



UNIVERSIDADE FEDERAL DO GOIÁS
Escola de Engenharia Elétrica e de Computação
Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Elétrica e de Computação



AVALIAÇÃO DE MÉTODOS PARA PARAMETRIZAÇÃO DE MODELOS APLICADOS EM SISTEMAS AGROPECUÁRIOS

OZANIVAL DARIO DANTAS

Orientador: Marco Antonio Assfalk de Oliveira

Co-orientador: Luis Gustavo Barioni

Goiânia
2007

OZANIVAL DARIO DANTAS

AVALIAÇÃO DE MÉTODOS PARA PARAMETRIZAÇÃO DE MODELOS APLICADOS EM SISTEMAS AGROPECUÁRIOS

Dissertação apresentada ao Curso de Mestrado em Engenharia Elétrica e de Computação da Universidade Federal de Goiás, para obtenção do Título de Mestre em Engenharia Elétrica e de Computação.

Área de concentração:

Engenharia de Computação

Orientador:

Prof. Marco Antonio Assfalk de Oliveira, *PhD.*

Co-orientador:

Luis Gustavo Barioni, *PhD.*

OZANIVAL DARIO DANTAS

AVALIAÇÃO DE MÉTODOS PARA PARAMETRIZAÇÃO DE MODELOS APLICADOS EM SISTEMAS AGROPECUÁRIOS

Dissertação defendida no Curso de Mestrado em Engenharia Elétrica e de Computação da Universidade Federal de Goiás, para a obtenção do grau de Mestre, aprovada em 31 de outubro de 2007, pela Banca Examinadora constituída pelos seguintes examinadores:

Prof. Marco Antonio Assfalk de Oliveira, *PhD.* – UFG
Presidente da Banca

Luis Gustavo Barioni, *PhD.* – Embrapa Cerrados

Prof. Dr. Leonardo da Cunha Brito – UFG

*Dedico esse trabalho a Deus,
aos meus pais e ao meu filho Diego,
com muito amor.*

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus, pelo dom da vida, pelos desafios e pela força para enfrentá-los e vencê-los.

Aos meus queridos pais por me trazerem a este mundo, pela educação, amor, e incentivo ao estudo e o desenvolvimento em uma carreira profissional. Mesmo com tantas dificuldades sempre procuraram o melhor e a prosperidade a mim e meus irmãos. Eu os amo muito.

Aos meus irmãos que são pessoas importantes na minha vida. Sei que desejam o melhor para mim e eu da mesma forma a eles. Também amo muito eles.

A minha irmã Rosana, que me permitiu ficar em seu apartamento durante a elaboração da dissertação, o que foi essencial para que eu tivesse a paz e a tranquilidade necessária para realizar o trabalho. Obrigado Minha.

A Denise Fonseca Chaves pela compreensão ao ficar com o Diego quando eu não pude e pelo apoio com o Laptop. Obrigado Dena.

Ao amigo Sérgio Bicalho, amigo que o mestrado me trouxe e grande parceiro de composições musicais. Obrigado pela companhia e por ser este grande “pro” em tudo que faz. Grande abraço, meu amigo.

Aos professores da Escola de Engenharia Elétrica e de Computação da Universidade Federal de Goiás pela base teórica necessária para desenvolver este trabalho.

Ao professor e orientador Marco Antonio Assfalk de Oliveira pelo apoio, compreensão e orientações sempre bem precisas.

À EMBRAPA pela oportunidade.

Aos doutores e amigos: Hércules Antônio do Prado, Marcos Mota do Carmo Costa e Euzébio Medrado da Silva que acreditaram que eu conseguiria vencer este desafio e me indicaram para cursar o mestrado. MUITÍSSIMO obrigado.

Aos mentores Luis Gustavo Barioni e Euzébio Medrado da Silva, amigos que sempre me ajudaram e me orientaram com grande sapiência, dedicação e principalmente paciência. Terei sempre uma dívida com vocês. Obrigado.

Finalmente, ao meu filho Diego que com sua alegria contagiante e extrema criatividade sempre me trouxe momentos de descontração e descanso mental. Te amo “Baby Look Son”.

RESUMO

Modelos matemáticos são representações de fenômenos naturais, consideradas indispensáveis, atualmente, para expressão do conhecimento científico, possibilitando novas descobertas, avaliação de conceitos e o desenvolvimento de sistemas de apoio a decisões. A parametrização, também chamada de ajuste ou identificação de parâmetros é, por sua vez, um dos processos mais essenciais na modelagem matemática e na identificação de sistemas, uma vez que o estabelecimento de valores adequados para os parâmetros é uma dos requisitos básicos para que o modelo possa representar realisticamente o comportamento do sistema. Na tentativa de aprimorar a acurácia do modelo modelistas empregam métodos de otimização numérica para a estimativa de parâmetros. Diversos métodos de otimização vem sendo criados, para esse e outros propósitos, e aplicados à parametrização de modelos ao longo do tempo, na tentativa de encontrar, mais eficientemente, soluções mais confiáveis. Nesse contexto, este trabalho objetivou comparar alguns desses métodos e ranqueá-los quanto à eficiência, eficácia, confiabilidade e robustez. Para isso foram criados índices para quantificar a confiabilidade e a robustez de um método. Os resultados mostraram que tais índices são bastante úteis e ferramentas promissoras para a comparação de métodos de otimização. Foram comparados os métodos: Downhill Simplex (DS), Quasi-Newton (QN), e Estratégia Evolutiva (EE) com duas estratégias de seleção ($ES_{\mu,\lambda}$ e $ES_{\mu+\lambda}$), na parametrização dos modelos Oltjen, van Genuchten e Beta. Os resultados definiram que o melhor método para parametrizar o modelo Beta é o DS por apresentar-se como o mais eficiente, o mais eficaz e o mais confiável. QN foi mais eficaz e mais confiável para parametrizar o modelo de van Genuchten, porém não foi o mais eficiente. Para o modelo Oltjen os métodos DS e QN foram igualmente eficazes e superiores à EE. Entretanto, o método DS foi o mais eficiente. Foi concluído, portanto, que o desempenho do método esteve fortemente relacionado ao problema (modelo + dados), pois os métodos não apresentaram repetibilidade quanto ao ranking de confiabilidade para diferentes modelos, com exceção da $EE_{\mu+\lambda}$, que ranqueou duas vezes como o segundo método mais confiável. A $EE_{\mu+\lambda}$ mostrou-se mais promissora que a $EE_{\mu,\lambda}$ para a parametrização dos modelos matemáticos testados. Dentro dos critérios adotados, nenhum dos métodos de otimização testados foi considerado robusto para a parametrização dos modelos.

Palavras-chave: Otimização, van Genuchten, Oltjen, Beta, Estratégia Evolutiva, Downhill Simplex, Quasi-Newton.

ABSTRACT

Mathematical models are representations of natural phenomena and are essential, nowadays, to the expression of scientific knowledge, allowing for new discoveries, evaluation of concepts and for the development of decision support systems. Parameterization, also known as parameter estimation or parameter identification is one of the most essential processes of mathematical modeling and system identification, because the establishment of adequate parameter values is one of the basic requirements for the model to represent realistically the system. In order to improve the accuracy of the models, some modelers apply numerical optimization methods for parameter estimation. Several optimization methods have been developed and applied to parameter estimation, in an attempt to achieve more reliable solutions with greater efficiency. In this context, this work compares and ranks some of the available optimization methods regarding their efficiency, effectiveness, reliability and robustness. In order to do that, metrics were created to quantify method reliability and robustness. The results have shown that those indices are useful and promising tools in the comparison of optimization methods. The Downhill Simplex (DS), Quasi-Newton (QN) and Evolutionary Strategies (ES) with two selection strategies (ES μ,λ and ES $\mu+\lambda$), were compared for the parameterization of the Oltjen, van Genuchten and Beta models using several data sets. The results have shown that the most efficient, effective and reliable method was the DS for the parameterization of the Beta model. The QN method was the most effective and reliable, but not the most efficient, to parameterize van Genuchten's model. For the Oltjen model, the DS and QN methods were equally effective and superior to the ES. It was observed, therefore, that the performance of the method was strongly related to the problem (model + dataset) as the ranking for the different criteria did not present repeatability, except for the ES $\mu+\lambda$ which ranked twice as the most reliable. The ES $\mu+\lambda$, has shown greater potential than the ES μ,λ . None of the methods tested was considered robust using the criteria adopted in this work.

Keywords: Optimization, Downhill Simplex, Quasi-Newton, Evolution Strategy, Oltjen, van Genuchten, Beta.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Possíveis formas de redefinição do <i>Simplex</i> . (a) Reflexão em busca do melhor ponto; (b) Reflexão e expansão na direção do melhor ponto; (c) Contração de uma dimensão para o melhor ponto e (d) Encolhimento, contração de todas as dimensões para o centro do simplex (PRESS et al., 1990).....	24
Figura 3 – Densidade de probabilidade das diferenças.....	41
Figura 4 – Curvas da distribuição exponencial, ajustadas às freqüências acumuladas de ocorrência dos valores percentuais da diferença entre o valor de SQE do método e o melhor resultado encontrado por todos os métodos. Seguimentos tracejados verticais correspondem à diferença percentual de SQE associada ao percentil de 95% para cada método.....	43
Figura 5 – Porcentagem de contribuição de cada método na execução da função objetivo.....	45
Figura 6 – Densidade de probabilidade das diferenças.....	47
Figura 7 – Curvas da distribuição exponencial, ajustadas às freqüências acumuladas de ocorrência dos valores percentuais da diferença entre o valor de SQE do método e o melhor resultado encontrado por todos os métodos. Seguimentos tracejados verticais correspondem à diferença percentual de SQE associada ao percentil de 95% para cada método.....	49
Figura 8 – Porcentagem do total de execuções da função objetivo pelos métodos avaliados	51

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Limites de valores para os parâmetros do modelo de Oltjen.....	27
Tabela 2 – Limites de valores para os parâmetros do modelo de Beta.....	28
Tabela 3 – Limites de valores dos parâmetros do modelo de <i>van Genuchten</i>	31
Tabela 4 – Limites do θ_s para cada um dos 102 casos do modelo.....	31
Tabela 5 – Quantidade de dados observados.....	34
Tabela 6 – Número Equalizado de Avaliações (NEA) dos métodos.....	38
Tabela 7 – Número de casos dos melhores resultados encontrados.....	40
Tabela 8 – Número de resultados por faixa de erro em relação ao melhor resultado obtido por cada método de otimização.....	41
Tabela 9 – Resultados da aplicação do teste F.....	42
Tabela 10 – Resultados da Análise da Parametrização do Modelo Beta.....	44
Tabela 11 – Número Equalizado de Avaliações (NEA) dos métodos.....	44
Tabela 12 – Número de casos dos melhores resultados encontrados.....	46
Tabela 13 – Número de casos dos métodos distribuídos nas faixas percentuais de erro acima do melhor resultado.....	47
Tabela 14 – Resultados da aplicação do teste F.....	48
Tabela 15 – Resultados da Análise da Parametrização do Modelo <i>van Genuchten</i>	50
Tabela 16 – Número Equalizado de Avaliações (NEA) dos métodos.....	50
Tabela 18 – Resultados da Análise da Parametrização do Modelo Oltjen.....	52
Tabela 19 – Classificações dos métodos referentes aos critérios comparativos em cada modelo.	53
Tabela 20 – Resultado quantitativo referente aos critérios comparativos em cada modelo.....	53
Tabela 21 – Índices de robustez dos métodos considerando a confiabilidade nos modelos para o percentil 95	54

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

UFG	Universidade Federal de Goiás
EMBRAPA	Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária
EE	Estratégia Evolutiva
SQE	Soma de Quadrados dos Erros
GL	Grau de Liberdade
DS	Downhill Simplex
QS	Quasi-Newton

LISTA DE SÍMBOLOS

EE($\mu+\lambda$)	Estratégia Evolutiva com seleção “Plus”
EE(μ,λ)	Estratégia Evolutiva com seleção “Comma”
τ'	Taxa de aprendizado geral
τ	Taxa de aprendizado sensível a coordenada
e	Base dos logaritmos naturais
σ	Tamanho de passo de mutação
DNA	Massa de ácido desoxirribonucléico (g)
PROT	Massa de proteína (kg)
GORD	Massa de gordura (kg)
EProt	Concentração de energia da proteína
EGord	Concentração de energia da gordura
ELm	Concentração de energia para manutenção
ELg	Concentração de energia para ganho
θ	Conteúdo de água no solo (g/g)
θ_r	Conteúdo residual de água no solo (g/g)
θ_s	Conteúdo saturado de água no solo (g/g)
α	Parâmetro de ajuste (kPa^{-1})
kPa	Unidade de medida quilopascal
F^{-1}	Beta incompleta inversa
NEA	Número Equalizado de Avaliações

Sumário

RESUMO	6
ABSTRACT	7
LISTA DE FIGURAS	8
LISTA DE TABELAS	9
LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS	10
LISTA DE SÍMBOLOS	11
1 INTRODUÇÃO	13
2 REVISÃO DA LITERATURA	15
2.1 TEORIA DE BASE DA ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS	15
3 MATERIAL E MÉTODOS	19
3.1 MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO NÃO-LINEARES	19
3.1.1 Estratégia Evolutiva (EE)	20
3.1.2 Downhill Simplex	23
3.1.3 Quasi-Newton	25
3.2 MODELOS TESTADOS	26
3.2.1 Modelo Oltjen	26
3.2.2 Modelo Beta	28
3.2.3 Modelo van Genuchten	30
3.3 CRITÉRIOS DE COMPARAÇÃO	32
3.4 PROCEDIMENTOS PARA A PARAMETRIZAÇÃO	33
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO	38
4.1 RESULTADOS PARA O MODELO BETA	38
4.2 RESULTADOS PARA O MODELO VAN GENUCHTEN	44
4.3 RESULTADOS PARA O MODELO OLTJEN	50
4.4 RESULTADOS COMPARATIVOS	52
5 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES	55
6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	57
APÊNDICE A – GLOSSÁRIO DE TERMOS TÉCNICOS	62
APÊNDICE B – SOMA DE QUADRADOS DOS ERROS (MODELO BETA)	64
APÊNDICE C – SOMA DE QUADRADOS DOS ERROS (MODELO VAN GENUCHTEN)	67
APÊNDICE D – LOGARITMO NATURAL DA SQE (MODELO BETA)	70
APÊNDICE E – LOGARITMO NATURAL DA SQE (MODELO VAN GENUCHTEN)	73
APÊNDICE F – TESTE F COM O LOGARITMO NATURAL DA SQE (BETA)	76
APÊNDICE G – ERRO PERCENTUAL DA SQE (MODELO BETA)	77
APÊNDICE H – ERRO PERCENTUAL DA SQE (MODELO VAN GENUCHTEN)	79
APÊNDICE I – EVOLUÇÃO DA EE ($\mu+\lambda$) NO PIOR RESULTADO (MODELO BETA)	82
APÊNDICE J – EVOLUÇÃO DA EE (μ,λ) NO MELHOR RESULTADO (MODELO BETA)	83
APÊNDICE K – EVOLUÇÃO DA EE (μ,λ) NO PIOR RESULTADO (MODELO BETA)	84
APÊNDICE L – EVOLUÇÃO DA EE (μ,λ) NO MELHOR RESULTADO (MODELO BETA)	85

1 INTRODUÇÃO

O ajuste de parâmetros (parametrização) é uma das fases mais relevantes da concepção de modelos de sistemas. Quanto melhor ajustados os parâmetros de um modelo, tanto mais próximo do real será o resultado obtido.

Infelizmente não existe um método de otimização perfeito e genérico para resolver o problema de ajuste de parâmetros em modelos matemáticos. Diversos métodos de otimização podem ser empregados e cada método resultará em um ajuste. Embora, por vezes, convergentes, possivelmente alguns métodos resultarão em melhor ajuste, evidenciado por menor erro de predição. Também para um mesmo resultado de ajuste, isto é, para quando um mesmo valor de parâmetros for obtido por diferentes métodos, ainda assim, alguns serão mais eficientes computacionalmente do que outros, portanto, demandarão menos tempo e recursos computacionais. Além disso, durante a parametrização de um modelo com diversos conjuntos de dados observados, um método pode apresentar resultados discrepantes com erros de predição, por vezes baixos e em outras vezes alto, apresentando-se assim menos confiável, se comparado a outro método. Expandido este contexto, ao parametrizar mais de um modelo, o método de otimização pode se apresentar como robusto ou não robusto, de acordo com a o grau de confiabilidade apresentado na parametrização de cada modelo. Faz-se necessário, portanto, avaliar e comparar diferentes métodos de otimização.

A pesquisa ora proposta, busca avaliar métodos de otimização não-lineares na parametrização de modelos aplicados em sistemas agropecuários. Dentre os objetivos específicos, destacam-se: selecionar e comparar os métodos de acordo com a eficiência, eficácia, confiabilidade e robustez.

ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO

Esta dissertação esta organizada em cinco capítulos cujos conteúdos são descritos a seguir:

- Capítulo 1, a introdução do trabalho.
- Capítulo 2, os conceitos básicos relativos à parametrização e uma revisão do estado atual relativo a esta questão.
- Capítulo 3, os modelos agropecuários, os métodos de otimização não-lineares utilizados e os procedimentos necessário para utilizar tais métodos e modelos.
- Capítulo 4, os resultados obtidos com cada um dos métodos e uma análise conjunta dos resultados.
- Capítulo 5, as conclusões finais deste trabalho e recomendações para trabalhos futuros.

2 REVISÃO DA LITERATURA

Neste capítulo serão abordados: a teoria de base da estimação de parâmetros; e o estado da arte da parametrização de modelos.

2.1 TEORIA DE BASE DA ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS

Modelos matemáticos são representações de fenômenos naturais, consideradas indispensáveis, atualmente, para expressão do conhecimento científico, possibilitando novas descobertas, contestação de antigos dogmas e ao desenvolvimento de sistemas de apoio a decisões (Tedeschi, 2006).

De forma geral, no processo de modelagem, um sistema é analisado, equações matemáticas são descritas e um programa de computador é desenvolvido (Scorza Júnior, 2006) na expectativa de representar adequadamente o comportamento do sistema. O processo de modelagem inclui diversos passos, que se iniciam pelo estabelecimento dos objetivos e limites do modelo, e passam pela escolha de formas matemáticas de representação e escolha de conjuntos de dados apropriados para sua parametrização.

A parametrização, também chamado de problema de ajuste ou identificação de parâmetros é, por sua vez, um dos processos essenciais da modelagem matemática e da identificação de sistemas (Kostina, 2004), uma vez que o estabelecimento de valores adequados para os parâmetros é uma dos requisitos básicos para que o comportamento do sistema modelado possa ser realisticamente representado (Barioni et al., 2006).

O ajuste de parâmetros, normalmente, se faz por meio da comparação das estimativas do modelo com dados quantitativos, observados no sistema a ser representado. Essas observações podem ser fruto do uso de diferentes métodos e equipamentos (sensores), os quais, podem também estar sujeitos à erro (Wallach, 2001).

Freqüentemente o primeiro passo para ajustar os parâmetros é atribuir valores nominais derivados de uma combinação de aproximação, teoria, conhecimento adquirido e aleatoriedade (Stuckman et al., 1991) e comparar os resultados com as observações do sistema real. Na tentativa de aprimorar a acurácia do modelo, alguns modelistas utilizarão de tentativa e erro para obter um

conjunto de parâmetros que produza melhor desempenho. Outros irão sistematicamente perturbar os parâmetros, um a um, determinando novas soluções e variando novamente os parâmetros de acordo com a informação obtida. Um terceiro grupo de modelista irá empregar um método de otimização numérica. Segundo Stuckman et al. (1991) essa abordagem possui vantagem por ser sistemática e pelo fato de que um algoritmo computacional é, geralmente, muito mais eficiente em termos de uso de tempo e outros recursos.

O conjunto de dados observados para o ajuste dos parâmetros contém, necessariamente, valores para as variáveis de entrada e saída do modelo matemático. Para o caso de ausência de medidas repetidas no tempo, considera-se os dados de entrada como uma matriz $X(n_e, m)$, de n_e variáveis independentes, correspondentes às variáveis de entrada do modelo, e m registros ou observações. Os dados de saída podem ser representados por uma matriz $O(n_s, m)$, contendo n_s variáveis dependentes, correspondentes às variáveis de saída (*i.e.* variáveis-resposta) do modelo sendo avaliado.

A solução ou simulação do modelo matemático, designado por f , em função de X produz uma matriz com valores estimados pelo modelo para as variáveis-resposta, com número de linhas idêntico ao da matriz O , para um determinado conjunto de valores para seus parâmetros. Chamando-se $Y(n_s, m)$ a matriz de valores das variáveis-resposta e θ o vetor de parâmetros, temos que:

$$Y = f(X, \theta)$$

O problema de ajuste de parâmetros trata de maximizar a verossimilhança entre Y e O por meio do ajuste de θ (Kostina, 2004). Se os erros são independentes, normalmente distribuídos, com média zero e variância desconhecida $N(0, \sigma^2)$, a minimização da soma de quadrados ponderada,

$$\min_{\theta} \sum_{i,j} \frac{(y_{ij} - o_{ij})^2}{\sigma_j^2}, \quad \mathbf{1)}$$

produz uma estimativa de máxima verossimilhança (BOX; TIAO, 1992; GAUSS, 1995). Nos casos em que a distribuição dos erros não é normal, outros procedimentos podem ser aplicados, como a minimização dos desvios absolutos (PRESS et al., 1990).

Tomando-se a função de verossimilhança representada pela Equação 1, é possível determinar algebricamente o valor dos parâmetros. Esse procedimento é conhecido como método dos mínimos quadrados (ANDERSON et al., 2003). Para alguns modelos de densidade de probabilidade é possível também aplicar o método dos momentos para determinação dos parâmetros (PERIN FILHO, 1995). Entretanto, para os demais modelos matemáticos, não é geralmente possível determinar-se algebricamente o valor dos parâmetros a partir de um determinado conjunto de dados. No caso geral, portanto, o ajuste de parâmetros constitui-se em um problema clássico de otimização não-linear (TALPAZ et al., 1987).

A parametrização de modelos não lineares sofre de problemas similares àqueles identificados por Mayer et al (1996) para a otimização das variáveis de decisão a eles associadas. Os principais são: (a) não existe função derivada disponível para a função de verossimilhança (Equação 1) pois esta não pode ser analiticamente diferenciada em relação aos parâmetros; (b) a maioria dos modelos requer restrições nos valores dos parâmetros para que seus resultados se encontrem dentro de amplitude adequada ou mesmo que não haja impossibilidade de obtenção dos resultados por erros de cálculo (e.g. divisão por zero ou raízes de números negativos); (c) a superfície de resposta, no espaço euclidiano, é raramente contínua e convexa.

