ESTUDO DE FUNÇÕES QUE SE AJUSTAM À MATURAÇÃO DA CANA-DE-AÇÚCAR

MARGARETH C. TOYAMA UDO

Bel. Matemática

Orientador: Prof. Dr. ROBERTO S. MORAES

Dissertação apresentada à Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", da Universidade de São Paulo, para obtenção do Título de Mestre em Agronomia - Área de Concentração Experimentação e Estatística.

PIRACICABA
Estado de São Paulo - Brasil
Maio - 1983

À Deus

*A meus pais,
meus irmãos e
meu esposo*

DEDICO.

AGRADECIMENTOS

- Ao Professor Dr. Roberto Simionato Moraes, pela orientação segura e valiosa durante todo o curso e, em especial, na realização deste trabalho.
- Aos Professores do Departamento de Matemática e Estatística da Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", USP, pelos ensinamentos transmitidos.
- Ao Professor Dr. Antonio Francisco Iemma pela revisão e pelas valiosas sugestões apresentadas na realização deste trabalho.
- Ao Professor Dr. Vivaldo Francisco da Cruz pelas valiosas sugestões apresentadas na realização deste trabalho.
- Aos colegas Eliza Helena de Souza Faria e Élio Paulo Zanta, pela amizade e troca de idéias durante o curso.
- Aos demais colegas do Curso de Pós-Graduação, pelo excelente convívio durante o curso.
- Ao meu esposo, Paulo, pelo apoio e incentivo.
- Aos colegas do Departamento de Matemática e Estatística, da Universidade Estadual de Maringá, pelo incentivo e colaboração.
- Ao CNPq, pelo auxílio financeiro prestado.
- Aos funcionários do Centro de Processamento de Dados, da Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", USP especialmente a Walter João Dihel pela constante colaboração.

À Maria Izalina Ferreira Alves, Rosa Maria Alves, Otávio Frassetto e Maria Alayde P. de Souza pela amizade.

Ao Professor Dr. Cássio R. de Melo Godói pela versão do resumo.

ÍNDICE

	Página
RESUMO	vii
SUMMARY	x
1. INTRODUÇÃO	1
1.1. Segunda Aproximação de Mitscherlich	2
1.2. Quadrático	3
1.3. Raíz Quadrada	3
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	5
2.1. Maturação da Cana-de-Açúcar	5
2.2. Equação de Mitscherlich	6
2.3. Método de Marquardt para a Estimação de Parâmetros de Modelos não-lineares	9
3. MATERIAL E MÉTODOS	12
3.1. Material	12
3.2. Métodos	13
3.2.1. Modelos	13
3.2.1.1. Estimativa dos Parâmetros ..	14
3.2.1.2. Aplicação do Método ao Modelo	24
3.2.1.3. Análise de Variância	28
3.2.1.4. Cálculo do máximo das funções	32
3.3. Programação da metodologia	34
4. RESULTADOS E DISCUSSÕES	35
4.1. Estudo dos modelos	35
4.1.1. Segunda aproximação de Mitscherlich ..	35
4.1.2. Quadrático	37
4.2. Valores iniciais da estimativa dos parâmetros do modelo $Y=A[1-10^{-C(x+b)}] \cdot 10^{-k(x+b)^2}$	37
4.3. Ajustamento aos modelos	38

	Página
5. CONCLUSÃO	46
6. BIBLIOGRAFIA	47
APÊNDICE	49

ESTUDO DE FUNÇÕES QUE SE AJUSTAM À MATURAÇÃO
DA CANA-DE-AÇÚCAR

Autora: Margareth C. Toyama Udo

Orientador: Roberto Simionato Moraes

RESUMO

A fim de verificar a melhor equação que adapta-se ao fenômeno da maturação da cana-de-açúcar, permitindo uma melhor análise do aproveitamento industrial, foram estudados três modelos, que são:

i) Segunda Aproximação de Mitscherlich:

$$Y = A[1 - 10^{-c(x+b)}] \cdot 10^{-k(x+b)^2} + e;$$

por que a porcentagem em peso de sacarose da cana-de-açúcar tem um crescimento rápido e um decréscimo mais lento.

ii) Quadrático:

$$Y = A + Bx + cx^2 + e ;$$

por ser utilizado pelos técnicos atualmente.

iii) Raiz Quadrada

$$Y = A + B + C\sqrt{x} + e ,$$

por que esta equação segue aproximadamente os dois modelos anteriores.

Para estudar os três modelos foram utilizados os resultados analíticos de Pol% cana, ou seja, a porcentagem em peso de sacarose da cana-de-açúcar, obtidos pela Usina São João, Araras (S.P.).

Inicialmente, fez-se a análise de variância em parcelas subdivididas e como a interação época x variedade (E x V) foi altamente significativa estudou-se os desdobramentos da época dentro das variedades (E d. V_i) e em seguida o efeito da regressão nos desdobramentos.

As estimativas dos parâmetros do modelo (i) foram feitas pelo método de MARQUARDT (1963); para (ii) e (iii) foram feitas pelo método dos mínimos quadrados comum, através do programa biblioteca, do Centro de Processamento de Dados da ESALQ.

Em seguida fêz-se a análise de regressão e também o gráfico para cada variedade para os três modelos e concluiu-se que:

- O modelo (ii) foi o que melhor se adaptou ao fenômeno de maturação como pode ser visto pelos valores do coeficiente de determinação (R^2), bem como visualmente pelo pró-

prio gráfico. Mas, neste modelo não é indicada a extrapolação.

- O modelo (iii) foi o que pior se comportou, não sendo portanto aconselhável a sua utilização.

- O modelo (i) teve uma adaptação pouco inferior ao quadrático, porém os problemas relativos a extrapolação são menores.

A STUDY OF FUNCTION SITTING SUGAR CANE RIPENING

Author: Margareth C. Toyama Udo

Adviser: Roberto Simionato Moraes

SUMMARY

The main purpose of this dissertation is to verify the best equation relating sugar cane ripening and time, yielding a better analysis of industrial exploitation. Three models are attacked

(i) Second Mitercherlich Approximation:

$$Y = A[1 - 10^{-c(x+b)}] \cdot 10^{-k(x+b)^2} + e ;$$

(ii) Quadratic Model

$$Y = A + Bx + Cx^2 + e$$

(iii) Square Root Model

$$Y = A + Bx + c\sqrt{x} + e$$

Analitic results of percentage of saccharose weight are used to study the three models, obtained by São João Sugar Mill, Araras (S.P.).

Initially, an analysis of variance is obtained from a split-plot design. By virtue of significance of variety x epoch component a further natural decomposition is done of epoch within varieties followed by linear regression of epochs within varieties.

Parameters estimates of model (i) is obtained by MARQUARDT (1963); for models (ii) and (iii) usual least squares method is applied.

For each model and each variety, data fitting is presented reaching the following main conclusions:

- Model (ii) is the best among the three model fitting when sugar-cane ripening is considered, conclusion based on R^2 criterion, but extrapolation is not recommended.

- Model (iii) is the worst, being your utilization not recommended.

- Model (i) is not the best but avoids extrapolation problems.

1. INTRODUÇÃO

A fim de obter o melhor rendimento industrial de açúcar e álcool da cana-de-açúcar é necessário conhecer o seu estágio de maturação. Este estágio é verificado pelos teores de sacarose e açúcares redutores que se apresentam no decorrer do período de safra.

Porém, é necessário saber qual o comportamento varietal em relação ao teor de sacarose durante o período de aproveitamento industrial. Para todas as variedades este período, inicia-se quando o teor de sacarose está ao redor de 13%. Com base na duração do período de aproveitamento industrial, as variedades podem ser classificadas em longos, médios e curtos.

Variedades precoces são as que apresentam um teor mínimo de sacarose para a moagem no início da safra.

Variedades médias são as que se apresentam em estágio de maturação para a moagem no meio da safra.

Variedades tardias são aquelas que podem ser industrializadas no final da safra.

Entretanto, há uma tendência para a substituição dos conceitos de precoce, média e tardia por rica, média e pobre em sacarose, respectivamente. Isto porque em qualquer época da safra, uma variedade precoce apresenta teores de sacarose mais elevados do que as variedades médias e tardias, e as médias, por sua vez, são mais ricas do que as tardias.

Toda curva de maturação de uma determinada variedade de cana-de-açúcar tende a mudar de uma safra a outra, mas manterá sempre um estágio idêntico dentro dos conceitos citados anteriormente.

O principal objetivo deste trabalho é a determinação das equações das curvas de maturação para verificar qual delas melhor adapta-se ao fenômeno, permitindo uma melhor análise do aproveitamento industrial destas variedades. Este aumento na eficiência da agro-indústria é de grande importância para o país seja na produção de açúcar, seja na de álcool. Com este objetivo serão estudados três modelos, procurando-se determinar qual deles melhor ajusta-se ao fenômeno que são:

1.1. Segunda Aproximação de Mitscherlich

Neste modelo a porcentagem em peso de sacarose da cana-de-açúcar (Pol% cana) tem crescimento rápido seguido de um decréscimo mais lento. Ou seja,

$$Y = A [1 - 10^{-c(x+b)}] \cdot 10^{-k(x+b)^2} + e;$$

onde Y é o valor de Pol% cana, x os meses, k (conhecido como fator de prejuízo), c e b são os parâmetros. Como o modelo é não-linear, os parâmetros serão estimados pelo método de MARQUARDT (1963), que consiste na combinação dos métodos de linearização e "steepest-descendent".

1.2. Quadrático

Este modelo é utilizado atualmente pelos técnicos. Nele a porcentagem em peso de sacarose de cana-de-açúcar tem crescimento e decréscimo iguais em torno do seu ponto de máximo. Ou seja,

$$Y = A + Bx + Cx^2 + e;$$

onde Y é o valor de Pol% cana, x os meses e A,B,C são os parâmetros.

1.3. Raiz Quadrada

Este modelo segue, aproximadamente os dois modelos anteriores. É dada por:

$$Y = A + Bx + C \sqrt{x} + e$$

onde Y é o valor de Pol% cana, x os meses e A , B , C são os pa
râmetros.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1. Maturação da Cana-de-açúcar

BRIEGER (1964), afirma que o melhor método para a determinação do estágio de maturação da cana-de-açúcar consiste na análise laboratorial do caldo.

O autor afirma ainda que para pequenas indústrias, fornecedores de cana-de-açúcar e organizações que não dispõem de laboratório, a determinação do teor de sacarose pode ser feita utilizando-se o refratômetro de campo, efetuando-se a leitura do Brix Refratométrico. A refração da luz através desse caldo determinará a quantidade de sólidos existentes, cujo valor é aproximadamente igual ao teor de sacarose. O mínimo recomendado na leitura do refratômetro é 18º Brix, para aconselhar o corte do canavial.

BRIEGER (1965), apresentou os resultados de três anos de estudos, com quinze variedades de cana-de-açúcar,

do teor de sacarose determinados quinzenalmente de abril a novembro, também afirma que as variedades reagem diferentemente ao fator clima com relação ao amadurecimento permitindo classificá-las em precoces, médias e tardias.

