

Diferentes algoritmos para estimação dos parâmetros de modelo não linear para obtenção de íons

Torquato Martins de Andrade Neto¹, Eugênio Ferreira Coelho², Carlos Alberto da Silva Ledo³

¹ Professor IF Sertão Pernambucano, campus Floresta. e-mail: torquato.neto@ifsertao-pe.edu.br

² Pesquisador Embrapa Mandioca e Fruticultura. e-mail: eugenio@embrapa.br

³ Pesquisador Embrapa Mandioca e Fruticultura. e-mail: ledo@embrapa.br

Resumo: O objetivo foi avaliar algoritmos de estimativa de parâmetros de modelo não linear de estimativa de íons na solução do solo. Foram monitorados: a umidade, condutividade elétrica, teor de NO_3^- e K^+ ao longo do tempo. Os dados coletados foram trabalhados em diferentes programas de estimativa. Os parâmetros do modelo foram estimados por meio dos seguintes programas: SAS, Statística 7.0 e Excel. No programa Statística 7.0, o modelo de estimativa de íons foi ajustado na forma não linear, com os seguintes algoritmos: Simplex (SI); Simplex & Gauss-Newton (SG); Hooke e Jeeves & Pattern Moves (HJ) e Rosenbrock & Patern Search (RO). Pode-se observar que ocorreram altos coeficientes de determinação. Entretanto, em condições práticas de campo, os parâmetros gerados pelos diferentes algoritmos resultaram em estimativa de íons não equivalentes com os teores medidos na solução do solo. Além disso, foram observados altos valores de RMSE e MEN para a maioria dos algoritmos. Exceto para a estimativa realizada pelo programa Excel “Solver”, que resultou em melhores resultados para as condições experimentais encontradas. A estimativa observada no “Solver”, resultou em uma variação entre os valores médios e estimados de cerca de 20%, sendo considerada como aceitável para a estimativa de íons.

Palavras-chave: estimativa de nitrato, estimativa de potássio, solução do solo.

Different algorithms for estimating parameters of a non-linear model for obtaining ions

Abstract: The objective of the work was to evaluate different algorithms for estimating parameters of a non linear model to obtain the concentration of nitrate and potassium ions in the soil solution. Soil water content, electrical conductivity and nitrate and potassium concentrations were monitored along time. The data were processed in different estimating computer programs. The programs had the function of estimating the parameter of the Vogeler model. The following programs were used: SAS, Statística 7.0 and Excel. The model in the case of the Statística program was non-linearly adjusted with the following algorithms: Simplex (SI); Simplex + Gauss-Newton (SG); Hooke & Jeeves +Pattern Moves (HJ) and Rosenbrock+Pattern Search (RO). In the excel, the parameters were compared for the choice of the best algorithm. High determination coefficients were verified for fitting models to the data; however, the model estimates of nitrate and potassium concentrations were not equivalent to the measured ones. Moreover, high RMSE and MEN were observed for most of the algorithms. The Solver tool provided the best results for the experimental conditions. The deviation of the estimates by the Solver and measured values were close to 20%, which is acceptable.

Keywords: nitrate estimation, potassium estimation, soil solution.

Introdução

Nos sistemas de produção agrícola fertirrigados a avaliação do teor de íons, umidade e condutividade elétrica, é realizada frequentemente no intuito de promover um melhor monitoramento do solo. Para tanto, alguns modelos de estimativa de íons têm sido empregados no manejo da irrigação e fertirrigação. (Andrade Neto et al., 2012; Santana et al., 2007; Silva et al., 2005). A utilização de modelos matemáticos para representação e análise de determinados processos químicos, físicos e biológicos, tanto em laboratório quanto em campo, pode ser uma ferramenta muito útil e ainda pouco difundida no campo da engenharia agrônômica e agrícola.

