ALGUNS ASPECTOS DA APLICAÇÃO DA SEGUNDA LEI DE MITSCHERLICH E DA EQUAÇÃO DE REGRESSÃO QUADRÁTICA À MATURAÇÃO DA CANA-DE-AÇÚCAR

ROMEU MAGNANI

Orientador: Dr. FREDERICO PIMENTEL GOMES

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: Estatística e Experimentação Agronômica.

PIRACICABA
Estado de São Paulo - Brasil
Fevereiro - 1985

Dedico este trabalho à Diná
e às nossas filhas: Flávia,
Cristina e Marina.

AGRADECIMENTOS

- Ao Dr. Frederico Pimentel Gomes, pela orientação segura e valiosa na realização deste trabalho.

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

- Aos Professores do Curso de Pós-Graduação, pelos ensinamentos transmitidos.

- Ao Prof. Dalton Geraldo Guaglianoni, especial amigo e companheiro de luta.

- Aos colegas do Curso de Pós-Graduação, pelo convívio.

- Aos funcionários do Departamento de Matemática e Estatística da ESALQ: Maria Izalina Ferreira Alves, Rosa Maria Alves e Octávio Frassetto, pela amizade.

- Aos colegas do Departamento de Físico-Química do Instituto de Química de Araraquara, pela solidariedade.

- Aos Professores: Celi Vasques Crepaldi, João Sahão Jr. e José Maria Lopes, pela amizade, incentivo e colaboração.

- Ao Prof. José Arana Varella, pela versão do resumo para o inglês.

- A todos que, direta ou indiretamente, contribuíram na execução deste trabalho.

ÍNDICE

	Página
RESUMO	v
SUMMARY	vii
1. INTRODUÇÃO	1
2. REVISÃO DE LITERATURA	4
3. MATERIAL E MÉTODOS	15
3.1. Material	15
3.2. Método dos Quadrados Mínimos	16
3.2.1. Modelo da Regressão Quadrática	16
3.2.2. Estimação dos Parâmetros	17
3.2.3. Análise de Variância	18
3.2.4. Programação do Método	21
3.3. Métodos do Gradiente	24
3.3.1. Modelo da Segunda Lei de Mitscherlich	24
3.3.2. Método de Newton	27
3.3.3. Método de Gauss	29
3.3.4. Método de Marquardt	32
3.3.5. Programação dos Métodos do Gradiente	33
4. RESULTADOS E DISCUSSÕES	42
4.1. Estimativas dos Parâmetros do Modelo Quadrático	42
4.2. Estimativas dos Parâmetros da Segunda Lei de Mitscherlich	45
4.3. Análise dos Ajustamentos	56
5. CONCLUSÕES	61
6. LITERATURA CITADA	63
APÊNDICE	67

ALGUNS ASPECTOS DA APLICAÇÃO DA SEGUNDA LEI
DE MITSCHERLICH E DA EQUAÇÃO DE REGRESSÃO
QUADRÁTICA À MATURAÇÃO DA CANA-DE-AÇÚCAR

Autor: Romeu Magnani

Orientador: Frederico Pimentel Gomes

RESUMO

Certos fenômenos, nos quais uma variável manifesta um crescimento inicial, em função de outra variável, e em seguida um decrescimento, tal como a quantidade de sacarose na cana-de-açúcar conforme esta se desenvolve, têm sido estudados pelo modelo de regressão Quadrática principalmente pela facilidade da estimação dos parâmetros, ainda que a realidade não mostre simetria em relação ao eixo vertical que passa pelo ponto de máximo. Por outro lado, o modelo da Segunda Lei de Mitscherlich pode dar uma descrição mais verdadeira, porém a estimação dos parâmetros é difícil.

Neste trabalho, para 27 grupos de dados de maturação da cana-de-açúcar, expressos em Pol% da cana, com o apoio de um microcomputador pessoal, é estudada a estimação dos parâmetros da Segunda Lei de Mitscherlich pelos métodos de Newton, Gauss e Marquardt; são analisados os dois ajusta-

mentos pelos testes estatísticos e os algoritmos de cálculo são codificados em linguagem BASIC.

Dos métodos estudados, o mais eficiente foi o de Marquardt, que permitiu a superação de dificuldades na convergência, decorrentes da localização do ponto onde se inicia o processo iterativo. Não foi possível estabelecer, por critérios exclusivamente estatísticos, o melhor ajustamento. Entretanto, um exame dos resultados evidenciou que a maturação da cana-de-açúcar, quanto à quantidade de Pol% da cana, pode ser estudada até o máximo por um modelo ou outro, mas, a partir daí, a Segunda Lei de Mitscherlich acompanha melhora tendência dos dados experimentais, fornecendo uma visão global mais real do fenômeno em questão e, portanto, mais informativa.

SOME ASPECTS OF THE MITSCHERLICH'S SECOND
LAW AND THE QUADRATIC REGRESSION EQUATION
APPLICATION ON THE SUGAR CANE MATURATION

Author: Romeu Magnani

Adviser: Frederico Pimentel Gomes

SUMMARY

Some phenomena, in which a variable initially increases and then decreases as a function of another variable, have been studied using the quadratic regression model. Although these phenomena follow well the model up to the maximum, from this point on the curve decreases more smoothly as predicted by the model. This is the case of the sugar cane maturation. Mitscherlich's Second Regression Law can give a better description but the parameter estimation is more difficult.

This work studies the maturation in 27 groups of data on the maturation of sugar cane, by measuring the quantity of saccarose (in Pol% of cane). The parameters of Mitscherlich's Second Law were estimated by Newton, Gauss and Marquardt methods. Both regression equations (quadratic and Mitscherlich's) were analyzed by statistical tests.

The Marquardt method was more efficient to esu

timate the parameters of the Mitscherlich's Law. This method leads easily to convergence. It was concluded that the statistical tests are not adequate as indicative of the best adjustment. However, the results showed that Mitscherlich's Law gives the best insight of the phenomena studied.

1. INTRODUÇÃO

Até recentemente, trabalhos que necessitassem, para o seu desenvolvimento, do auxílio de um computador, encontravam dificuldades. Hoje, devido ao advento dos microcomputadores, os quais possuem incorporada uma linguagem de uso e aprendizado fácil, o BASIC, o pesquisador começa a ter à sua disposição essa poderosa ferramenta de trabalho, onde ele mesmo pode operar. Num futuro próximo isso deverá servir também ao estudante em sala de aula. Assim, modelos matemáticos para descrever experimentos e os correspondentes métodos de estimação dos parâmetros, não adotados em razão da complexidade nos cálculos, devem ser repensados e reestudados com vista a substituírem aqueles utilizados principalmente pela simplicidade que manifestam.

Uma equação para a qual o computador é instrumento indispensável de apoio é a Segunda Lei de Mitscherlich,

$$Y = b_1 [1 - 10^{-b_3(X+b_2)}] 10^{-b_4(X+b_2)^2}$$

com X e Y as variáveis independente e dependente respectivamente; b_1 , b_2 , b_3 e b_4 os parâmetros a serem estimados através de dados experimentais, e sua curva representativa teria o aspecto da figura abaixo, para b_4 positivo e os parâmetros b_1 e b_3 , em geral, positivos:

Esta lei pode, em princípio, descrever fenômenos nos quais, enquanto X cresce, há um crescimento inicial rápido de Y até atingir um máximo e, a partir daí, surge um decrescimento menos intenso. Revelam tal comportamento, por exemplo, as produções de culturas submetidas a doses crescentes de um nutriente, ou os teores de sacarose na cana-de-açúcar, medidos conforme a cana se desenvolve. Nestes casos, e principalmente no último, tem sido aplicado o modelo de regressão Quadrática, de equação

$$Y = b_0 + b_1X + b_2X^2 \quad ,$$

por ser mais simples e responder satisfatoriamente, pelo menos

até que o máximo seja atingido.

Este trabalho tem em mira focalizar alguns as pectos do ajustamento, para uma situação experimental, de um modelo considerado mais complicado, o não linear nos parâmetros, e ao mesmo tempo compará-lo com aquele mais simples, o linear. Este objetivo será seguido no caso particular da análise do experimento de maturação da cana-de-açúcar, pelos modelos da Segunda Lei de Mitscherlich e Quadrático, pretendendo-se basicamente:

1º) Verificar e tirar conclusões sobre o desempenho, em um microcomputador, dos métodos iterativos de Newton, Gauss e Marquardt na estimação dos parâmetros da Segunda Lei de Mitscherlich.

2º) Sugerir programas em linguagem BASIC para os métodos adotados.

3º) Analisar experimentos de maturação da cana de-açúcar pelos modelos da Segunda Lei de Mitscherlich e da regressão Quadrática, examinando a representatividade dos testes estatísticos usuais de modelos lineares quando aplicados indistintamente aos dois casos.

2. REVISÃO DE LITERATURA

Considerando que os objetivos propostos para o presente trabalho compreendem uma discussão sobre métodos iterativos de estimação de parâmetros, incluindo um confronto entre o modelo linear e o não linear quando ajustados aos mesmos dados, iniciaremos esta revisão de literatura com um pequeno exame do primeiro modelo, por demais conhecido.

SEAL (1967) apresenta uma visão histórica do desenvolvimento do modelo de regressão linear,

$$Y_j = \sum_{k=1}^m b_k X_{kj} + E_j \quad (j=1, 2, \dots, n; n > m)$$

onde os X_{kj} são "coeficientes" conhecidos (variáveis independentes), os Y_j são "observações" (variável dependente), os b_k são as "incógnitas" (parâmetros) e os E_j são os "erros", citando ter sido Legendre, em 1805, o primeiro a sugerir em publicação o Método dos Quadrados Mínimos para o cálculo de es

timativas dos parâmetros, ao estabelecer o princípio de que a solução mais satisfatória para os b_k é aquela que minimiza a soma de quadrados dos erros. Entretanto, foi Gauss, no seu Theoria Motus, em 1809, o primeiro a discutir o modelo de regressão linear associado a uma distribuição de probabilidades dos erros. Em notação matricial o modelo fica:

$$Y = XB + E$$

com X a matriz (n x m) de coeficientes, B o vetor de m parâmetros, Y e E os vetores, respectivamente, de observações e erros. O método dos quadrados mínimos fornece uma única solução,

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

desde que $X'X$ seja não-singular, sendo X' a matriz transposta de X. A partir de hipóteses para os erros, conclusões probabilísticas a respeito dos parâmetros e do modelo são obtidas. No seu artigo, Seal discorre sobre outros autores que forneceram substanciais contribuições, destacando, do século 19 até antes de 1950, além do próprio Gauss, Cauchy, Chebyshev, Pizzetti, Karl Pearson e R.A. Fisher. Um impulso maior, na aplicação das técnicas estatísticas para a construção e estimação de modelos matemáticos ligados a experimentos, veio dos trabalhos de G.E. Box e seus colaboradores, por volta de 1950.

Para focalizar os métodos de estimação e o estudo de modelos não lineares,

$$Y_j = f(X_j; B) + E_j \quad ,$$

principiamos com a análise da publicação de BARD (1974), o qual considera que métodos computacionais com os nomes de Newton, Gauss e Cauchy têm sido conhecidos por muito tempo, mas suas aplicações mais amplas a problemas práticos aguardaram o advento dos computadores eletrônicos. Bard expõe e discute os chamados métodos iterativos do gradiente que exigem, em cada iteração, o cálculo do gradiente da função "soma de quadrados"

$$S(B) = \sum_{j=1}^n [Y_j - f(X_j; B)]^2$$

em cuja minimização estamos interessados. No início da i -ésima iteração está disponível o vetor $B_i = [b_{1i}, b_{2i}, \dots, b_{mi}]'$ e um novo vetor B_{i+1} é procurado através da fórmula

$$B_{i+1} = B_i - p_i R_i G_i$$

onde p_i é um escalar, R_i uma matriz ($m \times m$) e G_i é o vetor gradiente de $S(B)$ calculados para $B=B_i$. Devemos notar que a direção $-G_i$ é aquela em que $S(B)$ decresce mais rapidamente no ponto B_i e $p_i R_i$ estabelece "quanto caminhar" nessa direção. O autor ressalta que os vários métodos do gradiente diferem um do outro pela escolha de p_i e R_i , entretanto, é comumente desejável que R_i seja definida positiva, de onde decorre que se G_i é um vetor não nulo, então, para um número p_i suficiente pequeno, teremos $S(B_{i+1}) < S(B_i)$, o que, num certo sentido, assegura que B_{i+1} está mais próximo do ponto de mínimo do que B_i .