O autor chamou de Período Útil de Industrialização (P.U.I.) o compreendido entre os teores de sacarose na cana de 12% a 16%. Recomendou escolher as variedades em função do P.U.I., sendo preferível os precoces de P.U.I. longo, pois a indústria terá possibilidade de moer a cana dessas variedades desde o início até o fim da safra.

MIOQUE (1968) afirma que o fator mais importante para se obter alto rendimento industrial é a utilização de matéria prima rica em sacarose; logo, o período de safra deve coincidir com a época da maturação mais completa da cana-de-açúcar.

O autor apresenta também o diagrama do P.U.I. de diversas variedades da cana-de-açúcar

2.2. Equação de Mitscherlich

Segundo SILVA (1978), Mitscherlich apresentou, em 1909 o modelo:

$$Y = A [1 - 10^{-c(x+b)}], \quad (2.2.1.)$$

onde x representa a dose de nutriente e Y a produção.

Nesta equação quando as doses de nutriente crescem, cresce tam bém a produção.

Segundo SILVA (1978), Mitscherlich, apresentou em 1928 a segunda aproximação:

$$Y = A \{ 1 - 10^{-c (x+b)} \} \cdot 10^{-k (x+b)^2}; \quad (2.2.2.)$$

onde k é o fator de prejuízo. O autor desenvolveu este modelo já que a equação (2.2.1.) não explica o fato da produção decrescer para doses de nutrientes excessivamente altas.

A partir da equação diferencial:

$$\frac{1}{Y} \frac{dy}{dx} = c_1 \frac{10^{-cx}}{1 - 10^{-cx}} - 2 kx \quad (2.2.3.)$$

chega-se a equação (2.2.2.).

PIMENTEL GOMES e MALAVOLTA (1949) demonstraram a primeira e a segunda aproximação de Mitscherlich.

A partir da equação diferencial:

$$\frac{dy}{dx} = k (A - y);$$

onde y é a produção da planta, x a quantidade de fertilizante assimilável à sua disposição, A e k são constantes positivas, demonstrara a primeira aproximação, dada por (2.2.1.). Esta equação supõe sempre uma produção máxima inatingível.

Em seguida, apresentaram a partir da equação diferencial:

$$\frac{1}{y} \frac{dy}{dx} = c_1 \cdot \frac{10^{-cx}}{1 - 10^{-cx}} - 2 kx$$

como chega-se a segunda aproximação de Mitscherlich.

Os autores afirmaram que os dados de adubação adaptaram-se melhor a segunda aproximação de Mitscherlich. Mas ela apresenta o inconveniente de ter um parâmetro a mais. Além disso, o efeito do fator $10^{-k(x+b)^2}$ só inicia-se para valores relativamente grandes de x , isto é, para adubações excessivamente pesadas. Portanto, excluindo-se os casos extremos é sempre preferível utilizar-se de (2.2.1.). A partir dessa conclusão, os autores, passaram a estudar apenas a equação (2.2.1.) e apresentaram o cálculo dos três parâmetros: A , c e b .

Segundo SILVA (1978), Mitscherlich apresentou em 1954 a importância da segunda aproximação, equação (2.2.2), pois através dela pode-se efetuar um estudo mais realista. Nessa aproximação pode-se determinar quando o efeito do adubo torna-se prejudicial à planta.

O autor mostrou que a curva resposta nesse caso atinge o máximo passando daí a decrescer de maneira muito lenta, sem apresentar nenhuma maneira de se estimar os parâmetros.

PIMENTEL GOMES e NOGUEIRA (1975) mostraram a partir do exemplo de regressão quadrática, o perigo da extrapolação, pois esta pode conduzir a absurdos. Isto se verifica, pois após certo período a curva de produção cai rapidamente; o que não ocorre na realidade. Por isso, os autores recomendaram a primeira aproximação de Mitscherlich, para este caso, já que até certo ponto, sua curva resposta permite extrapolação.

SILVA (1978) estudou três modelos:

$$i) Y = A (1 - 10^{-c (x+b)}) + e;$$

$$ii) Y = A (1 - 10^{-c (x+b)}) 10^{-k (x+b)^2} + e;$$

$$iii) Y = A + Bx + Cx^2 + e.$$

aplicados à dados de adubação de trigo.

A autora concluiu que a equação (ii) foi a que melhor se ajustou, principalmente quando há aplicação de altas doses de fertilizantes o que acarreta uma queda na produção.

2.3. Método de MARQUARDT para a Estimação de Parâmetros de Modelos não-lineares

MARQUARDT (1963) introduziu um novo método para a estimação de parâmetros, para modelos não-lineares. O mé

todo é uma conciliação entre "steepest-descendent" e o de linearização.

Vários autores têm utilizado este método dentre eles SALVIANO (1973) apresentou o modelo não-linear:

$$Y_t = \alpha \cdot \beta^{x_t} + E_t ; t = 1, 2, \dots, n.$$

onde $\beta = 1 + i$, sendo i uma constante desconhecida, x é um valor fixo; Y é a variável aleatória, e α, β são os parâmetros a serem estimados e E_t é o erro aleatório do modelo. Para a solução do problema o autor estudou três métodos:

- i) de Gauss-Newton,
- ii) do Gradiente e
- iii) de Marquardt.

Desses processos o autor afirmou ser o terceiro o melhor método, pois elimina as desvantagens dos dois outros, isto é, sempre alcança a estimação desejada e usa um número mínimo de iterações. BARD (1974) estudou os métodos de Newton, Gauss-Newton e Marquardt. Apresentou todo o desenvolvimento teórico dos mesmos e um exemplo numérico. O autor afirmou ser o último método de grande utilidade prática. SILVA (1980) estudou três métodos de estimação de parâmetros do modelo:

$$Y = A [1 - 10^{-cx}] \cdot 10^{-kx^2} + e$$

aplicados a dados de maturação da cana-de-açúcar cujos métodos são Newton, modificados de Gauss-Newton e Marquardt. A autora concluiu que o último método é mais apropriado para o modelo, pois conduz a uma soma de quadrados dos desvios de resíduos menores que os demais. Além disso, na maioria dos casos este método apresentou um número menor de iterações.

Portanto, como o método conduz a bons resultados será feita a utilização do mesmo.

3. MATERIAL E MÉTODOS

3.1. Material

Os dados foram gentilmente cedidos pela Cooperativa Central dos Produtores de Açúcar e Alcool do Estado de São Paulo (COPERSUCAR). Estes dados são resultados analíticos de Pol% cana, que é a porcentagem em peso de sacarose, determinada através de métodos apropriados como pode ser visto em publicação da C.T.C. - COPERSUCAR (1980).

Na tabela 11, do apêndice, são apresentados os resultados analíticos de Pol% cana em ensaios de competição de variedades de cana-de-açúcar. Estes experimentos foram conduzidos na Usina São João, Araras (S.P.), no ano agrícola de 1979 com cana-planta das variedades CB40-13, CB41-76, CB-53-98, CB47-355, CP51-22, IAC48/65, IAC52/150 e Na56-79. Para cada variedade são dados três repetições de Pol% cana, onde cada repetição é uma análise tecnológica de uma amostra de quinze colmos escolhidos ao acaso, por toda a área. Cada uma dessas amostras foram realizadas no mesmo dia ou no máximo vinte e quatro horas após a coleta,

pois caso contrário, os resultados analíticos poderiam estar totalmente comprometidos.

3.2. Métodos

3.2.1. Modelos

Os modelos a serem testados são:

$$(3.2.1.a) \quad Y_i = A [1 - 10^{-c(x_i+b)}] 10^{-k(x_i+b)^2} + e_i$$

onde: Y_i é a porcentagem de sacarose contida na cana-da-açúcar
(Pol% cana)

x_i é o mês onde se determina o Pol% cana

A, b, c e k são os parâmetros da função.

e_i é o erro aleatório, onde $e_i \sim N(0, \sigma^2)$

$$(3.2.1.b) \quad Y_i = A + Bx_i + Cx_i^2 + e_i$$

onde: Y_i é a porcentagem de sacarose contida na cana-de-açúcar
(Pol% cana).

x_i é o mês onde se determina o Pol% cana.

A, B, C são os parâmetros da função

e_i é o erro aleatório, onde $e_i \sim N(0, \sigma^2)$.

$$(3.2.1.c) \quad Y_i = A + Bx_i + C\sqrt{x_i} + e_i.$$

onde: Y_i é a porcentagem de sacarose contida na cana-de-açúcar (Pol% cana).

x_i é o mês onde se determina o Pol% cana.

A, B e C são os parâmetros da função.

e_i é o erro aleatório, onde $e_i \sim N(0, \sigma^2)$

3.2.1.1. Estimativa dos Parâmetros

3.2.1.1.1. Método para o ajuste de funções

lineares nos parâmetros pelo método dos mínimos quadrados

Para o cálculo da estimativa dos parâmetros, de funções lineares nos parâmetros, aplica-se o método dos mínimos quadrados, aos modelos 3.2.1.b e 3.2.1.c.

Dados n pares de valores (x_i, Y_i) ; $i=1,2,\dots,n$, tem-se que x_i representa os meses, enquanto Y_i é a quantidade de Pol % cana, no respectivo mês. Então, a equação na forma geral será:

$$Y = X\beta + \epsilon$$

onde:

$$X = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 \\ 1 & x_2 & x_2^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 \end{pmatrix}, \text{ para o modelo quadrático e}$$

$$X = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & \sqrt{x_1} \\ 1 & x_2 & \sqrt{x_2} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_n & \sqrt{x_n} \end{pmatrix}, \text{ para o modelo} \\ \text{raiz quadrada,}$$

β é o vetor dos parâmetros, ε o vetor de erros e Y é o vetor das quantidades analíticas de Pol % cana.

Aplicando o método dos mínimos quadrados tem-se o sistema de equações normais cuja solução é:

$$\hat{\beta} = (X'X)^{-1} X'Y,$$

que fornece a estimativa dos parâmetros.

Para o modelo 3.2.1.a os parâmetros serão estimados pelo método de Marquardt, apresentado a seguir.

3.2.1.1.2. Método de Marquardt para o ajuste de funções de regressão não linear

Este método foi desenvolvido por MARQUARDT (1963), e através dele serão estimados os parâmetros do modelo 3.2.1.a.

Os vários métodos de estimativa dos parâmetros não-lineares por mínimos quadrados são baseados em duas apro-

ximações. Por um lado o método de linearização e por outro o do "steepest-descendent".

O método de Marquardt representa uma ótima interpolação entre os métodos de linearização e "steepest-descendent".

Exposição do modelo

Seja o modelo:

$$\begin{aligned} Y_i &= f(x_1, x_2, \dots, x_m; \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_k) + e_i \\ &= f(x, \beta) + E, \end{aligned} \quad (3.2.1.1.2.a)$$

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

x_k são as variáveis independentes, $k = 1, 2, \dots, m$
 β_i são valores populacionais de k -parâmetros e
 e_i são os erros aleatórios independentes, ou de
 $e_i \cap N(0, \sigma^2)$, para todo i .