No Brasil, a área de modelagem e simulação de sistemas tem recebido pouca contribuição ao longo dos anos, tanto na elaboração dos modelos como na utilização destes para orientação de pesquisas (Dias, 2006). Segundo Garnés et al. (1997), os primeiros trabalhos onde o procedimento de estimativa de parâmetros é discutido foram apresentados por Johann Carl Friedrich Gauss e por Adrien-Marie Legendre no século XIX. A grande vantagem destes algoritmos de estimativa é a rapidez na convergência. Os algoritmos que utilizam este tipo de procedimento são os propostos por Hooke & Jeeves (1961); Rosenbrock (1960); Powell (1964); e Powell (1965) e Simplex também conhecido como Poliedros Flexíveis (Nelder & Mead, 1965).

Pires et al. (2012) utilizaram o mesmo procedimento com bons resultados na estimativa de parâmetros de modelos não lineares para descrição de crescimento de caprinos. Na literatura especializada, a maioria dos estudos e pesquisas de comparações e avaliações de modelos utiliza o coeficiente de determinação (R^2) para verificar a qualidade de ajustes do modelo. Entretanto, diversos índices estatísticos de avaliação de modelos têm sido utilizados, tais como: raiz quadrada média do erro (RMSE), média dos erros normalizadas (MEN) e o teste de Mayer et al. (1994).

Em qualquer tipo de modelagem, além do ajuste realizado, é necessário fazer inferências sobre os parâmetros em estudo. Dentre as vantagens da utilização de modelos não-lineares estão: obtenção de parâmetros que são facilmente interpretáveis e em muitas situações necessita-se menos parâmetros nos modelos não-lineares do que nos lineares, isto simplifica e facilita a interpretação. Diversos modelos não lineares têm sido utilizados: Hart & Reynolds (1965), Karmeli (1978), Elliot et al. (1980), Warrick et al. (1989) e Silva (2009). Diversos autores tem utilizado a modelagem para estimativa de íons no solo (Muñoz-Carpena et al.,

2001; Santana et al., 2007; Andrade Neto et al., 2012). Os modelos não lineares permitem o ajuste de relações mais complexas que as obtidas em relações lineares. Em diversos exemplos tem a sua forma funcional específica para o problema a ser tratado, relacionada a algum mecanismo inerente ao processo em questão (biológico, físico e químico). A escolha dos valores iniciais é crucial e pode influenciar nos resultados do ajuste utilizando métodos numéricos, especialmente em exemplos como este com um pequeno número de dados (Motuslky & Ransnas, 1987). A escolha de valores iniciais para os demais parâmetros é menos óbvia. Uma das formas de se obter tais valores é efetuar um ajuste aproximado, visual por tentativa e erro, traçando-se curvas sobre o gráfico dos dados.

O objetivo do trabalho foi avaliar diferentes algoritmos de estimativa de parâmetros de modelo não linear de estimativa de potássio e nitrato na fertirrigação da bananeira Prata Gorutuba.

Material e Métodos

O experimento foi conduzido na Embrapa Mandioca e Fruticultura com a bananeira, c.v. 'Prata Gorutuba', cultivada em fileiras simples e duplas de mangueiras de irrigação, no espaçamento 3,0 x 2,5 m. Todas as atividades referentes à adubação e tratos culturais foram realizadas conforme Silva (2008). Os tratamentos foram distribuídos da seguinte forma: T1- Gotejamento com emissores de 4,0 L h⁻¹ espaçados de 0,7 m em faixa continua com uma linha lateral por fileira de plantas; T2- Gotejamento com emissores de 4,0 L h⁻¹ espaçados de 0,7 m em faixa continua com duas linhas laterais por fileira de plantas. A lâmina de irrigação foi à mesma para todos os tratamentos, com turno de rega fixo diário. O modelo matemático foi testado no gotejamento em fileiras simples e duplas de mangueiras de irrigação. Para tanto, foram instaladas sondas de TDR em duas profundidades (0-0,20 e 0,20-0,40 m).

