2)=TOT(2)+(Y(I)-AO*F1)*F2
5     TOT(3)=TOT(3)+(Y(I)-AO*F1)*F3
      DO 6 I=1,N2
6     SN(I)=A(I)
C .....INVERSÃO DA MATRIZ N
      CALL MINV(a,N1,D,L,M)
      GO TO (501,502),IP
501   I1=0
      DO 1 I=1,N1
C .....CALCULO DO VETOR SOLUÇÃO D
      X1(I)=0
      I1=I1+N1
      DO 1 J=1,N1
      I2=I1-N1
      I3=J+I2
1     X1(I)=X1(I)+A(I3)*TOT(J)
      V1=X1(1)*(-2*TOT(1))+X1(2)*(-2*TOT(2))+X1(3)*(-2*TO
      *T(3))
C .....CALCULO ROO PARA OBTEN UM PASSO ACEITAVEL
      RMIN=0.0000000001
      RMAX=10.**20
      VALI(1)=AO
      VALI(2)=CO
      VALI(3)=PKO
      DO 19 J=4,10
19    VALI(J)=0
      J=1
      CALL PIRI1(SQ,X1,X,Y,N,V1,VALI,RMAX,RMIN,J,RO1)
C .....NOVAS ESTIMATIVAS DOS PARAMETROS
      AA1=AO+RO1*X1(1)
      CC1=CO+RO1*X1(2)
      PPK1=PKO+RO1*X1(3)

```

PROGRAMA 4 (continuação)

```

          IF (PPK1) 49,7474
49      PPK1=PKO-0.1*PKO
74      CONTINUE
C .....TESTE DE FINALIZAÇÃO DO PROCESSO
          ERRO1=(AO+0.001)*0.0001
          ERRO2=(CO+0.001)*0.0001
          ERRO3=(PKO+0.001)*0.0001
          TEST1=ABS(AA1-AO)
          TEST2=ABS(CC1-CO)
          TEST3=ABS(PPK1-PKO)
          IF (TEST1-ERRO1) 11,11,12
11      IF (TEST2-ERRO2) 13,13,12
13      IF (TEST3-ERRO3) 14,14,12
C .....INICIO DE UMA NOVA ITERAÇÃO
12      AO=AA1
          CO=CC1
          PKO=PPK1
          ITER=ITER+1
          GO TO 500
14      IP=2
C .....SOLUÇÃO FINAL
          AO=AA1
          CO=CC1
          PKO=PPK1
          GO TO 500
502     CONTINUE
          WRITE(3,7070)
7070    FORMAT(25X,'GAUSS NEWTON',/)
          SQD=0
          SQTOT=0
          DO 10 I=1,N
          YEST(I)=AA1*(1-10**(-CC1*X(I)))*10**(-PPK1*X(I)**2)
          DESV(I)=Y(I)-YEST(I)
          SQD=SQD+DESV(I)**2
10      SQTOT=SQTOT+Y(I)**2
          SQPAR=SQTOT-SQD
          R2=SQPAR/SQTOT
          WRITE(3,1010) (SN(I),I=1,9)
          WRITE(3,8)
          WRITE(3,1010) (A(I),I=1,9)
1010    FORMAT(5X,3E17.10)
          WRITE(3,8)
          8      FORMAT(1X,/)
          WRITE(3,777) (TOT(I),I=1,3)
777     FORMAT(5X,E17.10)

```

PROGRAMA 4 (continuação)

```
      WRITE(3,9595)ITER
9595  FORMAT(5X,ITERAÇÃO=' ',14./)
      WRITE(3,750)
750   FORMAT(30X,60)('-')
      WRITE(3,850)
850   FORMAT(T32,'X',T44,'Y',T65,'YEST',T81,'Y-YEST')
      WRITE(3,750)
      DO 72 I=1,N
72    WRITE(3,950)X(I).Y(I),YEST(I),DESV(I)
950   FORMAT(T31.F6.1,T24,F15.5,T54,F18.5,T72,F18.5)
      WRITE(3,750)
      WRITE(3,5002)R2
5002  FORMAT(2X,'R2=',F15.6,/)
      WRITE(3,5001)SQTOT,SQPAR,SQD
5001  FORMAT(2X,'SQTOT=',F15.3,'SQPAR=',F15.3,'SQD=.F10.
      *3,/)
      GO TO 1001
      END
```

PROGRAMA 5