Dos métodos considerados por Bard, o mais sim-

ples, chamado "método da descida mais rápida" (Steepest Descent), admite como R_i a matriz de identidade, mas não é recomendado na prática. Quanto aos métodos clássicos, destaca o de Newton com $p_i = 1$ e $R_i = H_i^{-1}$, sendo H_i a matriz Hessiana de $S(B)$ calculada para $B=B_i$, e o método de Gauss com $p_i=1$ e $R_i = \tilde{H}_i^{-1}$, admitindo $\tilde{H}$, uma aproximação de H , com elementos

$$\tilde{h}_{km} = 2 \sum_{j=1}^n [\partial f(X_j; B) / \partial b_k] [\partial f(X_j; B) / \partial b_m] .$$

Considera, ainda, algumas modificações introduzidas neste método, propondo algoritmos para melhorá-lo. O método de Gauss, na forma original, consiste no desenvolvimento em série de Taylor até o termo de primeira ordem da função $f(X_j; B)$ em torno do ponto B_i , o qual, para B_i próximo de B , permite escrever:

$$f(X_j; B) \cong f(X_j; B_i) + \sum_{k=1}^m [\partial f(X_j; B) / \partial b_k]_{B=B_i} (b_k - b_{ki})$$

e considerando

$$Y_j^* = Y_j - f(X_j; B_i)$$

$$a_k = b_k - b_{ki}$$

$$X_{kj}^* = [\partial f(X_j; B) / \partial b_k]_{B=B_i}$$

o modelo torna-se aproximadamente da forma:

$$Y_j^* = \sum_{k=1}^m a_k X_{kj}^* + E_j \quad (j=1, 2, \dots, ; n > m)$$

agora, linear nos parâmetros a_k . A resolução de quadrados mínimos

nimos para modelos lineares pode ser seguida, gerando a esti
mativa $\hat{A} = \hat{B} - B_i$. Daí, se aceitarmos $\hat{B} = B_{i+1}$, vem a fórmula ite
rativa:

$$B_{i+1} = B_i + \hat{A}_i = B_i - \hat{H}_i^{-1} G_i \quad .$$

Um capítulo do livro de Bard é dedicado inteiramente à ques-
tão das conclusões, depois de obtidas as estimativas, no que
concerne à validade destas, ou do modelo ajustado. Como acon
tece nos textos gerais, no caso um dos mais completos sobre
estimação de parâmetros em modelos não lineares, as dificulda
des na pesquisa do mínimo são apresentadas de maneira ampla,
sem entrar em detalhes para equações específicas. Além disso,
são superficiais as considerações sobre o problema da escolha
do ponto de partida dos métodos iterativos.

Alguns artigos existentes na literatura sobre
métodos não lineares serão, agora, examinados. Dentre eles
destaca-se o de LEVENBERG (1944) que apresenta uma extensão
do método de linearização de Gauss de modo a assegurar uma
melhora na solução inicial. Considerando que o método de Gauss,
ao abandonar os termos maiores do que primeira ordem no desen-
volvimento de $f(X_j; B)$ em série de Taylor, sujeita-se a diver
gir, Levenberg adota para ser minimizada uma soma de quadra-
dos ponderada,

$$\bar{S}(B) = v S(B) + \sum_{k=1}^m w_k (b_k - b_{ki})^2$$

com v e w_k constantes positivas que representam a importância

relativa de $S(B)$ e de $(b_k - b_{ki})$ no processo de minimização. Aplicando o método dos quadrados mínimos, obtém a fórmula iterativa:

$$B_{i+1} = B_i - L_i^{-1} G_i$$

com L_i uma matriz ($m \times m$) que difere da matriz do método de Gauss, $\tilde{H}_i$, apenas pelos elementos da diagonal principal, os quais, na matriz L_i , estão acrescidos de valores $w_k v^{-1}$ escolhidos de modo a assegurar a convergência. Além disso, os dois métodos coincidem quando $v \rightarrow \infty$. A utilidade prática deste método depende das constantes v e w_k serem selecionadas por critérios que levem a procedimentos adequados para sua programação em computadores.

HARTLEY (1961) introduz uma modificação no método de Gauss considerando, em cada iteração, a função

$$S(p) = S(B_i - p \tilde{H}_i^{-1} G_i) \quad , \quad 0 \leq p \leq 1 \quad .$$

Atribuindo três valores para p (por exemplo: 0, 1/2 e 1), obtém três pontos, e determinando o mínimo p^* da parábola que passa por eles adota a fórmula

$$B_{i+1} = B_i - p^* \tilde{H}_i^{-1} G_i \quad .$$

Considera, também, que haverá convergência sempre que o processo se inicie numa região convexa em torno do valor a ser alcançado.

FLETCHER e POWELL (1963) apresentam um método

iterativo de grande poder, baseado num procedimento descrito por DAVIDON (1959), no qual a matriz R é sistematicamente ajustada de iteração em iteração, pretendendo-se um comportamento semelhante ao da inversa da Hessiana. Alguns teoremas sobre a convergência são provados e se efetuam vários testes para exemplificá-los. Implementações alternativas a esse método foram introduzidas por BARD (1970) e também por FLETCHER (1970).

MARQUARDT (1963), com bases teóricas mais sólidas, chega numa fórmula iterativa semelhante à de Levenberg, com

$$w_k = \sum_{j=1}^n \left[\left(\frac{\partial f(X_j; B)}{\partial b_k} \right)^2 \right]_{B=B_i}$$

e $v^{-1} = q$ escolhido convenientemente. Propõe, também, um algoritmo para a aplicação do processo iterativo. Este método tem se mostrado de grande eficiência, principalmente por, em geral, permitir a adoção de q tal que tenhamos $S(B_{i+1}) < S(B_i)$.

KITTRELL et alii (1965), destacando que a convergência dos processos iterativos depende das estimativas iniciais dos parâmetros e da complexidade da equação, fornecem algumas técnicas para a obtenção dessas estimativas. Uma primeira sugere usar as informações disponíveis a respeito da magnitude esperada para os parâmetros desconhecidos. Estas podem ser intervalos ou estimativas mais definidas dos valores dos parâmetros. Outra técnica é a estimação cíclica, pela qual, uma parte dos parâmetros é mantida fixa enquanto a outra varia. Uma terceira recomenda linearizar a equação do modelo, se for

possível, e pelo método dos quadrados mínimos determinar as estimativas iniciais. Observemos que, muitas vezes, os pesquisadores afirmam terem feito uma linearização quando, na verdade, mudaram o modelo. Assim, supondo originalmente

$$Y = f(X) + E$$

a aplicação de logarítmos daria

$$\log Y = \log [f(X) + E] \quad ,$$

mas, como se adota

$$\log Y = \log f(X) + E$$

não podemos dizer que o modelo inicial foi linearizado. Os autores discutem, ainda, a pesquisa em "rede", dividindo a superfície de somas de quadrados em partes, com o mínimo procurado em cada uma delas. Exemplificam com problemas ligados à Química e chamam a atenção de que a escolha de uma técnica particular depende do problema em questão.

SMITH e SHANNO (1971) descrevem um procedimento para resolver problemas de estimação não linear, resumindo se numa modificação do algoritmo de Marquardt, de modo que q, antes com a restrição de não ser negativo, assuma certos valores negativos quando vantajoso. Entretanto, por incluir o cálculo de autovalores, o método tem sido considerado trabalhoso.

Quanto às considerações probabilísticas, após a determinação das estimativas dos parâmetros, a literatura é

um tanto limitada. Além de BARD (1974) já citado, destaca-se o artigo de HARTLEY (1964) que trata de regiões de confiança para os parâmetros em leis de regressão não linear. GUTTMAN e MEETER (1965), através de exemplos numéricos, examinam a validade das medidas de não linearidade. Também é importante o texto de DRAPER e SMITH (1981).

Cabe, agora, uma revisão de literatura para as Leis de Mitscherlich com ênfase à Segunda Lei quando aplicada a dados de maturação da cana-de-açúcar. A Primeira Lei,

$$Y = b_1 [1 - 10^{-b_3(X+b_2)}]$$

divulgada na Alemanha, em 1909, é aceita atualmente como apropriada ao estudo de ensaios de adubação de plantas cultivadas, com X representando a dose de um certo nutriente e Y a produção correspondente. Seu comportamento pode ser visualizado pelo gráfico:

Muitos trabalhos foram apresentados sobre ela destacando-se os de PIMENTEL GOMES (1951,1953,1969,1978) e alguns deste mesmo autor em colaboração com outros (1949,1966,1967,1975).

Tais estudos resultaram num processo geral para estimar os pa râmetros da Primeira Lei; em considerações sobre sua aplica- bilidade na análise de experimentos de adubação e na compa- ração, e indicação de dificuldades mais comuns, quando se em pregam polinômios com o mesmo objetivo.

Em 1928, Mitscherlich propôs uma modificação na sua equação, acrescentando o fator

$$10^{-b_4(X+b_2)^2},$$

que possibilita um decrescimento na curva a partir de um cer to valor de X, quando b_4 é positivo, criando, assim, a sua conhecida Segunda Lei. Esta é cogitada em trabalhos sobre a Primeira, mas sua utilização é preterida devido aos cál- culos que requer e por se considerarem satisfatórios, nessas pesquisas, os resultados da Primeira Lei. Seu uso é recomen- dado quando doses excessivas do nutriente são empregadas.

SILVA (1978) estuda a adequação da Segunda Lei de Mitscherlich a dados de adubação de trigo, e compara os re sultados obtidos com os provenientes do ajustamento da Pri- meira Lei e do modelo Quadrático aos mesmos dados. Obtém es- timativas dos parâmetros do modelo de Mitscherlich através do método de Gauss, com a modificação de Hartley, atingindo in- clusive uma solução com b_1 e b_3 negativos, e do modelo Quadrá tico pelo método usual de quadrados mínimos para modelos li- neares. Conclui que a Segunda Lei de Mitscherlich se adapta bem aos dados, sendo sua aplicação preferível quando se apli

cam altas doses de fertilizante, caso em que há uma queda na produção a partir de certo nível.

SILVA (1980) adota $b_2=0$ na Segunda Lei de Mitscherlich e estuda seu ajustamento a dados referentes à maturação da cana-de-açúcar. Emprega, para a estimação dos parâmetros, os métodos de Newton, Gauss (modificado) e Marquardt com o objetivo de verificar qual o melhor para o modelo em questão. Conclui que o método de Marquardt chega à solução em um número menor de iterações, ainda que os outros também levem à boas estimativas. Entretanto, a ausência do fator b_2 tornou, pelo modelo, nula a quantidade de sacarose na cana no mês anterior ao do início das medições, o que não ocorre na prática.

UDO (1983) aplica os modelos: Segunda Lei de Mitscherlich, Quadrático e da Raiz-Quadrada, também para verificar qual deles é mais apropriado ao estudo de maturação da cana-de-açúcar. Para a estimação dos parâmetros da Lei de Mitscherlich utiliza o método de Marquardt. Deduz, aplicando logaritmo na função de Mitscherlich, que os parâmetros b_1 e b_3 devem ser positivos, porém, esta conclusão não é válida, por ter sido obtida da restrição de só existir, no campo real, logaritmo de número positivo. Adotando os testes estatísticos para modelos lineares, conclui que o Quadrático se adapta melhor ao fenômeno do que a Lei de Mitscherlich, porém que esta última é mais adequada à extrapolação.

3. MATERIAL E MÉTODOS

3.1. Material

Este trabalho adota, para estudar o ajuste do modelo Quadrático e da Segunda Lei de Mitscherlich ao fenômeno de maturação da cana-de-açúcar, resultados analíticos de Pol% da cana referentes a ensaios de competição de variedades realizados na região de Sertãozinho (S.P.), no ano de 1970, e na Usina São João, Araras (S.P.), no ano de 1979. Esses dados foram utilizados por SILVA (1980) e UDO (1983) respectivamente, e estão expostos, aqui, na Tabela 1 (pag. 43) onde as variedades de 1 a 19 são as da primeira autora e as de 20 a 27 as da segunda. Os dados destas oito últimas variedades são médias de três repetições, as quais estão apresentadas na Tabela 7 do apêndice.

De acordo com BAYMA (1975), a "Pol", medida for

necida pelos aparelhos chamados Polarímetros e pelos Sacarímetros, é uma soma algébrica do poder rotatório dos açúcares da cana sobre a luz polarizada. Na prática, se a cana está madura e sadia, a porcentagem de açúcares redutores é baixa e a medição de Pol estima o teor de sacarose.