Amostras de solução do solo para avaliação da condutividade elétrica e concentração de íons foram retiradas ao mesmo tempo em que foram feitas leituras de umidade do solo e condutividade elétrica aparente com uso de um reflectometro tipo TDR. Para determinação do modelo de estimativa da condutividade elétrica da solução do solo bem como da estimativa dos íons potássio e nitrato como função da condutividade elétrica aparente e da umidade do solo, as coletas de solução do solo foram realizadas em uma bateria de sondas de TDR e extratores de solução instalados entre dois gotejadores próximos à planta. As antenas ficaram separadas por 0,10 m e do lado de

cada uma delas foram dispostos extratores de solução. Foram instalados extratores de solução próximos às sondas de TDR e aos gotejadores. Os extratores de solução foram instalados a 0,30 m da planta nas profundidades de 0,20 e 0,40 m entre a planta e um gotejador a uma distância fixa de 0,15 m do mesmo, em duas profundidades (0,20 e 0,40m) com três repetições, ficando os extratores localizados no bulbo molhado entre dois emissores. As amostras de solução do solo, em cada experimento, foram coletadas em cada parcela experimental com três repetições a cada 30 dias, durante o ciclo da bananeira.

Caracterização do modelo avaliado

O trabalho refere-se à estimativa dos parâmetros da equação (1) por meio de diferentes métodos. Essa equação matemática para estimativa de íons é em função da condutividade elétrica aparente do solo (CEa) e da umidade do solo (θ). Por meio da equação (1), foram feitas as estimativas da concentração dos íons (potássio e nitrato), onde se teve como variável dependente o teor dos íons (C_i), e como variáveis independentes a umidade (θ) e a condutividade elétrica do solo (CEa).

$$C_i = \left\{ \frac{1}{\alpha} \left[\frac{CEa - (a\theta - b)}{c\theta - d} \right] \right\}^{\frac{1}{\mu}} \quad (1)$$

em que:

C_i - teor do íon (mg L⁻¹)

CEa - condutividade elétrica aparente do solo (dS m⁻¹);

θ - umidade do solo (cm³ cm⁻³);

a, b, c, d, α e μ - são os parâmetros da equação (1).

A umidade do solo foi determinada por meio da equação (2) de Ledieu et al. (1986) e a CEa por meio da equação (3) proposta por Giese & Tiemann (1975).

$$\theta = 0,1138\sqrt{\varepsilon - 0,1785} \quad (2)$$

em que:

θ - teor de água no solo, cm³ cm⁻³, e

ε - constante dielétrica do solo.

$$f_T = 1 + \frac{(25 - T)}{49,7} + \frac{(25 - T)^2}{3.728} \quad (3)$$

f_T - fator de correção da CE quanto aos efeitos da temperatura, adimensional.

T - corresponde à temperatura da solução do solo (°C).

Métodos testados

Os dados dos íons (nitrato e potássio), condutividade elétrica aparente do solo (CEa) e umidade (θ), foram relacionados por alguns programas (SAS, Statistica 7.0 e Excel) a fim de promover a calibração dos parâmetros do modelo de simulação de nitrato e potássio. No programa estatística, o modelo de calibração dos íons foram ajustados na forma não linear, com os seguintes algoritmos: Simplex (SI); Simplex & Gauss-Newton (SG); Hooke & Jeeves (HJ) e Rosenbrock (RO). Os parâmetros gerados foram comparados para escolha do método com melhores resultados nas estimativas dos íons. No Excel, utilizou-se a ferramenta Solver para calibração dos parâmetros. No SAS foi utilizado o PROC MODEL para a calibração dos parâmetros do modelo. A exceção do método Simplex, todos os algoritmos usados para análise de regressão não linear (Gauss-Newton, Marquardt Levenberg) calculam, repetidamente (em cada iteração), a derivada de Y em relação a todos os parâmetros Motuslky & Ransnas (1987).

Avaliação estatística dos métodos

Os diferentes métodos de estimação de parâmetros foram avaliados por meio do coeficiente de determinação (R^2), raiz quadrada média do erro (RMSE) e média dos erros normalizadas (MEN). Os valores medidos e estimados de nitrato e potássio foram comparados com base no ajuste do modelo de regressão linear simples, sendo as estimações dos parâmetros da regressão testadas pela hipótese de nulidade conjunta: $H_0: \beta_0=0$ e $\beta_1=1$ e H_a : não H_0 (Mayer et al., 1994), $\alpha = 0,05$. Caso não ocorra rejeição da hipótese de nulidade, conclui-se pela equivalência dos métodos.