Indicam-se os pontos dados por:

$$(Y_i; x_{1i}; x_{2i}, \dots, x_{mi}), \text{ para } i = 1, 2, \dots, n,$$

cujo problema é minimizar a função $\phi(\beta)$ dada por:

$$\phi(\beta) = \sum_{i=1}^n [Y_i - f(x_{ik}, \beta)]^2 \quad (3.2.1.1.2.b)$$

Método

Inicialmente toma-se o desenvolvimento da fun-

çãõ $f(x, \beta)$ pela s\u00e9rie de Taylor atrav\u00eas de termos lineares no ponto $\beta = \beta_0$, onde β_0 \u00e9 o ponto inicial. Da\u00ed tem-se:

$$f(x, \beta) = f(x, \beta_0) + \sum_{j=1}^k \left(\frac{\partial f_i}{\partial \beta_j} \right) (d_t)_j \quad (3.2.1.1.2.c)$$

onde $(d_t)_j = \beta_j - \beta_0$

Substituindo-se, agora, este resultado em (3.2.1.1.2.b) tem-se:

$$\phi(\beta) = \sum_{i=1}^n \left(y_i - f(x, \beta_0) - \sum_{j=1}^k \frac{\partial f_i}{\partial \beta_j} (d_t)_j \right)^2 \quad (3.2.1.1.2.d)$$

Agora $(d_t)_j$ aparece linearizado. Pode-se assim empregar o m\u00e9todo dos m\u00ednimos quadrados fazendo

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

Ent\u00e3o, determina-se d_t resolvendo:

$$A d_t = -q \quad (3.2.1.1.2.e)$$

onde:

$$A = 2 \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n \frac{\partial f_i}{\partial \beta_j} \cdot \frac{\partial f_i}{\partial \beta_m} \end{pmatrix}, \quad \begin{matrix} i = 1, 2, \dots, n \\ j, m = 1, 2, \dots, k \end{matrix} \quad (3.2.1.1.2.f)$$

$$q = 2 \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n (y_i - f_i) \frac{\partial f_i}{\partial \beta_j} \end{pmatrix}; \quad \begin{matrix} i = 1, 2, \dots, n \\ j = 1, 2, \dots, k \end{matrix} \quad (3.2.1.1.2.g)$$

Na prática, isto equivale a encontrar o valor correto de β por somente uma fração d_t {t é usado para designar que d foi calculado usando a série de Taylor}.

O importante é obter a direção d_t do próximo passo. O parâmetro deve ser corrigido por uma fração d_t compatível, pois pode ocorrer um passo inaceitável, fazendo com que saia da região onde $f(x, \beta)$ pode adequadamente ser representada por (3.2.1.1.2.c) causando assim a divergência do processo. Vários métodos tomam o tamanho do passo como $\rho \cdot d_t$, $0 \leq \rho \leq 1$; já que a direção é especificado por d_t . Assim a divergência raramente ocorre.

O método "steepest-descendent" por contraste simplesmente, toma a direção do gradiente negativo de $\phi(\beta)$, assim:

$$d_g = - \left(\frac{\partial \phi}{\partial \beta_1}, \frac{\partial \phi}{\partial \beta_2}, \dots, \frac{\partial \phi}{\partial \beta_k} \right)';$$

onde: ' indica a matriz transposta.

Tanto no método de linearização como no "steepest-descendent" é necessário o controle cuidadoso do tamanho do passo. Ainda assim, a convergência é lenta em muitos casos.

No algoritmo a ser descrito, a direção e o tamanho do passo são determinados simultaneamente.

Base Teórica do Algoritmo de Determinação
de Direção e Tamanho do Passo

A base teórica do algoritmo está contida em vários teoremas, sendo que os teoremas 1 e 2 são devidos a Morrison e citados por MARQUARDT (1963), onde são apresentadas as demonstrações.

Teorema 1: Seja $\lambda \geq 0$ arbitrário e $\underline{d}_0$ satisfazendo a equação:

$$(A + \lambda I) \underline{d}_0 = -q \quad (3.2.1.1.2.h)$$

Então $\underline{d}_0$ minimiza $\phi(X, \beta)$ na esfera cujo raio $\|\underline{d}\|$ satisfaz,

$$\|\underline{d}\|^2 = \|\underline{d}_0\|^2 ;$$

onde $\|\quad\|$ é a indicação de norma.

Teorema 2: Seja $\underline{d}(\lambda)$ a solução de (3.2.1.1.2.h) para um dado valor de λ . Então $\|\underline{d}(\lambda)\|^2$ é uma função decrescente contínua de λ , tal que quando $\lambda \rightarrow \infty$, $\|\underline{d}(\lambda)\|^2 \rightarrow 0$.

Teorema 3: Seja γ o ângulo entre $\underline{d}_0$ e $\underline{d}_g$. Então γ é uma função monótona decrescente e contínua de λ , tal que, quando $\lambda \rightarrow \infty$, $\gamma \rightarrow 0$. Desde que $\underline{d}_g$ é independente de λ , isto segue que $\underline{d}_0$ sofre uma rotação na direção de $\underline{d}_g$, com $\lambda \rightarrow \infty$.

Construção do Algoritmo

A solução, d_t , de (3.2.1.1.2.e) tem a propriedade de ser invariante por transformações lineares no espaço dos parâmetros β , o que não ocorre com o método "steepest-descent". Então é necessário criar uma escala para o espaço dos parâmetros β . De maneira conveniente MARQUARDT (1963) sugere a seguinte escala,

$$(A + \lambda B^2) d = -q \quad (3.2.1.1.2.i)$$

onde a matriz B é definida como:

$$B = (b_{ii}) = \begin{cases} (a_{ii})^{1/2}, & \text{se } a_{ii} \neq 0, \\ 1 & , \text{ se } a_{ii} = 0 \end{cases} \quad (3.2.1.1.2.j)$$

ao invés de se tomar o sistema dado em (3.2.1.1.2.e).

Portanto, B^2 é uma matriz diagonal cujos elementos coincidem com o valor absoluto dos elementos da diagonal de A. Em seguida, pré-multicando-se o sistema (3.2.1.1.2.i) por $(A + \lambda B^2)^{-1}$ tem-se:

$$d = -(A + \lambda B^2)^{-1} \cdot q \quad (3.2.1.1.2.1)$$

que é a direção aceitável, pois $(A + \lambda B^2)^{-1}$ é uma matriz definida positiva.

Algoritmo do Método para Seleção de λ_i

- 1) Para $i=1$, inicia-se com $\lambda = 10^{-2}$.
- 2) para a i -ésima iteração. Calculam-se:

$$d = - (\hat{A}_i + \lambda B_i^2)^{-1} \cdot q_i ,$$

$$\beta^{(1)} = \beta_i + d , \quad e$$

$$\phi^{(1)} = \phi(\beta^{(1)})$$

3) se $\phi^{(1)} < \phi_i$, aceita-se $\beta_{i+1} = \beta^{(1)}$ e troca-se λ pelo $\max(0, 1.1\lambda; \epsilon)$ onde considera-se ϵ como sendo igual a 10^{-7} .

4) se $(d' \cdot q_i)^2 / [(q'_i \cdot q_i)(d' \cdot d)] < 1/2$, troca-se λ por 10.1λ e retorna-se a (2).

O presente algoritmo pode requerer cálculo de d para vários valores de λ em uma simples iteração. Isto pode ser evitado trocando-se (4) por:

4a) Encontrar um valor ρ_i suficientemente pequeno tal que:

$$\phi(\beta_i + \rho_i \cdot d) < \phi_i$$

Aceita-se $\beta_{i+1} = \beta_i + \rho_i \cdot d$ e troca-se λ por 10.1λ .

Segundo BARD (1974) o melhor valor de ρ_i é obtido tomando-se o mínimo de:

$$a + b\rho_0 + c.\rho_0^2 = \alpha,$$

onde: $a = \phi(\beta_i)$

$$b = -q'_i \cdot A^{-1} \cdot q_i = q'_i \cdot d_i$$

$$c = \phi(\beta_i + \rho_0 \cdot d_i).$$

$$c = (-q'_i d_i \rho_0 + \phi(\theta_i) - \phi(\theta_i + \rho_0 d_i)) / \rho_0^2$$

Trata-se de uma função quadrática cujo ponto estacionário é:

$$\rho = -\frac{b}{2c} = \frac{-q'_i d_i \rho_0^2}{2[-q'_i d_i \rho_0 + \phi(\theta_i) - \phi(\theta_i + \rho_0 d_i)]}$$

tomando-se ρ_0 no intervalo $0 < \rho_0 < t$, onde t é um número suficientemente grande.

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

Fim do Processo Iterativo

O processo natural para a finalização é a anulação do gradiente dg . Mas, quase sempre, os cálculos fornecem estimativas dos parâmetros muito próximas do mínimo e ainda assim, o gradiente continua com tamanho considerável tornando sua anulação impossível. Por outro lado, caso haja a divergência, o critério de finalização não funciona, tornando o processo iterativo interminável.

Logo, um critério prático é finalizar o ciclo iterativo quando as iterações suplementares falharem na mudan

ça significativa dos parâmetros. Isto é, dado um conjunto ϵ_j ($j = 1, 2, \dots, k$) aceita-se $\beta_{i+1,j}$ como a solução β^* , se:

$$|\beta_{i+1,j} - \beta_{i,j}| < \epsilon_j$$

onde $\beta_{i,j}$ é o j -ésimo componente de β_i .

Segundo MARQUARDT (1963) os valores ϵ_j devem ser pré-estabelecidos, e sugere:

$$\epsilon_j = 10^{-2}(\beta_{i,j} + 10^{-3})$$

onde o valor 10^{-3} é colocado para evitar os casos em que $\beta_{i,j}$ são próximos de zero.

Terminado o processo iterativo com $\beta = \beta^*$, deve-se saber se β^* está ou não próximo do mínimo. Assume-se então que se conhece o gradiente $q^* = q(\beta^*)$ e a matriz Hessiana $H^* = H(\beta^*)$ (Matriz das derivadas segunda) ou alguma aproximação sua. Agora, ao seccionar-se a superfície $\phi(\beta)$ ao longo dos eixos β_j , tem-se uma curva cuja equação aproximada nas vizinhanças de β^* é dada por:

$$S(\beta_j) = \beta^* + (q_j^*) \cdot (\beta_j - \beta_j^*) + \frac{1}{2} (\beta_j - \beta_j^*)' \cdot H_{j,j}^* (\beta_j - \beta_j^*)$$

cujo ponto estacionário é:

$$\beta_j = \beta_j^* - q_j^* / H_{j,j}^*$$

Portanto, o valor $d_j = |q_j^* / H_{j,j}^*|$ é uma medida de erro na determinação de β^* .

Se cada d_j é pequeno, na mesma escala na qual β_j é medido, então β^* está bem próximo do mínimo de $\phi(\beta)$.