3.2. Método dos Quadrados Mínimos

3.2.1. Modelo da Regressão Quadrática

Consideremos que n valores Y_j de Pol% da cana, obtidos em n épocas X_j , relacionam-se pelo modelo

$$Y_j = b_0 + b_1 X_j + b_2 X_j^2 + E_j \quad (j=1, 2, \dots, n; n \geq 3)$$

onde os erros E_j são variáveis aleatórias independentes de média zero e variância constante σ^2 . Admitimos, ainda, que os erros tenham distribuição normal.

Em notação matricial o modelo fica

$$Y = XB + E$$

sendo

$$Y = \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{bmatrix}, \quad X = \begin{bmatrix} 1 & X_1 & X_1^2 \\ 1 & X_2 & X_2^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & X_n & X_n^2 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \end{bmatrix}, \quad E = \begin{bmatrix} E_1 \\ E_2 \\ \vdots \\ E_n \end{bmatrix},$$

com $\text{Esp}(E) = \phi$, $\text{Esp}(EE') = I \sigma^2$ (I=Matriz de Identidade).

3.2.2. Estimação dos Parâmetros

A estimativa de B pelo método dos quadrados mínimos é o vetor $\hat{B} = [\hat{b}_0, \hat{b}_1, \hat{b}_2]'$, o qual minimiza a soma de quadrados dos erros $E'E$. Considerando identicamente nula a diferencial desta soma em relação aos parâmetros, chegamos ao sistema de equações normais

$$X'X \hat{B} = X'Y ,$$

que, para $X'X$ não-singular, fornece a solução

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

isto é,

$$\begin{bmatrix} \hat{b}_0 \\ \hat{b}_1 \\ \hat{b}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} n & \sum_{j=1}^n X_j & \sum_{j=1}^n X_j^2 \\ \sum_{j=1}^n X_j & \sum_{j=1}^n X_j^2 & \sum_{j=1}^n X_j^3 \\ \sum_{j=1}^n X_j^2 & \sum_{j=1}^n X_j^3 & \sum_{j=1}^n X_j^4 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^n Y_j \\ \sum_{j=1}^n Y_j X_j \\ \sum_{j=1}^n Y_j X_j^2 \end{bmatrix} .$$

Determinadas as estimativas dos parâmetros, então, estimativas $\hat{Y}$ de Y podem ser obtidas pela equação ajus-

tada: $\hat{Y} = \hat{b}_0 + \hat{b}_1 X + \hat{b}_2 X^2$.

3.2.3. Análise de Variância

Após a determinação da equação de regressão, podemos conduzir a análise da variância, conforme o esquema seguinte:

Causa de Variação	G.L.	S.Q.	Q.M.
Regressão	$m-1=2$	$\hat{B}'X'Y-C$	$(\hat{B}'X'Y-C)/2$
Desvios da Regressão (Resíduo)	$n-3$	$Y'Y-\hat{B}'X'Y$	$(Y'Y-\hat{B}'X'Y)/(n-3)$
Total	$n-1$	$Y'Y-C$	

$$m = \text{número de parâmetros} \quad , \quad C = \left(\sum_{j=1}^n Y_j \right)^2 / n .$$

Um outro procedimento para a obtenção da soma de quadrados dos desvios da regressão seria:

$$SQ \text{ Desvios} = \sum_{j=1}^n (Y_j - \hat{Y}_j)^2 .$$

Para testar a hipótese $H_0: b_1 = b_2 = 0$, ao nível de significância α , podemos utilizar a estatística F. Nesse caso, rejeitamos H_0 sempre que o valor de

$$F = \frac{QM \text{ Regressão}}{QM \text{ Desvios}}$$

for maior do que o valor crítico $F(2, n-3, \alpha)$.

A proporção da variação total de Y "explicada" pela regressão é medida pelo Coeficiente de Determinação

$$R^2 = \frac{SQ \text{ Regressão}}{SQ \text{ Total}} ,$$

obtido de $SQ \text{ Total} = SQ \text{ Regressão} + SQ \text{ Desvios}$ e, portanto, quanto mais próximo de 1 estiver R^2 melhor será o ajustamento, pois, $0 \leq R^2 \leq 1$. Este coeficiente tende a crescer quando n diminui e quando aumenta o grau do polinômio e, acompanhando HOFFMANN e VIEIRA (1977), deve ser corrigido para o número de graus de liberdade obtendo-se o Coeficiente de Determinação Corrigido:

$$\begin{aligned} \bar{R}^2 &= 1 - \frac{SQ \text{ Desvios}/(n-m)}{SQ \text{ Total}/(n-1)} \\ &= R^2 - \frac{m-1}{n-m} (1 - R^2) . \end{aligned}$$

Um outro indicador da qualidade do ajustamento obtido é o Coeficiente de Variação, definido por

$$C.V. = \frac{\sqrt{QM \text{ Desvios}}}{\bar{Y}} ,$$

que mede a dispersão relativa das observações. O resultado se rá tanto melhor quanto menor for o Coeficiente de Variação.

Na análise anterior, adotamos como estimativa da variância do erro experimental o quadrado médio dos desvios da regressão. Quando dispomos, para um ou mais valores de X, de mais de um valor observado de Y, é possível obter

uma estimativa melhor da variância do erro, dada pelo quadrado médio do resíduo de uma análise de variância em que cada valor distinto de X é suposto como um "tratamento" a que está sendo submetida a variável Y . Considerando Y_{jk} a observação k da época j ($j=1,2,\dots,n$ e $k=1,2,\dots,r$), teremos as somas de quadrados:

$$SQ \text{ Total} = \sum_{k=1}^r \sum_{j=1}^n Y_{jk}^2 - C \quad \text{onde} \quad C = \left(\sum_{k=1}^r \sum_{j=1}^n Y_{jk} \right)^2 / nr ,$$

$$SQ \text{ Tratamentos} = \frac{1}{r} \sum_{j=1}^n T_j^2 - C \quad \text{com} \quad T_j = \text{Total do tratam. } j , \text{ e}$$

$$SQ \text{ Resíduo} = SQ \text{ Total} - SQ \text{ Tratamentos} .$$

Podemos decompor a $SQ \text{ Tratamentos}$ para estudar a regressão e, levando em conta os objetivos deste trabalho, indicamos:

$$SQ \text{ Tratamentos} = SQ \text{ Regressão} + SQ \text{ Desvios da regressão}$$

onde

$$SQ \text{ Desvios da regressão} = r \sum_{j=1}^n (\bar{Y}_j - \hat{Y}_j)^2$$

com $\bar{Y}_j$ representando a média das observações da época X_j .

O esquema da análise de variância será:

Causa de variação	G.L.
Regressão	$m-1=2$
Desvios da Regressão	$n-m$
(Tratamentos)	$(n-1)$
Resíduo	$n(r-1)$
Total	$nr-1$

Teremos:

$$F_{\text{regr}} = \frac{\text{QM Regressão}}{\text{QM Resíduo}}$$

e

$$F_{\text{desv.regr}} = \frac{\text{QM Desvios da regr.}}{\text{QM Resíduo}}$$

e uma conclusão de que os dados apresentem a suposta relação quadrática entre as variáveis X e Y, através de um valor significativo de F_{regr} , deve vir acompanhada de um valor não significativo de $F_{\text{desv.regr}}$.

3.2.4. Programação do Método

Desenvolvemos, aqui, um programa em linguagem BASIC voltado especificamente para a regressão Quadrática. Definindo as somas de produtos, para n pares (Z_j, W_j) ,

$$S(z, w) = \sum_{j=1}^n (Z_j - \bar{Z})(W_j - \bar{W}) = \sum_{j=1}^n Z_j W_j - \left(\sum_{j=1}^n Z_j \right) \left(\sum_{j=1}^n W_j \right) / n$$

não é difícil, a partir do sistema de equações normais, chegar às seguintes fórmulas:

$$\hat{b}_1 = \frac{S(x,y) S(x^2, x^2) - S(x^2, y) S(x, x^2)}{S(x, x) S(x^2, x^2) - (S(x, x^2))^2} ,$$

$$\hat{b}_2 = \frac{S(x, x) S(y, x^2) - S(x, x^2) S(x, y)}{S(x, x) S(x^2, x^2) - (S(x, x^2))^2} ,$$

$$\hat{b}_0 = \bar{Y} - \hat{b}_1 \bar{X} - \hat{b}_2 \bar{X}^2 .$$

A programação se baseia na formação de uma matriz X com elementos $X(1,j) = X_j$, $X(2,j) = X_j^2$ e $X(3,j) = Y_j$ para $j=1,2,\dots,n$, possibilitando chegarmos às somas S pela combinação dos índices 1, 2 e 3, dois a dois. Observemos que o programa foi elaborado para dados sem repetição e, quando estas existirem, os parâmetros serão estimados corretamente desde que Y_j represente a média das observações da época X_j , mas, para a análise estatística, deverá sofrer as modificações indicadas no final da seção anterior.

```

5 REM: REGRESSAO QUADRATICA -----
10 PRINT "QUAL O NO. DE OBSERVACOES",
20 INPUT N
30 DIM R(3),S(3,3),T(3,3),X(3,N)
37 REM: ENTRAM AS OBSERVACOES -----
39 REM: CALCULA SOMAS DE X, DE X*X E DE Y
40 PRINT "ENTRE OS PARES X,Y"
50 FOR J=1 TO N
60 PRINT J,
70 INPUT X(1,J),X(3,J)
80 X(2,J)=X(1,J)*X(1,J)
90 R(1)=R(1)+X(1,J)
100 R(2)=R(2)+X(2,J)
110 R(3)=R(3)+X(3,J)

```

```

120 NEXT J
129 REM: FORMA AS SOMAS S(I,J)
130 FOR I=1 TO 3
140 FOR J=I TO 3
150 FOR K=1 TO N
160 T(I,J)=T(I,J)+X(I,K)*X(J,K)
170 NEXT K
180 S(I,J)=T(I,J)-R(I)*R(J)/N
190 NEXT J
200 NEXT I
209 REM: CALCULA ESTIMATIVAS DOS PARAMETROS -----
210 D=S(1,1)*S(2,2)-S(1,2)*S(1,2)
220 B1=S(1,3)*S(2,2)-S(2,3)*S(1,2)
230 B2=S(1,1)*S(2,3)-S(1,2)*S(1,3)
240 B1=B1/D
250 B2=B2/D
260 B0=(R(3)-B1*R(1)-B2*R(2))/N
269 REM: CALCULA ELEMENTOS PARA A ANALISE -----
270 ST=S(3,3)
280 SR=B0*R(3)+B1*T(1,3)+B2*T(2,3)-R(3)*R(3)/N
290 SD=ST-SR
300 MR=SR/2
310 MD=SD/(N-3)
320 F=MR/MD
330 ME=R(3)/N
340 CV=SQR(MD)/ME*100
350 C1=SR/ST
360 CD=C1-2*(1-C1)/(N-3)
369 REM: IMPRIME RESULTADOS -----
370 PRINT "ESTIMATIVAS DOS PARAMETROS"
380 PRINT "      B0=";B0
390 PRINT "      B1=";B1
400 PRINT "      B2=";B2
410 PRINT "ANALISE"

```

```

42Ø PRINT " SQDESV=";SD
43Ø PRINT " QMDESV=";MD
44Ø PRINT "      F=";F;"(2 E";N-3;"GRAUS DE LIBERDADE)"
45Ø PRINT " C.DET.=";CD
46Ø PRINT " C.VAR.=";CV
47Ø END

```

Quando tivermos $\hat{b}_2 < 0$ haverá um valor máximo de Pol% da cana determinado com a introdução das seguintes linhas no programa:

```

462 IF B2>Ø THEN 468
463 XM=-B1/(2*B2)
464 YM=BØ-B1*B1/(4*B2)
465 PRINT
466 PRINT "XMAX=";XM;" YMAX=";YM
467 GOTO 47Ø
468 PRINT "NAO TEM MAXIMO"

```

3.3. Métodos do Gradiente

3.3.1. Modelo da Segunda Lei de Mitscherlich

Consideremos, agora, que os n valores Y_j de Pol% da cana, obtidos para as n épocas X_j , sigam o modelo

$$Y_j = f(X_j; B) + E_j \quad (j=1, 2, \dots, n; n \geq 4)$$

onde

$$f(X_j; B) = b_1 \left[1 - 10^{-b_3 (X_j + b_2)} \right] 10^{-b_4 (X_j + b_2)^2}$$

e os erros E_j são variáveis aleatórias independentes com distribuição normal de média zero e variância σ^2 . Como anteriormente, na impossibilidade de conhecermos o vetor correto de parâmetros, $B = [b_1, b_2, b_3, b_4]'$, adotamos uma estimativa $\hat{B} = [\hat{b}_1, \hat{b}_2, \hat{b}_3, \hat{b}_4]'$ que minimize a soma de quadrados dos erros

$$S(B) = \sum_{j=1}^n [Y_j - f(X_j; B)]^2 .$$

Uma condição necessária e suficiente para que $\hat{B}$ seja um ponto de mínimo de $S(B)$ é que, neste ponto, se anule o vetor gradiente $G(B)$ de S e seja definida positiva a matriz Hessiana $H(\hat{B})$.