Resultados e Discussão

Os diferentes métodos de estimativa de parâmetros apresentaram bons resultados para os dados coletados em um solo com aplicação de diferentes fontes potássicas, isso no que se refere ao coeficiente de determinação. Haja vista os valores dos coeficientes de determinação encontrados serem em termos gerais superiores a 80%. Observa-se também que as estimações em cada método resultaram em parâmetros (a, b, c, d, α e μ) totalmente diferentes (Tabela 1). Uma observação importante está no fato do surgimento de parâmetros totalmente diferentes quando se modifica os valores iniciais em cada método. Entretanto, ocorre uma nova convergência e surge uma nova solução para os parâmetros do modelo com altos coeficientes de determinação. Foram observados em termos gerais

Tabela 1. Parâmetros resultantes dos ajustes da equação (1) aos dados de nitrato como função de CEa, para as diferentes fontes nitrogenadas aplicadas em um Latossolo Amarelo Distrófico

Algoritmo	Parâmetros				Coeficientes					
	a	b	c	d	α	μ	R ²	RMSE (mg L ⁻¹)	MEN (%)	P
Ureia										
SI	8,8563	-7,6242	-8398,44	10248,0	0,3904	-1,473	0,88	38,87	27,70	0,0102 ^s
SG	-1,8040	4,2094	5190,93	1,0016	0,0105	-1,038	0,84	78,47	61,60	0,0156 ^s
HJ	-8,1281	-6,5116	-0,3659	-0,4863	0,9084	0,7952	0,91	38,24	36,29	0,0092 ^s
RO	-3,9281	-5,0116	-1,3659	-1,4630	0,5384	0,7950	0,85	79,56	76,74	0,0100 ^s
SAS	4,0E+23	7,4.10 ²²	0,3689	14093,9	22,003	10,697	0,83	63,34	58,34	0,0011 ^s
SO	5179,68	-9,2.10 ³	-6891,32	14093,9	0,6132	0,0194	0,80	19,61	16,73	0,0320 ^s
Nitrato de cálcio										
SI	14286,90	3,3E+03	1,3939	16177,9	0,0224	0,4221	0,78	59,8	64,80	0,0091 ^s
SG	19991,20	4,89876	-42601,5	5377,9	0,03212	0,3388	0,74	66,5	65,17	0,0008 ^s
HJ	-3879,19	-1,5.10 ⁴	-0,7697	-0,4861	1259,69	1,6684	0,80	53,1	49,40	0,0340 ^s
RO	-4446,65	2,6.10 ³	-0,6939	-0,4166	5792,45	0,5584	0,70	63,6	56,25	0,0130 ^s
SAS	689560,3	-4,9.10	35276,9	13900,3	0,0027	3,4485	0,56	64,4	72,91	0,0002 ^s
SO	5374,80	-9,5.10 ³	-7237,52	13967,0	0,6738	0,0043	0,77	12,0	18,26	0,0280 ^s

R² = Refere-se ao coeficiente de determinação. *Métodos de estimativa de parâmetros: SI = Simplex; SG = Simplex+Gauss Newton; HJ = Hooke e Jeeves; RS: Rosenbrock; SAS e SO=Solver Excel.