Nesse contexto, não existe um algoritmo sempre superior (PRESS et al.,1990). Diversos algoritmos têm sido empregados: Levenberg-Marquardt (MARQUARDT, 1963), Gauss-Newton (THAL et al., 1984; SCHENBRENNER; OSTIN,1995; KADA; TARASIEWICZ, 2004); Simplex (LUCE; CUNDY, 1994); Multistart Powell (CHEN et al., 2005), Stuffed Complex Evolution (RONGSONG et al., 2005), Metropolis Monte Carlo (MAILHOT et al., 1997; OLTJEN et al., 2006), simulated annealing (HELLWICH, 1999); Harmony Search (JOONGHOON et al., 2001); conjugate gradient (KADA; TARASIEWICZ, 2004); Generalized Reduced Gradient (LASDON et al.,1978), Dual Quasi-Newton (SAS INSTITUTE, 2000). Ademais, o desenvolvimento de novos algoritmos de otimização não-linear é uma área extremamente ativa de pesquisa e novos algoritmos têm sido desenvolvidos, a cada ano, para situações genéricas (NDIRITU; DANIELL, 1999) ou específicas (KLEPPER; ROUSE, 1991).

Desde que nenhum método é capaz de encontrar o ótimo global de um problema geral de minimização em tempo aceitável e de que nenhuma técnica de otimização é invariavelmente superior à outra, i.e. o desempenho dos métodos depende da natureza do problema, é de interesse comparar o desempenho dos métodos para problemas específicos. Assim diversos trabalhos têm sido realizados para comparar métodos de otimização não-linear, seja para otimizar variáveis de decisão em um modelo de sistemas (e.g. MAYER et al., 1996), seja na parametrização de modelos específicos (THAL et al., 1984; LUCE; CUNDY, 1994; DANTAS et al., 2007).

3 MATERIAL E MÉTODOS

Neste capítulo serão abordados modelos matemáticos aplicados a problemas agropecuários, os métodos de otimização não-lineares empregados e, finalmente, os procedimentos necessários para utilizar tais métodos e modelos.

3.1 MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO NÃO-LINEARES

O desenvolvimento de modelos matemáticos para fins de predição requer um adequado ajuste do valor dos parâmetros para que o modelo represente fielmente os dados observados (BARIONI et al., 2006). Em modelos de sistemas dinâmicos, o ajuste de parâmetros constitui-se em um problema de otimização não-linear (TALPAZ et al., 1987).

Os métodos de otimização não-lineares são métodos que possibilitam otimizar a parametrização de modelos não-lineares. A parametrização tem como objetivo ajustar os valores dos parâmetros de um modelo e é feita por meio de alterações simultâneas nos diversos parâmetros. O objetivo é fazer com que o modelo, ao ser executado, obtenha valores de saída semelhantes aos valores de saída observados. Desta forma, valores são atribuídos para os parâmetros do modelo, em seguida, o modelo é executado com os dados de entrada observados e então os valores de saída são estimados pelo modelo. A diferença existente entre os valores de saída observados (dados observados) e os valores de saída estimados (dados estimados) pelo modelo é utilizada na função objetivo para calcular o erro de predição. Quanto melhor ajustados os parâmetros menor será o erro de predição. Assim, para parametrizar os modelos foram utilizados métodos de otimização que buscaram minimizar o valor retornado pela função objetivo (erro de predição).

Entretanto, à medida que o número de parâmetros de ajuste aumenta, cresce geometricamente o espaço de busca e, normalmente, aumenta o risco de obtenção de uma superfície multidimensional de resposta mais complexa e de difícil otimização. Não existe um método genérico para a solução de todos os problemas não-lineares (PRESS et al., 1990). Vários métodos já foram desenvolvidos e podem ser agrupados em duas classes não completamente distintas. Segundo Fernandes (1997), temos os *métodos de procura* e os *métodos de gradiente*. Os *métodos de*

procura usam apenas valores da função objetivo, comparando-os, para progredir em direção ao valor mínimo; e os *métodos do gradiente*, utilizam os valores da função objetivo e a informação relativa às derivadas, na forma do vetor gradiente e/ou da matriz *Hessiana*. Quando o método utiliza apenas o vetor gradiente ele é caracterizado como sendo de primeira ordem; quando usa tanto o vetor gradiente quanto a matriz *Hessiana*, das segundas derivadas da função, o método é caracterizado como sendo de segunda ordem.

Para realizar o experimento desta pesquisa foram selecionados três métodos de otimização: a) O método de procura *Downhill Simplex* por ser um método que utiliza cálculos simples; que segundo Walsh (1979), trabalha particularmente bem se o número de parâmetros não exceder a cinco ou seis; e por ter obtido um excelente desempenho na comparação de seus resultados com os resultados do método GRG2 (Gradiente Reduzido Generalizado) na parametrização da função Beta (DANTAS et al., 2007); b) A Estratégia Evolutiva, que também é um método de procura, mas que trabalha com os conceitos de população e evolução do indivíduo; c) O método de gradiente *Quasi-Newton* que é indicado para problemas em que a superfície de respostas se mostre suave.

3.1.1 Estratégia Evolutiva (EE)

A Estratégia Evolutiva é um dos membros da família dos algoritmos evolucionários e se presta a uma vasta gama de problemas de otimização, pois não necessita de grande volume de informações sobre o problema. Ela é capaz de resolver problemas multidimensionais, multimodais e não lineares (HEITKOETTER; BEASLEY, 1994 apud BITTENCOURT, 2006). Pode explorar a superfície de resposta de forma ampla ou restrita, dependendo da estratégia de seleção de sobreviventes implementada. Com a estratégia de seleção de sobreviventes “comma” (μ, λ) o algoritmo faz uma busca mais extensa enquanto que na estratégia “plus” ($\mu + \lambda$) a busca se torna mais restrita (EIBEN; SMITH, 2003).

De forma geral, a estrutura de um algoritmo evolutivo segue o seguinte pseudocódigo (EIBEN; SMITH, 2003):

INICIO

INICIALIZAR a população com soluções candidatas geradas aleatoriamente

AVALIAR cada candidato utilizando a função objetivo

REPETIR ATÉ (CONDIÇÃO DE TERMINO satisfeita)

1. *SELECIONAR pais*
2. *RECOMBINAR pares de pais*
3. *MUTAR os filhos gerados*
4. *AVALIAR os novos candidatos*
5. *SELECIONAR indivíduos para a próxima geração*

FIM REPETIR

FIM

Seguindo o algoritmo, a sub-rotina INICIALIZAR cria uma população inicial de forma aleatória, seguindo os limites de valores definidos para cada parâmetro do modelo. A representação do cromossomo segue o esquema: $[x_1, \dots, x_n, \sigma_1, \dots, \sigma_n]$, onde x_1, \dots, x_n representam os valores dos parâmetros do modelo; $\sigma_1, \dots, \sigma_n$ representa tamanhos de passo de mutação para cada parâmetro, respectivamente. A seguir é realizada a AVALIAÇÃO da população que consiste em criar uma lista dos indivíduos ordenada pelo valor obtido na função objetivo. Depois o algoritmo entra em um *Loop* até que a condição de parada seja satisfeita. Nos experimentos desta pesquisa, o algoritmo termina quando a função objetivo é executada 105.030 (cento e cinco mil e trinta) vezes. Este número foi calculado com o objetivo de utilizar um mesmo número de execuções da função objetivo para ambas as estratégias de seleção: (μ, λ) e $(\mu + \lambda)$. A primeira rotina dentro do *Loop* é a SELECIONAR, nela é feita a seleção dos pais que irão compor os pares para serem recombinados na próxima rotina RECOMBINAR. O método de recombinação discreta, no qual o valor de cada um dos alelos é transmitido por apenas um dos pais, escolhido aleatoriamente, foi adotado para gerar os filhos de uma geração. A terceira rotina MUTAR, consiste em introduzir uma alteração no genótipo dos indivíduos filhos (mutação) e foi realizada segundo as Equações (2) e (3).

$$\sigma'_i = \sigma_i e^{\tau N(0,1) + \tau N_i(0,1)} \quad 2)$$

Em que:

σ_i é o desvio padrão para *i*-ésima variável.

σ'_i é o desvio padrão para *i*-ésima variável após a mutação.

$N(0,1)$ é um valor aleatório, obtido de uma distribuição normal com média zero e variância igual a um.

$N_i(0,1)$ é um valor aleatório, obtido de uma distribuição normal com média zero e variância igual a um para o *i*-ésimo parâmetro.

$\sigma'_i < \varepsilon_0 \Rightarrow \sigma'_i = \varepsilon_0$, com $\varepsilon_0 = 10^{-8}$

τ' é a taxa de aprendizado geral sendo, $\tau' \propto \frac{0,01}{\sqrt{2n}}$

τ é a taxa de aprendizado sensível ao parâmetro sendo, $\tau \propto \frac{0,01}{\sqrt{2\sqrt{n}}}$

e é a base dos logaritmos naturais

$$x'_i = x_i + \sigma_i N_i(0,1) \quad \mathbf{3)}$$

Em que:

x_i é o *i*-ésimo parâmetro do modelo.

x'_i é o *i*-ésimo parâmetro do modelo após a mutação.

σ_i é o *i*-ésimo tamanho de passo de mutação.

$N_i(0,1)$ é um valor aleatório, obtido de uma distribuição normal com média zero e variância igual a um para o *i*-ésimo parâmetro.

A seguir é realizada novamente a AVALIAÇÃO da população, onde uma nova lista dos indivíduos ordenada pelo valor obtido na função objetivo é criada. Na quinta rotina, SELECIONAR, a lista gerada na AVALIAÇÃO é utilizada como critério para selecionar os sobreviventes para formar a população da próxima geração. As estratégias de seleção de sobreviventes utilizadas foram:

- a. *comma* (μ, λ) com $\lambda = \mu * 7$ e μ igual ao tamanho da população. Nesta estratégia são selecionados, os μ indivíduos melhores dos λ indivíduos gerados na recombinação, com isso cada indivíduo sobrevive apenas uma

geração. Esta estratégia é indicada quando se deseja explorar uma área maior da superfície de resposta. (e.g. Apêndices K e L)

- b. *plus* ($\mu + \lambda$) com $\lambda = \mu$ e μ igual ao tamanho da população. Nesta estratégia são selecionados, os μ indivíduos melhores dos $(\mu + \lambda)$ indivíduos, onde os λ indivíduos foram gerados na recombinação, com isso, ascendentes e descendentes lutam pela sobrevivência na formação da nova geração. Esta estratégia é indicada quando se deseja explorar uma área menor da superfície de resposta. (e.g. Apêndices I e J)

Para os experimentos aqui descritos a EE foi implementada no ambiente de desenvolvimento do MatLab (MATLAB, 2007) e foi utilizada uma população (μ) inicial de 30 indivíduos e um cromossomo de oito posições.

Dentre as características da Estratégia Evolutiva, destaca-se:

- ✓ Não há necessidade de conhecimento aprofundado do modelo a ser parametrizado.
- ✓ É um método de procura.
- ✓ É mais indicado para trabalhar com modelos complexos que possuem um número elevado de parâmetros.
- ✓ Possui duas estratégias de seleção que faz com que o algoritmo se comporte de forma mais local ou mais expansiva.
- ✓ Utiliza a teoria da evolução para melhorar os indivíduos (resultados obtidos).
- ✓ Trabalha com uma população inicial ao invés de um único ponto.

3.1.2 *Downhill Simplex*

O método *Downhill Simplex*, também conhecido como método de *Nelder-Mead*, possibilita a otimização em problemas não-lineares e multidimensionais, requer apenas uma função objetivo e não necessita de derivadas para encontrar a solução (PRESS et al., 1990).

O método utiliza-se de um simplex inicial, onde cada vértice representa uma solução possível. O número de vértices do simplex é igual ao número de parâmetros a serem ajustados, somado de um. Por exemplo, para quatro parâmetros, teremos um simplex com cinco vértices. Cada vértice é formado por uma solução possível, ou seja, um conjunto de valores adequados para os

parâmetros do modelo. São estes valores de parâmetro que definirão o tamanho do simplex inicial.

Depois de formado o simplex inicial, o algoritmo determina os pontos que retornam o pior, o segundo pior e melhor valor da função objetivo (no caso de minimização, o pior ponto é aquele que retorna o maior valor da função objetivo). O algoritmo procura então redefinir a “posição” do pior ponto modificando o valor dos parâmetros a serem ajustados. A seqüência de reflexão, contração, expansão ou encolhimento (apresentadas na Figura 1) do simplex em uma iteração depende do valor relativo de seus vértices durante o processo. Os parâmetros internos *Alfa*, *Beta* e *Gama*, controlam a dimensão desses movimentos. Uma vez redefinido o simplex, outro pior ponto é identificado e o processo se repete até que a distância entre o melhor ponto e o pior ponto atinja o limite de tolerância (parâmetro do método).

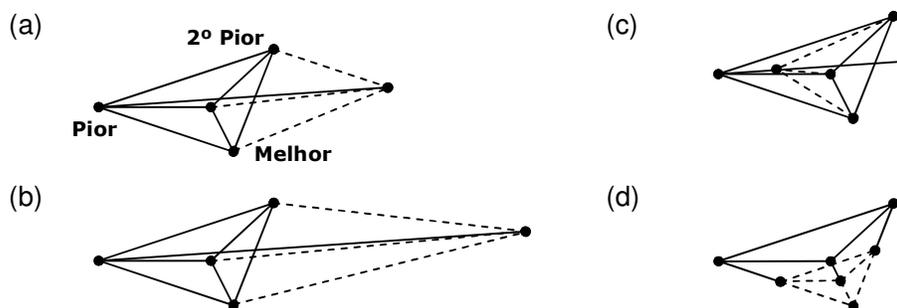


Figura 1 – Possíveis formas de redefinição do Simplex. (a) Reflexão em busca do melhor ponto; (b) Reflexão e expansão na direção do melhor ponto; (c) Contração de uma dimensão para o melhor ponto e (d) Encolhimento, contração de todas as dimensões para o centro do simplex (PRESS et al., 1990).

Para realizar o experimento, o método *Downhill Simplex* foi implementado no ambiente de desenvolvimento do *MatLab*. As constantes *Alfa*, *Beta* e *Gama* receberam os valores sugeridos por PRESS et al. (1990) ou seja, 1,0; 0,5 e 2,0 respectivamente. O limite de tolerância da distância entre o melhor ponto e o pior ponto foi definido como 1×10^{-10} e o número máximo de interações como 1500.

Com o objetivo de prover igualdade de partida inicial para os métodos avaliados, a população inicial da EE supriu os pontos do Simplex inicial. Foram gerados ao todo seis Simplex (30/5) que foram utilizados como início para parametrizar cada caso. No final os melhores resultados obtidos (um em cada caso), foram utilizados para compor o resultado final do *Downhill Simplex*.

Dentre as características do *Downhill Simplex*, destacam-se (WALSH, 1979; PRESS et al., 1990; FERNANDES, 1997):

- ✓ É um método de procura.
- ✓ É de fácil programação.
- ✓ Obtém melhores resultados quando trabalhar, no máximo, com 5 parâmetros.
- ✓ Utiliza expressões algébricas bastantes simples.

3.1.3 Quasi-Newton

O método *Quasi-Newton*, também conhecido como método de métrica variável, faz parte da família dos métodos de gradiente. Esse método possui a característica de possibilitar a otimização em problemas nos quais não se conhece as derivadas da função objetivo. Uma vez que, na minimização do erro de predição em um modelo de simulação, é quase sempre impossível ou inconveniente estabelecer analiticamente as derivadas, esse método de gradiente se presta de forma adequada.

O método *Quasi-Newton* utiliza uma aproximação numérica da inversa da matriz *Hessiana* que é atualizada usando a informação do gradiente da iteração anterior. Segundo Press et al. (1990), o método é convergente para funções suaves em geral.

Para realizar o experimento, com método *Quasi-Newton*, foi utilizada a função “fmincon” do pacote computacional MATLAB (THE MATHWORKS INC, 2006), atribuindo o valor de 1×10^{-8} para o argumento de tolerância (TolCon) e restringindo os limites dos valores dos parâmetros para os valores apresentados pela tabela de restrição do (ver Tabela 1, Tabela 2 ou Tabela 3, conforme o modelo).

Também, com o objetivo de prover igualdade de partida inicial para os métodos avaliados, a população inicial da EE foi novamente utilizada, fornecendo 30 pontos iniciais que foram utilizados como início para parametrizar cada caso. Assim, o método foi executado 30 vezes para cada caso, e o melhor resultado obtido foi considerado como o resultado do caso em questão. No final os melhores resultados obtidos (um em cada caso), foram utilizados para compor o resultado final do método *Quasi-Newton*.

Dentre as características do *Quasi-Newton*, destaca-se:

- ✓ É um métodos de gradiente.
- ✓ Utiliza uma aproximação numérica da inversa da matriz *Hessiana*, assim, não requer a segunda derivada.

3.2 MODELOS TESTADOS

A seguir são descritos os modelos não-lineares, ligados a sistemas agropecuários, utilizados nos experimentos de parametrização nesta pesquisa.

3.2.1 Modelo Oltjen

Um modelo dinâmico e mecanicista de crescimento e composição corporal de bovinos em crescimento, originalmente publicado por Oltjen et al. (1986) e atualizado por Oltjen e Sainz (1995) foi usado para simular cada animal representado no conjunto de dados. O modelo contém três variáveis de estado, correspondentes às massas de *DNA*, proteína (*PROT*) e gordura (*GORD*) totais. A variação do estado do sistema é dada pelo seguinte conjunto de equações:

$$\frac{dDNA}{dt} (g/dia) = k_1 (DNA_{max} - DNA) NUT_1 \quad 4)$$

$$\frac{dPROT}{dt} (kg/dia) = NUT_2 k_2 DNA^{0,73} - k_3 PROT^{0,73} \quad 5)$$

$$\frac{dGORD}{dt} (kg/dia) = \frac{\left(\left(\frac{DMI - \alpha EBW^{0,75}}{ELm} \right) ELg - \frac{dPROT}{dt} EProt \right)}{EGord} \quad 6)$$

NUT_1 e NUT_2 são funções (Equações 7 e 8), que representam o efeito nutricional na deposição de *DNA* e proteína.

$$NUT_1 = -0,70 + 1,70 P \quad 7)$$

$$NUT_2 = 0,83 + \frac{0,20 P}{(0,15+P)}, \quad 8)$$

Em que, P representa a razão entre o consumo observado de energia metabolizável e o consumo de energia metabolizável para o crescimento normal do animal. Na Equação 6, E_{Prot} é a concentração de energia da proteína (assumida como 5,54 Mcal/kg) e E_{Gord} é a concentração de energia da gordura (9,35 Mcal/kg). ELm e ELg representam a concentração de energia para manutenção e ganho, respectivamente.

Os parâmetros k_1 , k_2 , k_3 , $DNAm_{max}$ e α (nas equações 4, 5 e 6) podem ser estimados empiricamente e refletem diferenças genotípicas entre raças de animais. Entretanto, em decorrência da alta correlação entre k_2 e k_3 , não há sentido em ajustar os dois parâmetros simultaneamente. Nos experimentos de parametrização relatados nesse trabalho, o valor de k_2 foi mantido constante em 0,0461, conforme estabelecido por Oltjen et al. (1986), já os demais parâmetros seguiram as respectivas faixas de limites da Tabela 1, os quais se basearam nos valores de parâmetros estabelecidos por Oltjen (1986).

Tabela 1 - Limites de valores para os parâmetros do modelo de Oltjen

Parâmetros	Inferior	Superior
K_1	0,0010	0,0042
K_3	0,0750	0,3000
$DNAm_{max}$	192,5000	770,0000
$Alfa$	0,0429	0,1716

Fonte: Baseado em Oltjen (1986).

Foi utilizado um conjunto de dados individuais de 72 bovinos do sexo masculino, não castrados, da raça nelore, que foram compilados de sete experimentos nos quais foram estimados: ingestão de matéria seca, concentração de energia metabolizável, composição inicial e final (gordura e proteína) dos animais (BACKES, 2003; FREITAS, 2004; MARTINS, 2001; PAULINO, 1996, 2002; SILVA, 2001; VÉRAS, 2000).

O modelo foi implementado como uma função no MATLAB e usado de forma idêntica pelos métodos de otimização que foram comparados. A simulação foi

realizada com integração numérica pelo método de Euler (ALBERTO, 2007) e passo de tempo de um dia.

3.2.2 Modelo Beta

Neste trabalho, a função Beta incompleta inversa (F^{-1}) de (P), dado (α, β) como seus parâmetros, também otimizados pelos métodos, foi definida como (THE MATHWORKS, 2006):

$$\hat{x} = F^{-1}(P|\alpha, \beta) = \{\hat{x}: F(\hat{x}|\alpha, \beta) = P\} \quad 9)$$

Em que:

$$P = F(\hat{x}|\alpha, \beta) = \frac{1}{B(\alpha, \beta)} \int_0^{\hat{x}} t^{\alpha-1} (1-t)^{\beta-1} dt \quad 10)$$

$B(\alpha, \beta)$ é a função *Beta* completa no intervalo de 0 a 1.

($0 \leq t \leq \hat{x}$).

Utilizando o pacote computacional MATLAB (MATLAB, 2007), os valores de (\hat{x}) foram obtidos por meio da função “betainv”, $\hat{x} = \text{betainv}(P, \alpha, \beta)$.

Os valores iniciais para x_1, \dots, x_n foram gerados dentro de limites pré-estabelecidos, conforme conhecimento dos valores possíveis para cada parâmetro (veja Tabela 2).

Tabela 2 - Limites de valores para os parâmetros do modelo de Beta¹

Parâmetros	Inferior	Superior
X_{min}	0,10	1
X_{max}	0,10	3
A	0,01	20
B	0,01	15

Fonte: Dados não publicados

Os dados utilizados na parametrização foram provenientes da avaliação de desempenho de 91 casos de sistemas de irrigação (Silva et al., 2006), contendo

¹ Comunicação pessoal de Euzebio Medrado da Silva ao autor em setembro de 2007

Avaliação de métodos para parametrização de modelos aplicados em sistemas agropecuários

um total de 5833 registros. Cada registro é formado por um par de valores, sendo o primeiro, a fração da área total irrigada (a) e o segundo, a lâmina de água aplicada normalizada pela média (X). Nessa associação, (a) representa uma pseudo-probabilidade, variando na escala de 0 a 1, e (X) a variável aleatória correspondente. Como (X) é ordenado em forma decrescente, então, para aplicar a função *Beta* acumulada para representar a fração da área total irrigada (a), foi necessário atribuir à variável (a) o valor de $(1-P)$. Além disso, considerando que nesse tipo de problema de avaliação de desempenho da irrigação, a variável usualmente fornecida é (a), então, faz-se necessário utilizar a função *Beta* inversa para a obtenção do valor predito (\hat{X}) de (X).