Adotando as notações:

$$f_j = f(X_j; B) \quad , \quad (j=1, 2, \dots, n)$$

$$(k, m=1, 2, 3, 4)$$

$$f_{kj} = \partial f(X_j; B) / \partial b_k \quad ,$$

$$f_{kmj} = \partial^2 f(X_j; B) / \partial b_k \partial b_m \quad ,$$

e considerando as variáveis auxiliares:

$$Z_j = X_j + b_2 \quad ,$$

$$U_j = 10^{-b_3(X_j + b_2)} = 10^{-b_3 Z_j} \quad ,$$

$$V_j = 1 - U_j \quad ,$$

$$W_j = 10^{-b_4(X_j + b_2)^2} = 10^{-b_4 Z_j^2} \quad ,$$

teremos para a Segunda Lei de Mitscherlich a equação

$$f_j = b_1 V_j W_j \quad .$$

As derivadas parciais de primeira ordem serão:

$$f_{1j} = V_j W_j \quad ,$$

$$f_{2j} = b_1 (L10) W_j (b_3 U_j - 2b_4 Z_j V_j) \quad , \quad \text{onde } L10 = \log_e 10 \quad ,$$

$$f_{3j} = b_1 (L10) Z_j U_j W_j \quad ,$$

$$f_{4j} = -b_1 (L10) Z_j^2 V_j W_j \quad ,$$

e as derivadas parciais de segunda ordem serão:

$$f_{11j} = 0 \quad ,$$

$$f_{12j} = (L10) W_j (b_3 U_j - 2b_4 Z_j V_j) \quad ,$$

$$f_{13j} = (L10) Z_j U_j W_j \quad ,$$

$$f_{14j} = -(L10) Z_j^2 V_j W_j \quad ,$$

$$f_{22j} = -b_1 (L10) W_j \{ b_3 (L10) U_j (b_3 + 4b_4 Z_j) + 2b_4 V_j [1 - 2b_4 (L10) Z_j^2] \} ,$$

$$f_{23j} = b_1 (L10) U_j W_j [1 - (L10) Z_j (b_3 + 2b_4 Z_j)] \quad ,$$

$$f_{24j} = -b_1 (L10) Z_j W_j \{ 2V_j [1 - b_4 (L10) Z_j^2] + b_3 (L10) Z_j U_j \} \quad ,$$

$$f_{33j} = -b_1 (L10)^2 Z_j^2 U_j W_j \quad ,$$

$$f_{34j} = -b_1 (L10)^2 Z_j^3 U_j W_j \quad ,$$

$$f_{44j} = b_1 (L10)^2 Z_j^4 V_j W_j \quad ,$$

$$f_{21j} = f_{12j} \quad , \quad f_{31j} = f_{13j} \quad , \quad f_{41j} = f_{14j} \quad ,$$

$$f_{32j} = f_{23j} \quad , \quad f_{42j} = f_{24j} \quad , \quad f_{43j} = f_{34j} \quad .$$

Resulta para $S(B)$ um vetor gradiente G de componentes g_k ($k=1,2,3,4$),

$$g_k = \partial S / \partial b_k = -2 \sum_{j=1}^n (Y_j - f_j) f_{kj} \quad ,$$

e uma matriz Hessiana de elementos h_{km} ($k,m=1,2,3,4$),

$$h_{km} = \partial^2 S / \partial b_k \partial b_m = 2 \sum_{j=1}^n f_{kj} f_{mj} - 2 \sum_{j=1}^n (Y_j - f_j) f_{kmj} \quad .$$

Observamos, por esses resultados, que a determinação algébrica de um vetor $\hat{B}$ que anule o gradiente G , pela resolução do sistema $G=0$, é impraticável. Por isso, métodos especiais devem ser empregados.

3.3.2. Método de Newton

Em lugar de $S(B)$, trabalhamos com uma aproximação como descrito a seguir. Tomando H_i e G_i , respectivamente a matriz Hessiana e o vetor gradiente de S calculados para um vetor $B_i = [b_{1i}, b_{2i}, b_{3i}, b_{4i}]'$, definimos a função

$$s_i(B) = S(B_i) + G_i'(B-B_i) + \frac{1}{2} (B-B_i)' H_i (B-B_i)$$

que consiste nos termos até segunda ordem do desenvolvimento em série de Taylor de $S(B)$, em torno de B_i . Considerando identa

ticamente nula a diferencial de $s_i(B)$ em relação ao B , obtemos

$$G_i + H_i(B - B_i) = 0 \quad ,$$

que, se H_i for não-singular, fornece o vetor $B = B_{i+1}$ para o qual é nulo o gradiente de $s_i(B)$:

$$B_{i+1} = B_i - H_i^{-1} G_i \quad .$$

Esta fórmula leva diretamente ao mínimo quando $S(B)$ é uma função quadrática e H_i é uma matriz definida positiva, conforme a condição necessária e suficiente da seção anterior. Entretanto, B_{i+1} dificilmente coincidirá com o mínimo quando $S(B)$ não é quadrática e, neste caso, a fórmula define a i -ésima iteração do método de Newton. Assim, o método consiste em calcular correções sucessivas para uma solução inicial B_1 até que a correção $B_{i+1} - B_i$, que tem o gradiente, seja considerada desprezível. Admitimos que está havendo convergência enquanto permanecer $S(B_{i+1}) < S(B_i)$. Isso deve ocorrer para H_i^{-1} definida positiva, pois a derivada de S na direção do vetor correção, $-G_i^T H_i^{-1} G_i$, será negativa.

Na prática, como nem sempre teremos a anulação do gradiente, a correção pode ser considerada desprezível quando o valor absoluto dos componentes de $B_{i+1} - B_i$ for menor do que uma precisão pré-formulada. BARD (1974) sugere que o procedimento seja interrompido quando

$$|b_{k(i+1)} - b_{ki}| < e_i \quad (k=1, 2, 3, 4)$$

com

$$e_i = 10^{-4}(b_{ki} + 10^{-3})$$

sendo 10^{-3} colocado para evitar dificuldades nas proximidades de zero.

3.3.3. Método de Gauss

Quando da revisão de literatura, o método de Gauss foi apresentado como uma sequência de resoluções de problemas lineares, substituindo a equação não linear do modelo por uma aproximação linear. O método pode ser visto, ainda, como uma aproximação do método de Newton, considerando a matriz $\tilde{H}$, em lugar de H , obtida da eliminação nesta última, em cada elemento, do termo que contém as derivadas parciais de segunda ordem, ou seja, $\tilde{H}$ é formada pelos elementos

$$\tilde{h}_{km} = 2 \sum_{j=1}^n f_{kj} f_{mj} \quad (k, m=1, 2, 3, 4) \quad .$$

Os termos abandonados contêm os erros $Y_j - f_j$ e se estes forem pequenos, o que deve acontecer pelo menos nas proximidades do mínimo, $\tilde{H}$ será uma boa aproximação de H . Então, no método de Gauss as iterações são definidas por:

$$B_{i+1} = B_i - \tilde{H}_i^{-1} G_i \quad .$$

A condição de que esta fórmula, em cada iteração, produza uma

soma de quadrados menor do que a anterior pode falhar, principalmente quando $\tilde{H}_i$ não é uma boa aproximação de H_i , implicando numa correção grande. Este problema é contornado considerando

$$B_{i+1} = B_i - p \tilde{H}_i^{-1} G_i ,$$

de modo que p suficientemente pequeno forneça $S(B_{i+1}) < S(B_i)$. HARTLEY (1961) propõe que p seja determinado de forma a minimizar uma aproximação quadrática de $S(B_{i+1})$, agora função de p . Podemos, por exemplo, adotar p como o ponto de mínimo da parábola $a+bp+cp^2$ que passa pelos pontos de S onde $p=0$ e $p=1$, e cujo declive se iguala ao de S em $p=0$. Daí, teremos

$$p = -b/2c$$

com $a = S(B_i)$, $b = -G_i^T \tilde{H}_i^{-1} G_i$ e $c = S(B_{i+1}) - a - b$. Um refinamento desta idéia está elaborado a seguir.

BARD (1974) considera a fórmula iterativa

$$B_{i+1} = B_i + p D_i \quad \text{com} \quad D_i = -\tilde{H}_i^{-1} G_i$$

e apresenta o seguinte algoritmo para a escolha de p :

1. Coloque $p_0 = 2^{-j}$ ($j=0$ na primeira iteração)

Calcule $S_0 = S(B_i + p_0 D_i)$

Se $S_0 < S(B_i)$ aceite $p=p_0$. Caso contrário continue.

2. Calcule $d = -G_i^T \tilde{H}_i^{-1} G_i$

$$p^* = d p_0^2 / [2(S(B_i) - S_0 - d p_0)]$$

Defina $p_1 = \max[0,25 p_0; \min(0,75 p_0, p^*)]$

$$j = j+1$$

Se $p_1 \leq p_{\min}$ aceite $\hat{B} = B_i$. Caso contrário continue.

3. Retorne ao passo 1 com $p_0 = p_1$.

Se, na primeira execução do passo 1, tivermos $S_0 < S(B_i)$, em vez de aceitar imediatamente $p = p_0$, podemos seguir para o passo 4 com o objetivo de tentar diminuir, ainda mais, S_0 .

4. Coloque $j =$ maior inteiro que não supere $j/2$.

Determine p^* como no passo 2.

Defina $p^* = 2 p_0$ quando $p^* < 0$

$$p_2 = \min(p^*, p_{\max})$$

5. Se $|p_2 - p_0| < 0,1 p_0$ aceite $p = p_0$. Caso contrário continue.

6. Calcule $S_2 = S(B_i + p_2 D_i)$.

Aceite $p = p_2$ ou $p = p_0$ dependendo se S_2 ou S_0 é o menor.

Para a Segunda Lei de Mitscherlich, foi satisfatório adotar $p_{\min} = 10^{-7}$ e $p_{\max} = 10^3$, porém, outra alternativa é estabelecer esses valores, a cada iteração, por

$$p_{i(\min)} = \min(e_k / D_{ki}) \quad e \quad p_{i(\max)} = \max(e_k / D_{ki})$$

acompanhando o critério de finalização da seção 3.3.2.

3.3.4. Método de Marquardt

O método de Marquardt se apóia na observação de que se N é qualquer matriz definida positiva, então $M + qN$ é definida positiva para o escalar q suficientemente grande, qualquer que seja a matriz M . Marquardt sugere a escolha de $M = \tilde{H}$, a aproximação da Hessiana do método de Gauss e N uma matriz diagonal com elementos

$$n_{kk} = \begin{cases} \tilde{h}_{kk} & (\tilde{h}_{kk} \neq 0) \\ 1 & (\tilde{h}_{kk} = 0) \end{cases} .$$

Portanto, a fórmula iterativa do método será:

$$B_{i+1} = B_i - (\tilde{H}_i + q_i N_i)^{-1} G_i ,$$

sendo q_i determinado de modo a garantir uma matriz definida positiva.

Quando $q_i \rightarrow \infty$ a matriz $q_i N_i$ predomina sobre $\tilde{H}_i$ e $(B_{i+1} - B_i) \rightarrow (1/q_i) N_i^{-1} G_i$, representando um vetor correção extremamente pequeno numa direção em declive, pois N_i é definida positiva. Um q_i suficientemente grande sempre ocasiona $S(B_{i+1}) < S(B_i)$. Por outro lado, quando q_i é pequeno $B_{i+1} - B_i$ se aproxima da correção de Gauss, D_i . Concluimos que o método de Marquardt consiste numa interpolação entre o método "da descida mais rápida" (Steepest Descent) e o método de Gauss.

O seguinte algoritmo, proposto por BARD (1974) a partir de um sugerido por Marquardt, pode ser adotado para

a escolha de q_i :

1. No início da primeira iteração adote $q = 0,01$.

2. No início da i -ésima iteração calcule

$$D_i = -(\tilde{H}_i + qN_i)^{-1}G_i, \quad B^* = B_i + D_i \quad \text{e} \quad S^* = S(B^*).$$

3. Se $S^* < S(B_i)$, aceite $B_{i+1} = B^*$ e adote $q = \max(0, 1q; 10^{-7})$.

Caso contrário continue.