coeficientes de determinação entre 0,83 a 0,91, para as aplicações de ureia. Com o nitrato de cálcio os métodos testados apresentaram coeficientes de determinação entre 0,56 a 0,80. Mesmo apresentando altos coeficientes de determinação, os valores medidos e estimados de nitrato na solução do solo, foram não equivalentes na avaliação da hipótese de nulidade (Mayer et al., 1994). Em termos gerais os métodos apresentaram respectivamente as seguintes probabilidades de rejeição de H₀: nas aplicações de uréia ($p=0,0102$ (SI); 0,0156 (SG); 0,0092 (HJ); 0,0100 (RO), e 0,0011 (SAS), para $\alpha=0,05$. Para as aplicações de nitrato de cálcio os valores do teste de Mayer et al. (1994) foram de ($p=0,0001$; 0,0008; 0,0340; 0,0130 e 0,0090), respectivamente para os métodos de Simplex, Simplex com Gauss Newton, Hooke & Jeeves, Rosenbrock e estimativa pelo PROC MODEL (SAS) (Tabela 1). Percebe-se então que mesmo apresentando altos ajustes dos dados (R²), ocorreu rejeição de H₀ para $\alpha = 0,05$. Dessa forma, o modelo gerados pelos diferentes métodos resultaram em valores medidos e estimados de nitrato apresentaram-se como não próximos, ou seja, não equivalentes.

A estimativa pela ferramenta Solver do Excel (SO) resultaram em coeficientes de determinação de 77% e 80%, respectivamente para as fontes de nitrato de cálcio e ureia. Observou-se menores valores de RMSE (12,09 e 19,61 mg L⁻¹), em comparação com os demais métodos. Isso significa uma variação abaixo de 20% para os valores medidos em comparação com os estimados em termo de média (MEN). Também foi observado a significância pelo teste de Mayer et al. (1994), para as estimações nas

duas fontes ($p=0,0320$ e 0,0280). Entretanto, os desvios encontrados abaixo de 20% podem ser considerados aceitáveis para as estimações de nitrato na solução do solo.

Percebe-se também na Tabela 1 que os valores do RMSE e MEN foram elevados. Os valores de RMSE variaram entre 38,24 (HJ) a 79,56 mg L⁻¹ (RO), para a fonte nitrogenada de ureia. Nas aplicações de nitrato de cálcio esse valores foram de 53,13 (SI) a 63,66 mg L⁻¹ (RO), enquanto a média dos erros normalizados variou entre 27,70% a 76,74%. Esses resultados resultam na baixa eficiência dos métodos nas estimações de nitrato em um Latossolo Amarelo Distrófico, pois os valores do RMSE encontrados foram altos, quando transformados em porcentagem em relação aos valores obtidos, resultaram em desvios acima de 30,0%. A simulação é considerada excelente quando RMSE é menor do que 10%, boa entre 10 e 20%, aceitável entre 20% e 30% e pobre quando maior do que 30% (Jamienson et al., 1991). Os valores observados para todos os métodos em estudos foram superiores a essa ultima faixa relatada, resultando em insucesso dos métodos.

Na Tabela 2 são apresentados os parâmetros do modelo em estudo estimados por vários métodos. Observa-se que os diferentes métodos assim como ocorreu com as estimativas de nitrato, apresentaram parâmetros extremamente diferentes entre eles. Isso pode em parte ser explicado pelo fato de sistemas não-lineares apresentarem, em diversas ocasiões, mais de uma solução. Portanto, para que o algoritmo localize todas as soluções existentes, estes passos devem ser executados várias vezes (Silva, 2009). Isso explica a existência de parâmetros

Tabela 2. Parâmetros resultantes dos ajustes da equação (1) aos dados de potássio como função de CEa e para as diferentes fontes potássicas.