Para aplicar a função *Beta*, no intervalo de 0 a 1 da variável randômica, os valores de (X) foram normalizados da seguinte forma:

$$x = \frac{X - X_{min}}{X_{max} - X_{min}} \quad 11)$$

em que X_{min} e X_{max} foram tratados como parâmetros e otimizados pelos métodos. Essa mesma normalização se aplica para o valor predito (\hat{X}).

Para o cálculo da soma de quadrado dos desvios, foi necessário retornar o valor de (\hat{X}) à sua forma não normalizada, conforme equação abaixo:

$$\hat{X} = \hat{x}(X_{max} - X_{min}) + X_{min} \quad 12)$$

Uma vez executada a equação (12), é possível calcular a soma do quadrado dos erros ponderada pelos Graus de Liberdade (GL), de acordo com a equação (13).

$$SQE = \frac{\sum(X - \hat{X})^2}{GL}, \quad 13)$$

em que, GL é o número de registros da amostra subtraído do número de parâmetros do modelo avaliado.

3.2.3 Modelo van Genuchten

Esse modelo é utilizado para tornar contínua a relação entre o conteúdo de água do solo e a força com que a água se encontra retida. Isso é necessário porque essa relação é normalmente medida para apenas um determinado número de pontos, requerendo assim, um modelo para descrever, de forma contínua, essa relação ao longo de todo o seu domínio. Essa relação, também conhecida como curva de retenção de água do solo, é fundamental em cálculos do balanço hídrico no solo, muito aplicado em estratégias de manejo da água em sistemas de irrigação.

Um dos modelos mais utilizados para representar a curva de retenção de água do solo é a relação proposta por Genuchten (1980), expresso pela seguinte equação:

$$\theta = \theta_r + (\theta_s - \theta_r) \left[\frac{1}{1 + (\alpha h)^n} \right]^{1 - \frac{1}{n}} \quad 14)$$

Em que:

- θ é o conteúdo de água no solo (g/g).
- θ_r é o conteúdo residual de água no solo (g/g).
- θ_s é o conteúdo saturado de água no solo (g/g).
- α é um parâmetro de ajuste (kPa^{-1}).
- n é outro parâmetro de ajuste.
- h é a tensão.

Observa-se que nesta equação, o valor de θ tende para θ_s , quando h tende para zero, e para θ_r , quando h tende para um valor de tensão muito elevado.

O valor inicial para cada um dos parâmetros do modelo (θ_r, n, α) foi gerado dentro de limites pré-estabelecidos, conforme conhecimento dos valores possíveis para cada parâmetro (veja Tabela 3).

Tabela 3 - Limites de valores dos parâmetros do modelo de *van Genuchten*¹

Parâmetros	Inferior	Superior
θ_r	0	1
θ_s	Tabela 4	Tabela 4
n	1,001	10
a	0,001	20

Fonte: Dados não publicados

Para o parâmetro θ_s os limites foram estabelecidos individualmente para cada caso, conforme Tabela 4. Isto porque cada caso representa um solo e cada solo possui valores de saturação diferentes. Assim, o limite de saturação inferior corresponde ao valor medido da saturação, enquanto que o limite superior corresponde ao valor máximo teórico de espaço poroso disponível para a saturação.

Tabela 4 - Limites do θ_s para cada um dos 102 casos do modelo *van Genuchten*¹

Caso	Inferior	Superior	Caso	Inferior	Superior	Caso	Inferior	Superior
1	0,5753	0,6552	35	0,3383	0,3703	69	0,3838	0,4271
2	0,4273	0,4932	36	0,3877	0,4359	70	0,3374	0,3868
3	0,4956	0,5803	37	0,5298	0,5913	71	0,4614	0,5472
4	0,5874	0,6449	38	0,4778	0,5352	72	0,2178	0,2456
5	0,5629	0,6616	39	0,6340	0,7329	73	0,1935	0,2214
6	0,5537	0,6325	40	0,5349	0,6202	74	0,2504	0,2703
7	0,6155	0,6963	41	0,5705	0,6502	75	0,5397	0,6085
8	0,4796	0,5395	42	0,5791	0,6564	76	0,4865	0,5277
9	0,5173	0,6008	43	0,3246	0,3625	77	0,5219	0,5745
10	0,5648	0,6298	44	0,3105	0,3530	78	0,4201	0,4741
11	0,5156	0,5867	45	0,3611	0,4091	79	0,3691	0,4169
12	0,6206	0,6969	46	0,3086	0,3454	80	0,4384	0,5002
13	0,7588	0,9183	47	0,3443	0,3930	81	0,4644	0,5202
14	0,5189	0,5880	48	0,4098	0,4673	82	0,4477	0,4812
15	0,6477	0,7495	49	0,3898	0,4216	83	0,5162	0,5852
16	0,7695	0,9005	50	0,3215	0,3476	84	0,5140	0,5788
17	0,6500	0,7481	51	0,3330	0,3712	85	0,4526	0,4921
18	0,6402	0,7282	52	0,2841	0,3263	86	0,4924	0,5626
19	0,4819	0,5590	53	0,3327	0,3739	87	0,4803	0,5459
20	0,4088	0,4771	54	0,2181	0,2511	88	0,4021	0,4281
21	0,4721	0,5391	55	0,2560	0,2943	89	0,4520	0,4970
22	0,5254	0,5968	56	0,2833	0,3294	90	0,6017	0,6665
23	0,6175	0,6906	57	0,3883	0,4248	91	0,5543	0,6234

¹ Comunicação pessoal de Euzébio Medrado da Silva ao autor em setembro de 2007

Caso	Inferior	Superior	Caso	Inferior	Superior	Caso	Inferior	Superior
24	0,5811	0,6568	58	0,3378	0,3849	92	0,6142	0,6937
25	0,3915	0,4386	59	0,3550	0,3900	93	0,4690	0,5277
26	0,3325	0,3780	60	0,2618	0,2957	94	0,4613	0,5297
27	0,3310	0,3799	61	0,3094	0,3364	95	0,5586	0,6163
28	0,3377	0,3700	62	0,3270	0,3575	96	0,4083	0,4563
29	0,3572	0,3959	63	0,2889	0,3276	97	0,3560	0,4072
30	0,3304	0,3690	64	0,2656	0,2970	98	0,4776	0,5570
31	0,3950	0,4429	65	0,2443	0,2762	99	0,5416	0,6218
32	0,3492	0,3999	66	0,2329	0,2658	100	0,5380	0,6073
33	0,3596	0,3944	67	0,2484	0,2771	101	0,4640	0,5163
34	0,4100	0,4404	68	0,2140	0,2435	102	0,4680	0,5274

Fonte: Dados não publicados

Os dados, de retenção de água do solo, utilizados na parametrização desse modelo, provém de uma base dados da Embrapa Cerrados, constituída de 102 casos de solos do bioma Cerrado, contendo um total de 2.260 registros. Cada registro é formado por um par de valores, sendo o primeiro, a tensão da água do solo (kPa) e o segundo, o conteúdo correspondente de água (g/g).

O modelo foi implementado como uma função no *MATLAB* e usado de forma idêntica pelos métodos de otimização comparados.

3.3 CRITÉRIOS DE COMPARAÇÃO

Com os objetivos de definir quais métodos são robustos e classificar os métodos quanto à eficiência, à eficácia e à confiabilidade, foram estabelecidos critérios específicos de comparação.

Eficiência: O critério de eficiência vem de sua definição, que é a capacidade de obter resultados efetivos com o mínimo de dispêndios, tempo etc. (adaptado de Houaiss et al. (2001)). Nesse contexto, o conceito de eficiência se refere ao processo. Assim, estabeleceu-se como critério de eficiência o número de vezes que o método executa a função objetivo (i.e. o número de avaliações) durante a parametrização do modelo em questão. Quanto menor esse número, mais eficiente o método.

Eficácia: A eficácia relaciona-se ao objetivo final (adaptado de Houaiss et al. (2001)). Neste contexto, estabeleceu-se como critério de eficácia o número de vezes que o método atingir o melhor resultado entre os métodos avaliados. Quanto maior esse número, mais eficaz o método.

Confiabilidade: Sendo confiabilidade a qualidade do que é confiável (adaptado de Houaiss et al. (2001)), um método é considerado confiável quando 95% dos seus resultados encontrarem-se dentro de um limite de tolerância estabelecido para o problema (neste trabalho foi adotada a tolerância de 5%). Assim, um método é mais confiável quando o conjunto de seus resultados estiver mais próximo do conjunto dos melhores resultados obtidos pelos métodos avaliados. Para classificar os métodos quanto a confiabilidade utilizou-se o posicionamento obtido pelo método na técnica de comparação entre curvas, apresentada em Silva e Azevedo (2002).

Robustez. Considera-se robustez como sendo a confiabilidade de um método extrapolada para mais de um modelo, ou seja, o quanto o método se mantém confiável ao parametrizar modelos diferentes. Para avaliar a robustez foi criado um índice de robustez. Esse índice, aqui definido, é o valor mínimo de tolerância para o qual o método pode ser considerado robusto (i.e. confiável para todos os modelos testados). Quanto menor esse valor, mais robusto o método. Neste experimento o método é considerado robusto quando o seu índice de robustez não exceder a 5%.

3.4 PROCEDIMENTOS PARA A PARAMETRIZAÇÃO

A parametrização realizada neste trabalho segue a seguinte seqüência de passos:

INICIO

Definir os parâmetros internos do método de otimização

PARA NCaso = 1 ATÉ (Número Total de Casos Observados)

EXECUTAR o método

ARMAZENAR o resultado em uma matriz de resultados

PRÓXIMO NCaso

FIM

O algoritmo tem seu início definindo-se os parâmetros internos do método de otimização em uso. Na seqüência o algoritmo entra em um *Loop* de 1 até o número total de casos observados, conforme o modelo (Tabela 5).

Tabela 5 - Quantidade de dados observados

Modelo	Qtde. Casos	Num. Total de Observações
<i>Oltjen</i>	1	72
<i>Beta</i>	91	5.833
<i>van Genuchten</i>	102	2.260

Para cada caso o método de otimização é executado para parametrizar o modelo e retornar os parâmetros otimizados. O algoritmo segue e o resultado obtido, em cada um dos casos observados, é armazenado em uma matriz de resultados.

Os métodos de otimização utilizam-se da função objetivo para calcular a soma do quadrado dos erros (SQE) entre os dados observados e os valores estimados pelo modelo, por meio da técnica dos mínimos quadrados (BECK; ARNOLD, 1977). O valor da SQE é ponderada pelo Grau de Liberdade (GL) de acordo com a seguinte equação:

$$SQE = \begin{cases} \frac{\sum(X-\hat{X})^2}{GL}, & \text{se } X_{min} \leq X \leq X_{max}, \\ \text{Infinito}, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad 15)$$

em que:

- GL é o número de observações do caso em questão subtraído do número de parâmetros do modelo avaliado.
- X_{min} e X_{max} são os valores mínimo e máximo, estabelecidos como válidos para cada modelo (ver Tabela 1, Tabela 2 e Tabela 3, conforme o modelo).
- Infinito é o maior valor possível que a variável *SQE* pode armazenar.

Nos experimentos, quando o valor de *SQE* é igual a *Infinito* o próprio método descarta o conjunto de parâmetros que gerou *Infinito* para *SQE*, isto faz com que o resultado sempre esteja dentro do espaço de resposta adequado para a realidade do modelo utilizado.

A função objetivo, equação (15), define tanto a eficácia do método (menores valores indicando maior eficácia) quanto o melhor resultado encontrado pelo método (em que o melhor conjunto de parâmetros é aquele que gera o menor valor de soma do quadrado dos erros – SQE).

A função objetivo foi implementada no ambiente de desenvolvimento do *MatLab* e utilizada por todos os métodos para o cálculo de SQE .

A matriz de resultados de cada método contém: número do caso; parâmetros do modelo otimizado (conforme o modelo); SQE e o número de avaliações da função objetivo.

A seguir seguem os procedimentos utilizados para possibilitar a análise dos métodos, nos critérios estabelecidos para a comparação:

Eficiência. Para possibilitar a equidade na determinação da eficiência dos métodos avaliados, utilizou-se a equação (16) que equaliza as avaliações dos métodos *Downhill Simplex* e *Quasi-Newton* com a da Estratégia Evolutiva:

$$NEA = \sum_i^n \bar{N}_i \frac{P}{Q}, \quad (16)$$

em que:

NEA é o número equalizado de avaliações.

n é o número de casos observados.

i é o índice do caso

\bar{N}_i é o número médio de avaliações para o i -ésimo caso

P é o número de indivíduos da população da EE

Q é o número de pontos necessários para a inicialização do método.

Uma vez calculada a soma dos valores de NEA (para os métodos *Downhill Simplex* e *Quasi-Newton*) com a quantidade de avaliações realizadas pela Estratégia Evolutiva, calculou-se a porcentagem do total de execuções da função objetivo pelos métodos avaliados. Este resultado foi utilizado para aferir a eficiência de cada um dos métodos.

Eficácia. Para definir a eficácia de cada método utilizou-se o procedimento de comparar os resultados da SQE de cada um dos métodos para definir o conjunto dos melhores resultados. A partir daí, cada resultado dos métodos foi comparado com o conjunto dos melhores resultados. Assim contabilizou-se em quantos casos cada um dos métodos alcançou o melhor resultado. Este resultado foi utilizado para aferir a eficácia de cada um dos métodos.

Confiabilidade. Com o objetivo de definir a confiabilidade dos métodos utilizou-se o procedimento de isolar a variação relativa aos erros dos métodos das demais variações (variação do caso e variação aleatória). Assim, optou-se por trabalhar com a diferença entre a SQE obtida por um método específico e a menor SQE obtida entre todos os métodos estudados. Desta forma, contabilizou-se em quantos casos cada um dos métodos teve seu resultado inserido em uma das faixas percentuais de erro acima do melhor resultado. As faixas foram definidas da seguinte forma: de 1% a 5%; de 5% a 10%; de 10% a 50%; de 50% a 100%; de 100% a 200%; de 200% a 400%. Depois disso calculou-se a distribuição percentual dos métodos em cada uma das faixas e traçou-se o gráfico de densidade de probabilidade das diferenças (eg. Figura 4). Este gráfico nos dá uma boa idéia da confiabilidade dos métodos. Em seguida utilizou-se a técnica de comparação entre curvas, apresentada em Silva e Azevedo (2002), adaptada para este trabalho da seguinte forma:

1. Utilizando o conjunto das diferenças entre o conjunto da SQE do método com o conjunto dos melhores resultados de todos os métodos, preparou-se o histograma, um por método, para identificar qual tipo de função de distribuição deveria ser utilizada para ajustar a curva de distribuição acumulada.
2. Utilizou-se a função Exponencial para ajustar a curva de distribuição acumulada aos pontos da frequência relativa acumulada. O teste de significância r de Pearson (LEVIN, 1987) foi utilizado para verificar se a curva foi bem ajustada.
3. Após realizar o passo 2 para todos os métodos, procedeu-se a comparação dos mesmos, realizada de dois em dois. Assim, utilizando-se da função Exponencial, ajustou-se uma curva de distribuição acumulada aos pontos da frequência relativa acumulada de ambos os métodos. O Teste F foi utilizado para determinar se a diferença visual existente entre os métodos é ou não significativa, ou seja, para verificar a significância estatística das diferenças entre os métodos
4. Seguindo os critérios para definir a confiabilidade, calculou-se os valores de percentil 95 para cada um dos métodos.
5. Utilizando-se dos pontos da frequência relativa acumulada de cada um dos métodos e dos dados estimados pela função de distribuição, traçou-se o gráfico de comparação entre curvas. Neste gráfico identificou-se os métodos mais confiáveis para parametrizar o modelo em questão, verificando-se aquele que

teve sua curva de distribuição mais próxima do eixo das ordenadas e seu valor de percentil 95 abaixo de 5%.

6. Para classificar os métodos, utilizou-se do posicionamento de cada um dos métodos em relação ao eixo das ordenadas.

Robustez. Para verificar a robustez do método foi calculada a sua confiabilidade, por meio do percentil 95 para cada modelo (i.e. o método foi considerado confiável sempre que menos de 5% dos valores de erro excedessem a tolerância estabelecida). O índice de robustez do método foi então estabelecido atribuindo-se o valor máximo de tolerância para o qual o método pode ser considerado confiável para parametrizar todos os modelos testados (maior valor de percentil 95 obtido pelo método em cada um dos modelos). Neste experimento, de forma arbitrária, o método foi considerado robusto quando o seu índice de robustez não excedeu a 5%.

O procedimento ora definido teve como base a análise preliminar realizada para identificar a diferença entre os métodos. Inicialmente utilizou-se os dados brutos de SQE. Entretanto, devido à distribuição dos dados resultantes não atender a premissa de normalidade requerida pelas análises estatísticas subseqüentes procedeu-se transformação logarítmica (LN) dos dados (Apêndices D e E). A distribuição resultante atendeu a normalidade e, foi, portanto, possível prosseguir na análise. Os resultados de comparação entre as curvas, por meio do teste F (Apêndice F), utilizando os dados transformados apontaram semelhança estatística entre os métodos, mesmo entre aqueles que apresentaram na densidade de probabilidade das diferenças, percentuais em faixas acima de 100% (veja Figura 3 na página 41).

Para entender a razão do baixo poder do teste realizado, procedeu-se uma análise de variância, incluindo-se no modelo, o método e o caso como fontes de variação. Constatou-se que a variação devida aos métodos representava menos de 2% da variância total (veja confiabilidade nas páginas 40 e 46). Optou-se, então, por trabalhar com o conjunto da diferença percentual dos erros de cada um dos métodos em relação ao conjunto dos melhores resultados (Apêndices G e H) visando minimizar a variação devida aos casos.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para facilitar o entendimento, os resultados foram apresentados por modelos e comparados posteriormente, para uma análise ampla.

4.1 RESULTADOS PARA O MODELO BETA

Eficiência. Ao calcular o *NEA* (Número Equalizado de Avaliações) dos métodos, equação (16), para o modelo *beta* parametrizado em 91 casos ($n=91$), utilizando uma população com 30 indivíduos ($P=30$), e com número de pontos necessários para a inicialização do método de 1, 5, 30 e 30 para os métodos *Quasi-Newton*, *Downhill Simplex*, $EE(\mu+\lambda)$ e $EE(\mu,\lambda)$, respectivamente, obteve-se os resultados apresentados na Tabela 6.

Tabela 6 – Número Equalizado de Avaliações (NEA) dos métodos.

	Quasi-Newton	Downhill Simplex	$EE(\mu+\lambda)$	$EE(\mu,\lambda)$
NEA	744.420	355.554	6.174.390	3.805.410

Na Figura 2, observa-se que, considerado o número de avaliações da função objetivo somente até obter o seu melhor resultado, equalizado com a equação (16), a $EE(\mu+\lambda)$ foi responsável por mais de 55% das vezes em que a função objetivo foi executada, enquanto que a $EE(\mu,\lambda)$ foi responsável aproximadamente por 34% das vezes, o *Quasi-Newton* por 6,7% e o *Downhill Simplex* por apenas 3,2%. Desta forma, o ranking de eficiência dos métodos é: *Downhill Simplex*, *Quasi-Newton*, $EE(\mu,\lambda)$, $EE(\mu+\lambda)$.

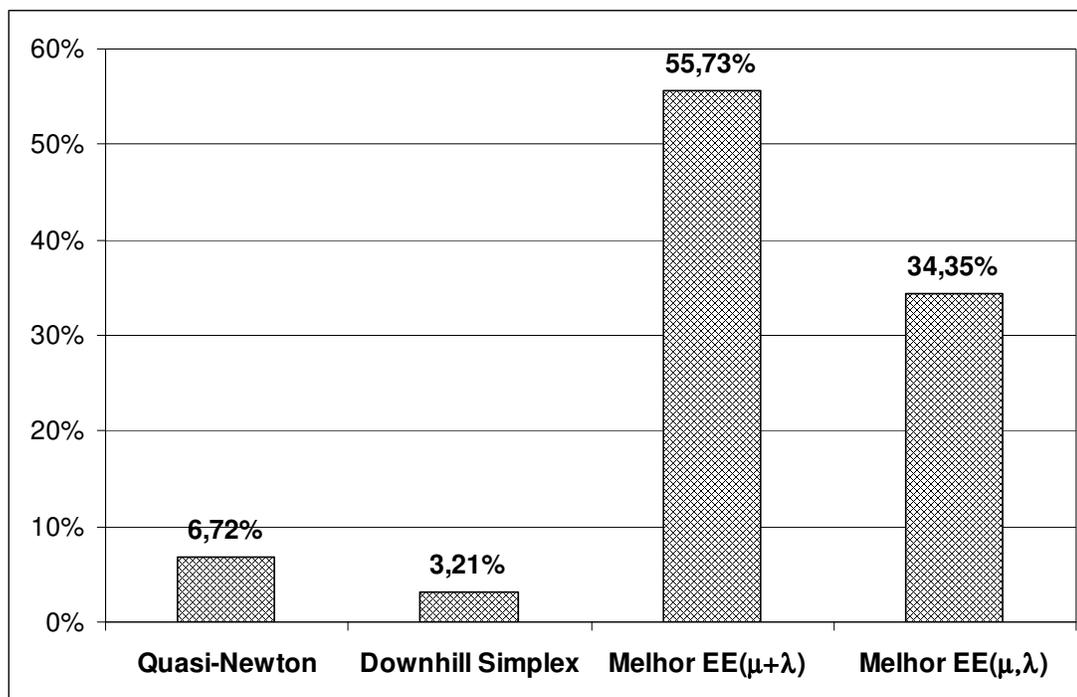


Figura 2 – Porcentagem do total de execuções da função objetivo pelos métodos avaliados

Eficácia. Os resultados das avaliações de eficácia são apresentados na Tabela 7. Dentre os 91 casos analisados para o modelo Beta, o método *Downhill Simplex* obteve maior eficácia em 89 casos (98%), sendo melhor absoluto 42 vezes. O método *Quasi-Newton* foi o segundo mais eficaz, 49 casos (54%), absoluto duas vezes. Nenhum dos resultados obtidos com a Estratégia Evolutiva figurou no conjunto dos melhores resultados, dando suporte à afirmativa de Nyarko e Scitovski (2004) de que uma das desvantagens dos algoritmos genéticos é a dificuldade em determinar o valor exato do ótimo global.

Comparando-se os melhores resultados apenas entre as duas estratégias de seleção ($\mu+\lambda$) e (μ,λ), em 87 casos a estratégia ($\mu+\lambda$) foi melhor, contra quatro casos da estratégia (μ,λ), não houve empates. Isto possibilitou estabelecer a EE($\mu+\lambda$) e a EE(μ,λ) como terceiro e quarto método, respectivamente, na classificação de eficácia.

Tabela 7 – Número de casos dos melhores resultados encontrados

	Isolado ¹	Empatado ²	Total de Casos
<i>Downhill Simplex</i>	42	47	89
<i>Quasi-Newton</i>	2	47	49
EE ($\mu+\lambda$)	0, (87 ³)	0	0, (87)
EE (μ,λ)	0, (4 ³)	0	0, (4)

¹ Número de casos em que o método obteve isoladamente o melhor resultado.