4. Encontre um valor p suficientemente pequeno tal que

$$S(B_i + pD_i) < S(B_i) \quad (\text{ver seção 3.3.3}). \quad \text{Mude } q \text{ por } 10q.$$

3.3.5. Programação dos Métodos do Gradiente

Em primeiro lugar, escrevemos um programa, em linguagem BASIC, para o método de Marquardt e, depois, sugerimos modificações para obter os programas dos outros métodos.

```

5 REM: AJUSTAMENTO DA SEGUNDA LEI DE MITSCHERLICH
6 REM: METODO DE MARQUARDT -----
9 REM: M=NO.DE PARAMETROS

10 M=4
20 PRINT "QUAL O NO. DE OBSERVACOES"
30 INPUT N
35 DIM B(M),B0(M),B1(M),D(M),D1(M),F(M),G(M),X(N),Y(N)
36 DIM H(M,M),H1(M,M)
40 PRINT "ENTRE OS PARES X,Y"
50 FOR J=1 TO N
60 PRINT J,
```

```

70 INPUT X(J),Y(J)
80 NEXT J
90 PRINT "ESTIMATIVAS INICIAIS DOS PARAMETROS"
100 FOR I=1 TO M
110 PRINT "B(";I;")=",
120 INPUT B(I)
130 NEXT I
139 REM: IT=NO. DA ITERACAO
140 IT=0
145 J0=0
147 Q=0.01
149 REM: INICIA A ITERACAO -----
150 SQ=0
160 FOR I=1 TO M
170 FOR J=1 TO M
180 H(I,J)=0
190 NEXT J
200 G(I)=0
210 NEXT I
219 REM: OBTEM H,G,SQ=S(B)
220 B1=B(1)*LOG(10)
230 FOR J=1 TO N
240 Z=X(J)+B(2)
250 U=10-1 $\sqrt{-B(3)*Z}$ 
260 V=1-U
270 W=10-1 $\sqrt{-B(4)*Z*Z}$ 
280 F(1)=V*W
290 F(2)=B1*W*(B(3)*U-2*B(4)*Z*V)
300 F(3)=B1*Z*U*W
310 F(4)=-B1*Z*Z*V*W
320 E=Y(J)-B(1)*F(1)
330 SQ=SQ+E*E
340 FOR I=1 TO M
350 FOR K=I TO M

```

```

36Ø H(I,K)=H(I,K)+2*F(I)*F(K)
37Ø NEXT K
38Ø G(I)=G(I)-2*E*F(I)
39Ø NEXT I
40Ø NEXT J
41Ø FOR I=1 TO M-1
42Ø FOR J=I+1 TO M
43Ø H(J,I)=H(I,J)
44Ø NEXT J
45Ø NEXT I
46Ø GOSUB 11ØØ
469 REM: CALCULA NOVAS ESTIMATIVAS -----
47Ø D=Ø
48Ø PØ=2[-JØ
49Ø FOR I=1 TO M
50Ø D(I)=Ø
51Ø FOR J=1 TO M
52Ø D(I)=D(I)-H1(I,J)*G(J)
53Ø NEXT J
54Ø BØ(I)=B(I)+PØ*D(I)
55Ø D=D+D(I)*G(I)
56Ø NEXT I
562 IF D<Ø THEN 57Ø
563 Q=1Ø*Q
564 GOSUB 11ØØ
565 GOTO 47Ø
57Ø SØ=Ø
58Ø FOR J=1 TO N
59Ø Z=X(J)+BØ(2)
60Ø E=Y(J)-BØ(1)*(1-1Ø[-BØ(3)*Z))*1Ø[-BØ(4)*Z*Z)
61Ø SØ=SØ+E*E
62Ø NEXT J
63Ø IT=IT+1
64Ø GOSUB 15ØØ

```

```

649 REM: TESTA FINALIZACAO -----
650 FOR I=1 TO M
660 D1(I)=ABS(B0(I)-B(I))
670 IF D1(I)>10-4*(B(I)+10-3) THEN 700
680 NEXT I
690 GOTO 770

699 REM: PREPARA NOVA ITERACAO -----
700 PRINT "ITERACAO: ";IT
710 FOR I=1 TO M
720 B(I)=B0(I)
730 PRINT "B(" ; I ; ")=" ; B(I)
740 NEXT I
750 PRINT "SQ=" ; S0
760 GOTO 150

769 REM: CALCULA ELEMENTOS PARA ANALISE -----
770 M1=0
780 M2=0
790 FOR J=1 TO N
800 M1=M1+Y(J)
810 M2=M2+Y(J)*Y(J)
820 NEXT J
830 C=M1*M1/N
840 ST=M2-C
850 SR=ST-S0
860 MR=SR/(M-1)
870 M0=S0/(N-M)
880 F=MR/M0
890 ME=M1/N
900 CV=SQR(M0)/ME*100
910 C1=SR/ST
920 CD=C1-(M-1)*(1-C1)/(N-M)

929 REM: IMPRIME RESULTADOS -----

```

```

93Ø PRINT "ITERACOES:";IT
94Ø PRINT "ESTIMATIVAS DOS PARAMETROS"
95Ø FOR I=1 TO M
96Ø PRINT "B(";I;")=";BØ(I)
97Ø NEXT I
98Ø PRINT "ANALISE"
99Ø PRINT "  SQDESV=";SØ
100ØØ PRINT "  QMDESV=";MØ
101Ø PRINT "          F=";F;"(";"M-1;"E";N-M;"GRAUS DE LIBERDADE)"
102Ø PRINT "  C.DET.=";CD
103Ø PRINT "  C.VAR.=";CV
104Ø END

1099 REM: SUBROTINA PARA INVERTER H. INVERSA=H1 -----
110Ø FOR I=1 TO M
1105 IF H(I,I)=Ø THEN H(I,I)=Q ELSE H(I,I)=(1+Q)*H(I,I)
111Ø FOR J=1 TO M
112Ø H1(I,J)=Ø
113Ø NEXT J
114Ø H1(I,I)=1
115Ø NEXT I
116Ø FOR I=1 TO M
117Ø FOR J=I TO M
118Ø IF H(J,I)<>Ø THEN 122Ø
119Ø NEXT J
120Ø PRINT "MATRIZ SINGULAR"
121Ø GOTO 9Ø
122Ø FOR K=1 TO M
123Ø S=H(I,K)
124Ø H(I,K)=H(J,K)
125Ø H(J,K)=S
126Ø S=H1(I,K)
127Ø H1(I,K)=H1(J,K)
128Ø H1(J,K)=S
129Ø NEXT K

```

```

1300 T=1/H(I,I)
1310 FOR K=1 TO M
1320 H(I,K)=T*H(I,K)
1330 H1(I,K)=T*H1(I,K)
1340 NEXT K
1350 FOR L=1 TO M
1360 IF L=I THEN 1420
1370 T=-H(L,I)
1380 FOR K=1 TO M
1390 H(L,K)=H(L,K)+T*H(I,K)
1400 H1(L,K)=H1(L,K)+T*H1(I,K)
1410 NEXT K
1420 NEXT L
1430 NEXT I
1440 RETURN

1499 REM: OBTEM SQ ACEITAVEL -----

1500 P=D*P0*P0/(2*(SQ-S0+P0*D))
1510 J1=0
1520 IF S0<SQ THEN 1810
1525 Q=10*Q
1530 IF 0.75*P0<P THEN P2=0.75*P0 ELSE P2=P
1540 IF 0.25*P0>P2 THEN P1=0.25*P0 ELSE P1=P2
1550 IF P1<=10-7 THEN 1760
1560 J0=J0+1
1570 FOR I=1 TO M
1580 B1(I)=B(I)+P1*D(I)
1590 NEXT I
1600 S1=0
1610 FOR J=1 TO N
1620 Z=X(J)+B1(2)
1630 E=Y(J)-B1(1)*(1-10-6(-B1(3)*Z))*10-6(-B1(4)*Z*Z)
1640 S1=S1+E*E
1650 NEXT J
1660 IF S1<SQ THEN 1710

```

```

167Ø IF J1=1 THEN RETURN
168Ø PØ=P1
169Ø P=D*P1*P1/(2*(SQ-S1+P1*D))
170Ø GOTO 153Ø
171Ø FOR I=1 TO M
172Ø BØ(I)=B1(I)
173Ø NEXT I
174Ø SØ=S1
175Ø RETURN
176Ø FOR I=1 TO M
177Ø BØ(I)=B(I)
178Ø NEXT I
179Ø SØ=SQ
180Ø GOTO 77Ø
181Ø JØ=INT(JØ/2)
182Ø IF P<=Ø THEN P=2*PØ
1825 IF Q<=1Ø[-7 THEN Q=1Ø[-7 ELSE Q=Ø.1*Q
183Ø IF P<1ØØØ THEN P1=P ELSE P1=1ØØØ
184Ø IF ABS(P1-PØ)<=Ø.1*PØ THEN RETURN
185Ø J1=1
186Ø SQ=SØ
187Ø GOTO 157Ø

```

Estimados os parâmetros, se tivermos $\hat{b}_4 > 0$ haverá um ponto de máximo que pode ser determinado pelo método de Newton-Raphson. Assim, a partir de uma solução inicial r_0 , pesquisamos o máximo através da fórmula iterativa

$$r_{i+1} = r_i - F(r_i)/F'(r_i)$$

onde $F(r) = df(r; \hat{B})/dr$ e $F'(r) = d^2f(r; \hat{B})/dr^2$.

Na programação anterior devem ser anexadas as

seguintes linhas:

```

1032 IF B0(4) <= 0 THEN 1038
1033 GOSUB 2000
1034 PRINT "XMAX=";XM;
1035 PRINT " YMAX=";YM
1036 GOTO 1040
1038 PRINT "NAO TEM MAXIMO"
1999 REM: DETERMINA O MAXIMO
2000 R=(X(1)+X(N))/2
2010 A1=(B0(3)+2*B0(4)*(R+B0(2)))*10[(-B0(3)*(R+B0(2)))
2020 A2=2*B0(4)*(R+B0(2))
2030 A3=1-10[(-B0(3)*(R+B0(2)))
2040 NU=A1-A2
2050 DE=-2*B0(4)*A3-B0(3)*LOG(10)*A1
2060 R0=R-NU/DE
2070 IF ABS(R0-R) < 0.0001 THEN 2100
2080 R=R0
2090 GOTO 2010
2100 XM=R0
2110 Z=XM+B0(2)
2120 YM=B0(1)*(1-10[(-B0(3)*Z))*10[(-B0(4)*Z*Z)
2130 RETURN

```

([: símbolo para a exponenciação)

Eliminando na programação anterior as linhas 147, 562 a 565, 1105 e 1825 obtemos a do método de Gauss. Quanto à programação do método de Newton, além destas supres
sões, devemos calcular entre as linhas de 280 a 320 as deriva

das parciais de segunda ordem, dadas na seção 3.3.1., através de um vetor $F1(I,K)$ e alterar a linha 360 para:

```
360 H(I,K)=H(I,K)+2*F(I)*F(K)-2*E*F1(I,K)
```

Como neste método $p=1$, devemos modificar a linha 480 para:

```
480 P0=1
```

e suprimir a linha 640, portanto, também a sub-rotina correspondente.

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

4.1. Estimativas dos Parâmetros do Modelo Quadrático

O ajustamento das equações quadráticas aos da dos experimentais de maturação da cana-de-açúcar da Tabela 1, comentados em 3.1., não apresentou qualquer dificuldade. As estimativas dos parâmetros, expostas na Tabela 2, foram obtidas pela programação da seção 3.2.4. A Tabela 4 mostra as somas de quadrados dos desvios (SQDesvios) e os valores máximos de Pol% da cana ($Y_{\max}$) com as correspondentes épocas ($X_{\max}$), que variaram entre meados de agosto e início de outubro, quando adotamos o modelo Quadrático para estudar as 27 variedades quanto ao problema de maturação. Ao mesmo tempo, esses resultados podem ser confrontados, pela Tabela 4, com os da Segunda Lei de Mitscherlich. Uma discussão a respeito é apresentada na seção 4.3.

Tabela 1. Resultados médios de Pol% da cana, obtidos na região de Sertãozinho (S.P.), em 1970 (1 a 19) e na Usina São João, Araras (S.P.), em 1979 (20 a 27).