3.2.1.2. Aplicação do Método ao Modelo

O modelo:

$$Y_i = A[1 - 10^{-c(x_i+b)}] \cdot 10^{-k(x+b)^2}$$

é uma função de uma variável independente x_i e de quatro parâmetros:

$$\beta_1 = A$$

$$\beta_2 = c$$

$$\beta_3 = b$$

$$\beta_4 = k$$

Derivando, tem-se:

$$F_1 = \frac{\partial Y_i}{\partial A} = [1 - 10^{-c(x_i+b)}] \cdot 10^{-k(x_i+b)^2}$$

$$F_2 = \frac{\partial Y_i}{\partial c} = (x_i+b) \cdot A \cdot 10^{-c(x_i+b)} \cdot 10^{-k(x_i+b)^2} \cdot L(10)$$

$$F_3 = \frac{\partial Y_i}{\partial b} = A \cdot 10^{-k(x_i+b)^2} \cdot L(10) \left(\begin{array}{l} -2k(x_i+b) + (c+2k(x_i+b)) \cdot \\ \cdot 10^{-c(x_i+b)} \end{array} \right)$$

$$F_4 = \frac{\partial Y_i}{\partial k} = -(x_i+b)^2 \cdot A[1 - 10^{-c(x_i+b)}] \cdot 10^{-k(x_i+b)^2} \cdot L(10)$$

Pode-se então construir a matriz A:

$$A = \begin{pmatrix} 2 \sum_{i=1}^n F_1^2 & 2 \sum_{i=1}^n F_1 \cdot F_2 & 2 \sum_{i=1}^n F_1 \cdot F_3 & 2 \sum_{i=1}^n F_1 \cdot F_4 \\ 2 \sum_{i=1}^n F_1 \cdot F_2 & 2 \sum_{i=1}^n F_2^2 & 2 \sum_{i=1}^n F_2 \cdot F_3 & 2 \sum_{i=1}^n F_2 \cdot F_4 \\ 2 \sum_{i=1}^n F_1 \cdot F_2 & 2 \sum_{i=1}^n F_2 \cdot F_3 & 2 \sum_{i=1}^n F_3^2 & 2 \sum_{i=1}^n F_3 \cdot F_4 \\ 2 \sum_{i=1}^n F_1 \cdot F_4 & 2 \sum_{i=1}^n F_2 \cdot F_4 & 2 \sum_{i=1}^n F_3 \cdot F_4 & 2 \sum_{i=1}^n F_4^2 \end{pmatrix}$$

onde:

$$\begin{aligned} F_1^2 &= [(1 - 10^{-c(x_i+b)}) \cdot 10^{-k(x_i+b)}]^2 \cdot L(10) \\ F_1 \cdot F_2 &= A(x_i+b) \cdot 10^{-c(x_i+b)} \cdot [1 - 10^{-c(x_i+b)}] \cdot 10^{-2k(x_i+b)} \cdot L(10) \\ F_1 \cdot F_3 &= A[-2k(x_i+b) + (c + 2k(x_i+b))] \cdot 10^{-c(x_i+b)} \cdot [1 - 10^{-c(x_i+b)}] \cdot 10^{-2k(x_i+b)} \cdot L(10) \\ F_1 \cdot F_4 &= -A(x_i+b)^2 [1 - 10^{-c(x_i+b)}] \cdot 10^{-k(x_i+b)} \cdot L(10) \\ F_2^2 &= [(x_i+b) \cdot A \cdot 10^{-c(x_i+b)} \cdot 10^{-k(x_i+b)} \cdot L(10)]^2 \\ F_2 \cdot F_3 &= A^2(x_i+b) \cdot 10^{-c(x_i+b)} \cdot \begin{pmatrix} -2k(x_i+b) + (c + 2k(x_i+b)) \cdot 10^{-c(x_i+b)} \\ 10^{-c(x_i+b)} \end{pmatrix} \cdot 10^{-2k(x_i+b)} \cdot [L(10)]^2 \end{aligned}$$

$$F_2 \cdot F_4 = -A^2 \cdot (x_i + b)^2 \cdot 10^{-c(x_i + b)} \cdot [1 - 10^{-c(x_i + b)}] \cdot 10^{-2k(x_i + b)^2} \cdot [L(10)]^2$$

$$F_3^2 = [A \cdot 10^{-k(x_i + b)^2} \cdot L(10) (-2k(x_i + b) + (c + 2k(x_i + b)) \cdot 10^{-c(x_i + b)})]^2$$

$$F_3 \cdot F_4 = -A^2 \cdot (x_i + b)^2 [-2k(x_i + b) + (c + 2k(x_i + b)) \cdot 10^{-c(x_i + b)}] \cdot [1 - 10^{-c(x_i + b)}] \cdot 10^{-2k(x_i + b)^2} \cdot [L(10)]^2$$

$$F_4^2 = [-(x_i + b)^2 \cdot A \cdot (1 - 10^{-c(x_i + b)}) \cdot 10^{-k(x_i + b)^2} \cdot L(10)]^2$$

De acordo com (3.2.1.1.2.g) fazendo

$$\hat{Y}_i = A \cdot [1 - 10^{-c(x_i + b)}] \cdot 10^{-k(x_i + b)^2},$$

tem-se:

$$q = \begin{bmatrix} 2 \sum_{i=1}^n [(Y_i - \hat{Y}_i) [(1 - 10^{-c(x_i + b)}) - 10^{-k(x_i + b)^2}]] \\ 2 \sum_{i=1}^n [(Y_i - \hat{Y}_i) [A \cdot (x_i + b) \cdot 10^{-c(x_i + b)} \cdot 10^{-k(x_i + b)^2} \cdot L(10)]] \\ 2 \sum_{i=1}^n [(Y_i - \hat{Y}_i) [(A \cdot 10^{-k(x_i + b)^2} \cdot L(10) (-2k(x_i + b) + (c + 2k(x_i + b)) \cdot 10^{-c(x_i + b)}))] \\ 2 \sum_{i=1}^n [(Y_i - \hat{Y}_i) [-A(x_i + b)^2 (1 - 10^{-c(x_i + b)}) \cdot 10^{-k(x_i + b)^2} \cdot L(10)]] \end{bmatrix}$$

Logo, de acordo com a matriz B em (3.2.1.1.2.j) chega-se ao sistema dado em (3.2.1.1.2.i).

$$\begin{pmatrix}
 2 \sum_{i=1}^n F_1^2 (1+\lambda) & 2 \sum_{i=1}^n F_1 \cdot F_2 & 2 \sum_{i=1}^n F_1 \cdot F_3 & 2 \sum_{i=1}^n F_1 \cdot F_4 \\
 2 \sum_{i=1}^n F_1 \cdot F_2 & 2 \sum_{i=1}^n F_2^2 (1+\lambda) & 2 \sum_{i=1}^n F_2 \cdot F_3 & 2 \sum_{i=1}^n F_2 \cdot F_4 \\
 2 \sum_{i=1}^n F_1 \cdot F_3 & 2 \sum_{i=1}^n F_2 \cdot F_3 & 2 \sum_{i=1}^n F_3^2 (1+\lambda) & 2 \sum_{i=1}^n F_3 \cdot F_4 \\
 2 \sum_{i=1}^n F_1 \cdot F_4 & 2 \sum_{i=1}^n F_2 \cdot F_4 & 2 \sum_{i=1}^n F_3 \cdot F_4 & 2 \sum_{i=1}^n F_4^2 (1+\lambda)
 \end{pmatrix}
 \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ d_4 \end{pmatrix}
 = -
 \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \\ q_4 \end{pmatrix}$$

Portanto, de acordo com o valor inicial (A_0, C_0, b_0, k_0) chega-se a:

$$(A + \lambda B^2) \cdot \begin{pmatrix} A - A_0 \\ c - c_0 \\ b - b_0 \\ k - k_0 \end{pmatrix} = -q$$

A matriz $(A + \lambda B^2)$ é definida positiva nas proximidades do mínimo, de modo que escolhido o valor inicial adequado chega-se ao sistema (3.2.1.1.2.1).

$$\begin{pmatrix} A - A_0 \\ c - c_0 \\ b - b_0 \\ k - k_0 \end{pmatrix} = - (A + \lambda B^2)^{-1} \cdot q$$

Em seguida faz-se um acréscimo aos valores ini
ciais.

$$\begin{pmatrix} A_i \\ C_i \\ b_i \\ k_i \end{pmatrix} = -q(A + \lambda B^2)^{-1}$$

e continua-se o processo até que o erro seja:

$$\varepsilon_{\alpha} < 10^{-2} (\beta_{i,\alpha} + 10^{-3}) ,$$

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

3.2.1.3. Análise de Variância

Os ensaios em delineamentos de blocos casualizados em parcelas subdivididas, serão analisados de modo usual segundo o esquema apresentado a seguir, na Tabela 1.

TABELA 1 - Esquema de Análise de variância em parcelas subdivididas.

Causas de variação	Grau de liberdade
Blocos (B)	$b-1$
Variedade (V)	n_a-1
Resíduo (a)	$(b-1)(n_a-1)$
Parcela	$b \cdot n_a - 1$
Época (E)	$n_b - 1$
Interação ExV	$(n_b - 1)(n_a - 1)$
Interação ExB	$(n_b - 1)(b - 1)$
Resíduo (b)	$(n_b - 1)(b - 1)(n_a - 1)$
Total	$n_a \cdot n_b \cdot b - 1$

onde: b = número de blocos
 n_a = número de tratamentos A nas parcelas, e
 n_b = número de tratamentos B nas sub-parcelas.

Através da análise anterior verifica-se o efeito da interação ExV é significativa, e neste caso, faz-se o desdobramento em época dentro de variedade, como se vê na Tabela 2.

TABELA 2 - Esquema de análise de variância com desdobramento da época dentro de variedade.

Causas de variação	Graus de liberdade
Blocos	$b-1$
Variedade	n_a-1
Resíduo (a)	$(b-1)(n_a-1)$
Parcela	$b.n_a-1$
Época d. var. 1	n_b-1
Época d. var. 2	n_b-1
	$\vdots$
Época d. var. n_b	n_b-1
Resíduo (b)	$(n_b-1)(b-1)(n_a-1)$
Total	$n_a.n_b.b-1$

Obtidos os desdobramentos, caso a época dentro da variedade seja significativa faz-se a análise de variância levando-se em conta a regressão como é apresentada na Tabela 3.

TABELA 3 - Esquema da análise de variância levando-se em conta a regressão.

Causas da variação	Graus de liberdade
Regressão	$p-1$
Desvio de regressão	n_b-p
Época d. var. i	n_b-1
Resíduo (b)	$(n_b-1)(n_a-1)(b-1)$

onde p é o número de parâmetros do modelo de regressão.

Para a segunda aproximação de Mitscherlich a soma dos quadrados dos desvios de regressão serão dados por:

$$SQ \text{ Desv.} = r \cdot \sum_{i=1}^{na} (\bar{Y}_i - \hat{\bar{Y}}_i)^2$$

E a soma dos quadrados de regressão será dada por:

$$SQ \text{ Reg.} = SQ \text{ Época d. Var. } i - SQ \text{ Desv. Reg.}$$

E, para o modelo quadrático e raiz quadrada a soma dos quadrados de regressão serão dados por

$$SQ \text{ Reg.} = r(\hat{\beta}'x'Y - C),$$

e a soma dos quadrados dos desvios de regressão por:

$$SQ \text{ Desv. Reg.} = SQ \text{ Época d. Var. } i - SQ \text{ Reg.}$$

Quanto ao coeficiente de determinação R^2 , serão calculados por:

$$R^2 = \frac{SQ \text{ Reg.}}{SQ \text{ Época d. Var. } i}$$

por que o resíduo não se confunde com os desvios de regressão.