² Número de casos em que mais de um método obteve o melhor resultado.

³ Comparação feita somente entre as estratégias ($\mu+\lambda$) e (μ,λ).

Nos 49 casos em que ambos os métodos, *Downhill Simplex* e *Quasi-Newton*, obtiveram resultados iguais como os melhores resultados (52%), pode-se interpretar que possivelmente trata-se um "mínimo forte"¹ (Walsh, 1979), haja vista que tanto o método de procura quanto o de gradiente, apesar de utilizarem estratégias completamente distintas para encontrar a solução, encontraram o mesmo ponto.

O método *Downhill Simplex* obteve o melhor resultado em 98% das vezes, enquanto, o método *Quasi-Newton*, 54%, indicando a maior probabilidade do primeiro em encontrar resultados superiores. Os resultados demonstram, portanto, superioridade do método *Downhill Simplex*, em relação aos outros métodos, quanto à eficácia na parametrização do modelo *Beta*, para conjuntos de dados similares aos utilizados neste experimento.

Confiabilidade. Separando-se a variância da soma de quadrados dos desvios ao longo dos 91 casos, temos que: 98,3% da variação é devida ao caso (ou seja, ao conjunto de dados para parametrização); 0,3% é devida aos métodos; e 1,4% da variância é devida a erros aleatórios (erro não explicado pelo modelo de análise de variância).

Observa-se que todos os erros do método *Downhill Simplex* estão entre 0% e 1% a mais que o melhor resultado encontrado dentre todos os métodos (Tabela 8). Já o *Quasi-Newton* apresenta um caso cujo erro esta entre 200% e 400% maior que o melhor resultado encontrado. A EE($\mu+\lambda$) não apresenta erros acima de 50%.

¹ veja apêndice A

Tabela 8 – Número de resultados por faixa de erro em relação ao melhor resultado obtido por cada método de otimização.

De	Até	EE($\mu+\lambda$)	EE(μ,λ)	<i>Downhill Simplex</i>	<i>Quasi-Newton</i>
0%	1%	56	4	91	57
1%	5%	25	13	0	14
5%	10%	6	13	0	7
10%	50%	4	30	0	11
50%	100%	0	0	0	0
100%	200%	0	28	0	1
200%	400%	0	3	0	1
Total de Casos		91	91	91	91

A densidade de probabilidade das diferenças (erro do método em relação ao melhor resultado) pode ser verificada no gráfico a seguir:

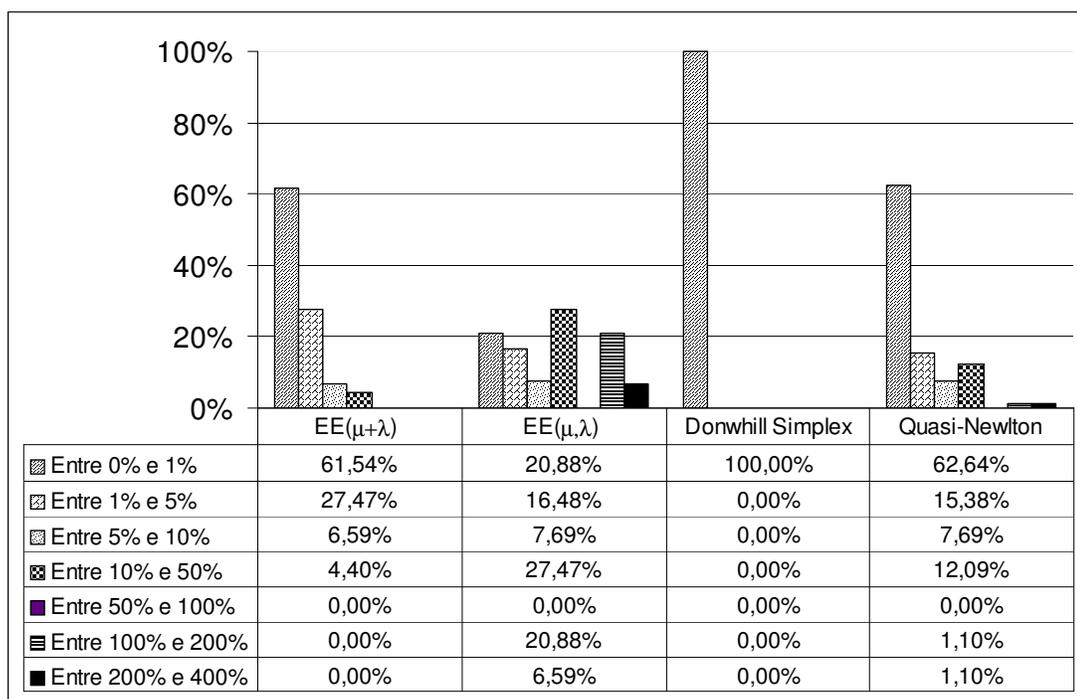


Figura 3 – Densidade de probabilidade das diferenças

Com base nas informações da Tabela 8 e da Figura 3, é possível definir que o método *Downhill Simplex* apresentou os melhores resultados e que a EE(μ,λ)

apresentou os piores resultados. Pode-se inferir, então, que o método mais confiável é o *Downhill Simplex* e que o método menos confiável é a $EE(\mu, \lambda)$.

Na análise dos histogramas das freqüências dos valores percentuais da diferença entre o valor de SQE do método e o melhor resultado encontrado por todos os métodos, foi constatado, por meio do teste de significância r de *Pearson* (LEVIN, 1987), cujo resultado revelou correlação superior a 0,95 para o método *Quasi-Newton*, 0,94 para $EE(\mu+\lambda)$ e 0,96 para $EE(\mu, \lambda)$, que a função de distribuição exponencial representava adequadamente a distribuição das probabilidades acumuladas desses resíduos. O método *Downhill Simplex* não possui distribuição de dados de SQE, pois obteve sempre os melhores resultados, não existindo assim variação significativa entre o seu resultado e o melhor resultado. Por este motivo não é possível ajustar a curva de distribuição exponencial e nem calcular a correlação.

O teste F revelou diferenças significativas entre os métodos em todas as comparações (Tabela 9).

Tabela 9 - Resultados da aplicação do teste F

Métodos	Prob. F	F Calculado	Comparação
Downhill Simplex e Quasi-Newton	< 0,001	8.376	Diferentes
Downhill Simplex e $EE(\mu+\lambda)$	< 0,001	6.264	Diferentes
Downhill Simplex e $EE(\mu, \lambda)$	< 0,001	104	Diferentes
Quasi-Newton e $EE(\mu+\lambda)$	< 0,001	12	Diferentes
Quasi-Newton e $EE(\mu, \lambda)$	< 0,001	132	Diferentes
$EE(\mu+\lambda)$ e $EE(\mu, \lambda)$	< 0,001	154	Diferentes

* F crítico de 4,098 e 1 grau de liberdade no numerador e 38 graus no denominador

Na Figura 4, são apresentados os pontos relativos às freqüências acumuladas de ocorrência dos valores percentuais da diferença entre o valor de SQE do método e o melhor resultado encontrado por todos os métodos, bem como as respectivas curvas da distribuição exponencial ajustadas.

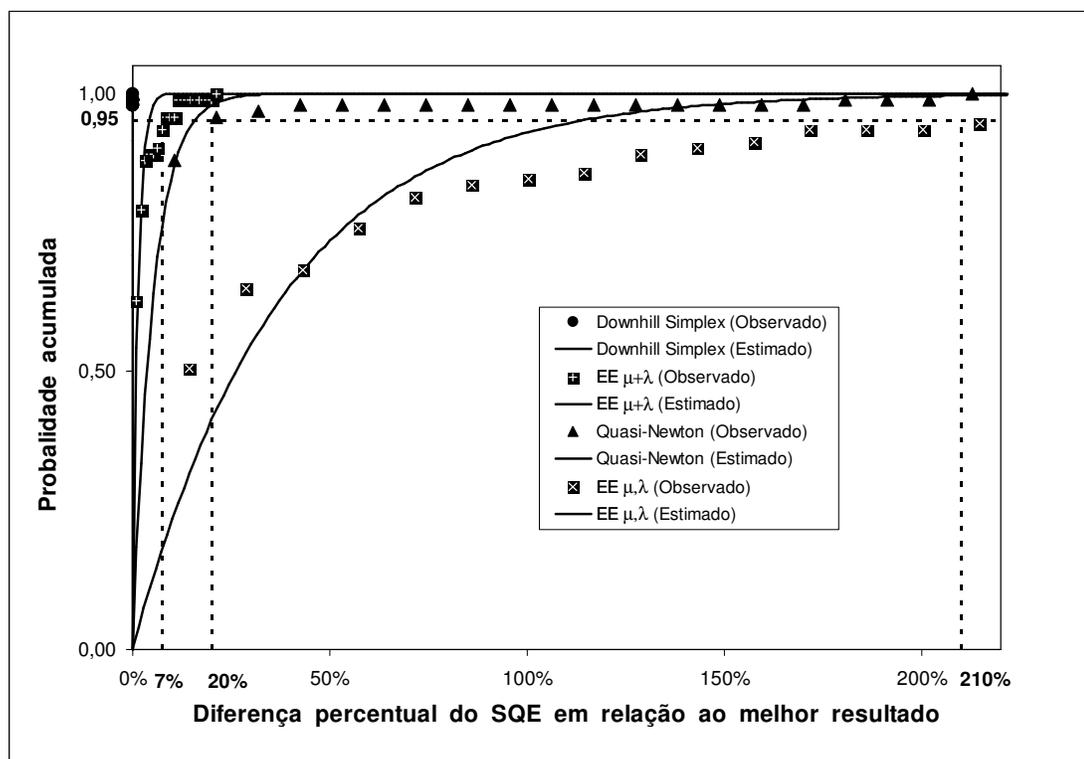


Figura 4 – Curvas da distribuição exponencial, ajustadas às freqüências acumuladas de ocorrência dos valores percentuais da diferença entre o valor de SQE do método e o melhor resultado encontrado por todos os métodos. Seguimentos tracejados verticais correspondem à diferença percentual de SQE associada ao percentil de 95% para cada método.

Pela disposição das curvas da distribuição exponencial (Figura 4), o *Downhill Simplex* foi o método que revelou melhor desempenho, pois quanto mais próximo a curva estiver do eixo das ordenadas, menores são seus valores de diferença percentual do SQE em relação ao melhor resultado. Conseqüentemente, é o método mais confiável para otimizar os parâmetros do modelo *beta*. O segundo método mais confiável foi a $EE(\mu+\lambda)$, superando o método de *Quasi-Newton* que aparece como terceiro método mais confiável. A $EE(\mu,\lambda)$ é o método menos confiável dentre os métodos analisados para parametrizar o modelo beta.

Analisando a Figura 4, conclui-se que existe 95% de probabilidade de que o resultado da parametrização de um caso, com o método $EE(\mu+\lambda)$, obtenha erro menor que 7% a mais em relação ao melhor resultado encontrado por todos os métodos. Para o método *Quasi-Newton*, este índice é de 20%. Para o método $EE(\mu,\lambda)$, este índice sobe para 210%.

Classificação. A Tabela 10 apresenta a classificação dos métodos em relação a cada um dos critérios de avaliação. O *Downhill Simplex* é o primeiro em todos os critérios: eficiência, eficácia e confiabilidade.

Tabela 10 - Resultados da Análise da Parametrização do Modelo Beta

Classificação	Eficiência	Eficácia	Confiabilidade
1º	<i>Downhill Simplex</i>	<i>Downhill Simplex</i>	<i>Downhill Simplex</i>
2º	<i>Quasi-Newton</i>	<i>Quasi-Newton</i>	EE ($\mu+\lambda$)
3º	EE(μ,λ)	EE ($\mu+\lambda$)	<i>Quasi-Newton</i>
4º	EE($\mu+\lambda$)	EE (μ,λ)	EE (μ,λ)

4.2 RESULTADOS PARA O MODELO van GENUCHTEN

Eficiência. Ao calcular o *NEA* (Número Equalizado de Avaliações) dos métodos, equação (16), para o modelo *van Genuchten* parametrizado em 102 casos ($n=102$), utilizando uma população com 30 indivíduos ($P=30$), e com número de pontos necessários para a inicialização do método de 1, 5, 30 e 30 para os métodos *Quasi-Newton*, *Downhill Simplex*, EE($\mu+\lambda$) e EE(μ,λ), respectivamente, obteve-se os resultados apresentados na Tabela 11.

Tabela 11 – Número Equalizado de Avaliações (NEA) dos métodos.

	Quasi-Newton	Downhill Simplex	EE($\mu+\lambda$)	EE(μ,λ)
NEA	921.150	462.642	6.672.000	5.593.260

Expressando os valores da Tabela 11 como proporções do número total de execuções da função objetivo (Figura 5), observa-se que, considerado o número de avaliações da função objetiva somente até obter o seu melhor resultado, equalizado com a equação (16), a EE ($\mu+\lambda$) foi responsável por mais de 48% das vezes em que a função objetivo foi executada, enquanto que a EE (μ,λ) foi responsável aproximadamente por 41% das vezes, o *Quasi-Newton* por 6,75% e o

Downhill Simplex por apenas 3,39%. Desta forma, a classificação de eficiência dos métodos é: *Downhill Simplex*, *Quasi-Newton*, EE (μ,λ), EE ($\mu+\lambda$).

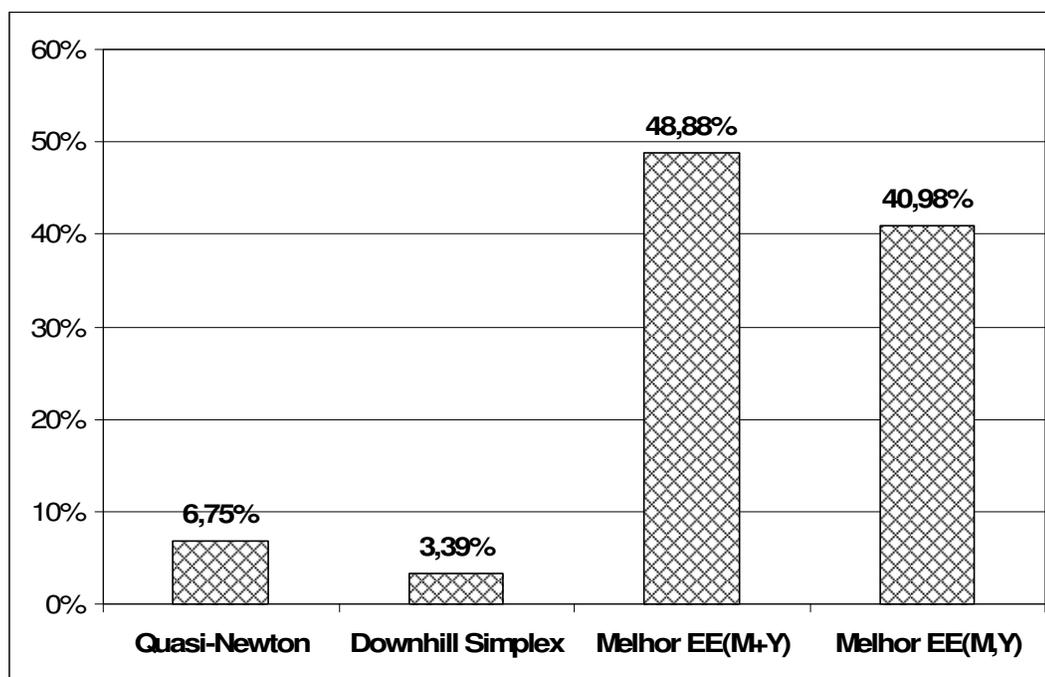


Figura 5 – Porcentagem de contribuição de cada método na execução da função objetivo

Eficácia. Os resultados das avaliações de eficácia são apresentados na Tabela 12. Dentre os 102 casos analisados para o modelo *van Genuchten*, o método *Quasi-Newton* obteve maior eficácia em 102 casos (100%), sendo melhor absoluto 60 vezes. O método *Downhill Simplex* foi o segundo mais eficaz, 42 casos (41%), não foi absoluto nenhuma vez. Nenhum dos resultados obtidos com a Estratégia Evolutiva figurou no conjunto dos melhores resultados.

Comparando-se os melhores resultados apenas entre as duas estratégias de seleção ($\mu+\lambda$) e (μ,λ), em 72 casos a estratégia ($\mu+\lambda$) foi melhor, contra 30 casos da estratégia (μ,λ). Não houve empates. Isto possibilitou estabelecer a EE($\mu+\lambda$) e a EE(μ,λ) como terceiro e quarto método, respectivamente, na classificação de eficácia.

Tabela 12 – Número de casos dos melhores resultados encontrados

	Isolado ¹	Empatado ²	Total de Casos
<i>Downhill Simplex</i>	0	42	42
<i>Quasi-Newton</i>	60	42	102
EE ($\mu+\lambda$)	0 (72 ³)	0	0 (72)
EE (μ,λ)	0 (30 ³)	0	0 (30)

¹ Número de casos em que o método obteve isoladamente o melhor resultado.

² Número de casos em que mais de um método obteve o melhor resultado.

³ Comparação feita somente entre as estratégias ($\mu+\lambda$) e (μ,λ).

Nos 42 casos em que ambos os métodos, *Downhill Simplex* e *Quasi-Newton*, obtiveram resultados iguais como os melhores resultados (41%), pode-se interpretar que possivelmente trata-se um mínimo “forte”¹ (WALSH, 1979).

O método *Quasi-Newton* obteve o melhor resultado em 100% das vezes, enquanto, o método *Downhill Simplex*, 41%, indicando a maior probabilidade do primeiro em encontrar resultados superiores. Os resultados demonstram, portanto, superioridade do método *Quasi-Newton*, em relação aos outros métodos, quanto à eficácia na parametrização do modelo *van Genuchten*, para conjuntos de dados similares aos utilizados neste experimento.

Confiabilidade. Separando-se a variância da soma de quadrados dos desvios ao longo dos 102 casos, temos que: 61% da variação é devida ao caso (ou seja, ao conjunto de dados para parametrização); 1% é devida aos métodos; e 38% da variância é devida a erros aleatórios (erro não explicado pelo modelo de análise de variância).

Observa-se que todos os erros do método *Quasi-Newton* estão entre 0% e 1% a mais que o melhor resultado encontrado dentre todos os métodos (Tabela 13). Já o *Downhill Simplex* apresenta nove casos cujo erro está acima de 100% maior que o melhor resultado encontrado. A EE(μ,λ) não apresenta erros acima de 50%. A EE($\mu+\lambda$) apresenta 1 caso em que o erro está acima de 100%.

1

Tabela 13 – Número de casos dos métodos distribuídos nas faixas percentuais de erro acima do melhor resultado.

De	Até	EE($\mu+\lambda$)	EE(μ,λ)	<i>Downhill Simplex</i>	<i>Quasi-Newton</i>
0%	1%	24	10	83	102
1%	5%	40	44	5	0
5%	10%	24	22	2	0
10%	50%	13	26	3	0
50%	100%	0	0	0	0
100%	200%	1	0	5	0
200%	400%	0	0	4	0
Total de Casos		102	102	102	102

A densidade de probabilidade das diferenças (erro do método em relação ao melhor resultado) pode ser verificada no gráfico a seguir:

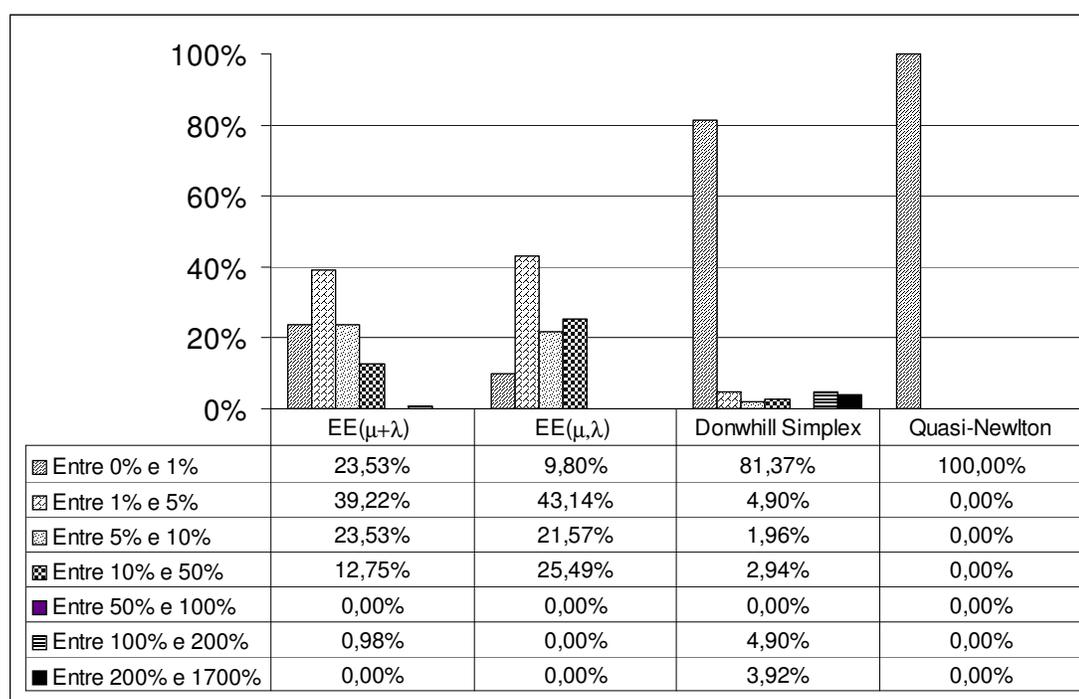


Figura 6 – Densidade de probabilidade das diferenças

Com base nas informações da Tabela 13 e da Figura 6, é possível definir que o método *Quasi-Newton* apresentou os melhores resultados. A EE($\mu+\lambda$) apresentou resultados melhores que a EE(μ,λ). O *Downhill Simplex* apresentou 8,8%

de erros acima de 100%. Desta forma podemos inferir, então, que o método mais confiável é o *Quasi-Newton*.

Na análise dos histogramas das freqüências dos valores percentuais da diferença entre o valor de SQE do método e o melhor resultado encontrado por todos os métodos, foi constatado, por meio do teste de significância r de *Pearson* (LEVIN, 1987), cujo resultado revelou correlação superior a 0,77 para o método *Downhill Simplex*, 0,98 para $EE(\mu+\lambda)$ e 0,99 para $EE(\mu,\lambda)$, que a função de distribuição exponencial representa adequadamente a distribuição das probabilidades acumuladas desses resíduos. O método *Quasi-Newton* não possui distribuição de dados de SQE, pois obteve sempre os melhores resultados, não existindo assim variação significativa entre o seu resultado e o melhor resultado. Por este motivo não é possível ajustar a curva de distribuição exponencial e nem calcular a correlação.