Algoritmo	Parâmetros						Coeficientes			
	a	b	c	d	α	μ	R^2	RMSE (mg L ⁻¹)	MEN (%)	P
Cloreto de potássio										
SI	2,40756	3,52.10 ⁻¹	-3,1037	0,23313	0,0834	-1,375	0,84	33,90	90,42	0,0001s
SG	4141,34	7576,15	14492,7	2028,15	0,0634	-0,317	0,88	26,80	88,40	0,0001s
HJ	-3127,44	9743,26	22,849	-12,452	21,133	0,8039	0,90	25,45	85,80	0,0010s
RO	-41539,17	3,2.10 ³	22,989	-13,563	19,882	0,8535	0,84	53,79	55,15	0,0019s
SAS	81,9047	42,6445	-15688,8	14065,4	1,8.10 ⁻¹³	0,2149	0,24	-	-	0,0000s
SO	19985,06	4,8.10 ³	2730,65	4666,60	0,00984	1,2866	0,82	5,62	18,48	0,0200s
Nitrato de potássio										
SI	2,4075	0,3519	-3,1037	0,2331	0,083	-1,350	0,80	23,90	60,20	0,0030s
SG	8,1319	1,0213	-1,9191	0,8349	0,033	0,1687	0,53	34,77	84,90	0,0004s
HJ	-4,7697	-1,2436	4,1897	-1,1628	0,309	0,0851	0,81	21,74	70,82	0,0049s
RO	4,0697	1,1.10 ²	4,1875	-1,35633	0,882	0,8335	0,72	24,07	56,62	0,0030s
SAS	64697,7	12763,0	-2167,80	14000,0	2.10 ¹⁷	0,1073	0,48	34,33	81,81	0,0001s
SO	11748,8	-5,1.10 ³	-1971,35	16862,61	0,3251	0,1212	0,76	6,89	26,80	0,0140s

R^2 = Refere-se ao coeficiente de determinação. *Métodos de estimativa de parâmetros: SI = Simplex; SG = Simplex+Gauss Newton; HJ = Hooke e Jeeves; RS: Rosenbrock; SAS e SO=Solver Excel.

extremamente distintos entre os métodos em estudo e também, a existência de parâmetros diferentes quando se fixa o método e analisa os parâmetros obtidos por tal método para as diferentes fontes potássicas aplicadas. Isso também foi observado nas fontes nitrogenadas. Foram observados altos coeficientes de determinação para as duas fontes potássicas estudadas (nitrato e cloreto de potássio) em todos os métodos testados.

Na análise dos valores medidos e estimados pelos diferentes métodos, observa-se que o teste da hipótese de nulidade de Mayer et al. (1994) resultou em valores medidos e estimados não equivalentes, isso devido a significância encontrada em todos os métodos ($p < 0,05$). Em termos gerais os métodos apresentaram respectivamente as seguintes probabilidades de rejeição de H_0 : nas aplicações de cloreto de potássio ($p=0,0001$ (SI); 0,0001 (SG); 0,0010 (HJ); 0,0019 (RO), 0,0000 (SAS)), para $\alpha=0,05$. Nos tratamentos com nitrato de potássio foi observado o mesmo comportamento no teste de Mayer et al. (1994) ($p=0,0030$ (SI); 0,0004 (SG); 0,0049 (HJ); 0,0030 (RO) e 0,0001(SAS), respectivamente para os métodos de Simplex, Simplex com Gauss Newton, Hooke e Jeeves, Rosenbrock e SAS. Perceber-se então que mesmo apresentando altos ajustes dos dados (R^2), ocorreu rejeição de H_0 para $\alpha=0,05$. Dessa forma, os valores dos parâmetros do modelo gerados pelos diferentes métodos resultaram em valores medidos e estimados de potássio não equivalentes entre si.

Em se tratando das determinações realizadas pelo do Solver Excel (SO), observou-se coeficientes de

determinação de 76% e 82%, respectivamente para as fontes de cloreto de potássio e nitrato de potássio. Observaram-se menores RMSE em comparação com os demais métodos (5,62 e 6,89 mg L⁻¹). Isso resultou em variação abaixo de 18,48% a 26,80% (MEN). Nas avaliações de comparação entre valores medidos e estimados de potássio, foi observado significância pelo teste de Mayer et al. (1994) para as estimações nas duas fontes ($p=0,0200$ e 0,0140), resultando em valores de potássio medidos não equivalentes com os estimados. Entretanto, os desvios encontrados em termos gerais podem ser aceitáveis para estimações desse íon no solo, devido às condições heterogêneas encontradas no solo.