```

C             METODO DE MARQUARDT
C             CALCULA ESTIMATIVAS DOS PARAMETROS DA FUNÇÃO
C              $Y=A*(1-10**(-CX))*10**(-KX**2)$ 
C             AO,CO,PKO SÃO OS VALORES INICIAIS DE A,C,K.
C             NUMERO DE OBSERVAÇÕES
C             N1 NUMERO DE EQUAÇÕES
C             UTILIZA SUBROTINA PIRI 1
C             DIMENSION A(49),P(49),B(49),L(7),M(7),Q(10),X1(10),
C             *X(50),Y(50),YEST(50),DESV(50),VALI(10),SN(50)
C             LE OS VALORES INICIAIS, O NUMERO DE OBSERVAÇÕES E O
C             NUMERO DE EQUAÇÕES
1001 READ(2,100)N,N1,AO,CO,PKO
100  FORMAT(215,3F10.0)
C             LE AS VARIÁVEIS INDEPENDENTES
C             READ(2,101) (X(I),I=1,N)
101  FORMAT(10F8.0)
C             LE AS VARIÁVEIS DEPENDENTES
C             READ(2,102) (Y(I),I=1,N)
102  FORMAT(10F8,0)
C             N2=N1*N1
C             ITER=0
C             IP=1
C             SLAMB=0.01
500  SQ=0
C             DO 1 I=1,N
1    SQ=SQ+(Y(I)-AO*(1-10**(-CO*X(I)))*10**(-PKO*X(I)**2
C             *))*2
C             WRITE(3,200)SQ,ITER
200  FORMAT(5X,'SQ=',F15.8,5X,'ITERV',14)
C             WRITE(3,201)AO,CO,PKO
201  FORMAT(5X,'AO=',F15.,',CO=',F15.9,'PKO=',F15.10)
C             DO 93 J=1,N1
93   Q(J)=0
C             DO 94 J=1,N2
94   A(J)=0
C .....CALCULO DA MATRIZ N
C             DO 95 I=1,N
C             CIDA=10**(-CO*X(I))
C             CASO=10**(-PKO*X(I)**2)
C             F1=(1-CIDA)*CASO
C             F2=X(I)*AO*CIDA*CASO*ALOG(10.)
C             F3=-X(I)**2*A)*CAS)*ALOG(10.)*(1-CIDA)
C             A(1)=A(1)+F1**2*2
C             A(2)=A(2)+F1*F2*2
C             A(3)=A(3)+F1*F3*2
C             A(4)=A(2)

```

PROGRAMA 5(continuação)

```

      A(5)=A(5)+F2**2*2
      A(6)=A(6)+F2*F3*2
      A(7)=A(3)
      A(8)=A(6)
      A(9)=A(9)+F3**2*2
C.....CALCULO DO VETOR Q
      Q(1)=Q(1)+(Y(I)-A0*F1)*(-2*F1)
      Q(2)=Q(2)+(Y(I)-A0*F1)*(-2*F2)
      95  Q(3)=Q(3)+(Y(I)-A0*F1)*(-2*F3)
C.....CALCULO DA MATRIZ  B=N+LP
      IF(A(1))2,3,2
      2  P(1)=ABS(A(1))
      GO TO 300
      3  P(1)=1
      300 IF(A(5)) 4,5,4
      4  P(5)=ABS(A(5))
      GO TO 301
      5  P(5)=1
      301 IF(A(9))6,7,6
      6  P(9)=ABS(A(9))
      GO TO 302
      7  P(9)=1
      302 P(2)=0
      P(3)=0
      P(4)=0
      P(6)=0
      P(7)=0
      P(8)=0
      DO 8 I=1,N2
      8  B(I)=A(I)+SLAMB*P(I)
      DO 5000 I=1.9
      5000 SN(I)=B(I)
C.....INVERSÃO DA MATRIZ  B
      CALL MINV(B,N1,D,L,M)
      GO TO (501,502),IP
      501 I1=0
      DO 9 I=1,N1
C.....CALCULO DO VETOR SOLUÇÃO D
      X1(I)=0
      I1=I1+N1
      DO 9 J=1,N1
      I2=I1-N1
      I3=J+I2
      9  X1(I)=X1(I)+B(I3)*(-Q(J))
      V1=X1(1)*Q(1)+X1(2)*Q(2)+X1(3)*Q(3)
C.....CALCULO DE NOVAS ESTIMATIVAS DOS PARAMETROS

```


PROGRAMA 5 (continuação)