O teste F revelou diferenças significativas entre os métodos em todas as comparações possíveis (Tabela 14).

Tabela 14 - Resultados da aplicação do teste F

Métodos	Prob. F	F Calculado	Comparação
Downhill Simplex e Quasi-Newton			Diferentes ¹
Downhill Simplex e $EE(\mu+\lambda)$	< 0,001	6.264	Diferentes
Downhill Simplex e $EE(\mu,\lambda)$	< 0,001	104	Diferentes
Quasi-Newton e $EE(\mu+\lambda)$			Diferentes ¹
Quasi-Newton e $EE(\mu,\lambda)$			Diferentes ¹
$EE(\mu+\lambda)$ e $EE(\mu,\lambda)$	< 0,001	154	Diferentes

* F crítico de 4,098 e 1 grau de liberdade no numerador e 38 graus no denominador

¹ Os métodos foram considerados diferentes pela impossibilidade de comparação estatística devido à ausência de distribuição de dados de SQE para o método *Quasi-Newton*.

Na Figura 7, são apresentados os pontos relativos às freqüências acumuladas de ocorrência dos valores percentuais da diferença entre o valor de SQE do método e o melhor resultado encontrado por todos os métodos, bem como as respectivas curvas da distribuição exponencial ajustadas.

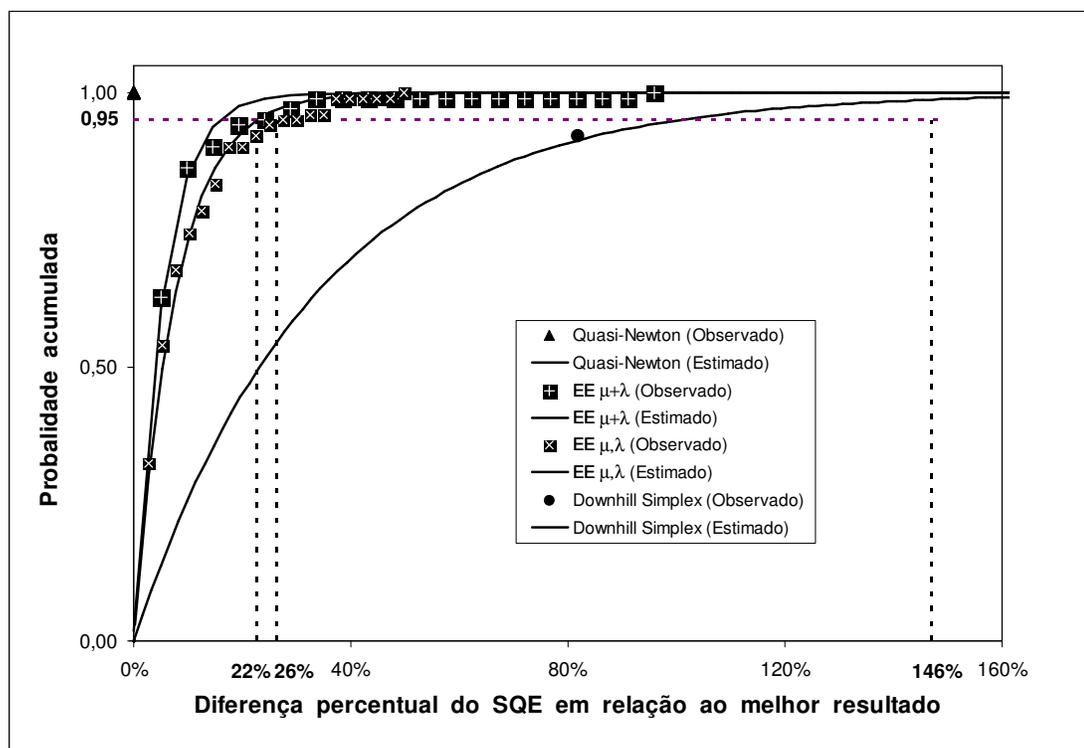


Figura 7 – Curvas da distribuição exponencial, ajustadas às freqüências acumuladas de ocorrência dos valores percentuais da diferença entre o valor de SQE do método e o melhor resultado encontrado por todos os métodos. Seguimentos tracejados verticais correspondem à diferença percentual de SQE associada ao percentil de 95% para cada método

Pela disposição das curvas da distribuição exponencial (Figura 7), o *Quasi-Newton* foi o método que revelou melhor desempenho, pois quanto mais próxima a curva estiver do eixo das ordenadas, menores são seus valores de diferença percentual do SQE em relação ao melhor resultado. Conseqüentemente, é o método mais confiável para otimizar os parâmetros do modelo *van Genuchten*. O segundo método mais confiável foi a $EE(\mu+\lambda)$, superando o método $EE(\mu,\lambda)$ que aparece como terceiro método mais confiável. O *Downhill Simplex* é o método menos confiável dentre os métodos analisados para parametrizar o modelo *van Genuchten*.

Analisando a Figura 7, conclui-se que existe 95% de probabilidade de que o resultado da parametrização de um caso, com o método $EE(\mu+\lambda)$, obtenha erro menor que 22% a mais em relação ao melhor resultado encontrado por todos os métodos. Para o método $EE(\mu,\lambda)$, este índice é de 26%. Para o método *Downhill Simplex*, este índice sobe para 146%.

Classificação. A Tabela 15 apresenta a classificação dos métodos em relação a cada um dos critérios de avaliação. O *Downhill Simplex* é o primeiro em eficiência e o *Quasi-Newton* é o primeiro em eficácia e também em confiabilidade.

Tabela 15 - Resultados da Análise da Parametrização do Modelo van Genuchten

Classificação	Eficiência	Eficácia	Confiabilidade
1º	<i>Downhill Simplex</i>	<i>Quasi-Newton</i>	<i>Quasi-Newton</i>
2º	<i>Quasi-Newton</i>	<i>Downhill Simplex</i>	EE ($\mu+\lambda$)
3º	EE (μ,λ)	EE ($\mu+\lambda$)	EE (μ,λ)
4º	EE ($\mu+\lambda$)	EE (μ,λ)	<i>Downhill Simplex</i>

4.3 RESULTADOS PARA O MODELO OLTJEN

A seguir são apresentados os resultados dos métodos, a classificação em relação a cada um dos critérios de avaliação (eficiência, eficácia e confiabilidade), e ao final, um quadro comparativo destas classificações.

Eficiência. Ao calcular o *NEA* (Número Equalizado de Avaliações) dos métodos, equação (16), para o modelo *Oltjen* parametrizado em 1 caso ($n=1$), utilizando uma população com 30 indivíduos ($P=30$), e com número de pontos necessários para a inicialização do método de 1, 5, 30 e 30 para os métodos *Quasi-Newton*, *Downhill Simplex*, EE($\mu+\lambda$) e EE(μ,λ), respectivamente, obteve-se os resultados apresentados na Tabela 16.

Tabela 16 – Número Equalizado de Avaliações (NEA) dos métodos.

	Quasi-Newton	Downhill Simplex	EE($\mu+\lambda$)	EE(μ,λ)
NEA	5.160	2.790	88.350	73.320

Expressando os valores da Tabela 16 como proporções do número total de execuções da função objetivo (Figura 8), observa-se que, considerado o número de avaliações da função objetivo somente até obter o seu melhor resultado, a EE ($\mu+\lambda$) foi responsável por mais de 52% das vezes em que a função objetivo foi

executada, enquanto que a EE (μ, λ) foi responsável aproximadamente por 43% das vezes, o *Quasi-Newton* por 3% e o *Downhill Simplex* por apenas 1,6%. Desta forma, o ranking de eficiência dos métodos é: *Downhill Simplex*, *Quasi-Newton*, EE (μ, λ), EE ($\mu + \lambda$).

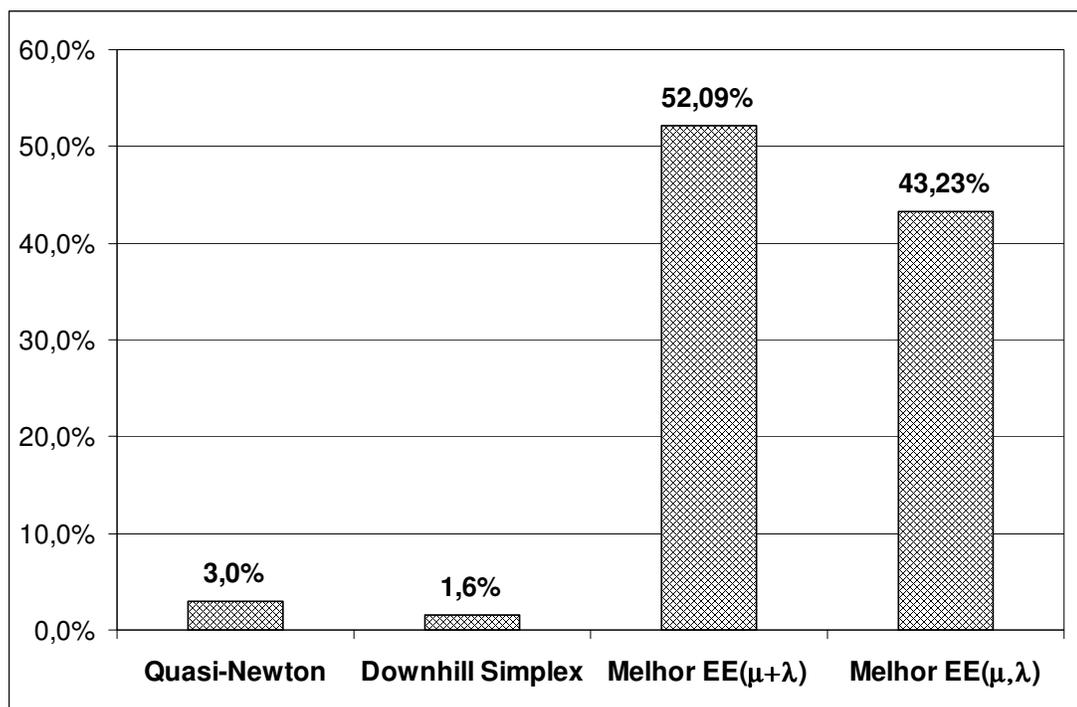


Figura 8 – Porcentagem do total de execuções da função objetivo pelos métodos avaliados

Eficácia. Como existe apenas um conjunto de dados observado para a parametrização do modelo de *Oltjen*, o resultado foi estabelecido diretamente com base nos valores de SQE obtidos pelos métodos. Assim, os métodos *Quasi-Newton* e *Downhill Simplex*, obtiveram o melhor resultado e ficaram empatados em primeiro na classificação de eficácia (Tabela 17). O segundo colocado foi a EE($\mu + \lambda$) e o terceiro a EE(μ, λ).

Tabela 17 - Resultados da SQE na Parametrização do Modelo Oltjen

	<i>Quasi-Newton</i>	<i>Downhill Simplex</i>	EE ($\mu + \lambda$)	EE (μ, λ)
SQE	30.3710670	30.3710670	30.3733990	30.3795240
Classificação	1º	1º	2º	3º

Confiabilidade. A técnica estabelecida para definir a confiabilidade de um método necessita de mais de um conjunto de dados observados (casos). Para o modelo *Oltjen* apenas um conjunto de dados estava disponível, assim não foi possível estabelecer a confiabilidade dos métodos.

Classificação. A Tabela 18 apresenta a classificação dos métodos em relação a cada um dos critérios de avaliação. O *Downhill Simplex* foi o primeiro nos critérios eficiência e eficácia. O *Quasi-Newton* também foi o primeiro no critério de eficácia.

Tabela 18 - Resultados da Análise da Parametrização do Modelo Oltjen

Classificação	Eficiência	Eficácia	Confiabilidade
1º	<i>Downhill Simplex</i>	<i>Downhill Simplex</i> <i>Quasi-Newton</i>	<i>Não se aplica</i>
2º	<i>Quasi-Newton</i>	EE ($\mu+\lambda$)	<i>Não se aplica</i>
3º	EE (μ,λ)	EE (μ,λ)	<i>Não se aplica</i>
4º	EE ($\mu+\lambda$)		<i>Não se aplica</i>

4.4 RESULTADOS COMPARATIVOS

Nas Tabela 19 e Tabela 20, podemos analisar o desempenho dos métodos nos diversos modelos comparando suas posições nas classificações quanto a eficiência, a eficácia e a confiabilidade. Desta forma, podemos verificar que existe um padrão de desempenho dos métodos quando o critério é eficiência. O *Downhill Simplex* foi sempre o mais eficiente, seguido pelo *Quasi-Newton*, EE(μ,λ) e EE($\mu+\lambda$). Quando o critério é eficácia, os métodos *Quasi-Newton* e *Downhill Simplex* foram os mais eficazes. Para o modelo Beta o método *Downhill Simplex* foi mais eficaz, enquanto que, para o modelo de *van Genutchen* o método *Quasi-Newton* foi superior. A EE($\mu+\lambda$) foi sempre superior à EE(μ,λ) nas classificações de eficácia. O critério de confiabilidade só pôde ser aplicado na análise de dois modelos. O padrão mais visível foi o de que a EE($\mu+\lambda$) ficou por duas vezes na segunda colocação. Os demais métodos trocaram de posição de forma variada.

Tabela 19 – Classificações dos métodos referentes aos critérios comparativos em cada modelo.

Modelo van Genuchten			
Classificação	Eficiência	Eficácia	Confiabilidade
1º	<i>Downhill Simplex</i>	<i>Quasi-Newton</i>	<i>Quasi-Newton</i>
2º	<i>Quasi-Newton</i>	<i>Downhill Simplex</i>	EE ($\mu+\lambda$)
3º	EE (μ,λ)	EE ($\mu+\lambda$)	EE (μ,λ)
4º	EE ($\mu+\lambda$)	EE (μ,λ)	<i>Downhill Simplex</i>
Modelo Beta			
Classificação	Eficiência	Eficácia	Confiabilidade
1º	<i>Downhill Simplex</i>	<i>Downhill Simplex</i>	<i>Downhill Simplex</i>
2º	<i>Quasi-Newton</i>	<i>Quasi-Newton</i>	EE ($\mu+\lambda$)
3º	EE(μ,λ)	EE ($\mu+\lambda$)	<i>Quasi-Newton</i>
4º	EE($\mu+\lambda$)	EE (μ,λ)	EE (μ,λ)
Modelo Oltjen			
Classificação	Eficiência	Eficácia	Confiabilidade
1º	<i>Downhill Simplex</i>	<i>Downhill Simplex</i> <i>Quasi-Newton</i>	<i>Não se aplica</i>
2º	<i>Quasi-Newton</i>	EE ($\mu+\lambda$)	<i>Não se aplica</i>
3º	EE (μ,λ)	EE (μ,λ)	<i>Não se aplica</i>
4º	EE ($\mu+\lambda$)		<i>Não se aplica</i>

Tabela 20 – Resultado quantitativo referente aos critérios comparativos em cada modelo.

Modelo van Genuchten			
Classificação	Eficiência	Eficácia	Confiabilidade
1º	462.642	102	0%
2º	921.150	42	22%
3º	5.593.260	0 (72) ¹	26%
4º	6.672.000	0 (30) ¹	146%
Modelo Beta			
Classificação	Eficiência	Eficácia	Confiabilidade
1º	355.554	89	0%
2º	744.420	47	7%
3º	3.805.410	0 (87) ¹	20%
4º	6.174.390	0 (4) ¹	210%
Modelo Oltjen			
Classificação	Eficiência	Eficácia	Confiabilidade
1º	2.790	30.3710670 ²	<i>Não se aplica</i>
2º	5.160	30.3733990 ²	<i>Não se aplica</i>
3º	73.320	30.3795240 ²	<i>Não se aplica</i>
4º	88.350		<i>Não se aplica</i>

¹ Comparação feita somente entre as estratégias ($\mu+\lambda$) e (μ,λ) para definir a 3ª e a 4ª posição na classificação.

² Como existe apenas um conjunto de dados, a classificação foi estabelecida diretamente pelos valores de SQE.

Lembrando que Robustez é a confiabilidade de um método extrapolada para mais de um modelo, ou seja, o quanto o método se mantém confiável ao parametrizar modelos diferentes, podemos então, analisar a Tabela 21.

Tabela 21 – Índices de robustez dos métodos considerando a confiabilidade nos modelos para o percentil 95

Métodos	Índice de tolerância de confiabilidade (Beta)	Índice de tolerância de confiabilidade (van Genuchten)	Índice de Robustez
EE($\mu+\lambda$)	7%	23%	23%
EE(μ,λ)	210%	26%	210%
Downhill Simplex	0%	147%	147%
Quasi-Newton	20%	0%	20%

O índice de confiabilidade para a EE($\mu+\lambda$), no percentil 95, é de 7%. Isto significa que 95% das suas SQE contêm erros de até 7% maiores do que o melhor resultado de SQE de todos os métodos utilizados, considerando o modelo Beta. Já para o modelo de *van Genuchten* este índice sobe para 23%. Assim, o índice de robustez mínimo para considerar a EE($\mu+\lambda$) confiável para parametrizar os dois modelos é de 23%. Como o critério estipulado neste trabalho para considera um modelo confiável em um determinado método é 5%, a EE($\mu+\lambda$) não é considerada robusta. Este mesmo raciocínio ao ser aplicado nos demais métodos nos permite concluir que mesmo o método *Quasi-Newton* sendo o mais robusto com índice de robustez de 20%, para os critérios deste trabalho ele também não é robusto.

5 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

As principais conclusões obtidas neste trabalho foram:

1. O procedimento utilizado e, sobretudo, os índices de confiabilidade e robustez, gerados nesse estudo, se mostraram úteis e promissores na comparação de métodos de otimização.
2. De acordo com o critério de robustez adotado, um método é considerado robusto quando o seu índice de robustez não exceder a 5%, nenhum dos métodos de otimização testados foi considerado robusto para a parametrização dos modelos.
3. O método da estratégia evolutiva, tanto com a seleção (μ, λ) quanto com a seleção $(\mu + \lambda)$, não obteve bom desempenho quanto aos critérios de eficiência e eficácia. Vale entretanto ressaltar que algoritmos de estratégia evolutiva são mais indicados para problemas de maior dimensionalidade. Além disso, nesse trabalho, não foram testados diferentes configurações do método (tamanho da população, operador de mutação, etc.).
4. A estratégia evolutiva $(\mu + \lambda)$ se mostrou mais promissora que a estratégia evolutiva (μ, λ) para a parametrização dos modelos matemáticos testados.
5. Houve especificidade do método em relação ao problema, pois os métodos não apresentaram repetibilidade quanto a classificação de confiabilidade para diferentes modelos, com exceção da Estratégia Evolutiva $(\mu + \lambda)$.
6. O método que melhor parametrizou o modelo Beta foi o *Downhill Simplex* por apresenta-se como o mais eficiente, o mais eficaz e o mais confiável.
7. O *Quasi-Newton* foi mais eficaz e mais confiável para parametrizar o modelo de *van Genuchten*, porém não foi o mais eficiente.
8. Para o modelo de *Oltjen* os métodos *Downhill Simplex* e *Quasi-Newton* foram os mais eficazes e o *Downhill Simplex*, o mais eficiente.

Para trabalhos futuros sugere-se:

1. Estudar as causas da falha dos métodos em casos específicos. Particularmente se aconselha estudar casos com grandes discrepâncias entre os resultados dos diferentes métodos.
2. Testar outros métodos de otimização não-linear para a parametrização de modelos avaliando sua eficiência, eficácia e robustez. Entre as opções considera-se promissor o uso da EE $(\mu + \lambda)$ no início da busca e depois um método de gradiente para encontrar ótimos locais.
3. Estudar o índice de robustez para situações nas quais a tolerância de confiabilidade possa variar de modelo para modelo.

Finalmente conclui-se que, em geral, pesquisadores envolvidos na parametrização de modelos não-lineares, devem utilizar métodos de otimização cautelosamente e, sempre que possível, utilizar mais de um método.

6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AGYEI, E.; HATFIELD, K. Enhancing gradient-based parameter estimation with an evolutionary approach. **Journal of Hydrology**, v. 316, p. 266-280, 2006.
- ALBERTO, P. V. **Alguns métodos numéricos para resolver a equação de Newton**. Coimbra: Universidade de Coimbra, Departamento de Física, 2004. Disponível em: <http://nautilus.fis.uc.pt/personal/pvalberto/apontamentos/metodos_ode.pdf>. Acesso em: 04 ago. 2007.
- AMBLER, S. W. **Análise e projeto orientados a objetos: um guia para o desenvolvimento de aplicações orientadas a objeto**. Rio de Janeiro: Infobook, 1997. 247 p.
- ANDERSON, D. R.; SWEENEY, D. J.; WILLIAMS, T. A. **Estatística aplicada à administração e economia**. 2. ed. São Paulo: Pioneira Thomson Learning, 2003. 642 p.
- ASCHENBRENNER, F.; OSTIN, A. Automatic parameter estimation applied on a groundwater model: the problem of structure identification. **Environmental Geology**, New York, v. 25, n. 3, p. 205-210, 1995.
- BACKES, A. A. **Composição corporal e exigências de energia, proteína e macroelementos minerais, para bovinos mestiços leiteiros e Zebu, castrados, em fase de recria e engorda, em confinamento**. 2003. Tese (Doutorado em Nutrição Animal) - Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, MG.
- BARIONI, L. G.; OLTJEN, J. W.; SAINZ, R. D. Iterative development, evaluation and optimal parameter estimation of a dynamic simulation model: a case study. In: KEBREAB, E.; DIJKSTRA, J.; BANNINK, A.; GERRITS, W. J. J.; FRANCE, J. (Ed.). **Nutrient digestion and utilization in farm animals: modelling approaches**. New York: CABI Publishing, 2006. p. 251-256.
- BECK, J. V.; ARNOLD, K. L. **Parameter estimation**. New York: John Wiley, 1977. 501 p.
- BITTENCOURT, G. **Inteligência computacional**. Disponível em: <<http://www.das.ufsc.br/gia/softcomp/>>. Acesso em: 27 nov. 2006.
- BOSCOVIC, R. **Theoria philosophiae naturalis**. Vienna: [s.n.], 1758.
- BOX, G. E. P.; TIAO, G. C. **Bayesian inference in statistical analysis**. New York: John Wiley & Sons, 1992. (Wiley Classics Library).
- CARSON, Y.; MARIA, A. Simulation optimization: methods and applications. In: WINTER SIMULATION CONFERENCE, 1997, Atlanta, Georgia. **Proceedings**. Disponível em: <<http://www.informs-cs.org/wsc97papers/prog97.html>>. Acesso em: 08 ago. 2007.
- CHEN, R. S.; PI, L. C.; HSIEG, C. C. Application of parameter optimization method for calibrating tank model. **Journal of the American Water Resources Association**, v. 41, n. 2, p. 389-402, 2005.
- DANTAS, O. D.; SILVA, E. M.; BARIONI, L. G.; OLIVEIRA, M. A. A. de; LIMA, J. E. F. W. **Comparação dos métodos GRG2 (solver do excel) e Downhill Simplex para a parametrização da função Beta**. Anais do XXXIX SBPO. (no prelo).
- EIBEN, A. E.; SMITH, J. E. **Introduction to evolutionary computing**. Berlin: Springer, 2003. 299 p. (Natural Computing Series).

