# COMPARAÇÃO DOS MÉTODOS GRG2 (SOLVER DO EXCEL) E DOWNHILL SIMPLEX PARA A PARAMETRIZAÇÃO DA FUNÇÃO BETA.

**Ozanival Dario Dantas**
Embrapa Cerrados
BR 020 Km 18. Caixa Postal: 08223. CEP: 73310-970. Planaltina, DF – Brasil
dario@cpac.embrapa.br

**Euzebio Medrado da Silva**
Embrapa Cerrados
BR 020 Km 18. Caixa Postal: 08223. CEP: 73310-970. Planaltina, DF – Brasil
euzebio@cpac.embrapa.br

**Luís Gustavo Barioni**
Embrapa Cerrados
BR 020 Km 18. Caixa Postal: 08223. CEP: 73310-970. Planaltina, DF – Brasil
barioni@cpac.embrapa.br

**Marco Antônio Assfalk de Oliveira**
Universidade Federal de Goiás
Escola de Engenharia Elétrica e de Computação
Coordenação de Pós-Graduação e Pesquisa
Praça Universitária S/N, Bloco A, Piso 3, Setor Universitário
Campus I – UFG – CEP: 74605-220 – Goiânia, GO – Brasil.
Assfalk@eee.ufg.br

**Jorge Enoch Furquim Werneck Lima**
Embrapa Cerrados
BR 020 Km 18. Caixa Postal: 08223. CEP: 73310-970. Planaltina, DF – Brasil
jorge@cpac.embrapa.br

**RESUMO**: A estimação do valor ótimo dos parâmetros em modelos matemáticos não lineares tem se beneficiado pelo contínuo desenvolvimento de técnicas de otimização numérica. O *software Excel*® fornece uma opção para essa tarefa, o suplemento *Solver,* o qual utiliza o método *GRG2* – Gradiente Reduzido Generalizado. No entanto, é imprescindível avaliar esse método, comparando sua eficácia com a de outros métodos de otimização disponíveis. Neste trabalho o método *Downhill Simplex* (*Nelder-Mead*) foi selecionado para comparação. Os valores dos parâmetros da função *Beta*, para 91 conjuntos de dados observados, contendo um total de 5833 registros referentes à avaliação de desempenho de diversos sistemas de irrigação, foram estimados utilizando o método *GRG2* e o *Downhill Simplex*. A comparação das curvas de freqüência acumulada da soma de quadrados dos erros revelou que o *Downhill Simplex* foi estatisticamente superior.

***Palavras Chaves:*** Otimização, *Nelder-Mead, GRG2*, Otimização Combinatória

# COMPARING THE GRG2 (EXCEL SOLVER) AND THE DOWNHILL SIMPLEX METHODS FOR THE PARAMETER ESTIMATION IN THE BETA FUNCTION

**ABSTRACT**: The estimation of the optimum parameter value of nonlinear mathematical models has been improved by the continuous development of numerical optimization techniques. The Microsoft Excel spreadsheet provides an option, through the Solver add-in, which uses the GRG2 – Generalized Reduced Gradient – method. Nevertheless, it is essential to evaluate that method, by comparing it efficacy with other available optimization methods. In this paper, the Downhill Simplex (Nelder-Mead) method was selected for the comparison. The parameter values for the Beta function were estimated for 91 datasets, totaling 5833 records, describing the performance of different irrigation systems. The comparison of the accumulated frequency distributions of the error sum of squares of both methods has revealed that the Downhill Simplex was statistically superior.

**Keywords**: *Optimization, Nelder-Mead, GRG2, Combinatorial optimization*

# 1 Introdução

O desenvolvimento de modelos matemáticos para fins de predição requer adequada estimativa do valor dos parâmetros para que o modelo represente fielmente os dados observados (BARIONI et al., 2006). Usualmente a parametrização é realizada por meio do ajuste simultâneo de diversos parâmetros do modelo a um conjunto de dados que contenha registros de valores de entrada e de saída do modelo considerado. Entretanto, à medida que o número de parâmetros de ajuste aumenta, cresce exponencialmente o espaço de busca e, normalmente, o risco de obtenção de uma superfície multidimensional de resposta mais complexa e de difícil otimização. Segundo Press et al. (1990) não existe um método genérico para a solução desse problema. Entretanto, devido à facilidade de uso e de acesso, o suplemento Solver do Excel® tem sido amplamente utilizado para parametrização de modelos. Como o Solver do Excel® utiliza apenas um algoritmo para obter a solução de problemas de otimização não-linear, é pertinente questionar sua eficácia diante de outros métodos.