```

      AA1=AO+X1(1)
      CC1=CO+X1(2)
      PPK1=PKO+X1(3)
      IF(PPK1)88,89,89
88    PPK1=PKO-0.1*PKO
89    CONTINUE
      DO 10 I=1,N
C.....VERIFICA SE A SOLUÇÃO D E UM PASSO ACEITAVEL
      SQO=0
10    SQO=SQO+(Y(I)-AA1*(1-10**(-CC1*X(I)))*10**(-PPK1*X(
      *I)**2))**2
      IF(SQO-SQ)11,12,12
11    CONTINUE
      IF(0.1*SLAMB-0.0000001)80,80,81
80    SLAMB=0.0000001
      GO TO 82
81    SLAMB=0.1*SLAMB
      GO TO 82
12    CONTINUE
C.....CALCULA ROO PARA OBTER UM PASSO ACEITAVEL
      RMIN=0.0000000001
      RMAX=10.**20
      VALI(1)=AO
      VALI(2)=CO
      VALI(3)=PKO
      DO 19 J=4.10
19    VALI(J)=0
      J=1
      CALL PIRI1(SQ,X1,X,Y,N,VL,VALI,RMAX,RMIN,J,RQ1)
      AA1=AO+R01*X1(1)
      CC1=CO+R01*X1(2)
      PPK1=PKO+R01*X1(3)
      IF(PPK1)71,73,73
71    PPK1=PKO-0.1*PKO
73    CONTINUE
      SLAMB=10*SLAMB
82    CONTINUE
C.....TESTE DE FINALIZAÇÃO DO PROCESSO
      ERRO1=(AO+0.001)*0.0001
      ERRO2=(CO+0.001)*0.0001
      ERRO3=(PKO+0.001)*0.0001
      TEST1=ABS(AA1-AO)
      TEST2=ABS(CC1-CO)
      TEST3=ABS(PPK1-PKO)
      IF(TEST1-ERRO1)51,51,52
51    IF(TEST2-ERRO2)53,53,52

```

PROGRAMA 5 (continuação)

```

53 IF(TEST3-ERRO3) 54,54,52
C.....INICIO DE UMA NOVA ITERAÇÃO
52 AO=AA1
   CO=CC1
   PKO=PPK1
   ITER=ITER+1
   GO TO 500
54 IP=2
C.....SOLUÇÃO FINAL
   AO=AA1
   CO=CC1
   PKO=PPK1
   GO TO 500
502 SQD=0
   SQTOT=0
   DO 60 I=,N
   YEST(I)=AA1*(1-10**(-CC1*X(I)))*10**(-PPK1*X(I)**2)
   DESV(I)=Y(I)-YEST(I)
   SQD=SQD+DESV(I)**2
60  SQTOT=SQTOT+Y(I)**2
   SQPAR=SQTOT-SQD
   R2=SQPAR/SQTOT
   WRITE(3,6969)
6969 FORMAT(20X,'METODO DE MARQUARDT',//)
   WRITE(3,7878)
7878 FORMAT(5X,15X,'MATRIZ INVERSA',//)
   WRITE(3,801) B(I),I=1,91
801  FORMAT(5X,3E17.7)
   WRITE(3,804)
   WRITE(3,6765)
6765 FORMAT(1X,20X,'MATRIZ HESSIANA',//)
   WRITE(3,5001)(SN(I),I=1,9)
5001 FORMAT(5X,3E17.7)
804  FORMAT(1X,/)
   WRITE(3,802) (Q(I),I=1,3)
802  FORMAT(5X,E17,7,/)
   WRITE(3,1040) SQTOT,SQPAR,SQD
1040 FORMAT(5X,'SQTOT=',F10.3,2X,'SQPAR=',F10.3,2X,'SQD=
*' ,F10.3,/)
   WRITE(3,804)
   WRITE(3,1050) R2
1050 FORMAT(10X,'R2=',F15.6,/)
   WRITE(3,199)
199  FORMAT(/)
   WRITE(3,150) AA1,CC1,PPK1,ITER

```

PROGRAMA 5 (continuação)

```
150  FORMAT(5X,'A=',F15.5,2X,'C=',F15.7,2X,'K=',F15.7,2X
      *, 'ITER=',13,/)
      WRITE(3,199)
      WRITE(3,750)
750  FORMAT(5X,'X',11X,'Y',15X,'YEST',13X,'DESV')
      WRITE(3,850)
850  FORMAT(2X,52('-'))
      DO 72 I=1,N
72   WRITE(3,950)X(I),Y(I),YEST(I),DESV(I)
950  FORMAT(2X,F6.1,2X,F15.5,2X,F15.5,2X,F15.8)
      WRITE(3,850)
      WRITE(3,960)
960  FORMAT(/)
      GO TO 1001
      END
```