Nº	Variedade	Meses							
		1 maio	2 junho	3 julho	4 agos.	5 set.	6 out.	7 nov.	8 dez.
1	CB-40-13	13,98	14,87	16,03	17,04	17,75	17,89	15,93	16,59
2	CB-40-77	8,57	12,62	14,83	15,66	17,72	17,76	13,72	17,69
3	CB-41-76	9,10	13,07	15,41	15,91	17,32	16,75	15,54	16,43
4	CB-46-47	11,64	14,82	16,84	16,80	17,52	18,08	16,47	16,72
5	CB-49-260	10,41	13,83	14,19	16,98	16,75	16,29	16,67	16,40
6	CB-56-121	12,42	13,97	13,19	16,39	15,96	17,51	14,83	15,51
7	CB-56-126	10,86	14,38	14,86	16,04	16,90	16,36	16,50	16,68
8	CB-56-164	12,80	14,47	15,12	16,32	16,92	16,08	15,76	16,02
9	CO-178	10,02	12,03	14,11	15,78	15,80	17,07	14,97	15,18
10	CO-740	9,04	13,33	15,59	17,12	17,30	18,15	17,71	17,64
11	CO-775	10,79	13,85	15,29	20,42	19,76	18,70	16,54	16,60
12	IAC-48-31	10,69	14,41	16,28	17,30	17,53	17,18	14,27	14,57
13	IAC-51-201	8,90	11,48	14,60	15,71	16,12	15,67	14,12	14,57
14	IAC-51-264	10,14	12,24	15,81	17,54	17,57	16,66	16,29	15,30
15	IAC-51-285	9,81	13,12	15,14	17,52	17,34	16,80	14,81	15,14
16	IAC-52-130	11,18	13,88	15,51	17,36	17,57	15,94	15,84	14,51
17	IAC-52-172	7,87	11,28	12,71	14,81	15,83	16,28	15,70	14,93
18	IAC-52-179	8,90	11,16	13,59	15,96	15,61	16,55	16,16	13,97
19	IAC-80-326	<u>9,20</u>	12,63	<u>15,07</u>	16,41	16,32	16,55	17,42	<u>16,33</u>
20	CB-40-13	13,07	14,90	15,92	16,45	16,92	16,29		
21	CB-41-76	11,11	11,59	13,20	14,91	14,32	14,21		
22	CB-53-98	10,28	12,48	12,81	14,18	14,99	14,59		
23	CB-47-355	10,20	12,37	13,57	15,50	16,23	15,54		
24	CP-51-22	10,84	12,16	13,87	15,59	15,37	15,09		
25	IAC-48-65	10,65	12,66	13,93	15,82	15,57	14,98		
26	IAC-52-150	10,58	12,99	14,93	15,25	16,03	16,02		
27	NA-56-79	12,61	14,58	15,42	16,12	16,89	16,33		

Tabela 2. Estimativas dos parâmetros do modelo Quadrático.

Nº	Variedade	$\hat{b}_0$	$\hat{b}_1$	$\hat{b}_2$
1	CB-40-13	11,8996	2,0119	-0,1841
2	CB-40-77	5,6584	3,8748	-0,3245
3	CB-41-76	6,3016	3,7856	-0,3292
4	CB-46-47	9,3702	3,0682	-0,2771
5	CB-49-260	8,1150	2,9862	-0,2495
6	CB-56-121	10,2747	2,0403	-0,1758
7	CB-56-126	9,1868	2,5339	-0,2065
8	CB-56-164	11,2119	1,8775	-0,1657
9	C0-178	6,8814	3,2846	-0,2860
10	C0-740	5,9585	4,0453	-0,3305
11	C0-775	5,8720	5,0841	-0,4807
12	IAC-48-31	7,5409	4,0479	-0,4109
13	IAC-51-201	5,5055	3,8908	-0,3576
14	IAC-51-264	6,1116	4,2563	-0,3949
15	IAC-51-285	6,2210	4,2201	-0,4020
16	IAC-52-130	8,0616	3,5968	-0,3539
17	IAC-52-172	4,4316	3,8620	-0,3190
18	IAC-52-179	4,8561	4,0820	-0,3623
19	IAC-80-326	6,3595	3,5962	-0,2961
20	CB-40-13	10,9060	2,4608	-0,2589
21	CB-41-76	8,7250	2,1944	-0,2098
22	CB-53-98	8,3300	2,2550	-0,1979
23	CB-47-355	7,1840	3,1713	-0,2889
24	CP-51-22	7,9400	2,8965	-0,2807
25	IAC-48-65	7,5280	3,3070	-0,3407
26	IAC-52-150	7,8460	3,1394	-0,2989
27	NA-56-79	10,5470	2,3657	-0,2309

4.2. Estimativas dos Parâmetros do Modelo da Segunda Lei de Mitscherlich.

O ajustamento da Segunda Lei de Mitscherlich aos dados experimentais pelo método de Marquardt, conforme a programação da seção 3.3.5., pôde ser feito, para toda variedade estudada, a partir do valor inicial b_{11} igual ao menor inteiro maior do que o Y_j máximo e de $b_{21}=b_{31}=b_{41}=0$. Deste modo, na segunda iteração houve uma modificação apenas em b_{31} e só a partir da terceira iteração ocorreram modificações simultaneamente nos quatro valores. Em muitos casos, depois de poucas iterações, foi alcançada uma soma de quadrados dos desvios razoavelmente pequena, mas sua diminuição exigiu continuar com um número grande de iterações, aumentando consideravelmente a estimativa de b_1 , diminuindo a de b_3 e alterando pouco as estimativas tanto de b_2 como de b_4 . Isso permite "imaginar" uma superfície de somas de quadrados estreita e alongada, na direção do eixo b_1 , que causa a convergência lenta observada. Na Tabela 6 do apêndice, onde fica indicada a forma da superfície, temos as estimativas obtidas por três critérios de finalização: quando, para $k=1,2,3,4$, $|b_{k(i+1)}-b_{ki}|$ atingiu um valor menor do que

$$1^{\circ}) 10^{-2}(b_{ki}+10^{-3})$$

$$2^{\circ}) 10^{-3}(b_{ki}+10^{-3})$$

$$3^{\circ}) 10^{-4}(b_{ki}+10^{-3})$$

Modificamos, então, a programação do método de Marquardt, dada em 3.3.5., adotando o primeiro critério como maneira de finalização e se, em alguma iteração, b_{1i} atinge um valor igual ou maior do que o dobro do inicial a pesquisa prossegue com o dobro de b_{1i} e com b_{3i} reduzido à metade. Quando o novo valor inicial (b_{1i}) duplica novamente, o critério é repetido. No programa devemos eliminar a linha 120 e modificar ou introduzir as seguintes linhas:

```

72 IF J=1 THEN 76
74 IF Y(J) < BB THEN 80
76 BB=INT(Y(J)+1)
90 B(1)=BB
100 FOR I=2 TO M
110 B(I)=0
670 IF D1(I) > 10[-2*(B(I)+10[-3)] THEN 700
752 IF IC=2 THEN 760
753 IF B(1) < 2*BB THEN 760
755 B(1)=B(1)*2
756 B(3)=B(3)/2
758 IC=IC+1
759 BB=B(1)

```

As estimativas obtidas deste modo, e aceitas neste trabalho, estão na Tabela 3.

Para efeito de comparação, e visualização, temos na Tabela 4 as somas de quadrados dos desvios e os valores máximos de Pol% da cana com as respectivas épocas e, a seguir, os gráficos das duas equações ajustadas, de Mitscherlich e Quadrática, para cada variedade.

Tabela 3. Estimativas dos parâmetros do modelo da Segunda Lei de Mitscherlich.

Nº	Variedade	Iterações	$\hat{b}_1$	$\hat{b}_2$	$\hat{b}_3$	$\hat{b}_4$
1	CB-40-13	8	32,6154	3,4547	0,057974	0,001469
2	CB-40-77	8	18,4890	0,1217	0,240052	0,000747
3	CB-41-76	7	18,5599	0,1573	0,252979	0,000918
4	CB-46-47	6	19,6116	0,6359	0,241455	0,000933
5	CB-49-260	6	19,1377	0,8190	0,190927	0,000771
6	CB-56-121	8	76,3991	3,8597	0,017167	0,001901
7	CB-56-126	7	16,6087	0,3824	0,337209	-0,000023
8	CB-56-164	6	21,3923	2,5092	0,117660	0,000970
9	CO-178	16	80,3807	1,8352	0,021087	0,003206
10	CO-740	7	19,4308	0,1763	0,232098	0,000545
11	CO-775	42	169,6710	1,0559	0,013920	0,005218
12	IAC-48-31	6	26,1400	0,6593	0,141309	0,003251
13	IAC-51-201	6	24,7750	0,6158	0,118399	0,002751
14	IAC-51-264	17	78,1376	1,2021	0,027842	0,004315
15	IAC-51-285	6	31,0080	0,7556	0,095464	0,003407
16	IAC-52-130	11	47,3563	1,5283	0,048852	0,003697
17	IAC-52-172	16	79,0446	1,1351	0,022241	0,003537
18	IAC-52-179	16	130,8260	1,1924	0,013773	0,004249
19	IAC-80-326	6	18,7998	0,3635	0,213554	0,000683
20	CB-40-13	16	28,7530	2,6474	0,077912	0,001886
21	CB-41-76	8	82,9975	3,3158	0,015545	0,002522
22	CB-53-98	14	26,0169	2,5694	0,065146	0,001451
23	CB-47-355	20	78,3646	2,0968	0,020619	0,003025
24	CP-51-22	14	75,9512	2,4050	0,020515	0,003090
25	IAC-48-65	12	76,4359	2,0183	0,022752	0,003783
26	IAC-52-150	6	17,9106	0,9655	0,198361	0,000610
27	NA-56-79	16	26,9168	2,7022	0,079488	0,001519

Tabela 4. Valores máximos de Pol% da cana ($Y_{\max}$) com a respectiva época ($X_{\max}$) e as somas de quadrados dos desvios (SQDesvios), para os dois modelos.

Nº	Variedade	Mitscherlich			Quadrático		
		SQDesvios	$X_{\max}$	$Y_{\max}$	SQDesvios	$X_{\max}$	$Y_{\max}$
1	CB-40-13	1,9890	5,35	17,35	1,8882	5,47	17,40
2	CB-40-77	12,6863	5,89	16,75	15,1453	5,97	17,23
3	CB-41-76	1,5364	5,42	16,70	3,6619	5,75	17,18
4	CB-46-47	1,1797	5,06	17,52	2,2688	5,54	17,86
5	CB-49-260	2,0488	5,92	16,74	2,7112	5,98	17,05
6	CB-56-121	6,5791	5,82	16,12	6,4313	5,80	16,19
7	CB-56-126	0,7702	—	—	2,0216	6,13	16,96
8	CB-56-164	0,7793	5,44	16,42	0,9397	5,67	16,53
9	CO-178	1,8263	5,66	16,20	1,8383	5,74	16,31
10	CO-740	0,2347	6,39	17,86	1,8380	6,12	18,34
11	CO-775	8,2868	5,08	19,27	8,9775	5,29	19,32
12	IAC-48-31	2,1212	4,44	17,42	3,5966	4,93	17,51
13	IAC-51-201	1,7208	5,11	15,90	2,6940	5,44	16,09
14	IAC-51-264	1,7742	5,18	17,51	2,2692	5,39	17,58
15	IAC-51-285	2,1741	4,91	17,17	3,2299	5,25	17,30
16	IAC-52-130	1,1412	4,82	17,15	1,5425	5,08	17,20
17	IAC-52-172	0,4969	6,00	15,98	0,4111	6,05	16,12
18	IAC-52-179	1,8853	5,58	16,14	1,4423	5,63	16,36
19	IAC-80-326	0,8118	6,18	16,87	1,8778	6,07	17,28
20	CB-40-13	0,0991	4,77	16,66	0,0759	4,75	16,75
21	CB-41-76	1,3978	5,26	14,31	1,2953	5,23	14,46
22	CB-53-98	0,6120	6,00	14,73	0,5834	5,70	14,76
23	CB-47-355	0,6477	5,61	15,88	0,6038	5,49	15,89
24	CP-51-22	0,9224	5,23	15,19	0,6625	5,16	15,41
25	IAC-48-65	0,7936	4,88	15,32	0,5247	4,85	15,55
26	IAC-52-150	0,1739	6,02	16,04	0,2905	5,25	16,09
27	NA-56-79	0,2244	5,25	16,54	0,2073	5,12	16,61

Figuras de (1) a (27). Gráficos da equações ajustadas :

— Mitscherlich

--- Quadrática

com as épocas de máximo Pol% da cana, M e Q respectivamente.

o ponto experimental

Devemos acrescentar que o método de Marquardt foi iniciado, para todas as variedades, com $b_{11}=500$ e sempre houve convergência, lenta quando b_1 tem valor pequeno, para resultados semelhantes aos obtidos.