Os valores de RMSE e MEN presentes na Tabela 2 evidenciam o mesmo comportamento observado nas demais estimações presentes nesse trabalho. Esses valores apresentaram-se na seguinte faixa de variação para as estimações dos métodos com solo sob aplicação de cloreto de potássio (25,45 a 53,79 mg L⁻¹). Para as aplicações de nitrato de potássio os valores ficaram entre 21,74 (HJ) e 34,77 mg L⁻¹ (SG), enquanto que a média dos erros normalizados variou entre 53,79% a 90,42%. A simulação foi considerada pobre, pois a variação do RMSE foi superior a 30% (Jamieson et al., 1991).

A provável explicação para o aparecimento de diferentes parâmetros nos métodos testados para diferentes situações experimentais neste estudo reside na possibilidade da existência de várias soluções ótimas nas equações não lineares, como relatado por (Silva, 2009). Em termos gerais, observa-se que os diferentes métodos de estimativa de parâmetros do modelo não

linear proposto (Equação 1) não podem ser utilizados para promover estimações de potássio e nitrato como função de CEa e umidade para as diferentes situações estudadas. Pois, mesmo apresentando altos coeficientes de determinação, resultaram em não equivalência dos valores medidos e estimados segundo Mayer et al. (1994). Um ponto importante é que os valores dos parâmetros resultantes do ajuste dos dados via os diferentes métodos, resultam em uma aplicabilidade do modelo apenas para uma faixa de valores de CEa e umidade não condizente com os valores médios encontrados no solo.

As dificuldades que podem ser encontradas na utilização desses métodos em estudo estão intimamente relacionadas com a definição dos valores iniciais dos parâmetros para uma melhor calibração do modelo. Santoro et al. (2005) empregaram o PROC MODEL (SAS, 2003) nas análises dos modelos não lineares e obtiveram seus valores iniciais na literatura e quando não conseguiram bons resultados utilizaram um maior número de iterações. Entretanto, no caso da estimativa dos parâmetros do modelo de estimativa dos íons pode-se observar que os altos coeficientes de determinação encontrados recomendariam a utilização dos mesmos como possíveis ferramentas de auxílio na modelagem de íons. Entretanto, em condições práticas no campo, os parâmetros gerados pelos diferentes métodos resultaram em estimativa de nitrato não equivalentes com os teores medidos na solução do solo (Mayer et al., 1994). Isso pode ser explicado pela dificuldade de se controlar os diversos fatores ambientais envolvidos.

Conclusões

Os métodos testados não proporcionaram bons ajustes nas estimações dos parâmetros nos dois solos estudados.

As estimações pelo SAS são sensíveis aos valores iniciais e demandaram mais tempo para ocorrer à convergência dos dados.

Os diferentes métodos resultaram em estimações de potássio e nitrato não equivalentes com os medidos na solução do solo.

As estimações resultantes da utilização da ferramenta “Solver” do Excel resultaram em melhores resultados.

Literatura Citada

Andrade Neto, T. M.; Coelho, E. F.; Alvez, M da S.; Santana Junior, E. B.; Santana, J. A do. Estimating potassium in the soil solution as a function of electrical conductivity and soil water content. *Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental (Online)*, v. 16, p. 618-623, 2012.