3.2.1.4. Cálculo do máximo das funções

3.2.1.4.1. Modelo: segunda aproximação de Mitscherlich

Obtém-se numericamente o máximo da função a partir do teorema de Rolle.

Algoritmo utilizado no cálculo do máximo da função:

Calcula-se o valor de Pol % cana máximo utilizando-se o computador. Para tanto, verifica-se em que ponto a função muda de crescente para decrescente. Para isso, inicia-se o processo tomando-se um valor Δx arbitrário de distanciamento de ponto. A partir do valor inicial x acrescentamos a ele o valor Δx , verificando em cada ponto o sinal de ΔY . Quando há uma mudança de sinal, repete-se o processo tomando-se como Δx o valor $\Delta x/2$ e como x inicial o x anterior a mudança de sinal. Repete-se este processo até obter $|\hat{Y}_{i+1} - \hat{Y}_i| < 10^{-7}$; isto é, até que a diferença entre o passo atual e o anterior seja menor que 10^{-7} .

3.2.1.4.2. Modelo quadrático

Para este modelo calcula-se o máximo pelo método usual, ou seja, fazendo-se a derivada tem-se então:

$$Y' = B + 2Cx$$

Fazendo-se $Y' = 0$, tem-se o ponto crítico, isto é, o mês que a cana-de-açúcar fornecerá a maior porcentagem de sacarose e este mês será:

$$x = - \frac{B}{2C}$$

Agora necessita-se calcular a segunda derivada para se fazer o estudo da concavidade. Neste caso, o objetivo é que esta seja negativa assim a função atingirá o máximo, pois caso contrário teremos um mínimo. Então:

$$Y'' = 2C,$$

logo Y'' só será negativa quando $C < 0$.

Portanto, no mês de maior produção de sacarose, a produção máxima será:

$$Y = a - \frac{B^2}{4.C}$$

3.2.1.4.3. Modelo: raiz quadrada

Analogamente ao modelo (3.2.1.4.2.) tem-se:

$$Y' = B + \frac{C}{2} x^{-1/2}$$

E o ponto crítico, ou seja, o mês de maior produção de sacarose será:

$$x = \frac{C^2}{4.B^2}$$

Calculando-se a segunda derivada tem-se:

$$y'' = - \frac{1}{4} . C . x^{-3/2} ,$$

substituindo o ponto crítico calculado e acrescentando-se a restrição necessária, chega-se a conclusão que o parâmetro B deve ser negativa. E o máximo da produção será:

$$Y = A - \frac{C^2}{4B}$$

3.3. Programação da metodologia

Para atingir os objetivos propostos fez-se as programações do método de MARQUARDT (1963) para estimar os parâmetros e o cálculo do máximo da função para o modelo. Segundo aproximação de Mitscherlich em linguagem FORTRAN IV; para os outros modelos utilizou-se o programa biblioteca, do Centro de Processamento de Dados, do Departamento de Matemática e Estatística da ESALQ onde com o auxílio do computador IBM - 1130, foram realizados os processamentos.

Os dois programas desenvolvidos estão apresentados no apêndice.

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

4.1. Estudo dos modelos

Foram feitos os estudos dos modelos, a fim de verificar os sinais dos parâmetros.

Inicialmente, sabe-se que Y é positivo, nos três casos, pois não há possibilidade de termos um Pol% negativo.

4.1.1. Segunda aproximação de Mitscherlich

Aplicando log na função obtém-se:

$$\log Y = \log [A[1-10^{-c(x+b)}]] + \log 10^{-k(x+b)^2}$$

$$\log Y = \log A + \log [1-10^{-c(x+b)}] + \log 10^{-k(x+b)^2} \quad (4.1.1a)$$

Pela restrição de logarítmo, tem-se:

$$i) Y > 0$$

- ii) $A > 0$
- iii) $1 - 10^{-c(x+b)} > 0$
- iv) $10^{-k(x+b)^2} > 0$

Da restrição (iii) tem-se:

$$\frac{10^{c(x+b)} - 1}{10^{c(x+b)}} > 0, \text{ mas } 10^{c(x+b)} > 0$$

$$\text{Logo, } 10^{c(x+b)} > 1$$

Portanto $c > 0$ e $(x+b) > 0$, devido x ser também sempre positivo.

Da equação (4.1.1.a) tem-se:

$$k = \frac{1}{(x+b)^2} \left(\log A + \log (1 - 10^{-c(x+b)}) - \log Y \right)$$

Como $k > 0$, devido a porcentagem de sacarose de cana-de-açúcar tender a decrescer após atingir o máximo e $(x+b)^2 > 0$, tem-se:

$$\log A + \log (1 - 10^{-c(x+b)}) - \log Y > 0$$

$$\log A > \log \frac{Y}{1 - 10^{-c(x+b)}}$$

$$A > \frac{Y}{1 - 10^{-c(x+b)}}$$

4.1.2. Quadrático

Pelo item (3.2.1.4.2.) sabe-se que Y é um valor positivo; C é negativo e a reta tangente é dada pela função:

$$Y' = B + 2Cx$$

Tem-se também, que o mês de maior percentagem de sacarose, considerando o fato de C ser negativo é:

$$x = \frac{B}{2C}$$

Porém, a partir de x maior que o ponto considerado, isto é, $x > \frac{B}{2}$, a percentagem de sacarose começa a decrescer. Analizando este fato, mais a reta tangente, pode-se ver que quanto maior o valor de C em valor absoluto, maior será a queda da função Y .

Agora, se $x = 0$, isto é, um mês antes do corte, o Pol % cana será o próprio valor de A .

Observação: Quanto ao modelo raiz quadrada não foi estudado, pois ele não apresentou-se adequado para o estudo.

4.2. Valores iniciais da estimativa dos parâmetros do modelo $Y = A[1 - 10^{-C(x+b)}] \cdot 10^{-k(x+b)^2}$

Geralmente, os modelos não lineares nos parâme

tros requerem um processo iterativo e para tal é muito importante a seleção de bons valores iniciais. Da escolha destes valores pode depender a convergência ou não do modelo, bem como a rapidez da convergência.

Apesar disso, ainda não existem algoritmos eficientes para solucionar o problema, sendo quase sempre necessário recorrer-se a intuição.

No presente trabalho, calculou-se os valores iniciais segundo BARD (1974) e com base no item anterior (4.1.1). Para cada parâmetro foi fixado um intervalo e fez-se todas as combinações possíveis calculando em cada caso a soma dos quadrados dos desvios. Através da menor soma dos quadrados dos desvios, selecionando-se os valores iniciais dos parâmetros.

4.3. Ajustamento aos modelos

Foram feitos os ajustamentos dos dados aos três modelos. Na Tabela 4, a seguir é apresentada a análise de variância, em parcelas sub-divididas, dos dados apresentados na Tabela 11, do apêndice.

Vê-se pela análise da Tabela 4 que os efeitos de variedade e da interação ExV foram altamente significativos. Isto indica que é conveniente fazer-se o desdobramento da análise conjunta o qual é apresentado a seguir na Tabela 5.

TABELA 4 - Análise de variância em parcelas sub-divididas.

Causas de Var.	G.L.	SQ	QM	F
Blocos (B)	2	0,2715	0,1357	
Variedade (V)	7	95,8755	13,6965	40,56 **
Resíduos (a)	14	4,7279	0,3377	
Parcela	23	100,8751		
Época (E)	5	392,9770	78,5954	323,55 **
Interação (ExV)	35	21,7677	0,6219	2,56 **
Resíduo (b)	80	19,4331	0,2429	
Total	143	535,0531		

TABELA 5 - Análise de variância relativa ao desdobramento da interação ExV. Época dentro de variedades.

Causas de Var.	G.L.	SQ	QM	F
Blocos	2	0,2715	0,1357	
Variedades (V)	7	95,8755	13,6965	40,56 **
Resíduo (a)	14	4,7279	0,3377	
Parcela	23	100,8751		
Época d. Var. 1	5	29,7886	5,9577	22,20 **
Época d. Var. 2	5	36,4347	7,2869	30,00 **
Época d. Var. 3	5	48,0763	9,6152	39,58 **
Época d. Var. 4	5	80,4128	16,0825	66,21 **
Época d. Var. 5	5	56,3548	11,2709	46,40 **
Época d. Var. 6	5	59,2087	11,8417	48,75 **
Época d. Var. 7	5	68,4240	13,6848	56,34 **
Época d. Var. 8	5	36,0446	7,2089	29,68 **
Resíduo (b)	80	19,4331	0,2429	
Total	143	535,0531		

Pela Tabela 5 vê-se que o desdobramento da época dentro de variedade resultou em valor de F altamente significativo, então foi feita a análise de regressão. Para tanto é necessário fazerem-se as estimativas dos parâmetros dos três modelos apresentada a seguir.

Modelo Segunda Aproximação de Mitscherlich

Como este modelo é não linear nos parâmetros, suas estimativas foram calculados pelo método de MARQUARDT (1963), descrito em (3.2.1.1.2.). Sendo que os resultados obtidos estão apresentados na Tabela 6.

TABELA 6 - Estimativas dos Parâmetros e o Número de Interações do modelo: $\hat{Y} = \hat{A} [1 - 10^{-\hat{C}(x+\hat{b})}] 10^{-\hat{k}(x+\hat{b})^2}$

Variedades	Interações	$\hat{A}$	$\hat{C}$	$\hat{b}$	$\hat{k}$
CB40-13	18	20,5170365	0,1566111	1,9101964	0,0011232
CB41-76	22	23,5619641	0,0771137	2,6344793	0,0014460
CB53-98	35	24,1039578	0,0738867	2,4749882	0,0013292
CB47-355	24	25,8821566	0,0843596	1,6244501	0,0017164
CP51-22	24	26,3361644	0,0801662	1,9143962	0,0019372
IAC48/65	24	26,5804874	0,0895819	1,5471480	0,0024533
IAC52/150	4	17,9106197	0,1983600	0,9655491	0,0006104
Na56-79	29	24,8156855	0,921987	2,5617108	0,0013762

Modelo Quadrático

Para este modelo a estimativa dos parâmetros foram calculados pelo método dos mínimos quadrados, conforme (3.2.1.1.1.) e (3.3.). E os resultados obtidos estão apresentados na Tabela 7.

TABELA 7 - Estimativa dos Parâmetros do Modelo $\hat{Y} = \hat{A} + \hat{B}x + \hat{C}x^2$

Variedades	$\hat{A}$	$\hat{B}$	$\hat{C}$
CB40-13	10,9060	2,4608	-0,2589
CB41-76	8,7250	2,1945	-0,2098
CB53-98	8,3300	2,2550	-0,1979
CB47-355	7,1840	3,1714	-0,2889
CP51-22	7,9400	2,8964	-0,2807
IAC48/65	7,5280	3,3070	-0,3407
IAC52/150	7,8460	3,1394	-0,2989
Na56-79	10,5470	2,3657	-0,2309

Modelo Raiz Quadrada

Como no modelo anterior os parâmetros foram calculados conforme (3.2.1.1.1.) e (3.3.). E na Tabela 8 estão apresentados os resultados.