Quanto aos métodos de Gauss e de Newton, a aplicação do procedimento anterior, para o início do processo iterativo, dará uma matriz Hessiana, ou sua aproximação, singular. Uma opção foi selecionar um conjunto de valores para cada parâmetro e adotar aquela combinação de valores, dentre todas as possíveis, que produzisse a menor soma de quadrados dos desvios. A forma da superfície destas impôs a seleção de muitos valores e, mesmo assim, em alguns casos o processo iniciou-se longe do mínimo, com uma conseqüente demora na convergência. Além disso, a matriz Hessiana nem sempre é definida positiva, devido à acumulação de erros de arredondamento, o que exigiu que o método de Newton também fosse modificado para garantir a convergência. Considerando essas dificuldades e que, por qualquer dos métodos, os resultados foram próximos, indicamos o método de Marquardt como o mais eficiente.

4.3. Análise dos Ajustamentos

Já é possível uma discussão dos resultados, levando-se em conta, principalmente, a propriedade da função de Mitscherlich, a qual motivou este trabalho, de poder apre

sentar um decrescimento menos intenso após o máximo. Em primeiro lugar, destaca-se a variedade de número 7 (CB-56-126) cujos dados levaram a um ajustamento pela Segunda Lei de Mitscherlich que não indica um máximo, pois temos $\hat{b}_4 < 0$. Aí, o último ponto ainda apresenta um valor alto de Pol% da cana e, desde que fosse a média de algumas repetições, deveria ser mais bem analisado. Se, entretanto, rejeitarmos a hipótese de que os dados tenham sido obtidos com precisão insuficiente, o comportamento da Segunda Lei indicaria que o período de experimentação foi curto. Não se tem, com segurança, a época em que a porcentagem de Pol começa a decrescer. As outras 26 variedades podem ser divididas em dois grupos. Um, que abrange aquelas para as quais a Segunda Lei, ao apresentar $\hat{b}_4$ positivo e mais próximo de zero, indica um decréscimo pouco intenso de Pol% da cana depois que o máximo foi atingido, aliás, acompanhando a tendência dos dados experimentais. Enquadram-se aí as variedades de números 2,3,4,5,10,19 e 26, ou seja, CB-40-77, CB-41-76, CB-46-47, CB-49-260, CO-740, IAC-80-326 e IAC-52-150. Outro, que compreende aquelas para as quais os dois modelos descrevem de forma semelhante o fenômeno de maturação, mas nas quais, ainda assim, a Segunda Lei é mais confiável para extrapolação. Enquanto que para as variedades do primeiro grupo a soma de quadrados dos desvios obtida pelo ajustamento da Lei de Mitscherlich foi sempre menor do que a obtida pelo ajustamento da equação Quadrática, no segundo grupo, se não foi menor, ficou próxima. Percebem-se maiores dificuldades,

devido ao período mais curto de experimentação, no estudo das variedades de 20 a 27 onde, independentemente do que os modelos possam indicar, a ausência de outros pontos coloca em dúvida se a tendência é de um decrescimento rápido ou lento. Quanto à época de máxima Pol% da cana, a Lei de Mitscherlich indica o início de outubro para a variedade 26 (IAC-52-150) enquanto que o modelo Quadrático indica cerca de três semanas antes. Mas, para as outras variedades, esta diferença nunca foi superior a duas semanas, sendo de apenas alguns dias na maioria dos casos. Um período de experimentação curto pode trazer outras consequências graves. Assim, se, por exemplo, a porcentagem de Pol para a variedade de número 5 (CB-49-260) tivesse sido pesquisada até o sexto mês apenas, teríamos uma indicação de máximo, aproximadamente, dois meses antes do obtido.

Para uma análise por critérios estatísticos, a Tabela 5 expõe, usando as definições da seção 3.2.3, e considerando somente os valores médios: o Coeficiente de Variação, o Coeficiente de Determinação e os valores do Teste F para a regressão Quadrática e para a regressão pela Segunda Lei de Mitscherlich, à qual atribuímos 3 graus de liberdade. Uma regressão significativa ao nível de 5% indicou-se por um asterisco e por dois asteriscos a significação ao nível de 1%. A comparação, em cada variedade, dos Coeficientes de Variação e dos Coeficientes ajustados de Determinação, obtidos pelo ajustamento dos dois modelos, não permitiu decidir se um de-

les é mais adequado, por terem sido sempre próximos os resultados. Entretanto, esses coeficientes se afastaram dos teoricamente ideais, 0 (zero) para o primeiro e 1 (um) para o outro, principalmente o de Variação, nas variedades que apresentaram pontos intermediários de Pol% da cana excessivamente discrepantes dos demais (2, 6 e 11), motivando suspeitas sobre tais dados. Por outro lado, nos casos em que as duas curvas praticamente coincidem, o valor de F para a regressão Quadrática ficou um tanto acima do F para a Segunda Lei de Mitscherlich. Como, para as variedades de 20 a 27, os dados são médias de três repetições, cujos valores são conhecidos e estão expostos na Tabela 7 do apêndice, é possível determinar uma outra estimativa, mais correta, do erro experimental. A análise foi, então, modificada, conforme a discussão na seção 3.2.3., e os resultados obtidos estão na Tabela 8 do apêndice. As conclusões anteriores, entretanto, não se alteraram, especialmente quanto a discrepância entre os valores de F quando as duas curvas quase coincidem. Esses resultados ressaltam que a eleição entre o modelo linear e o não linear por critérios exclusivamente estatísticos, próprios para o primeiro modelo, não é correta.

Tabela 5. Coeficientes de Variação (C.V.), Coeficientes ajustados de Determinação ($\bar{R}^2$) e valores do Teste F para a Segunda Lei de Mitscherlich e para a Regressão Quadrática.

Nº Variedade	Mitscherlich			Quadrático		
	C.V.(%)	$\bar{R}^2$	F	C.V.(%)	$\bar{R}^2$	F
1 CB-40-13	4,34	0,7299	7,31*	3,78	0,7949	14,56**
2 CB-40-77	12,02	0,6878	6,14	11,74	0,7018	9,24*
3 CB-41-76	4,15	0,9465	42,30**	5,73	0,8980	31,83**
4 CB-46-47	3,37	0,9289	31,47**	4,18	0,8906	29,48**
5 CB-49-260	4,71	0,9010	22,23**	4,85	0,8951	30,88**
6 CB-56-121	8,57	0,4364	2,81	7,57	0,5593	5,44
7 CB-56-126	2,86	0,9524	47,70**	4,15	0,9001	32,53**
8 CB-56-164	2,86	0,8847	18,90**	2,81	0,8888	28,96**
9 CO-178	4,70	0,9132	25,54**	4,22	0,9301	47,55**
10 CO-740	1,54	0,9940	386,99**	3,85	0,9624	90,48**
11 CO-775	8,73	0,7984	10,24*	8,12	0,8253	17,53**
12 IAC-48-31	4,77	0,9000	21,99**	5,55	0,8643	23,29**
13 IAC-51-201	4,72	0,9303	32,12**	5,28	0,9127	35,57**
14 IAC-51-264	4,38	0,9368	35,61**	4,43	0,9354	51,66**
15 IAC-51-285	4,93	0,9166	26,63**	5,37	0,9008	32,79**
16 IAC-52-130	3,51	0,9328	33,38**	3,65	0,9273	45,65**
17 IAC-52-172	2,58	0,9852	156,34**	2,10	0,9902	354,80**
18 IAC-52-179	4,91	0,9364	35,33**	3,84	0,9611	87,37**
19 IAC-80-326	3,01	0,9732	85,75**	4,09	0,9504	68,09**
20 CB-40-13	1,43	0,9751	66,17*	1,02	0,9873	194,75**
21 CB-41-76	6,32	0,7125	5,13	4,97	0,8224	12,58*
22 CB-53-98	4,18	0,8999	15,99	3,34	0,9364	37,82**
23 CB-47-355	4,09	0,9396	26,93*	3,23	0,9625	65,13**
24 CP-51-22	4,91	0,8773	12,91	3,40	0,9412	41,04**
25 IAC-48-65	4,52	0,8995	15,91	3,00	0,9557	54,92**
26 IAC-52-150	2,06	0,9809	86,74*	2,18	0,9788	116,24**
27 NA-56-79	2,19	0,9533	35,06*	1,72	0,9713	85,53**

5. CONCLUSÕES

Dos métodos do gradiente estudados, para a estimação dos parâmetros da Segunda Lei de Mitscherlich, o de Marquardt teve melhor desempenho. Foi proposto, e empregado, um algoritmo que, incorporado ao método de Marquardt, acelerou a convergência do processo e eliminou a necessidade de uma pesquisa prévia de valores iniciais. Mais ainda, após poucas iterações, sempre ficou definida a ordem de grandeza tanto de b_2 como de b_4 e se b_1 aumentaria ou não, isto é, se a Lei de Mitscherlich apresentaria um comportamento equivalente ao da parábola ou se teria um decrescimento menos intenso após o máximo. Concluiu-se, também, que os problemas de convergência estão relacionados com a forma da superfície das somas de quadrados, estreita e alongada na direção do eixo b_1 .

Uma análise visual dos gráficos obtidos evidenciou que os ajustamentos se assemelham, por um modelo ou

outro, até o máximo, mas, daí em diante, a Segunda Lei de Mitscherlich acompanha melhor a tendência dos dados, tornando-se mais confiável a extrapolação. Entretanto, mesmo para a Segunda Lei, esta confiabilidade diminuiu para as variedades de 20 a 27, pois, o máximo ocorreu no final do período experimental e não sobraram pontos suficientes para caracterizar o fenômeno a partir daí. Conclui-se, então, que a Lei de Mitscherlich dará uma visão mais informativa desde que o período experimental seja suficientemente longo, como para as variedades de 1 a 19. Na verdade, tudo indica que também o intervalo de um mês, entre uma medição e outra, deva ser diminuído.

Quanto à análise estatística, Coeficientes de Variação acima de 6%, por qualquer dos modelos, ocorreram para as variedades com dados intermediários discrepantes. Por outro lado, os valores do Coeficiente de Determinação, corrigido ou não, e do Teste F não foram suficientes para indicar o melhor ajustamento.

6. LITERATURA CITADA

- BARD, Y., 1970. Comparison of Gradient Methods for the Solution of Nonlinear Problems. SIAM J. Num. Anal. 7: 157-186.
- BARD, Y., 1974. Nonlinear Parameter Estimation. Nova York, Academic Press Inc. 341 p.
- BAYMA, A.C., 1975. Manual de Técnicas de Laboratório e Fabricação de Açúcar de Cana. Rio de Janeiro, Instituto de Açúcar e do Alcool, p. 92-109, Coleção Canavieira nº 18.
- DAVIDON, W.C., 1959. Variable Metric Method for Minimization. Atomic Energy Commission Research and Development Report nº 5990, Argonne National Laboratories.
- DRAPER, N.R. e H. SMITH, 1981. Applied Regression Analysis. 2ª edição, Nova York, John Wiley. 710 p.
- FLETCHER, R. e M.J.D. POWELL, 1963. A Rapidly Convergent Descent Method for Minimization. The Computer Journal. 6: 163-168.

- FLETCHER, R., 1970. A New Approach to Variable Metric Algorithms. The Computer Journal. 13: 317-322.
- GUTTMAN, I. e D.A. MEETER, 1965. On Beale's Measures of Nonlinearity. Technometrics. 7: 623-637.
- HARTLEY, H.O., 1961. The Modified Gauss-Newton Method for the Fitting of Nonlinear Regression Functions by Least Squares. Technometrics. 3: 269-280.
- HARTLEY, H.O., 1964. Exact Confidence Regions for the Parameters in Nonlinear Regression Law. Biometrika. 51: 347-353.
- HOFFMANN, R. e S. VIEIRA, 1977. Análise de Regressão. São Paulo, Ed. da Universidade de São Paulo. 339 p.
- KITRELL, J.R., R. MEZAKI e C.C. WATSON, 1965. Estimation of Parameters for Nonlinear Least Squares Analysis. Industrial and Engineering Chemistry. 57: 18-27.
- LEVENBERG, K., 1944. A Method for the Solution of Certain Nonlinear Problems in Least Squares. Quart. Appl. Math. 2: 164-168.
- MARQUARDT, D.W., 1963. An Algorithm for Least Squares Estimation of Nonlinear Parameters. SIAM J. Num. Analysis. 11: 431-441.
- PIMENTEL GOMES, F., 1951. A Interpolação da Lei de Mitscherlich e a Análise da Variância em Experimentos de Adubação. Anais da E.S.A. "Luiz de Queiroz". 8: 185-204.
- PIMENTEL GOMES, F., 1953. The Use of Mitscherlich Law in the Analysis of Experiments with Fertilizers. Biometrics. 9: 498-517.
- PIMENTEL GOMES, F., 1969. Novos Aspectos do Estudo Econômico

de Adubação. Fertilité. 34: 3-9.