- Dias, R. S. Estudo do metabolismo do fósforo utilizando modelos matemáticos. Piracicaba, USP, 2006. p.104. (Tese de Doutorado).
- Elliot, R.L.; Nelson, J.D.; Loftis, J.C.; Hart W.E. Comparison of sprinkler uniformity models. *Journal of the Irrigation and Drainage Division*, v.106, p.321-330, 1980.
- Garnés, S. J. A.; Sampaio, R. J. B., Dalmolin, Q., “Ajustamento paramétrico por mínimos quadrados”, Congresso Brasileiro de Ciências Geodésicas, Curitiba –PR, 1997.
- Giese, K.; Tiemann, R. Determination of the complex permittivity from the sample time domain reflectometry. *Advanced Molex Relaxes Processes*, New York, v.7, n.1, p.45-49, 1975.
- Hart, W.E.; Reynolds, W.N. Analytical design of sprinkler systems. *Transactions of the American Society of Agricultural Engineers*, v.8, p.83-89, 1965.
- Hooke, R., Jeeves, T.A., 1961, “Direct Search Solution of Numerical and Statistical Problems”, *Journal of ACM.*, v. 8, pp. 212-229.
- Ledieu, J.; de Ridder, P.; de Cleck, P.; Dautrebande, S. A method measuring soil water moisture by time-domain reflectometry. *Journal of Hydrology*, Amsterdam, v.88, n.1, p.319-328, 1986.
- Jamieson, P. D, Porter J. R.; Wilson DR. A test of the computer simulation model ARC-WHEAT1 on wheat crops grown in New Zeland. *Field Crops Research*, 27:337-350, 1991.
- Karmeli, D. Distribution pattern and losses for furrow irrigation. *Journal of the Irrigation and Drainage Division*, v.104, p.59-69, 1978.
- Mayer, D. G.; Stuart, M. A.; Swain, A. J. Regression of real word data on model output: An appropriate overall test of validity. *Agriculture System*. v.45, p.93-104, 1994.
- Motuslky, H. & Ransnas, L. Fitting curves to data using nonlinear regression: a practical and nonmathematical review. *FASEB J*, 1, 365-374, 1987.
- Muñoz-Carpena, R.; Regalado, C.M.; Alvarez-Benedí, J.; Socorro, A.R.; Pérez, N. Determinación simultánea mediante TDR del transporte de agua y un soluto salino en el suelo. In: López, J.J.; Quemada, M. (Ed.). *Temas de Investigación en Zona no Saturada*. Pamplona: Universidade Pública de Navarra, 2001. p.1-7.
- Nelder, J.A., Mead, R. A simplex method for function minimization, *Computer Journal*, v. 7, pp. 308-313, 1965.
- Pires, L. C.; Machado, T. M. M.; Carneiro, P. L. S. Modelos não lineares para descrição do crescimento de caprinos repartida criados na caatinga. *Anais... IX Simpósio Brasileiro de Melhoramento Animal*. João Pessoa, PB. 2012.
- Powell, M. J. D. “An efficient method for finding the minimum of a Function of several variables without calculating derivatives”, *Computer Journal*, v. 7, p.303-307, 1964.
- Powell, M. J. D. “A method for minimizing a sum of squares of non-linear functions without calculating derivatives”, *Computer Journal*, v. 7, p.303-307, 1965.

- Rosenbrock, H.H. "An Automatic method for finding the greatest or least value of a function", *Computer Journal*, v. 3, pp. 175-184, 1960.
- Santana, G. S.; Coelho, E. F.; Silva, T. M.; Ramos, M. M. Relação entre potássio na solução do solo, umidade e condutividade elétrica aparente do solo. *Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental*. v.11, n.2, p.142-151, 2007.
- Santoro, K. R.; Barbosa, S. B. P.; Brasil, L. H. de A.; Santos, E. de S. Estimativas de parâmetros de curvas de crescimento de bovinos Zebu, criados no estado de Pernambuco. *Revista Brasileira de Zootecnia*.vol.34, n.6, 2005.
- Sas Institute Inc. *Statistical analysis system user's guide*. Version 9.1 ed. Cary: SAS Institute, USA, 2003.
- Silva, M. R. Um novo método híbrido aplicado à solução de sistemas não-lineares com raízes múltiplas. UERJ, Nova Friburgo, RJ, 2009. (Tese de Doutorado).
- Silva, J.T.A. da; Borges, A. L. Solo, nutrição mineral e adubação da bananeira. *Informe Agropecuário*, v.29, p.25-37, 2008.
- Silva, T. S. M.; Coelho, E. F.; Paz, V. P. S.; Vellame, L. M.; Santana, G. S. Teor de potássio na solução do solo com uso da técnica de reflectometria no domínio do tempo. *Revista Irriga, Botucatu*, v. 10, n. 4, p. 393-402, novembro-dezembro, 2005.
- Warrick, A.W.; Hart, W.E.; Yitayew, M. Calculation of distribution and efficiency for nonuniform irrigation. *Journal of Irrigation and Drainage Engineering*, v.115, p.674-686, 1989.