FERNANDES, E. M. da G. P. **Computação numérica**. 2. ed. Braga: Universidade do Minho, 1997. 414 p.

FREEDMAN, V. L.; LOPES, V. L.; HERNANDEZ, M. Parameter identifiability for catchment-scale erosion modeling: a comparison of optimization algorithms. **Journal of Hydrology**, v. 207, p. 89-97, 1998.

FREITAS, J. A. S. **Exigências nutricionais de energia e proteína e eficiência líquida de utilização da energia metabolizável para bovinos de diferentes grupos genéticos, em confinamento**. 2004. Tese (Doutorado em Nutrição Animal) - Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, MG.

GARCIA, E. M.; CARMO, L. C. do; FERRAZ, K. M. de A. **Normas para elaboração de dissertações e teses**. 3. ed. Piracicaba: USP: ESALQ, 2005. 110 p.

GAUSS, C. F. **Theory of combinations of observations least subject to errors, original with translation**. Philadelphia: SIAM, 1995.

GENUCHTEN, M.Th. van. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. **Soil Science Society America Journal**, v. 44, p. 892-898, 1980.

HEITKOETTER, J.; BEASLEY, D. **The Hitch-Hiker's Guide to evolutionary computation: a list of frequently asked questions**. [S. l.: s. n.], 1994.

HELLWICH, O. Model parameter estimation for digital image analysis using simulated annealing. **Photogrammetrie Fernerkundung Geoinformation**, v. 6, p. 371-379, 1999.

HOUAISS, A.; VILLAR, M. de S.; FRANCO, F.M. de M. **Dicionario Houaiss da lingua portuguesa**. Rio de Janeiro: Objetiva, 2001. 2922 p.

JOONGHOON, K.; ZONGWOO, G.; EUNGSEOK, K. Parameter estimation of the nonlinear Muskingum model using Harmony Search. **Journal of the American Water Resources Association**, v. 37, n. 5, p. 1131-1138, 2001.

KADA, B.; TARASIEWICZ, S. Analysis and identification of distributed parameter model for wood drying systems. **Drying Technology**, New York, v. 22, n. 5, p. 933-946, 2004.

KLEPPER, O.; ROUSE, D. I. A procedure to reduce parameter uncertainty for complex models by comparison with real system output illustrated on a potato growth model. **Agricultural Systems**, Barking, v. 36, n. 4, p. 375-395, 1991.

KOSTINA, E. Robust parameter estimation in dynamic systems. **Optimization and Engineering**, v. 5, p. 461-484, 2004.

LAGARIAS, J. C.; REEDS, J. A.; WRIGHT, M. H.; WRIGHT, P. E. Convergence properties of the nelder-mead simplex method in low dimensions. **SIAM Journal on Optimization**, v. 9, n. 1, p. 112-147, 1998.

LAPPONI, C. J. R. **Estatística usando o excel**. 4. ed. Rio de Janeiro: Campus, 2005. 476 p.

LASDON, L. S.; WARREN, A. D.; JAIN, A.; RATNER, M. Design and testing of a generalized reduced gradient code for nonlinear programming. **ACM Transactions on Mathematical Software**, New York, v. 4, n. 1, p. 34-50, 1978.

- LEVIN, J. **Estatística aplicada a ciências humanas**. 2. ed. São Paulo: Harbra, 1987. 392 p.
- LEVINE, D M.; STEPHAN, D.; KREHBIEL, T.C.; BERENSON, M.L. **Estatística teoria e aplicações usando o Microsoft Excel**. 3. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2005. 819 p.
- LUCE, C. H.; CUNDY, T. W. Parameter identification for a runoff model for forest roads. **Water Resources Research**, Washington, v. 30, n. 4, p. 1057-1069, 1994.
- MAILHOT, A.; GAUME, E.; VILLENEUVE, J. P. Uncertainty analysis of calibrated parameter values of an urban storm water quality model using Metropolis Monte Carlo algorithm. **Water Science and Technology**, Oxford, v. 36, n. 5, p. 141-148, 1997.
- MARQUADT, D. W. An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters. **Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics**, v. 11, p. 431-441, 1963.
- MARTINS, R. G. R. **Exigências de energias, proteína e macroelementos minerais (Ca, P, Mg, Na e K) de bovinos Nelore e mestiços, não-castrados, em confinamento**. 2001. Tese (Doutorado em Nutrição Animal) - Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, MG.
- MATLAB. Disponível em: <<http://www.mathworks.com/>>. Acesso em: 5 de setembro de 2007.
- MAYER, A. S.; HUANG, C. L. Development and application of a coupled-process parameter inversion model based on the maximum likelihood estimation method. **Advances In Water Resources**, v. 22, n. 8, p. 841-853, Jun. 1999.
- MAYER, D. G.; BELWARD, J. A.; BURRAGE, K. A Use of advanced techniques to optimize a multi-dimensional dairy model. **Agricultural Systems**, v. 50, p. 239-253, 1996.
- MAYER, D. G.; BELWARD, J. A.; BURRAGE, K. Robust parameter settings of evolutionary algorithms for the optimisation of agricultural systems models. **Agricultural Systems**, v. 69, p. 199-213, 2001.
- MAYER, D. G.; BELWARD, J. A.; WIDELL, H.; BURRAGE, K. Survival of the fittest: genetic algorithms versus evolution strategies in the optimization of systems models. **Agricultural Systems**, v. 60, p. 113-122, 1999.
- NDIRITU, J. G.; DANIELL, T. M. An improved genetic algorithm for rainfall-runoff model calibration and function optimization. **Mathematical and Computer Modelling**, Oxford, v. 33, p. 695-706, 2001
- NYARKO. E. K.; SCITOVSKI, R. Solving the parameter identification problem of mathematical models using genetic algorithms. **Applied Mathematics and Computations**, v. 153, p. 651-658, 2004.
- OLTJEN, J. W.; BYWATER, A. C.; BALDWIN, R. L.; GARRETT, W. N. Development of a dynamic model of beef cattle growth and composition. **Journal of Animal Science**, Champaign, v. 62, p. 86-97, 1986.
- OLTJEN, J. W.; SAINZ, R. D. Mechanistic, dynamic models of growth. In: BALDWIN, R. L. (Ed.). **Modelling ruminant digestion and metabolism**. London: Chapman and Hall, 1995. p. 441-468.

OLTJEN, J. W.; SAINZ, R. D.; PLEASANTS, A. B.; SOBOLEVA, T. K.; ODDY, V. H. Representation of fat and protein gain at low levels of growth and improved prediction of variable maintenance requirement in a ruminant growth and composition model. In: KEBREAB, E.; DIJKSTRA, J.; BANNINK, A.; GERRITS, W. J. J.; FRANCE, J. (Ed.). **Nutrient digestion and utilization in farm animals: modelling approaches**. Wallingford: CABI, 2006.

PAULINO, M. F. **Composição corporal e exigências de energias, proteína e macroelementos minerais (Ca, P, Mg, Na e K) de bovinos não-castrados de quatro raças zebuínas em confinamento**. 1996. Tese (Doutorado em Nutrição Animal) - Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, MG.

PAULINO, P. V. R. **Exigências nutricionais e validação da seção HH para predição da composição corporal de zebuínos**. 2002. Dissertação (Mestrado em Nutrição Animal) - Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, MG.

PERIN FILHO, C. P. **Introdução à simulação de sistemas**. Campinas: Unicamp, 1995. 163 p.

PRESS, W. H.; FLANNERY, B. P.; TEUKOLSKY, S. A.; VETTERLING, W. T. **Numerical recipes in C: the art of scientific computing**. New York: Cambridge University Press, 1990. 735 p.

RIVERA, E. C.; COSTA, A. C.; ATALA, D. I. P.; MAUGERI, F.; MACIEL, M. R. W.; MACIEL FILHO, R. Evaluation of optimization techniques for parameter estimation: application to ethanol fermentation considering the effect to temperature. **Process Biochemistry**, v. 41, p. 1682-1687, 2006.

RONGSONG, C.; LANCHIEH, P.; CHENGCHENG, H. Application of parameter optimization method for calibrating tank model. **Journal of the American Water Resources Association**, v. 41, n. 2, p. 389-402, 2005.

ROSS, S. M. **A first course in probability**. New York: Macmillan Publishing, 1979. 305 p.

SAINZ, R. D.; BARIONI, L. G.; PAULINO, P. V.; VALADARES FILHO, S. C.; OLTJEN, J. W. Growth patterns of Nellore vs british beef cattle breeds assessed using a dynamic, mechanistic model of cattle growth and composition. In: KEBREAB, E.; DIJKSTRA, J.; BANNINK, A.; GERRITS, W. J. J.; FRANCE, J. (Ed.). **Nutrient digestion and utilization in farm animals: modelling approaches**. New York: CABI Publishing, 2006. p. 160-170.

SAS INSTITUTE. **SAS user's guide: statistics**, version 2000. Cary, NC, 2000.

SCORZA JÚNIOR, R. P. Modelagem matemática e simulação de sistemas: uma importante ferramenta na pesquisa agropecuária. In: ROSCOE, R.; MERCANTE, F. M.; SALTON, J. C. (Org.). **Dinâmica da matéria orgânica do solo em sistemas conservacionistas: modelagem matemática e métodos auxiliares**. Dourados: Embrapa Agropecuária Oeste, 2006. p. 63-74.

SILVA, E. M. da; AZEVEDO, J. A. de. Influência do período de centrifugação na curva de retenção de água em solos de Cerrado. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, Brasília, v. 37, p. 1487-1494, 2002.

SILVA, F. F. **Desempenho, características de carcaça, composição corporal e exigências nutricionais (energia, proteína, aminoácidos e macrominerais) de novilhos Nelore, nas fases de recria e engorda, recebendo diferentes níveis de concentrado e proteína.** 2001. Tese (Doutorado em Nutrição Animal) – Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, MG.

STUCKMAN, B.; EVANS, G.; MOLLAGHASEMI, M. Comparison of global search methods for design optimization using simulation. In: WINTER SIMULATION CONFERENCE, 23., 1991, Phoenix. **Proceedings...** Washington: IEEE Computer Society, 1991. p. 937-944.

TALPAZ, H.; DA ROSA, G. D.; HEEARN, A. B. Parameter estimation and calibration of simulation models as a non-linear optimization problem. **Agricultural Systems**, Barking, v. 23, n.1, p. 107-116, 1987.

TEDESCHI, L. O. Assessment of the adequacy of mathematical models. **Agricultural Systems**, Barking, v. 89, p. 225-247, 2006.

THAL, W. M.; CAMPBELL, C. L.; MADDEN, L. V. Sensitivity of Weibull model parameter estimates to variation in simulated disease progression data. **Phytopathology**, St. Paul, v. 74, n.12, p. 1425-1430, 1984.

The MathWorks Inc. **MATLAB Function Reference**, version R2006a. Natick, MA, 2006.

VÉRAS, A. S. C. **Consumo, digestibilidade, composição corporal e exigências nutricionais de bovinos Nelore alimentados com rações contendo diferentes níveis de concentrado.** 2000. Tese (Doutorado Nutrição Animal) – Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, MG.

WALLACH, D.; GOFFINET, B.; BERGEZ, J. E.; DEBAEKE, P.; LEENHARDT, D.; AUBERTOT, J. N. Parameter estimation for crop models: a new approach and application to a corn model. **Agronomy Journal**, Madison, v. 93, n. 4, p. 757-766, 2001.

WALSH, G. R. **Methods of optimization.** Chichester: John Wiley & Sons, 1979. 219 p.

APÊNDICE A – Glossário de termos Técnicos

Para melhor elucidar o texto deste trabalho, faz-se necessário explicitar os seguintes termos:

Algoritmo: conjunto das regras e procedimentos lógicos perfeitamente definidos que levam à solução de um problema em um número finito de etapas.

Caso: Refere-se às condições definidas por um conjunto de dados observados e um modelo matemático.

Conjunto dos melhores resultados: É o conjunto de todos os melhores resultados de SQE, obtidos pelos métodos de otimização na parametrização de um determinado modelo.

Eficácia do método: O quanto o método foi capaz de produzir resultados bons ou ideais para a solução do problema. É número de vezes que o método atingiu o melhor resultado dentre os métodos avaliados.

Erro de Predição: é diferença existente entre o valor real observado e o valor predito pelo modelo matemático.

Espaço Euclidiano: É um espaço constituído por mais de três dimensões.

Loop: conjunto de instruções que um programa de computador percorre e repete um significativo número de vezes, até que sejam alcançadas as condições desejadas.

Mantença: Estado teórico no qual a energia retida pelo animal ao longo do tempo e sua produção são nulas.

Método de Euler: É um método numérico, dos mais simples, para resolver equações diferenciais.

Mínimo Forte ou Máximo Forte: é a posição no espaço de busca que nas imediações fornece o melhor resultado para a função objetivo.

Modelo: Refere-se a um modelo matemático que representa um sistema real. O modelo busca simular as resposta que o sistema real forneceria dada uma determinada entrada.

Otimização: campo da matemática aplicada cujos princípios e métodos são utilizados para resolver problemas quantitativos, lidando com a maximização ou minimização de funções.

Ótimo local: é o ponto de máximo (no caso de maximização) ou de mínimo (no caso de minimização) nas suas mediações.

Parametrização: Ato de ajustar os parâmetros de um modelo para permitir que o mesmo estime melhor suas saídas.

Parâmetro: variável para a qual se fixa ou à qual se atribui um valor e por seu intermédio se definem outros valores ou funções num dado sistema.

APÊNDICE B – Soma de Quadrados dos Erros (Modelo Beta)

Caso	EE($\mu+\lambda$)	EE(μ,λ)	Downhill Simplex	Quasi-Newton	Menor SQE
1	0,00288219	0,00288473	0,00288166	0,00288166	0,00288166
2	0,00450234	0,00451465	0,00448505	0,00450126	0,00448505
3	0,00040749	0,00040675	0,00039709	0,00040525	0,00039709
4	0,00084468	0,00084494	0,00084406	0,00084430	0,00084406
5	0,00082325	0,00082374	0,00076635	0,00081944	0,00076635
6	0,00073106	0,00093586	0,00072875	0,00072875	0,00072875
7	0,00039472	0,00039575	0,00039407	0,00039407	0,00039407
8	0,00335131	0,00335384	0,00327697	0,00334892	0,00327697
9	0,00231324	0,00232145	0,00229593	0,00231031	0,00229593
10	0,00032844	0,00037323	0,00032654	0,00032654	0,00032654
11	0,00173140	0,00174210	0,00172344	0,00172344	0,00172344
12	0,00451705	0,00453655	0,00451382	0,00451382	0,00451382
13	0,00203443	0,00203602	0,00203141	0,00203141	0,00203141
14	0,00190346	0,00190508	0,00189867	0,00189867	0,00189867
15	0,00115539	0,00116272	0,00115437	0,00115437	0,00115437
16	0,00060352	0,00101084	0,00059481	0,00059481	0,00059481
17	0,00034628	0,00055171	0,00033956	0,00033956	0,00033956
18	0,00053414	0,00054195	0,00053255	0,00053255	0,00053255
19	0,00130773	0,00130829	0,00130539	0,00130539	0,00130539
20	0,00055621	0,00079409	0,00055460	0,00055460	0,00055460
21	0,00028361	0,00085090	0,00027996	0,00027996	0,00027996
22	0,00325825	0,00327742	0,00293955	0,00322990	0,00293955
23	0,00140290	0,00196115	0,00139935	0,00139935	0,00139935
24	0,00106976	0,00125746	0,00106715	0,00106715	0,00106715
25	0,00016025	0,00057279	0,00015585	0,00018195	0,00015585
26	0,00716595	0,00718492	0,00714305	0,00970851	0,00714305
27	0,00131374	0,00209563	0,00131103	0,00131271	0,00131103
28	0,00067224	0,00229171	0,00066777	0,00066777	0,00066777
29	0,00166913	0,00208973	0,00166377	0,00178893	0,00166377
30	0,00032667	0,00083751	0,00032149	0,00032149	0,00032149
31	0,00071705	0,00074384	0,00071645	0,00071645	0,00071645
32	0,00096918	0,00107489	0,00096906	0,00096906	0,00096906
33	0,00056695	0,00057073	0,00053165	0,00056624	0,00053165
34	0,00292610	0,00296842	0,00292451	0,00292451	0,00292451
35	0,00026916	0,00035188	0,00026746	0,00026746	0,00026746
36	0,00053429	0,00168849	0,00053381	0,00053997	0,00053381
37	0,00067519	0,00121850	0,00067048	0,00069074	0,00067048
38	0,00023145	0,00023284	0,00019106	0,00023088	0,00019106
39	0,00163455	0,00179168	0,00163377	0,00163377	0,00163377
40	0,00079981	0,00080152	0,00079815	0,00079815	0,00079815

Caso	EE($\mu+\lambda$)	EE(μ,λ)	Downhill Simplex	Quasi-Newton	Menor SQE
41	0,00072223	0,00072252	0,00072088	0,00072144	0,00072088
42	0,00073968	0,00090768	0,00073880	0,00073880	0,00073880
43	0,00116919	0,00125943	0,00115579	0,00120212	0,00115579
44	0,00066300	0,00144484	0,00066177	0,00078247	0,00066177
45	0,00016426	0,00016467	0,00015367	0,00016378	0,00015367
46	0,00032130	0,00061258	0,00031647	0,00031647	0,00031647
47	0,00085094	0,00088100	0,00084373	0,00236643	0,00084373
48	0,00062833	0,00141626	0,00062713	0,00064376	0,00062713
49	0,00023853	0,00036932	0,00023735	0,00023735	0,00023735
50	0,00205932	0,00258722	0,00205362	0,00222266	0,00205362
51	0,00021920	0,00076737	0,00021654	0,00024931	0,00021654
52	0,00104108	0,00126373	0,00103458	0,00113880	0,00103458
53	0,00184296	0,00212802	0,00183645	0,00183645	0,00183645
54	0,00010476	0,00010505	0,00009470	0,00010434	0,00009470
55	0,00016043	0,00015615	0,00014935	0,00014935	0,00014935
56	0,00017506	0,00040638	0,00017315	0,00017627	0,00017315
57	0,00013931	0,00030871	0,00013518	0,00013518	0,00013518
58	0,00039644	0,00104859	0,00039359	0,00051742	0,00039359
59	0,00030084	0,00030004	0,00029924	0,00029930	0,00029924
60	0,00036110	0,00036256	0,00034177	0,00036008	0,00034177
61	0,00067990	0,00081576	0,00067616	0,00067616	0,00067616
62	0,00049265	0,00049549	0,00048927	0,00048927	0,00048927
63	0,00105031	0,00111382	0,00103675	0,00103675	0,00103675
64	0,00054961	0,00080092	0,00054244	0,00054244	0,00054244
65	0,00149503	0,00233978	0,00148852	0,00153641	0,00148852
66	0,00025662	0,00026017	0,00025625	0,00025625	0,00025625
67	0,00569163	0,00569467	0,00568763	0,00677840	0,00568763
68	0,00088902	0,00089404	0,00080021	0,00088648	0,00080021
69	0,00209204	0,00209126	0,00208809	0,00208809	0,00208809
70	0,00154270	0,00279586	0,00153978	0,00158112	0,00153978
71	0,00067490	0,00097291	0,00066805	0,00067671	0,00066805
72	0,00123848	0,00123942	0,00121570	0,00123782	0,00121570
73	0,01212596	0,01214153	0,01176221	0,01212081	0,01176221
74	0,00043746	0,00049638	0,00043325	0,00043325	0,00043325
75	0,00371150	0,00373841	0,00370614	0,00370614	0,00370614
76	0,00437084	0,00437687	0,00424717	0,00436910	0,00424717
77	0,00115502	0,00159749	0,00115095	0,00115095	0,00115095
78	0,00055390	0,00063839	0,00054353	0,00054626	0,00054353
79	0,00024907	0,00041206	0,00024715	0,00025010	0,00024715
80	0,00111050	0,00111151	0,00110797	0,00110877	0,00110797
81	0,00021492	0,00024856	0,00021140	0,00021140	0,00021140
82	0,00024947	0,00040064	0,00023361	0,00023361	0,00023361

Caso	EE($\mu+\lambda$)	EE(μ,λ)	Downhill Simplex	Quasi-Newton	Menor SQE
83	0,00033105	0,00049523	0,00032975	0,00032975	0,00032975
84	0,00044498	0,00088486	0,00043604	0,00043604	0,00043604
85	0,00043217	0,00164825	0,00042697	0,00133496	0,00042697
86	0,00017142	0,00024356	0,00016701	0,00016701	0,00016701
87	0,00051073	0,00127490	0,00049965	0,00057468	0,00049965
88	0,00048277	0,00058282	0,00046454	0,00046454	0,00046454
89	0,00018590	0,00019057	0,00018519	0,00018519	0,00018519
90	0,00157314	0,00157717	0,00157146	0,00157146	0,00157146
91	0,00164557	0,00165041	0,00164478	0,00164478	0,00164478
Média	0,00128376	0,00150266	0,00126672	0,00135704	0,00126672
Mínimo	0,00010476	0,00010505	0,00009470	0,00010434	0,00009470
Máximo	0,01212596	0,01214153	0,01176221	0,01212081	0,01176221

APÊNDICE C – Soma de Quadrados dos Erros (Modelo van Genuchten)