PIMENTEL GOMES, F., 1978. A Lei de Mitscherlich Aplicada a Ensaaios de Adubação. Anais da Reunião Brasileira da Sociedade Internacional de Biometria na Comemoração do 90º Aniversário do Instituto Agrônomo de Campinas.

PIMENTEL GOMES, F. e H. CAMPOS, 1966. Resultados de Ensaaios de Adubação. In: Cultura e Adubação do Milho. Instituto Brasileiro da Potassa. Brasil.

PIMENTEL GOMES, F. e E. MALAVOLTA, 1949. Aspectos Matemáticos e Estatísticos da Lei de Mitscherlich. Anais da E.S.A."Luiz de Queiroz". 6: 193-229.

PIMENTEL GOMES, F. e I.R. NOGUEIRA, 1975. Extrapolação ou Projeção: Uma técnica Difícil e Perigosa. Ciência e Cultura. 29: 1386-1389.

SEAL, H.L., 1967. The Historical Development of the Gauss Linear Model. Biometrika. 54: 1-24.

SMITH, F.B. e D.F. SHANNO, 1971. An Improved Marquardt Procedure for Nonlinear Regressions. Technometrics. 13: 63-74.

SILVA, Maria A.P., 1978. Segunda Aproximação de Mitscherlich, $Y=A(1-10^{-c(x+b)})10^{-k(x+b)^2}$, Aplicada à Adubação Mineral. Piracicaba, ESALQ/USP, 96 p. (Dissertação de Mestrado).

SILVA, Maria A.P., 1980. 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. Piracicaba, ESALQ/USP, 85 p. (Tese de Doutorado).

UDO, Margareth C.T., 1983. Estudo de Funções que se Ajustam à Maturação da Cana-de-Açúcar. Piracicaba, ESALQ/USP, 74 p. (Dissertação de Mestrado).

ZAGATTO, A.G. e F. PIMENTEL GOMES, 1967. Aspectos Econômicos da Adubação. Em MALAVOLTA, E., Manual de Química Agrícola. Adubos e Adubações. 2.^a Ed. Biblioteca Agronômica "Ceres".

A P Ê N D I C E

Tabela 6. Estimativas dos parâmetros da Segunda Lei de Mitscherlich obtidas pelo método de Marquardt finalizado quando, para todo k , $|b_{k(i+1)} - b_{ki}|$ atingiu um valor menor do que (1) $10^{-2}L$, (2) $10^{-3}L$ e (3) $10^{-4}L$ com $L = b_{k,i} + 10^{-3}$.

Nº Variedade	Iter.	$\hat{b}_1$	$\hat{b}_2$	$\hat{b}_3$	$\hat{b}_4$	SQDesvios
1 CB-40-13	(1) 8 (2) 287 (3) 324	32,6154 237,0380 295,6750	3,4547 4,4091 4,4325	0,057974 0,005540 0,004402	0,001469 0,002136 0,002153	1,9891 1,8870 1,8856
2 CB-40-77	(1) 8 (2) 11 (3) 11	18,4890 18,4875	0,1217 0,1215	0,240052 0,240120	0,000747 0,000746	12,6864 12,6863
3 CB-41-76	(1) 7 (2) 7 (3) 7	18,5599	0,1573	0,252979	0,000918	1,5364
4 CB-46-77	(1) 6 (2) 6 (3) 6	19,6116	0,6359	0,241455	0,000933	1,1797
5 CB-49-260	(1) 6 (2) 6 (3) 6	19,1377	0,8190	0,190927	0,000771	2,0488
6 CB-56-121	(1) 42 (2) 277 (3) 277	73,6452 329,9340	3,8563 4,1172	0,018024 0,003623	0,001909 0,002135	6,5593 6,5137
7 CB-56-126	(1) 7 (2) 7 (3) 7	16,6087	0,3824	0,337209	-0,000023	0,7702
8 CB-56-164	(1) 6 (2) 8 (3) 8	21,3923 21,4052	2,5092 2,5115	0,117660 0,117485	0,000970 0,000971	0,7793 0,7793
9 CO-178	(1) 46 (2) 259 (3) 259	65,3354 260,0910	1,7851 1,9868	0,026939 0,006034	0,003116 0,003546	1,8071 1,7754

Tabela 6. Continuação

Nº Variedade		Iter.	$\hat{b}_1$	$\hat{b}_2$	$\hat{b}_3$	$\hat{b}_4$	SQDesvios
10 CO-740	(1) (2) (3)	7	19,4308	0,1763	0,232098	0,000545	0,2347
11 CO-775	(1) (2) (3)	68 217	168,1490 499,1740	1,0550 1,1148	0,014057 0,004532	0,005215 0,005461	8,2875 8,2317
12 IAC-48-31	(1) (2) (3)	6	26,1400	0,6593	0,141309	0,003251	2,1212
13 IAC-51-121	(1) (2) (3)	6 7	24,7750 24,7811	0,6158 0,6161	0,118399 0,118346	0,002751 0,002752	1,7208 1,7208
14 IAC-51-264	(1) (2) (3)	31 87 91	52,0185 76,3932 76,9991	1,0818 1,1966 1,1985	0,045378 0,028600 0,028340	0,003950 0,004299 0,004305	1,7813 1,7734 1,7733
15 IAC-51-285	(1) (2) (3)	6 8	31,0080 31,0034	0,7556 0,7554	0,095465 0,095488	0,003407 0,003407	2,1741 2,1741
16 IAC-52-130	(1) (2) (3)	7 8	47,3000 47,3389	1,5276 1,5281	0,048929 0,048879	0,003695 0,003696	1,1412 1,1412
17 IAC-52-172	(1) (2) (3)	51 209 210	67,6274 213,0500 213,0640	1,1062 1,2441 1,2441	0,026706 0,007721 0,007720	0,003447 0,003902 0,003902	0,4723 0,4519 0,4519
18 IAC-52-179	(1) (2) (3)	72 249 252	157,6620 618,7460 623,7630	1,2219 1,2828 1,2830	0,011450 0,002797 0,002774	0,004358 0,004577 0,004578	1,7178 1,6722 1,6722
19 IAC-80-326	(1) (2) (3)	6	18,7998	0,3635	0,213554	0,000683	0,8118

Tabela 6. Continuação

Nº Variedade	Iter.	$\hat{b}_1$	$\hat{b}_2$	$\hat{b}_3$	$\hat{b}_4$	SQDesvios
20	(1) 16	28,7530	2,6474	0,077912	0,001886	0,0990
CB-40-13	(2) 149	63,6393	3,2675	0,026552	0,002626	0,0846
	(3) 229	78,9178	3,3454	0,020664	0,002726	0,0842
21	(1) 12	40,6919	3,1261	0,034089	0,002045	2,1465
CB-41-76	(2) 189	195,1240	3,4149	0,006286	0,002688	1,3130
	(3) 249	257,3460	3,4341	0,004722	0,002721	1,3109
22	(1) 14	26,0169	2,5694	0,065146	0,001451	0,6122
CB-53-98	(2) 147	53,1355	3,0381	0,025556	0,002105	0,5961
	(3) 221	76,6887	3,1504	0,016784	0,002269	0,5951
23	(1) 56	72,9124	2,0903	0,022430	0,003005	0,6434
CB-47-355	(2) 279	330,6800	2,2428	0,004509	0,003441	0,6181
	(3) 328	397,7290	2,2495	0,003734	0,003461	0,6170
24	(1) 58	74,3495	2,4005	0,021368	0,003085	0,7000
CP-51-22	(2) 277	300,8070	2,5545	0,004835	0,003467	0,6756
	(3) 277	300,8070	2,5545	0,004835	0,003467	0,6756
25	(1) 54	74,3777	2,0135	0,023855	0,003776	0,5838
IAC-48-65	(2) 264	326,8740	2,1652	0,004943	0,004235	0,5588
	(3) 264	326,8740	2,1652	0,004943	0,004235	0,5588
26	(1) 6	17,9106	0,9655	0,198361	0,000610	0,1739
IAC-52-150	(2) 6	17,9106	0,9655	0,198361	0,000610	0,1739
	(3) 6	17,9106	0,9655	0,198361	0,000610	0,1739
27	(1) 16	26,9168	2,7022	0,079488	0,001519	0,2243
NA-56-79	(2) 141	49,6351	3,2819	0,033264	0,002160	0,2171
	(3) 158	51,4633	3,3018	0,031798	0,002184	0,2171

Tabela 7. Resultados de Pol% da cana, obtidos pela Usina São João, Araras (S.P), no ano de 1979.

Nº Variedade	Amostra	Meses					
		1 maio	2 junho	3 julho	4 agos.	5 set.	6 out.
20	1	12,59	14,62	15,74	16,15	17,04	16,23
CB-40-13	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
	Média	13,07	14,90	15,92	16,45	16,92	16,29
21	1	13,04	11,54	13,33	14,83	14,78	14,35
CB-41-76	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
	Média	11,11	11,59	13,20	14,91	14,32	14,21
22	1	10,35	12,31	13,10	14,32	15,62	15,18
CB-53-98	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
	Média	10,28	12,48	12,81	14,18	14,99	14,59
23	1	10,15	12,23	13,37	15,45	16,87	15,28
CB-47-355	2	9,95	12,52	13,52	15,69	15,86	15,52
	3	10,51	12,36	13,82	15,36	15,96	15,82
	Média	10,20	12,37	13,57	15,50	16,23	15,54

Tabela 7. Continuação

Nº Variedade	Amostra	Meses					
		1 maio	2 junho	3 julho	4 agos.	5 set.	6 out.
24	1	10,66	11,92	13,58	15,37	13,92	15,43
CP-51-22	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
	Média	10,84	12,16	13,87	15,59	15,37	15,09
25	1	10,66	12,56	13,65	15,69	15,54	14,55
IAC-48-65	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
	Média	10,65	12,66	13,93	15,82	15,57	14,98
26	1	9,62	13,10	15,57	15,60	15,85	15,75
IAC-52-150	2	11,05	12,83	14,42	15,18	16,17	15,83
	3	11,07	13,05	14,80	14,97	16,08	16,48
	Média	10,58	12,99	14,93	15,25	16,03	16,02
27	1	11,94	14,37	15,84	16,06	16,48	16,54
NA-56-79	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
	Média	12,61	14,58	15,42	16,12	16,89	16,33

Tabela 8. Valores do Teste F para a Regressão e para os Desvios da Regressão; Coeficientes de Variação (C.V.) e Coeficientes de Determinação (R^2) para as variedades de 20 a 27, com três repetições em cada época, de acordo com os modelos: Mitscherlich e Quadrático.

Nº Variedade	Modelo	F Regr.	F Desv. Regr.	C.V.(%)	R^2
20	Mitscherlich	81,94**	1,26	2,22	0,9442
CB-40-13	Quadrático	123,21**	0,64	2,22	0,9465
21	Mitscherlich	16,81**	3,27	6,04	0,7311
CB-41-76	Quadrático	25,45**	2,02	6,04	0,7381
22	Mitscherlich	76,23**	4,77 *	3,32	0,9139
CB-53-98	Quadrático	114,56**	3,04	3,32	0,9156
23	Mitscherlich	277,19**	10,32 **	2,21	0,9622
CB-47-355	Quadrático	416,49**	6,41 **	2,21	0,9639
24	Mitscherlich	39,73**	3,08	4,85	0,8678
CP-51-22	Quadrático	60,47**	1,47	4,85	0,8805
25	Mitscherlich	214,64**	13,40 **	2,13	0,9432
IAC-48-65	Quadrático	326,47**	5,92 *	2,13	0,9564
26	Mitscherlich	100,93**	1,16	3,31	0,9548
IAC-52-150	Quadrático	150,61**	1,30	3,31	0,9499
27	Mitscherlich	69,64**	1,99	2,68	0,9289
NA-56-79	Quadrático	104,61**	1,23	2,68	0,9303