TABELA 8 - Estimativa dos Parâmetros do Modelo $\hat{Y}=\hat{A}+\hat{B}x+\hat{C}\sqrt{x}$.

Variedades	$\hat{A}$	$\hat{B}$	$\hat{C}$
CB40-13	4,8959	-2,3287	10,4393
CB41-76	4,9545	-1,2982	7,0970
CB53-98	3,7142	-1,4131	8,0060
CB47-355	1,1110	-1,9493	10,8642
CP51-22	2,2640	-1,9994	10,2775
IAC48/65	0,2168	-2,7843	12,9969
IAC52/150	0,5792	-2,5060	12,4588
Na56-79	5,1484	-1,9191	9,3577

Como já foram estimados os valores dos parâmetros dos três modelos, é possível fazer o cálculo da análise da variância levando-se em conta a regressão conforme (3.2.1.3.). Para uma maior simplicidade apresentam-se os valores de F e do coeficiente de determinação (R^2), na Tabela 9.

Comparando-se as análises de regressão da Tabela 9, notou-se que o modelo quadrático apresentou valores significativos de F_{Reg} , para todas as variedades e valores significativos de $F_{Desv.Reg}$ em menor número que os demais métodos.

Ademais, os valores dos coeficientes de determinação (R^2) calculados com base nos resultados obtidos através do modelo quadrático, foram em geral maiores que os coeficientes de determinação inerentes aos outros dois modelos.

Estes fatos, sem dúvida, podem sugerir melhor adequação do modelo quadrático aos dados analisados.

Na Tabela 10 apresenta-se para os três modelos a produção máxima bem como o seu respectivo mês.

A produção máxima de sacarose foi aproximadamente igual para os três modelos. Entretanto, a obtenção desses máximos dá-se, quase sempre antes no modelo quadrático, depois na raiz quadrada, ficando a segunda aproximação de Mitscherlich num ponto intermediário.

Os gráficos das três equações para cada variedade estão no apêndice. Pelos gráficos vê-se que o modelo que mais se aproximou dos dados foi o modelo quadrático confirmando o resultado sugerido na discussão da Tabela 9. Nota-se ainda neste modelo uma queda mais rápida que os outros dois, o que prejudica qualquer extrapolação [PIMENTEL GOMES e NOGUEIRA (1975)]. Desse modo essa ação não é indicada. Quanto a segunda aproximação de Mitscherlich, apesar de ter uma adaptação um pouco pior que o quadrático, não foge muito do real observado. Este modelo não apresenta muitos problemas quanto à extrapolação. O modelo raiz quadrada tem uma adaptação pior que os demais, fugindo principalmente nos últimos pontos. Também apresenta um ponto de máximo mais deslocado para a direita, ou seja, alcançando esse ponto praticamente no final da safra.

TABELA 9 - Valores de F do efeito de regressão e desvio de regressão e o R² (coeficiente de determinação) para as variedades dos modelos: Segunda Aproximação de Mitscherlich, Quadrático e Raiz Quadrada.

Modelos	C.V.	G.L.	Variedades									
			CB	CB	CB	CB	CB	CP	IAC	IAC	Na	Na
			40-13	41-76	53-98	47-355	51-22	48-65	52-150	56-79		
Segunda	Reg.	3	56,17*	4,99	16,90	22,90*	14,86	17,28	86,97	38,13		
Aproximação de Mitscherlich	Desv.Reg.	2	0,15	7,18**	3,05	3,81*	4,05*	3,54*	0,87	1,10		
	R ²		0,9882	0,8821	0,9620	0,9717	0,9571	0,9629	0,9924	0,9828		
Quadrático	Reg.	2	608,92**	13,01*	16,00*	73,41**	41,84**	56,97**	141,41**	88,97**		
	Desv.Reg.	3	0,10	5,17**	5,65**	2,21	2,68	2,08	0,99	0,82		
	R ²		0,9975	0,8973	0,9143	0,9800	0,9654	0,9743	0,9895	0,9834		
Raiz Quadrada	Reg.	2	84,64**	8,41	16,10*	35,14**	20,94*	25,13*	185,14**	72,36**		
	Desv.Reg.	3	0,71	6,57**	5,62**	4,52*	5,16**	4,58	0,75	1,00		
	R ²		0,9826	0,8487	0,9148	0,9591	0,9332	0,9437	0,9920	0,9797		

TABELA 10 - Valores da Produção Máxima e o seu Respetivo Mês para os Três Modelos.

Variedades	$Y = \hat{A} [1 - 10^{-\hat{C}(x+\hat{b})}] \cdot 10^{-\hat{k}(x+\hat{b})^2}$				$Y = \hat{A} + \hat{B}x + \hat{C}x^2$		$Y = \hat{A} + \hat{B} + \hat{C}/\sqrt{x}$	
	x (Mês)	Y (Pol%)	x (Mês)	Y (Pol%)	x (Mês)	Y (Pol%)	x (Mês)	Y (Pol%)
CB 40-13	5,00 (Início Set)	16,63	4,75 (Fim Ago)	16,75	5,02 (Início Set)	16,20		
CB 41-76	6,00 (Início Out)	14,41	5,23 (Início Set)	14,47	7,47 (Meio Nov)	14,65		
CB 53-98	6,06 (Início Out)	14,77	5,70 (Meio Set)	14,76	8,42 (Meio Dez)	15,05		
CB 47-355	6,00 (Início Out)	15,89	5,49 (Meio Set)	15,39	7,77 (Fim Nov)	16,25		
CP 51-22	5,50 (Meio Set)	15,36	5,16 (Início Set)	15,41	6,61 (Meio Out)	15,47		
IAC 48-65	5,00 (Início Set)	15,46	4,85 (Fim Ago)	16,55	5,45 (Meio Set)	15,38		
IAC 52-150	6,02 (Início Out)	16,04	5,25 (Início Set)	16,09	6,18 (Início Out)	16,06		
Na 56-79	5,50 (Meio Set)	16,55	5,12 (Início Set)	16,61	5,94 (Fim Set)	16,56		

5. CONCLUSÃO

Os resultados obtidos na busca do modelo mais adequado para descrever o fenômeno da maturação, nas oito variedades de cana-de-açúcar estudadas, sugerem que:

1) O modelo quadrático foi o que melhor se adaptou ao fenômeno como pode ser visto pelos valores do coeficiente de determinação (R^2), bem como visualmente pelo próprio gráfico.

2) O modelo raiz quadrada foi o que pior se comportou não sendo portanto aconselhável a sua utilização.

3) O modelo segunda aproximação de Mitscherlich, teve uma adaptação inferior ao quadrático.

4) O modelo quadrático apresenta problemas na extrapolação; já na segunda aproximação de Mitscherlich esses problemas são menores.

6. BIBLIOGRAFIA

- BARD, Y., 1974. Nonlinear Parameter Estimation. Nova York. Academic Press, Inc., 341pp.
- BOLETIM c.T.C. COPERSUCAR, 1980. 37pp.
- BRIEGER, F.O., 1964. Maturação da Cana-de-Açúcar. Boletim Informativo Copereste, Ribeirão Preto, 4(s.n.).
- BRIEGER, F.O., 1965. Escolha da Melhor Época para Industrializar a Cana. Boletim Informativo Copereste, Ribeirão Preto, 4 (s.n.).
- BIEGER, F.O., 1967. Açúcar por Hectare. Boletim Informativo Copereste, Ribeirão Preto, 5 (s.n.).
- HARTLEY, H.O., 1961. The Modified Gauss-Newton Method for the Fitting of Non-Linear Regression Function by Least Squares. Technometrics, Richmond, 3: 269-280.
- MARQUARDT, D.W., 1963. An Algorithm for Least Squares. Estimation of Non-Linear Parameters. Journal Society for Industrial and Applied Mathematics, Filadelfia, 11: 431-441.

- MIOQUE, J., 1968. Aumento de Produtividade das Usinas de Açúcar. Boletim Informativo Copereste, Ribeirão Preto, 4 (s.n.)
- OLIVEIRA, E.R. de, C. CRUCCIANI, A.I. BASSINELLO e D. BARBIN, 1974a. Algumas Características Tecnológicas de 15 Variedades de Cana-de-Açúcar (Resultados Preliminares para Cana-Planta). Brasil Açucareiro, Rio de Janeiro 84(1): 34-43.
- OLIVEIRA, E.R. de, C. CRUCCIANI, A.I., BASSINELLO e D. Barbin, 1974b. Algumas Características Tecnológicas de 15 Variedades de Cana-de-Açúcar (Resultados Preliminares para Cana-Soca). Brasil Açucareiro, Rio de Janeiro 84(3): 22-32.
- PIMENTEL GOMES, F. e E. MALAVOLTA, 1949. Considerações Matemáticas sobre a Lei de Mitscherlich. Boletim nº 3, E.S.A. "Luiz de Queiroz", Piracicaba, 24pp.
- PIMENTEL GOMES, F. e I.R. NOGUEIRA, 1975. Extrapolação ou Projeção: Uma Técnica Difícil e Perigosa. Ciência e Cultura 29: 1386-1389.
- SALVIANO, A., 1973. Aspectos Metodológicos de la Construction de Modelos Estatísticos em las Ciências Sociales Chapingo, 264pp. (Dissertação de Mestrado).
- SILVA, M.A.P. da, 1978. Segunda Aproximação de Mitscherlich $Y = A[1 - 10^{-c(x+b)}] 10^{-k(x+b)^2}$, Aplicada à Adubação Mineral. Piracicaba, ESALQ/USP, 96pp. (Dissertação de Mestrado).
- SILVA, M.A.P. da, 1980. Métodos de Estimção dos Parâmetros do Modelo $Y = A[1 - 10^{-cx} \cdot 10^{-kx^2}] + e$. Aplicação a dados de Maturação da Cana-de-Açúcar. Piracicaba, ESALQ/USP, 85pp. (Tese de Doutorado).

APÊNDICE

TABELA 11 - Resultados analíticos de Pol % cana, obtidos pela Usina São João, em Araras (SP), em 1979.

variedade	Amo- stra	Maio	Junho	Julho	Agosto	Setembro	Outubro
CB40-13	1	12,59	14,62	15,74	16,15	17,04	16,23
	2	13,46	15,00	16,26	16,80	16,39	16,16
	3	13,17	15,09	15,75	16,41	17,34	16,49
	M	13,07	14,90	15,92	16,45	16,92	16,29
CB41-76	1	15,03	11,54	13,33	14,83	14,78	14,35
	2	10,54	10,97	12,96	14,45	13,98	14,14
	3	9,76	12,26	13,32	15,44	14,21	14,13
	M	11,11	11,59	13,20	14,91	14,32	14,21
CB53-98	1	10,35	12,31	13,10	14,32	15,62	15,18
	2	9,90	12,79	13,09	14,36	14,70	14,58
	3	10,58	12,35	12,24	13,86	14,64	14,01
	M	10,28	12,48	12,81	14,18	14,99	14,59
CB47-355	1	10,15	12,23	13,37	15,45	16,87	15,28
	2	9,95	12,52	13,52	15,69	15,86	15,52
	3	10,51	12,36	13,82	16,37	15,96	15,82
	M	10,20	12,37	13,57	15,50	16,23	15,54

Cont.