Caso	EE($\mu+\lambda$)	EE(μ,λ)	Downhill Simplex	Quasi-Newton	Menor SQE
1	0,00005548	0,00005644	0,00005424	0,00005424	0,00005424
2	0,00001797	0,00002002	0,00001709	0,00001707	0,00001707
3	0,00001796	0,00001683	0,00001389	0,00001389	0,00001389
4	0,00011094	0,00011366	0,00010828	0,00010648	0,00010648
5	0,00003977	0,00004826	0,00003894	0,00003894	0,00003894
6	0,00010336	0,00010437	0,00010713	0,00010284	0,00010284
7	0,00007273	0,00009663	0,00007150	0,00007101	0,00007101
8	0,00003731	0,00004005	0,00003450	0,00003450	0,00003450
9	0,00001802	0,00001888	0,00001750	0,00001750	0,00001750
10	0,00004984	0,00004438	0,00004322	0,00004322	0,00004322
11	0,00002349	0,00002125	0,00002079	0,00002079	0,00002079
12	0,00012879	0,00013329	0,00012536	0,00012536	0,00012536
13	0,00006520	0,00006815	0,00006367	0,00006367	0,00006367
14	0,00006260	0,00006228	0,00008204	0,00006000	0,00006000
15	0,00010270	0,00010621	0,00010110	0,00010108	0,00010108
16	0,00006826	0,00006496	0,00006414	0,00006414	0,00006414
17	0,00004587	0,00004358	0,00004099	0,00004099	0,00004099
18	0,00008179	0,00008428	0,00007948	0,00007948	0,00007948
19	0,00002819	0,00002806	0,00002742	0,00002742	0,00002742
20	0,00001040	0,00001004	0,00000982	0,00000982	0,00000982
21	0,00004853	0,00005109	0,00004745	0,00004741	0,00004741
22	0,00004832	0,00005212	0,00004581	0,00004581	0,00004581
23	0,00014011	0,00014500	0,00013911	0,00013911	0,00013911
24	0,00009311	0,00009457	0,00009239	0,00009239	0,00009239
25	0,00006600	0,00006672	0,00006514	0,00006514	0,00006514
26	0,00003940	0,00004137	0,00003919	0,00003919	0,00003919
27	0,00003668	0,00003800	0,00003664	0,00003664	0,00003664
28	0,00005048	0,00004657	0,00004618	0,00004618	0,00004618
29	0,00006392	0,00006528	0,000067583	0,00006298	0,00006298
30	0,00004278	0,00004374	0,00004139	0,00004139	0,00004139
31	0,00006972	0,00006902	0,00006886	0,00006886	0,00006886
32	0,00003864	0,00003892	0,00003833	0,00003833	0,00003833
33	0,00002719	0,00002779	0,00002575	0,00002575	0,00002575
34	0,00001710	0,00001829	0,00001588	0,00001588	0,00001588
35	0,00001237	0,00001272	0,00001232	0,00001232	0,00001232
36	0,00001658	0,00001576	0,00001513	0,00001513	0,00001513
37	0,00004605	0,00004653	0,00004528	0,00004528	0,00004528
38	0,00002642	0,00002763	0,00002525	0,00002525	0,00002525
39	0,00007852	0,00007822	0,00007777	0,00007777	0,00007777
40	0,00006505	0,00006583	0,00007132	0,00006478	0,00006478
41	0,00009807	0,00009880	0,00009791	0,00009791	0,00009791
42	0,00008376	0,00008521	0,00008283	0,00008283	0,00008283
43	0,00000902	0,00000926	0,00000890	0,00000886	0,00000886
44	0,00000718	0,00000822	0,00000686	0,00000549	0,00000549
45	0,00002461	0,00002733	0,00004659	0,00002423	0,00002423
46	0,00001124	0,00001356	0,00002741	0,00001098	0,00001098

Caso	EE($\mu+\lambda$)	EE(μ,λ)	Downhill Simplex	Quasi-Newton	Menor SQE
47	0,00000646	0,00000684	0,00000639	0,00000635	0,00000635
48	0,00004410	0,00004458	0,00004281	0,00004281	0,00004281
49	0,00000952	0,00000867	0,00014035	0,00000809	0,00000809
50	0,00000706	0,00000707	0,00000674	0,00000615	0,00000615
51	0,00005188	0,00005200	0,00005158	0,00005158	0,00005158
52	0,00002105	0,00002097	0,00002063	0,00002063	0,00002063
53	0,00003610	0,00003016	0,00002938	0,00002938	0,00002938
54	0,00002995	0,00003010	0,00003119	0,00002977	0,00002977
55	0,00000788	0,00000775	0,00000769	0,00000769	0,00000769
56	0,00002446	0,00002349	0,00002330	0,00002330	0,00002330
57	0,00004125	0,00004051	0,00003963	0,00003934	0,00003934
58	0,00002873	0,00002740	0,00002667	0,00002667	0,00002667
59	0,00008311	0,00008424	0,00008246	0,00008246	0,00008246
60	0,00001640	0,00001768	0,00002411	0,00001397	0,00001397
61	0,00002312	0,00002554	0,00002249	0,00002249	0,00002249
62	0,00002146	0,00002454	0,00002125	0,00002105	0,00002105
63	0,00002012	0,00002071	0,00002023	0,00002005	0,00002005
64	0,00003077	0,00003080	0,00003252	0,00003069	0,00003069
65	0,00001952	0,00002048	0,00001847	0,00001847	0,00001847
66	0,00002226	0,00002229	0,00002232	0,00002206	0,00002206
67	0,00001810	0,00001786	0,00001775	0,00001775	0,00001775
68	0,00001436	0,00001451	0,00001413	0,00001413	0,00001413
69	0,00002507	0,00003349	0,00002444	0,00002443	0,00002443
70	0,00002719	0,00002768	0,00002709	0,00002704	0,00002704
71	0,00006326	0,00004984	0,00004928	0,00004928	0,00004928
72	0,00001943	0,00001950	0,00001925	0,00001925	0,00001925
73	0,00001408	0,00001439	0,00001385	0,00001385	0,00001385
74	0,00002344	0,00002300	0,00002142	0,00002142	0,00002142
75	0,00002295	0,00002766	0,00002266	0,00002266	0,00002266
76	0,00001746	0,00001552	0,00001396	0,00001396	0,00001396
77	0,00010467	0,00010984	0,00010411	0,00010411	0,00010411
78	0,00002180	0,00002340	0,00009073	0,00002064	0,00002064
79	0,00002388	0,00002307	0,00012047	0,00002216	0,00002216
80	0,00002610	0,00002747	0,00002492	0,00002492	0,00002492
81	0,00001095	0,00001166	0,00001003	0,00001003	0,00001003
82	0,00001937	0,00001855	0,00001773	0,00001773	0,00001773
83	0,00003536	0,00003589	0,00003507	0,00003506	0,00003506
84	0,00005042	0,00004911	0,00004885	0,00004885	0,00004885
85	0,00002004	0,00002435	0,00001859	0,00001859	0,00001859
86	0,00001576	0,00001578	0,00001506	0,00001506	0,00001506
87	0,00008671	0,00009001	0,00008591	0,00008590	0,00008590
88	0,00000912	0,00000906	0,00001663	0,00000846	0,00000846
89	0,00001688	0,00001734	0,00001605	0,00001605	0,00001605
90	0,00012798	0,00012884	0,00012697	0,00012697	0,00012697
91	0,00003753	0,00004064	0,00003675	0,00003675	0,00003675
92	0,00009351	0,00009417	0,00027631	0,00009266	0,00009266
93	0,00002957	0,00002958	0,00002773	0,00002766	0,00002766
94	0,00001578	0,00001466	0,00001417	0,00001417	0,00001417
95	0,00001592	0,00001885	0,00001396	0,00001396	0,00001396
96	0,00001938	0,00001897	0,00001777	0,00001777	0,00001777

Caso	EE($\mu+\lambda$)	EE(μ,λ)	Downhill Simplex	Quasi-Newton	Menor SQE
97	0,00002468	0,00001364	0,00001260	0,00001260	0,00001260
98	0,00005750	0,00005800	0,00005602	0,00005602	0,00005602
99	0,00004832	0,00005202	0,00004772	0,00004772	0,00004772
100	0,00004433	0,00004489	0,00004433	0,00004425	0,00004425
101	0,00005310	0,00005694	0,00004904	0,00004904	0,00004904
102	0,00003459	0,00003787	0,00003422	0,00003287	0,00003287
Média	0,00004152	0,00004238	0,00005169	0,00003995	0,00003995
Mínimo	0,00000646	0,00000684	0,00000639	0,00000549	0,00000549
Máximo	0,00014011	0,00014500	0,00067583	0,00013911	0,00013911

APÊNDICE D – Logaritmo Natural da SQE (Modelo Beta)

Caso	EE($\mu+\lambda$)	EE(μ,λ)	Downhill Simplex	Quasi-Newton	Menor SQE
1	-5,84920402	-5,84832307	-5,84938977	-5,84938977	-5,84938977
2	-5,40315886	-5,40042671	-5,40700617	-5,40339897	-5,40700617
3	-7,80549039	-7,80731636	-7,83134098	-7,81100018	-7,83134098
4	-7,07654775	-7,07624402	-7,07728443	-7,07700277	-7,07728443
5	-7,10225452	-7,10165169	-7,17386594	-7,10689073	-7,17386594
6	-7,22100855	-6,97404498	-7,22418536	-7,22418536	-7,22418536
7	-7,83733236	-7,83473258	-7,83899370	-7,83899370	-7,83899370
8	-5,69840468	-5,69764810	-5,72083664	-5,69911621	-5,72083664
9	-6,06910562	-6,06556497	-6,07661921	-6,07037434	-6,07661921
10	-8,02115526	-7,89330341	-8,02695853	-8,02695853	-8,02695853
11	-6,35882772	-6,35266314	-6,36343177	-6,36343177	-6,36343177
12	-5,39989711	-5,39558891	-5,40061170	-5,40061170	-5,40061170
13	-6,19753930	-6,19676022	-6,19902416	-6,19902416	-6,19902416
14	-6,26408110	-6,26323285	-6,26660006	-6,26660006	-6,26660006
15	-6,76331681	-6,75699285	-6,76419933	-6,76419933	-6,76419933
16	-7,41273786	-6,89697767	-7,42727603	-7,42727603	-7,42727603
17	-7,96825417	-7,50248495	-7,98786526	-7,98786526	-7,98786526
18	-7,53484960	-7,52033965	-7,53783443	-7,53783443	-7,53783443
19	-6,63945888	-6,63903082	-6,64125405	-6,64125405	-6,64125405
20	-7,49437129	-7,13830933	-7,49726279	-7,49726279	-7,49726279
21	-8,16792157	-7,06921456	-8,18085253	-8,18085253	-8,18085253
22	-5,72656596	-5,72069930	-5,82949979	-5,73530398	-5,82949979
23	-6,56921418	-6,23422485	-6,57174558	-6,57174558	-6,57174558
24	-6,84032525	-6,67866202	-6,84276767	-6,84276767	-6,84276767
25	-8,73876841	-7,46499461	-8,76661970	-8,61178792	-8,76661970
26	-4,93841422	-4,93577149	-4,94161551	-4,63475229	-4,94161551
27	-6,63487489	-6,16789900	-6,63693845	-6,63566348	-6,63693845
28	-7,30489130	-6,07845492	-7,31156351	-7,31156351	-7,31156351
29	-6,39545173	-6,17071969	-6,39866784	-6,32613576	-6,39866784
30	-8,02655352	-7,08507911	-8,04255507	-8,04255507	-8,04255507
31	-7,24036059	-7,20368308	-7,24120892	-7,24120892	-7,24120892
32	-6,93905917	-6,83553323	-6,93918782	-6,93918782	-6,93918782
33	-7,47523240	-7,46859153	-7,53953022	-7,47649959	-7,53953022
34	-5,83408371	-5,81972609	-5,83462693	-5,83462693	-5,83462693
35	-8,22019423	-7,95223018	-8,22654981	-8,22654981	-8,22654981
36	-7,53456369	-6,38392307	-7,53547287	-7,52399523	-7,53547287
37	-7,30051490	-6,71013789	-7,30751018	-7,27774706	-7,30751018
38	-8,37115862	-8,36517725	-8,56294623	-8,37360402	-8,56294623
39	-6,41638633	-6,32459999	-6,41686799	-6,41686799	-6,41686799
40	-7,13113946	-7,12899618	-7,13321116	-7,13321116	-7,13321116

Caso	EE($\mu+\lambda$)	EE(μ,λ)	Downhill Simplex	Quasi-Newton	Menor SQE
41	-7,23316874	-7,23276067	-7,23503695	-7,23425803	-7,23503695
42	-7,20929109	-7,00461354	-7,21048541	-7,21048541	-7,21048541
43	-6,75144014	-6,67709422	-6,76297162	-6,72367252	-6,76297162
44	-7,31873543	-6,53975842	-7,32058968	-7,15305745	-7,32058968
45	-8,71406866	-8,71156478	-8,78070266	-8,71695609	-8,78070266
46	-8,04312692	-7,39783024	-8,05828934	-8,05828934	-8,05828934
47	-7,06916882	-7,03445154	-7,07768064	-6,04637084	-7,07768064
48	-7,37244550	-6,55973830	-7,37436334	-7,34818129	-7,37436334
49	-8,34101396	-7,90384397	-8,34596629	-8,34596629	-8,34596629
50	-6,18537911	-5,95716956	-6,18815275	-6,10905033	-6,18815275
51	-8,42551182	-7,17254722	-8,43772243	-8,29682112	-8,43772243
52	-6,86749770	-6,67368595	-6,87375935	-6,77778319	-6,87375935
53	-6,29638274	-6,15256275	-6,29991847	-6,29991847	-6,29991847
54	-9,16382584	-9,16104300	-9,26479906	-9,16786055	-9,26479906
55	-8,73765416	-8,76468374	-8,80919398	-8,80919398	-8,80919398
56	-8,65039807	-7,80823243	-8,66134570	-8,64351339	-8,66134570
57	-8,87881973	-8,08311517	-8,90892146	-8,90892146	-8,90892146
58	-7,83297680	-6,86031250	-7,84021218	-7,56666134	-7,84021218
59	-8,10892143	-8,11159653	-8,11425019	-8,11407330	-8,11425019
60	-7,92634657	-7,92231153	-7,98138280	-7,92918347	-7,98138280
61	-7,29356912	-7,11138779	-7,29907813	-7,29907813	-7,29907813
62	-7,61570745	-7,60995755	-7,62259975	-7,62259975	-7,62259975
63	-6,85866783	-6,79995928	-6,87166562	-6,87166562	-6,87166562
64	-7,50629835	-7,12974468	-7,51943035	-7,51943035	-7,51943035
65	-6,50560794	-6,05769700	-6,50997395	-6,47830421	-6,50997395
66	-8,26789718	-8,25417072	-8,26935176	-8,26935176	-8,26935176
67	-5,16875918	-5,16822530	-5,16946083	-4,99401452	-5,16946083
68	-7,02538828	-7,01975608	-7,13063945	-7,02825081	-7,13063945
69	-6,16961690	-6,16999005	-6,17150694	-6,17150709	-6,17150709
70	-6,47422355	-5,87961710	-6,47611696	-6,44962435	-6,47611696
71	-7,30094040	-6,93522411	-7,31114896	-7,29827054	-7,31114896
72	-6,69386892	-6,69310990	-6,71243515	-6,69440488	-6,71243515
73	-4,41240642	-4,41112364	-4,44286317	-4,41283114	-4,44286317
74	-7,73453059	-7,60817744	-7,74419501	-7,74419501	-7,74419501
75	-5,59631844	-5,58909393	-5,59776384	-5,59776429	-5,59776429
76	-5,43279897	-5,43142058	-5,46150233	-5,43319781	-5,46150233
77	-6,76364100	-6,43932076	-6,76716377	-6,76716377	-6,76716377
78	-7,49852045	-7,35656840	-7,51742799	-7,51241972	-7,51742799
79	-8,29779348	-7,79433244	-8,30550512	-8,29364592	-8,30550512
80	-6,80294573	-6,80203853	-6,80522658	-6,80450705	-6,80522658
81	-8,44524381	-8,29983180	-8,46177164	-8,46177164	-8,46177164
82	-8,29616488	-7,82244005	-8,36185219	-8,36185219	-8,36185219

Caso	EE($\mu+\lambda$)	EE(μ,λ)	Downhill Simplex	Quasi-Newton	Menor SQE
83	-8,01324322	-7,61048947	-8,01718107	-8,01718107	-8,01718107
84	-7,71748156	-7,03007960	-7,73777476	-7,73777476	-7,73777476
85	-7,74668834	-6,40804165	-7,75880718	-6,61885223	-7,75880718
86	-8,67137451	-8,32014806	-8,69744591	-8,69744591	-8,69744591
87	-7,57966134	-6,66488793	-7,60159358	-7,46169946	-7,60159358
88	-7,63597762	-7,44763502	-7,67445865	-7,67445865	-7,67445865
89	-8,59030554	-8,56548746	-8,59410960	-8,59410960	-8,59410960
90	-6,45467994	-6,45212406	-6,45575098	-6,45575098	-6,45575098
91	-6,40967009	-6,40673190	-6,41014901	-6,41014901	-6,41014901
Média	-7,18713005	-6,91404047	-7,20432387	-7,15101963	-7,20432388
Mínimo	-9,16382584	-9,16104300	-9,26479906	-9,16786055	-9,26479906
Máximo	-4,41240642	-4,41112364	-4,44286317	-4,41283114	-4,44286317

APÊNDICE E – Logaritmo Natural da SQE (Modelo van Genuchten)

Caso	EE($\mu+\lambda$)	EE(μ,λ)	Downhill Simplex	Quasi-Newton	Menor SQE
1	-9,79945348	-9,78226248	-9,82216716	-9,82216716	-9,82216716
2	-10,92699074	-10,81888269	-10,97729656	-10,97808527	-10,97808527
3	-10,92757799	-10,99264296	-11,18422751	-11,18427301	-11,18427301
4	-9,10652582	-9,08230861	-9,13083285	-9,14756062	-9,14756062
5	-10,13236715	-9,93897870	-10,15342071	-10,15342105	-10,15342105
6	-9,17731845	-9,16752929	-9,14148562	-9,18237536	-9,18237536
7	-9,52877383	-9,24461044	-9,54583238	-9,55272098	-9,55272098
8	-10,19630095	-10,12544910	-10,27462724	-10,27462741	-10,27462741
9	-10,92427750	-10,87765600	-10,95332482	-10,95335568	-10,95335568
10	-9,90672254	-10,02261748	-10,04909349	-10,04910652	-10,04910652
11	-10,65888608	-10,75902680	-10,78093125	-10,78093125	-10,78093125
12	-8,95733057	-8,92301479	-8,98428626	-8,98428642	-8,98428642
13	-9,63803091	-9,59373724	-9,66173660	-9,66173660	-9,66173660
14	-9,67873574	-9,68379330	-9,40826278	-9,72121050	-9,72121050
15	-9,18372853	-9,15012788	-9,19936116	-9,19958710	-9,19958710
16	-9,59223427	-9,64178916	-9,65450565	-9,65450565	-9,65450565
17	-9,98973570	-10,04100803	-10,10208577	-10,10208577	-10,10208577
18	-9,41140789	-9,38136576	-9,44000076	-9,44000089	-9,44000089
19	-10,47668682	-10,48102234	-10,50434369	-10,50434369	-10,50434369
20	-11,47382034	-11,50864245	-11,53102488	-11,53102488	-11,53102488
21	-9,93327342	-9,88197030	-9,95580282	-9,95662073	-9,95662073
22	-9,93762183	-9,86199811	-9,99097820	-9,99097820	-9,99097820
23	-8,87305118	-8,83874544	-8,88024313	-8,88024313	-8,88024313
24	-9,28176089	-9,26614286	-9,28945801	-9,28945801	-9,28945801
25	-9,62590185	-9,61494504	-9,63889657	-9,63889704	-9,63889704
26	-10,14182073	-10,09302383	-10,14700967	-10,14721276	-10,14721276
27	-10,21337763	-10,17795021	-10,21436219	-10,21436219	-10,21436219
28	-9,89386302	-9,97455110	-9,98289500	-9,98298809	-9,98298809
29	-9,65781793	-9,63686431	-7,29957206	-9,67273209	-9,67273209
30	-10,05935423	-10,03722061	-10,09238481	-10,09238524	-10,09238524
31	-9,57108153	-9,58112731	-9,58343681	-9,58343681	-9,58343681
32	-10,16116424	-10,15410156	-10,16933354	-10,16933354	-10,16933354
33	-10,51251493	-10,49079196	-10,56709543	-10,56709558	-10,56709558
34	-10,97628708	-10,90915238	-11,05044097	-11,05056617	-11,05056617
35	-11,30011075	-11,27202404	-11,30395037	-11,30426055	-11,30426055
36	-11,00749183	-11,05796968	-11,09893434	-11,09893434	-11,09893434
37	-9,98587737	-9,97535200	-10,00257333	-10,00257333	-10,00257333
38	-10,54133627	-10,49656901	-10,58676777	-10,58681578	-10,58681578
39	-9,45220290	-9,45593519	-9,46179215	-9,46179215	-9,46179215
40	-9,64039454	-9,62836054	-9,54836486	-9,64457129	-9,64457129
41	-9,22981070	-9,22242118	-9,23148348	-9,23148348	-9,23148348
42	-9,38761127	-9,37033835	-9,39870188	-9,39870188	-9,39870188
43	-11,61632741	-11,58976539	-11,62921845	-11,63414416	-11,63414416
44	-11,84428930	-11,70861383	-11,88931536	-12,11243434	-12,11243434
45	-10,61252561	-10,50766922	-9,97410298	-10,62808796	-10,62808796
46	-11,39578504	-11,20816705	-10,50454712	-11,41936545	-11,41936545
47	-11,95004210	-11,89324656	-11,96009403	-11,96654838	-11,96654838