Tabela 11 - Cont.

Variedade	Amo- stra	Maio	Junho	Julho	Agosto	Setembro	Outubro
CP51-22	1	10,66	11,92	13,58	15,37	13,92	15,43
	2	10,77	12,04	13,86	16,21	16,77	15,14
	3	11,09	12,52	14,17	15,19	15,41	14,71
	M	10,84	12,16	13,87	15,59	15,37	15,09
IAC48/65	1	10,66	12,56	13,65	15,69	15,54	14,55
	2	10,49	12,96	14,30	16,05	15,30	14,94
	3	10,79	12,47	13,83	15,71	15,87	15,45
	M	10,65	12,66	13,93	15,82	15,57	14,98
IAC52/150	1	9,62	13,10	15,57	15,60	15,85	15,75
	2	11,05	12,83	14,42	15,18	16,17	15,83
	3	11,07	13,55	14,80	14,97	16,08	16,48
	M	10,58	12,99	14,93	15,25	16,03	16,02
Na56-79	1	11,94	14,37	15,84	16,06	16,48	16,54
	2	12,96	14,60	14,79	16,05	17,23	15,86
	3	12,94	14,78	15,62	16,26	16,96	16,60
	M	12,61	14,58	16,42	16,12	16,89	16,33

TABELA 12 - Valores Observados e suas Estimativas através dos três Modelos.

Variedades	Meses	Y Observados	Y ESTIMADOS		
			$\hat{A}[1-10^{\hat{c}(x+\hat{b})}]$ $10^{-\hat{k}(x+\hat{b})^2}$	$\hat{A}+\hat{B}x+\hat{C}x^2$	$A+Bx+\hat{C}\sqrt{x}$
CB40-13	Maio	13,07	13,04	13,11	13,01
	Junho	14,90	14,91	14,79	15,00
	Julho	15,92	15,99	15,96	15,99
	Agosto	16,45	16,52	16,61	16,46
	Setembro	16,92	16,63	16,74	16,60
	Outubro	16,29	16,44	16,35	16,49
CB41-76	Maio	11,11	10,72	10,71	10,75
	Junho	11,59	12,30	12,27	12,39
	Julho	13,20	13,40	13,42	13,35
	Agosto	14,91	14,08	14,15	13,96
	Setembro	14,32	14,40	14,45	14,33
	Outubro	14,21	14,41	14,34	14,55
CB53-98	Maio	10,28	10,37	10,39	10,31
	Junho	12,48	12,08	12,05	12,21
	Julho	12,81	13,33	13,31	13,34
	Agosto	14,18	14,16	14,18	14,07
	Setembro	14,99	14,62	14,66	14,55
	Outubro	14,59	14,77	14,74	14,85
CB47-355	Maio	10,20	10,06	10,06	10,03
	Junho	12,37	12,42	12,37	12,58
	Julho	13,57	14,10	14,10	14,08
	Agosto	15,50	15,18	15,25	15,04
	Setembro	16,23	15,75	15,82	15,66
	Outubro	15,54	15,89	15,81	16,03

Cont.

TABELA 12 - Cont.

Variedades	Meses	Y Observados	Y ESTIMADOS		
			$A[1-10^{-\hat{C}(x+\hat{b})}]$ $10^{-\hat{k}(x+\hat{b})^2}$	$\hat{A}+\hat{B}x+\hat{C}x^2$	$\hat{A}+\hat{B}x+\hat{C}\sqrt{x}$
CP51-22	Maio	10,84	10,55	10,56	10,54
	Junho	12,16	12,65	12,61	12,80
	Julho	13,87	14,10	14,10	14,07
	Agosto	15,59	14,97	15,03	14,82
	Setembro	15,37	15,34	15,40	15,25
	Outubro	15,09	15,30	15,21	15,44
IAC48/65	Maio	10,54	10,47	10,49	10,43
	Junho	12,66	12,85	12,78	13,03
	Julho	13,93	14,39	14,38	14,38
	Agosto	15,82	15,22	15,30	15,07
	Setembro	15,57	15,46	15,55	15,36
	Outubro	14,98	15,21	15,10	15,35
IAC52/150	Maio	10,58	10,55	10,69	10,53
	Junho	12,99	13,13	12,93	13,19
	Julho	14,93	14,66	14,57	14,64
	Agosto	15,25	15,51	15,62	15,47
	Setembro	16,03	15,92	16,07	15,91
	Outubro	16,02	16,04	15,92	16,06
Na56/79	Maio	12,61	12,65	12,68	12,59
	Junho	14,58	14,41	14,35	14,54
	Julho	15,42	15,59	15,57	15,60
	Agosto	16,12	16,27	16,32	16,19
	Setembro	16,89	16,55	16,60	16,48
	Outubro	16,33	16,45	16,43	16,56

PROGRAMA 1

```

C      MÉTODO DE MARQUARDT
C      CÁLCULO DAS ESTIMATIVAS DOS PARÂMETROS DA FUNÇÃO
C       $Y = A * (1 - 10^{(-C(X+B))} * 10^{(-K(X+B)**2)})$ 
C      AO,CO,B0,PKO SÃO OS VALORES INICIAIS DE A,C,K,B
C      N NÚMERO DE OBSERVAÇÕES
C      N1 NÚMERO DE EQUAÇÕES
C      UTILIZA A SUBROTINA PIRI 1
C      DIMENSION A(49),P(49),B(49),L(7),M(7),O(10),X1(20),
C          X(50),Y(50),YES
1      (T)50, DESV(50),VALI(20),SN(50),YYEST(20),DIF(20),
C          XEST(20),DIFE(20)
1001   READ(2,100)N,N1,AO,CO,BO,PKO
100    FORMAT (2I5,4F10.0)
C      READ(2,101)(X(I),I=1,N)
101    FORMAT (10F8,0)
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
C      YY1=X(I)+B0
C      YY2=-CO*YY1
C      YY3=-PKO*(YY1**2)
C      YY4=10.**YY2
C      YY5=10.**YY3
C      YY6=AO*(1-YY4)
C      YYEST(I)=YY6*YY5
C      DIF(I)=Y(I)-YYEST(I)
1      SQ=SQ+DIF(I)**2
C      WRITE (3,200)SQ,ITER

```

```

200  FORMAT(5X,'SQ=',F25.8,5X,'ITERA=',I4)
      WRITE(3,201)AO,CO,BO,PKO
201  FORMAT(5X,'AO=',F25.8,'CO=',F15.8,'BO=',F15.8,
        'PKO=',F15.8)

      DO 93 J=1,N1
93    Q(J) = 0
      DO 94 J=1,N2
94    A(J) = 0
C     CÁLCULO DA MATRIZ N
      DO 95 I=1,N
      CIDA=10.**(-CO*(X(I)+BO))
      CASO=10.**(-PKO*(X(I)+BO**2))
      F1=(1-CIDA)*CASO
      F2=(X(I)+BO)*AO*CIDA*CASO*ALOG(10.)
      F3=AO*CASO*ALOG(10.)*(-2*PKO*(X(I)+BO)+(CO+2*PKO*
        (X(I)+BO))*CIDA)
      F4=-(X(I)+BO)**2*AO*(1-CIDA)*CASO*ALOG(10.)
      A(1)=A(1)+F1**2
      A(2)=A(2)+F1*F2
      A(3)=A(3)+F1*F3
      A(4)=A(4)+F1*F4
      A(6)=A(6)+F2**2
      A(7)=A(7)+F2*F3
      A(8)=A(8)+F2*F4
      A(11)=A(11)+F3**2
      A(12)=A(12)+F3*F4
      A(16)=A(16)+F4**2
C     CÁLCULO DO VETOR Q
      Q(1)=Q(1)+(Y(I)-AO*F1)*F1
      Q(2)=Q(2)+(Y(I)-AO*F1)*F2
      Q(3)=Q(3)+(Y(I)-AO*F1)*F3
95    Q(4)=Q(4)+(Y(I)-AO*F1)*F4
C     MATRIZ A
      A(1)=2*A(1)
      A(2)=2*A(2)

```

```

A(3)=2*A(3)
A(4)=2*A(4)
A(5)=A(2)
A(6)=2*A(6)
A(7)=2*A(7)
A(8)=2*A(8)
A(9)=A(3)
A(10)=A(7)
A(11)=2*A(11)
A(12)=2*A(12)
A(13)=A(4)
A(14)=A(8)
A(15)=A(12)
A(16)=2*A(16)
C   VETOR Q
    Q(1)=-2*Q(1)
    Q(2)=-2*Q(2)
    Q(3)=-2*Q(3)
    Q(4)=-2*Q(4)
C   CÁLCULO 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(6))4,5,4
    4    P(6)=ABS(A(6))
    GO TO 301
    5    P(6)=1
301  IF(A(11))6,7,6
    6    P(11)=ABS(A(11))
    GO TO 302
    7    P(11)=1
302  IF(A(16))8,9,8
    8    P(16)=ABS(A(16))
    GO TO 303
    9    P(16)=1

```

```

303   P(2)=0
      P(3)=0
      P(4)=0
      P(5)=0
      P(7)=0
      P(8)=0
      P(9)=0
      P(10)=0
      P(12)=0
      P(13)=0
      P(14)=0
      P(15)=0
      DO 28 I=1,N2
28    B(I)=A(I)+SLAMP*P(I)
      DO 5000 I=1,16
5000  SN(I)=B(I)
C     INVERSÃO DA MATRIZ B
      CALL MINV (B,N1,D,L,M)
      DO TO (501,502),IP
501   I1=0
      DO 29 I=1,N1
C     CÁLCULO DO VETOR SOLUÇÃO D
      X1(I)=0
      I1=I1+N1
      DO 29 J=1,N1
      I2=I1-N1
      I3=J+I2
29    X1(I)=X1(I)+B(I3)*(-Q(J))
      V1=X1(1)*Q(1)+X1(2)*Q(2)+X1(3)*Q(3)+X1(4)*Q(4)
C     CÁLCULO DE NOVAS ESTIMATIVAS DOS PARÂMETROS
      AA1=AO+X1(1)
      CC1=CO+X1(2)
      BB1=BO+X1(3)
      IF(BB1)78,79,79
78    BB1=BO-0.1*BO

```

```

79      CONTINUE
        PPK1=PKO+X1(4)
        IF (PPK1) 88,89,89
88      PPK1=PKO-0.1*PKO
89      CONTINUE
        SQO=0
C      VERIFICA-SE A SOLUÇÃO D E UM PASSO ACEITÁVEL
        DO 10 I=1,N
          XX1=X(I)+BB1
          XX2=-CC1*XX1
          XX3=-PPK1*(XX1**2)
          XX4=10.**XX2
          XX5=10.**XX3
          XX6=AA1*(1.-XX4)
          XEST(I)=XX6*XX5
          DIFE(I)=Y(I)-XEST(I)
10      SQO=SQO+DIFE(I)**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
        CÁLCULO DE RO PARA OBTER UM PASSO ACEITÁVEL
        RMIN=0.0000000001
        RMAX=10.**20
        VALI(1)=AO
        VALI(2)=CO
        VALI(3)=BO
        VALI(4)=PKO
        DO 19 J=5,16
          X1(J)=0

```

```

19      VALI(J)=0
      J=1
      CALL PIR11(SQ,X1,X,Y,N,V1,VALI,RMAX,RMIN,J,RO1)
      AA1=AO+RO1*X1(1)
      CC1=CO+RO1*X1(2)
      BB1=BO+RO1*X1(3)
      IF(BB1) 61,63,63
61      BB1=BO-0.1*BO
63      CONTINUE
      PPK1=PKO+RO1*X1(4)
      IF(PPK1) 71,73,73
71      PPK1=PKO-0.1*PKO
73      CONTINUE
      SLAMB=10.*SLAMB
82      CONTINUE
C      TESTE DE FINALIZAÇÃO DO PROCESSO
      AX=ABS(AO)
      ERRO1=(AX+0.001)*0.01
      CX=ABS(CO)
      ERRO2=(CX+0.001)*0.01
      BX=ABS(BO)
      ERRO3=(BX+0.001)*0.01
      PPX=ABS(PKO)
      ERRO4=(PPX+0.001)*0.01
      TEST1=ABS(AA1-AO)
      TEST2=ABS(CC1-CO)
      TEST3=ABS(BB1-BO)
      TEST4=ABS(PPK1-PKO)
      IF(TEST1-ERRO1) 51,51,52
51      IF(TEST2-ERRO2) 53,53,52
53      IF(TEST3-ERRO3) 54,54,52
54      IF(TEST4-ERRO4) 55,55,52
      INÍCIO DE UMA NOVA ITERAÇÃO
52      AO=AA1
      CO=CC1

```

```

BO=BB1
PKO=PPK1
ITER=ITER+1
GO TO 500
55  IP=2
C   SOLUÇÃO FINAL
AO=AA1
CO=CC1
BO=BB1
PKO=PPK1
GO TO 500
502  SQD=0
     SQTOT=0
     COR=0
     DO 59 I=1,N
59   COR=COR+Y(I)
     CORR=COR**2/N
     WRITE(3,2121)CORR
2121  FORMAT(1X,'CORR=',F15.6)
     DO 60 I=1,N
     Y1=X(I)+BB1
     Y2=-CC1*Y1
     Y3=-PPK1*(Y1**2)
     Y4=10.**Y2
     Y5=10.**Y3
     Y6=AA1*(1-Y4)
     YEST(I)=Y6*Y5
     DESV(I)=Y(I)-YEST(I)
     SQD=SQD+DESV(I)**2
60   SQTOT=SQTOT+Y(I)**2
     SQPAR=SQTOT-SQD
     R2=SOPAR/SQTOT
     WRITE(3,6969)
6969  FORMATI(20X,'METODO DE MARQUARDT',//)
     WRITE(3,7878)

```

```

7878  FORMAT(1X,15X,'MATRIZ INVERSA' ,//)
      WRITE(3,801) (B(I),I=1,16)
801   FORMAT(5X,4E17.7)
      WRITE(3,804)
      WRITE(3,6765)
6765  FORMAT(1X,20X,'MATRIZ HESSIANA',//)
      WRITE(3,5001) (A(I),I=1,16)
5001  FORMAT(5X,4E17.7)
804   FORMAT(1X,/)
      WRITE(3,804)
      WRITE(3,802) (Q(I),I=1,4)
802   FORMAT(5X,E17.7,/)
      WRITE(3,1040) SQTOT,SQPAR,SQD
1040  FORMAT(5X,'SQTOT=',F25.4,2X,'SQPAR=',F25.4,2X,'
      SQDE=',F15.4,/)
      WRITE(3,804)
1050  FORMAT(10X,'R2=',E17.7,//)
      WRITE(3,199)
      WRITE(3,1050) R2
199   FORMAT(/)
      WRITE(3,150) AA1,CC1,BB1,PPK1,ITER
150   FORMAT(5X,'A=',F15.8,2X,'C=',F15.8,2X,'B=',F15.
      .8,2X,'K=',F15.8,'IT
4  ER=',I3,///)
      WRITE(3,199)
      WRITE(3,750)
750   FORMAT(5X,'X',11X,'Y',15X,'YEST',13X,'DESV')
      WRITE(3,850)
850   FORMAT(5X,52('-',))
      DO 72 I=1,N
72    WRITE(3,950) X(I),Y(I),YEST(I),DESV(I)
950   FORMAT(2X,F6.2,3(2X,F15.8))
      WRITE(3,850)
      CALL MINV(A,N1,D,L,M)
      WRITE(3,7979)

```



```
7979    FORMAT(1X,15X,'INVERSA DA MATRIZ HESSIANA',//)
      WRITE(3,803)(A(I),I=1,16)
803    FORMAT(5X,4E17.7)
      WRITE(3,960)
960    FORMAT(////////)
      GO TO 1001
      END
```

```
FEATURES SUPPORTED
ONE WORD INTEGERS
EXTENDED PRECISION
```

SUBROTINA PIRI1

```

C      SUBROTINA PIRI1
C      INTERPOLA O VALOR DE RO PARA A OBTENÇÃO DE UM
      PASSO ACEITÁVEL
      SUBROUTINE PIRI1(SQ,SOL,X,Y,N,V1,VALI,RMAX,RMIN,
                     J,RO1)
      DIMENSION VALI(20),BETAO(20),BETA1(20),SOL(20),
                     X(50),Y(50),DESV(20
1)ALYES(20),GAYES(20),DIFE(20),EPYES(20),DIFE(20)
      ROO=1./2.**J
      DO 1 I=1,16
1      BETAO(I)=VALI(I)+ROO*SOL(I)
      IF(BETAO(3)) 41,42,42
41      BETAO(3)=VALI(3)-0.1*VALI(3)
42      CONTINUE
      IF(BETAO(4)) 50,51,51
50      BETA0(4)=VALI(4)-0.1*VALI(4)
51      CONTINUE
      SQO=0
      DO 2 I=1,N
      ALFA1=X(I)+BETA0(3)
      ALFA2=-BETA0(2)*ALFA1
      ALFA3=-BETA0(4)*(ALFA1**2)
      ALFA4=10.**ALFA2
      ALFA5=10.**ALFA3
      ALFA6=BETA0(1)*(1.-ALFA4)
      ALYES(I)=ALFA6*ALFA5
      DESV(I)=Y(I)-ALYES(I)
2      SQO=SQO+DESV(I)**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
      GO TO 11

```

```

6      IF(0.25*RO1-ROAST) 9,9,10
9      RO2=ROAST
      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=1,16
14     BETAl(I)=VALI(I)+RO2*SOL(I)
      IF(BETAl(3)) 43,44,44
43     BETAl(3)=VALI(3)-0.1*VALI(3)
44     CONTINUE
      IF(BETAl(4)) 52,53,53
52     BETAl(4)=VALI(4)-0.1*VALI(4)
53     CONTINUE
      SQ2=0
      DO 15 I=1,N
      GAMA1=X(I)+BETAl(3)
      GAMA2=-BETAl(2)*GAMA1
      GAMA3=-BETAl(4)*(GAMA1**2)
      GAMA4=10.**GAMA2
      GAMA5=10.**GAMA3
      GAMA6=BETAl(1)*(1.-GAMA4)
      GAYES(I)=GAMA6*GAMA5
      DIF(I)=Y(I)-GAYES(I)
15     SQ2=SQ2+DIF(I)**2
      J=I+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
12     RETURN
      3      J=J/2
      IF(ROAST) 21,21,22
21     ROAST=2*ROO

```

```

22   IF (ROAST-RMAX) 23,23,24
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=1,16
28   BETAl (I)=VALI (I)+RO1*SOL (I)
      IF (BETAl (3)) 45,46,46
45   BETAl (3)=VALI (3)-0.1*VALI (3)
46   CONTINUE
      IF (BETAl (4)) 54,55,55
54   BETAl (4)=VALI (4)-0.1*VALI (4)
55   CONTINUE
      DO 29 I=1,N
      EFE1=X (I)+BETAl (3)
      EFE2=-BETAl (2)*EFE1
      EFE3=-BETAl (4)*(EFE1**2)
      EFE4=10.**EFE2
      EFE5=10.**EFE3
      EFE6=BETAl (1)*(1.-EFE4)
      EFYES (I)=EFE6*EFE5
      DIFE (I)=Y (I)-EFYES (I)
29   SQ1=SQ1+DIFE (I)**2
      IF (SQ1-SQO) 40,40,26
26   RO1=ROO
40   RETURN
      END

FEATURES SUPPORTED
ONE WORD INTEGERS
EXTENDED PRECISION
CORE REQUIREMENTS FOR PIR11
COMMON      0      VARIABLES      568      PROGRAM      826

```

RELATIVE ENTRY POINT AFRESS IS 024E (HEX)

END OF COMPILATION

// DUP

*DEFLETE PIRI1

CART ID 0002 DB ADDR 4668 DB CNT 0039

*STORF WS UA PIRI1

CART ID 002 OB ADDR 517E DB CNT 003E

PROGRAMA 2

```

C      CÁLCULO DO MÁXIMO DA FUNÇÃO
C       $Y = A * (1 - 10^{**(-C * (X+B))} * 10^{** (X+B)} ** 2)$ 
      DIMENSION Z(20),Y(20)
1000    READ(2,1)N,AO,CO,BO,PKO,DELTA
        1    FORMAT(I10,5F10.0)
          READ(2,2)(Z(I),I=1,N)
            2    FORMAT(10F8,0)
              WRITE(3,1001)N,AO,CO,BO,PKO
1001    FORMAT(1X,I5,4F15,8)
          M=N+1
          DO 42 I=1,M
            Y(I)=AO*(1-10**(-CO*(Z(I)+BO)))*10**(-PKO*(Z(I)+
              +BO)**2)

            J=I+1

            Y(J)=AO*(1-10**(-CO*(Z(J)+BO)))*10** (PKO*(Z(J)+BO)
              **2)

            IF(Y(J)-Y(I))20,20,42
20      WRITE (3,200) I,J

200    FORMAT(1X,'TROCA DE SINAL PARA I= ',I3,'E J= ',I3)
          X=Z(I)
32      Y1=AO*(1-10**(-CO*(X+BO)))*10**(-PKO*(X+BO)**2)
          X=X+DELTA
          Y2=AO*(1-10**(-CO*(X+BO)))*10**(-PKO*(X+BO)**2)
          DIF=Y2-Y1
          WRITE(3,202)Y1,Y2,X,DIF
202    FORMAT(1X,'Y1=',F15.8,'Y2=',F15.8,'X=',F15.8,
              'DIF=',F15.8)
          TEST=ABS(DIF)
          IF(TEST-0.0000001)11,11,50
50      IF(DIF)41,41,32
41      X=X-DELTA
          DELTA=DELTA/2

```

```
GO TO 32
42  CONTINUE
11  GO TO 1000
END
```

FEATURES SUPPORTED
ONE WORD INTEGERS
EXTENDED PRECISION
IOCS

CORE REQUIREMENTS FOR
COMMON 0 VARIABLES 16B PROGRAM 472

END OF COMPILATION

// XEQ