Caso	EE($\mu+\lambda$)	EE(μ,λ)	Downhill Simplex	Quasi-Newton	Menor SQE
48	-10,02910935	-10,01823721	-10,05870536	-10,05870536	-10,05870536
49	-11,56189140	-11,65580543	-8,87138294	-11,72490599	-11,72490599
50	-11,86104427	-11,85928102	-11,90809057	-11,99847205	-11,99847205
51	-9,86664260	-9,86417790	-9,87238018	-9,87238018	-9,87238018
52	-10,76873504	-10,77255974	-10,78883879	-10,78883879	-10,78883879
53	-10,22925675	-10,40905582	-10,43525578	-10,43525578	-10,43525578
54	-10,41608511	-10,41103326	-10,37530290	-10,42187147	-10,42187147
55	-11,75128488	-11,76834889	-11,77553005	-11,77553005	-11,77553005
56	-10,61843578	-10,65891686	-10,66724571	-10,66724571	-10,66724571
57	-10,09586005	-10,11397355	-10,13581480	-10,14333715	-10,14333715
58	-10,45749497	-10,50495707	-10,53184307	-10,53184307	-10,53184307
59	-9,39538217	-9,38179638	-9,40317511	-9,40317511	-9,40317511
60	-11,01799535	-10,94284955	-10,63305252	-11,17860526	-11,17860526
61	-10,67480892	-10,57527923	-10,70240707	-10,70240707	-10,70240707
62	-10,74928114	-10,61506346	-10,75902831	-10,76873333	-10,76873333
63	-10,81389502	-10,78510148	-10,80812253	-10,81750188	-10,81750188
64	-10,38901103	-10,38797321	-10,33361462	-10,39141401	-10,39141401
65	-10,84403681	-10,79593564	-10,89909236	-10,89909301	-10,89909301
66	-10,71259191	-10,71117243	-10,70993070	-10,72172818	-10,72172818
67	-10,91955321	-10,93321242	-10,93890079	-10,93890084	-10,93890084
68	-11,15125670	-11,14089781	-11,16687779	-11,16687779	-11,16687779
69	-10,59397639	-10,30436383	-10,61932891	-10,61955718	-10,61955718
70	-10,51266678	-10,49468931	-10,51640958	-10,51837694	-10,51837694
71	-9,66830260	-9,90675603	-9,91797517	-9,91797645	-9,91797645
72	-10,84848964	-10,84513373	-10,85805321	-10,85805321	-10,85805321
73	-11,17102492	-11,14891533	-11,18755917	-11,18755917	-11,18755917
74	-10,66093652	-10,67996304	-10,75126780	-10,75126780	-10,75126780
75	-10,68218334	-10,49558039	-10,69472075	-10,69472075	-10,69472075
76	-10,95545644	-11,07322642	-11,17907065	-11,17907352	-11,17907352
77	-9,16469381	-9,11652158	-9,17005340	-9,17005340	-9,17005340
78	-10,73370619	-10,66283471	-9,30759843	-10,78847610	-10,78847610
79	-10,64262598	-10,67694922	-9,02415130	-10,71736981	-10,71736981
80	-10,55342989	-10,50224221	-10,59988810	-10,59988814	-10,59988814
81	-11,42238062	-11,35902893	-11,50996096	-11,50996595	-11,50996595
82	-10,85198061	-10,89528204	-10,94022616	-10,94022616	-10,94022616
83	-10,24992924	-10,23509758	-10,25826846	-10,25854820	-10,25854820
84	-9,89502784	-9,92151599	-9,92674498	-9,92674498	-9,92674498
85	-10,81779800	-10,62303169	-10,89290155	-10,89290155	-10,89290155
86	-11,05773615	-11,05692797	-11,10320516	-11,10320516	-11,10320516
87	-9,35299725	-9,31555693	-9,36221156	-9,36230495	-9,36230495
88	-11,60477595	-11,61203917	-11,00433582	-11,68017206	-11,68017206
89	-10,98919394	-10,96258000	-11,03965356	-11,03965518	-11,03965518
90	-8,96363695	-8,95694668	-8,97154641	-8,97154665	-8,97154665
91	-10,19036059	-10,11069742	-10,21147960	-10,21147960	-10,21147960
92	-9,27744528	-9,27036485	-8,19398203	-9,28659710	-9,28659710
93	-10,42861983	-10,42839773	-10,49295470	-10,49559670	-10,49559670
94	-11,05682967	-11,13048698	-11,16419905	-11,16419905	-11,16419905
95	-11,04792533	-10,87881023	-11,17943639	-11,17943639	-11,17943639
96	-10,85152141	-10,87240357	-10,93806223	-10,93806223	-10,93806223
97	-10,60959281	-11,20242290	-11,28209609	-11,28209672	-11,28209672

Caso	EE($\mu+\lambda$)	EE(μ,λ)	Downhill Simplex	Quasi-Newton	Menor SQE
98	-9,76366147	-9,75502027	-9,78973239	-9,78973253	-9,78973253
99	-9,93763477	-9,86392851	-9,95011811	-9,95011816	-9,95011816
100	-10,02386378	-10,01126407	-10,02391110	-10,02558475	-10,02558475
101	-9,84340384	-9,77355835	-9,92291195	-9,92291195	-9,92291195
102	-10,27194631	-10,18137881	-10,28280152	-10,32300326	-10,32300326
Média	-10,34812752	-10,33089243	-10,27443148	-10,40457561	-10,40457561
Mínimo	-11,95004210	-11,89324656	-11,96009403	-12,11243434	-12,11243434
Máximo	-8,87305118	-8,83874544	-7,29957206	-8,88024313	-8,88024313

APÊNDICE F – Teste F com o logaritmo natural da SQE (Beta)

Métodos	Prob. F	F Calculado	Comparação
Downhill Simplex e Quasi-Newton	33,299%	1,230	SIMILARES
Downhill Simplex e EE($\mu+\lambda$)	73,908%	0,312	SIMILARES
Downhill Simplex e EE(μ,λ)	0,001%	43,232	DIFERENTES
Quasi-Newton e EE($\mu+\lambda$)	80,259%	0,225	SIMILARES
Quasi-Newton e EE(μ,λ)	0,006%	30,543	DIFERENTES
EE($\mu+\lambda$) e EE(μ,λ)	0,005%	31,498	DIFERENTES

* F crítico de 4,103 e 2 grau de liberdade no numerador e 10 graus no denominador

APÊNDICE G – Erro Percentual da SQE (Modelo Beta)

Caso	EE($\mu+\lambda$)	EE(μ,λ)	Downhill Simplex	Quasi-Newton
1	0,000185761	0,001067268	0	0
2	0,003854719	0,006601156	0	0,003613719
3	0,026187618	0,024315536	0	0,020549084
4	0,000736948	0,001040954	0	0,000281697
5	0,074237828	0,074885609	0	0,069268964
6	0,003181863	0,284205692	0	0
7	0,001662719	0,004270205	0	0
8	0,022685451	0,02345949	0	0,021958041
9	0,007541882	0,011115561	0	0,006264402
10	0,005820147	0,142998561	0	0
11	0,00461466	0,010826822	0	0
12	0,000714849	0,005035426	0	0
13	0,001485961	0,002266502	0	0
14	0,00252213	0,003372882	0	0
15	0,000882905	0,007232508	0	0
16	0,014644366	0,699439282	0	0
17	0,019804647	0,624792812	0	0
18	0,00298928	0,017648702	0	0
19	0,001796782	0,002225696	0	0
20	0,002895689	0,431830164	0	0
21	0,013014927	2,039332675	0	0
22	0,108418066	0,114939887	0	0,098774879
23	0,002534601	0,401468651	0	0
24	0,002445402	0,178338799	0	0
25	0,028242758	2,675264427	0	0,167461547
26	0,003206418	0,005861124	0	0,359155041
27	0,002065696	0,598458058	0	0,001275786
28	0,006694514	2,431881266	0	0
29	0,003221294	0,256020205	0	0,075227306
30	0,016130258	1,605112756	0	0
31	0,00084869	0,038238826	0	0
32	0,000128651	0,109217253	0	0
33	0,066409946	0,073515409	0	0,065059465
34	0,000543372	0,015012408	0	0
35	0,006375816	0,315635246	0	0
36	0,000909595	2,163091285	0	0,011543759
37	0,007019806	0,817337096	0	0,030210474
38	0,211413203	0,218680827	0	0,20845443
39	0,000481771	0,096658688	0	0
40	0,002073852	0,004223881	0	0
41	0,001869963	0,002278879	0	0,000779227
42	0,001195035	0,228595769	0	0
43	0,011598219	0,08967273	0	0,04008152
44	0,001855972	1,183286397	0	0,182383397
45	0,068904179	0,071583946	0	0,065822252
46	0,015277957	0,9356808	0	0

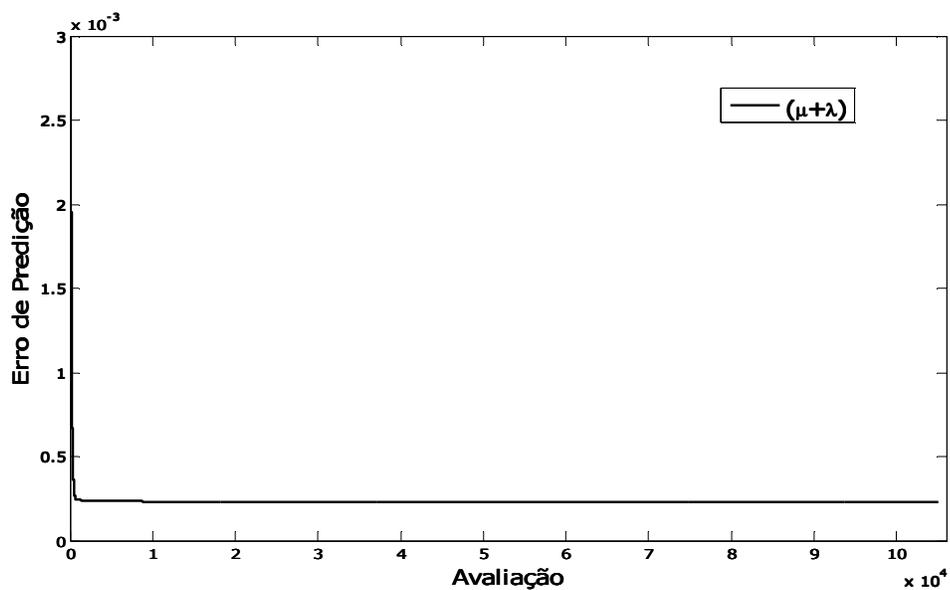
Caso	EE($\mu+\lambda$)	EE(μ,λ)	Downhill Simplex	Quasi-Newton
47	0,008548148	0,044177092	0	1,804737059
48	0,001919679	1,258328727	0	0,026527802
49	0,00496461	0,556006059	0	0
50	0,00277749	0,259838057	0	0,082315162
51	0,012285471	2,543713579	0	0,151311025
52	0,00628129	0,221492404	0	0,100732819
53	0,003541988	0,15876609	0	0
54	0,106247014	0,109329809	0	0,10179262
55	0,074160922	0,045515679	0	0
56	0,011007782	1,346942157	0	0,017992258
57	0,030559364	1,283721372	0	0
58	0,007261624	1,664188967	0	0,314624202
59	0,005342992	0,002657193	0	0,000176912
60	0,056578892	0,060850844	0	0,053585738
61	0,00552421	0,206459868	0	0
62	0,006916105	0,01272245	0	0
63	0,013082629	0,074339802	0	0
64	0,013218606	0,4765166	0	0
65	0,004375559	0,571887215	0	0,032176557
66	0,001455641	0,015296856	0	0
67	0,000701891	0,001236296	0	0,191778002
68	0,11098962	0,117264593	0	0,107813932
69	0,001891971	0,001518184	1,43672E-07	0
70	0,001895208	0,815752283	0	0,026846661
71	0,010260848	0,45633769	0	0,012961698
72	0,018739655	0,019513201	0	0,018193796
73	0,030925303	0,032248608	0	0,030487545
74	0,009711269	0,145702021	0	0
75	0,001446896	0,008708062	4,58698E-07	0
76	0,02911927	0,03053878	0	0,028708903
77	0,003528984	0,387971061	0	0
78	0,019087418	0,174520048	0	0,005020839
79	0,007741456	0,667245203	0	0,011929802
80	0,002283457	0,00319314	0	0,000719785
81	0,016665167	0,175789492	0	0
82	0,067892752	0,714998388	0	0
83	0,003945616	0,501840874	0	0
84	0,020500513	1,029308634	0	0
85	0,012192576	2,860379655	0	2,126627517
86	0,026414237	0,45833861	0	0
87	0,02217452	1,551561823	0	0,150152017
88	0,039231009	0,254608577	0	0
89	0,003811312	0,029035692	0	0
90	0,001071616	0,003633503	0	0
91	0,000479031	0,003422951	0	0
Média	0,017803053	0,444015784	6,61946E-09	0,07500415
Mínimo	0,000128651	0,001040954	0	0
Máximo	0,211413203	2,860379655	0,00000046	2,126627517

APÊNDICE H – Erro Percentual da SQE (Modelo van Genuchten)

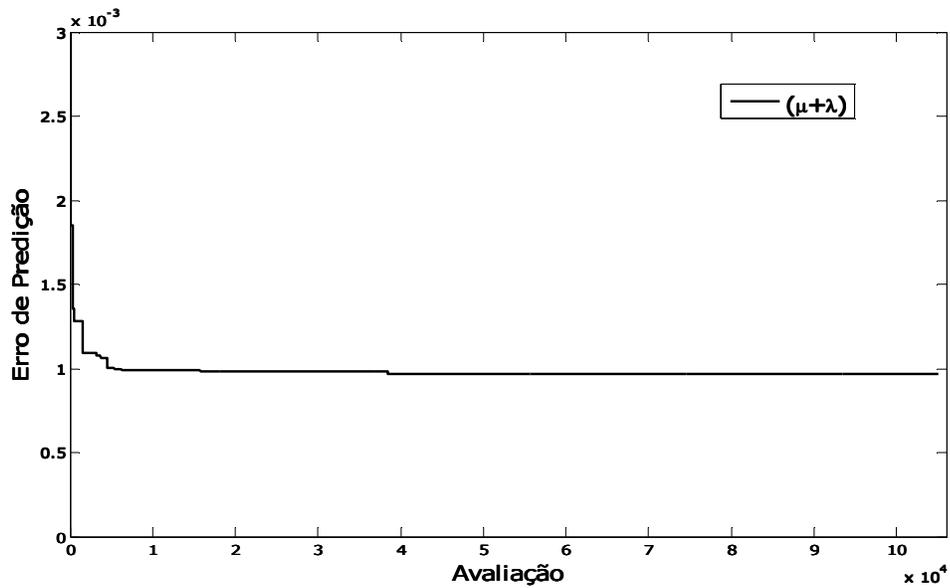
Caso	EE($\mu+\lambda$)	EE(μ,λ)	Downhill Simplex	Quasi-Newton
1	0,022973594	0,040711562	0	0
2	0,052422381	0,172575472	0,000789023	0
3	0,292650827	0,211222343	4,54972E-05	0
4	0,041888357	0,067427986	0,016868454	0
5	0,021277095	0,239170678	3,33824E-07	0
6	0,005069724	0,014956829	0,041737244	0
7	0,024236186	0,360851413	0,006912383	0
8	0,081475656	0,160879965	1,73926E-07	0
9	0,029505072	0,078638589	3,08586E-05	0
10	0,153019298	0,026842994	1,30251E-05	0
11	0,129805131	0,02214611	0	0
12	0,027322445	0,063187671	1,59535E-07	0
13	0,023988906	0,070364616	0	0
14	0,043389714	0,03812603	0,367450035	0
15	0,015984982	0,050702737	0,000225957	0
16	0,064251119	0,012797692	0	0
17	0,118904486	0,062981543	0	0
18	0,029005702	0,060388269	1,25817E-07	0
19	0,028042865	0,023595421	0	0
20	0,05887237	0,022634791	0	0
21	0,02362199	0,077507421	0,000818241	0
22	0,054805475	0,137667477	0	0
23	0,007217867	0,042370754	0	0
24	0,00772682	0,023589072	0	0
25	0,013080002	0,024241158	4,75863E-07	0
26	0,005406589	0,055684031	0,000203113	0
27	0,000985036	0,037083006	0	0
28	0,093217384	0,008472683	9,30945E-05	0
29	0,015025924	0,036518785	9,731249829	0
30	0,033582591	0,056714571	4,3485E-07	0
31	0,012431927	0,002312174	0	0
32	0,008202754	0,015348575	0	0
33	0,056097646	0,079290218	1,55343E-07	0
34	0,077107375	0,151901194	0,000125203	0
35	0,004158414	0,032761728	0,000310219	0
36	0,095753778	0,041815291	0	0
37	0,016836115	0,027595214	0	0
38	0,046529558	0,094444328	4,80063E-05	0
39	0,009635373	0,005874142	0	0
40	0,004185484	0,016342853	0,100986309	0
41	0,001674176	0,009103485	0	0
42	0,011152337	0,028769603	0	0
43	0,017976414	0,04537824	0,004937866	0
44	0,307536768	0,497535119	0,249969276	0
45	0,015684077	0,127969079	0,92318946	0
46	0,023860633	0,235157387	1,496321704	0
47	0,016643254	0,076055261	0,006475218	0

Caso	EE($\mu+\lambda$)	EE(μ,λ)	Downhill Simplex	Quasi-Newton
48	0,030038331	0,04129815	0	0
49	0,177053871	0,071543966	16,34879502	0
50	0,147318835	0,149343631	0,094591764	0
51	0,005754073	0,008236013	0	0
52	0,020307185	0,016412275	0	0
53	0,228752014	0,026546199	0	0
54	0,00580313	0,010897153	0,047669912	0
55	0,024541473	0,007207008	0	0
56	0,050020759	0,008363637	0	0
57	0,048622187	0,029798963	0,00755072	0
58	0,07718171	0,027250688	0	0
59	0,00782339	0,021608896	0	0
60	0,174226824	0,265865034	0,725561894	0
61	0,027982499	0,135562171	0	0
62	0,019642612	0,166105853	0,009752272	0
63	0,003613365	0,032931	0,009423474	0
64	0,002405872	0,003446729	0,059502424	0
65	0,056599998	0,108665865	6,49527E-07	0
66	0,009178136	0,010611658	0,011867349	0
67	0,019536014	0,005704636	5,63254E-08	0
68	0,015743737	0,026320403	0	0
69	0,025910783	0,370524277	0,000228294	0
70	0,005726495	0,023970415	0,001969297	0
71	0,283606704	0,011283608	1,27839E-06	0
72	0,009609451	0,013003296	0	0
73	0,016671702	0,039400227	0	0
74	0,094536819	0,073908464	0	0
75	0,012616332	0,220353241	0	0
76	0,250592049	0,111651891	2,86464E-06	0
77	0,005373978	0,054990565	0	0
78	0,056297543	0,133875478	3,396802909	0
79	0,077608065	0,041248618	4,436951447	0
80	0,047554342	0,102572327	4,01303E-08	0
81	0,091535398	0,162923411	4,98522E-06	0
82	0,092256289	0,045969407	0	0
83	0,008656215	0,023727751	0,000279777	0
84	0,032225494	0,005242684	0	0
85	0,077995775	0,309793986	0	0
86	0,046518566	0,047364691	0	0
87	0,009351147	0,047857933	9,33973E-05	0
88	0,07831119	0,070507561	0,965676064	0
89	0,051756092	0,080123274	1,6197E-06	0
90	0,007941063	0,014707061	2,36273E-07	0
91	0,021343596	0,1060357	0	0
92	0,009193826	0,016364704	1,982062174	0
93	0,069270743	0,069508252	0,002645494	0
94	0,113345428	0,034286759	0	0
95	0,140550517	0,350704291	0	0
96	0,090395875	0,067862147	0	0
97	0,959136692	0,082933782	6,351E-07	0

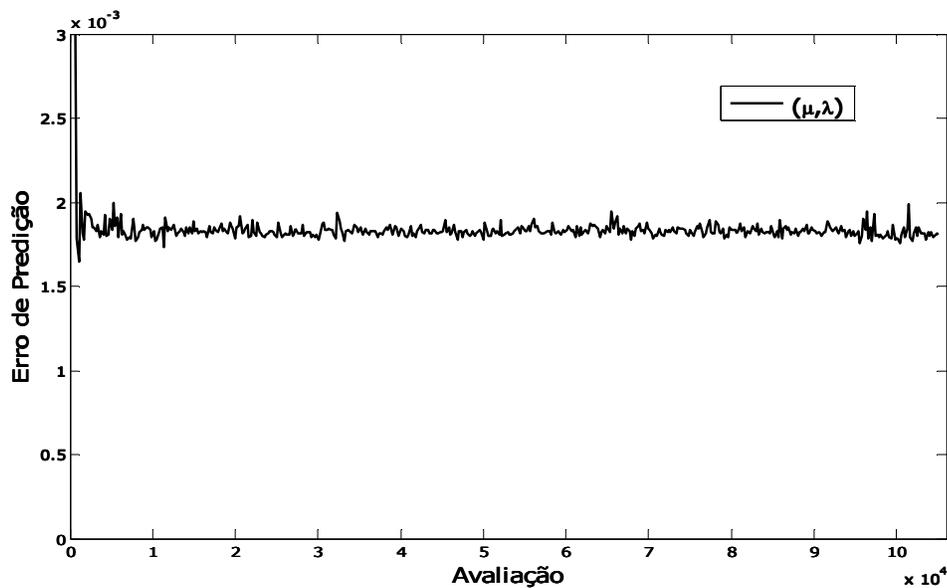
Caso	EE($\mu+\lambda$)	EE(μ,λ)	Downhill Simplex	Quasi-Newton
98	0,026413879	0,035321759	1,42796E-07	0
99	0,012561629	0,090013022	4,19094E-08	0
100	0,001722455	0,014423707	0,001675046	0
101	0,082754342	0,161083476	0	0
102	0,052382823	0,152143885	0,041020766	0
Média	0,062334225	0,079873599	0,402871901	0
Mínimo	0,000985036	0,002312174	0	0
Máximo	0,959136692	0,497535119	16,34879502	0

APÊNDICE I – Evolução da EE ($\mu+\lambda$) no pior resultado (Modelo Beta)

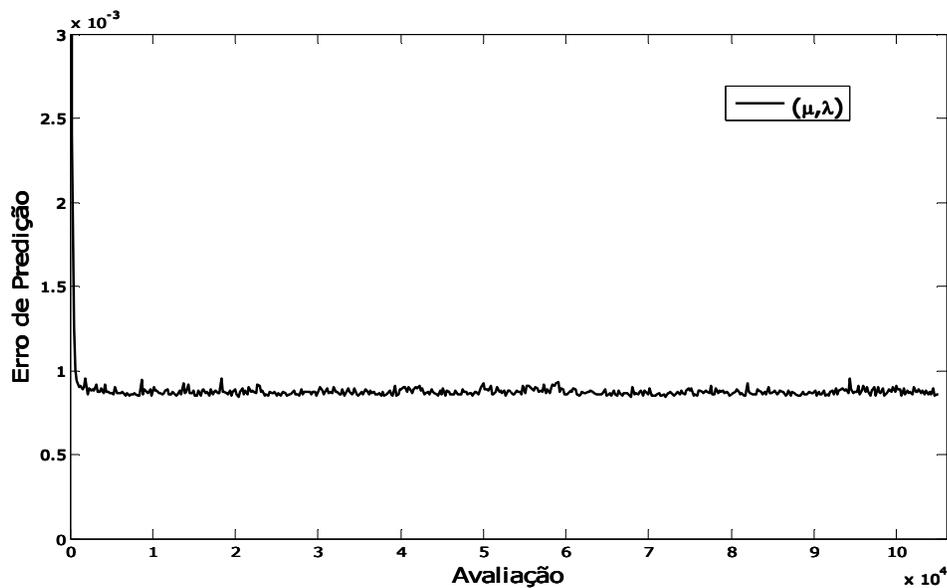
Evolução do erro de predição (dos melhores indivíduos de cada geração da estratégia de seleção ($\mu+\lambda$)) em comparação com a quantidade de avaliações realizadas no caso 38.

APÊNDICE J – Evolução da EE ($\mu+\lambda$) no melhor resultado (Modelo Beta)

Evolução do erro de predição (dos melhores indivíduos de cada geração da estratégia de seleção ($\mu+\lambda$)) em comparação com a quantidade de avaliações realizadas no caso 32.

APÊNDICE K – Evolução da EE (μ, λ) no pior resultado (Modelo Beta)

Evolução do erro de predição (dos melhores indivíduos de cada geração da estratégia de seleção (μ, λ)) em comparação com a quantidade de avaliações realizadas no caso 85.

APÊNDICE L – Evolução da EE (μ, λ) no melhor resultado (Modelo Beta)

Evolução do erro de predição (dos melhores indivíduos de cada geração da estratégia de seleção (μ, λ)) em comparação com a quantidade de avaliações realizadas no caso 4.