Este artigo tem por objetivo comparar os métodos *GRG2* (LASDON et al., 1978), disponibilizado no Microsoft *Excel®* Solver, e *Downhill Simplex* (PRESS, 1990; WALSH, 1979), para determinar qual o mais eficaz para parametrizar o modelo conhecido como função *Beta*.

# 2 Material e Métodos

A função *Beta*, os dados utilizados para o ajunte do modelo, os métodos de otimização e os procedimentos adotados para a comparação desses métodos são descritos a seguir.

## *2.1 O método de Downhill Simplex*

O método *Downhill Simplex*, também conhecido como método de *Nelder-Mead,* foi um dos utilizados para a determinação do valor ótimo dos parâmetros da função *Beta*. Esse método possui a característica de possibilitar a otimização em problemas não-lineares e multidimensionais, requerendo apenas uma função objetivo e sem necessidade de derivadas para encontrar a solução (PRESS et al., 1990).

O método utiliza-se de um simplex inicial, onde cada ponto é formado por uma solução possível, nesse caso, os parâmetros da função *Beta*. O número de vértices do simplex é igual a um mais o número de parâmetros a serem ajustados. Nesse caso, para quatro parâmetros, teremos um simplex com cinco vértices. Os valores dos parâmetros (para cada ponto) 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 ou expansão (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, um 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).

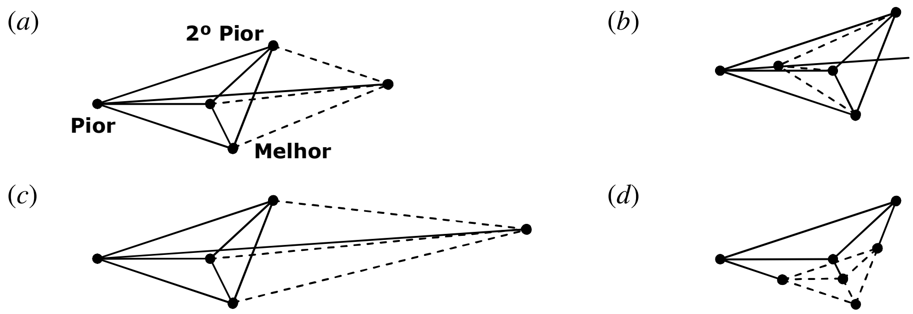


**Figura 1.** Possíveis formas de redefinição do *Simplex* (PRESS et al., 1990). (*a*) Reflexão em busca do melhor ponto; (*b*) Reflexão e expansão na direção do melhor ponto; (*c*) Contração de uma dimensão para o melhor ponto e (*d*) Contração de todas as dimensões para o melhor ponto.

Como o *Donwhill Simplex* é, originalmente, um método de otimização irrestrita, uma função de penalização foi incorporada à função objetivo para evitar soluções inadequadas. Caso algum ponto possua um parâmetro com valor fora dos limites estabelecidos (Tabela 1), a função objetivo retorna um valor bastante grande, de forma que o método descarte o ponto posteriormente.

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. A tolerância foi definida como $1 \times 10^{-10}$ e o número máximo de interações como 1500.

## 2.2 GRG – SOLVER

O algoritmo de gradientes reduzidos generalizados proposto por Lasdon et al. (1978) trata da solução de problemas de otimização não lineares nos quais a função objetiva pode ter não linearidades de qualquer forma, contanto que essa função seja diferenciável. O algoritmo trata de problemas gerais de otimização restrita da forma:

Minimizar $Z(X)$
sujeito a:

$$0 \leq g_i(X) \leq ub(i),\ i = 1,\ m,$$
$$lb(i) < X_i < ub(i),\ i = m+1, m+n,$$

onde X é um vetor de n variáveis. Assume-se que as funções Z e $g_i$ são diferenciáveis, o que não é necessário no método *Downhill Simplex*.

De acordo com Lasdon et al. (1978), o problema é resolvido minimizando uma seqüência de problemas reduzidos, nos quais a função objetivo reduzida F(*x*) possui um vetor *x* (um subconjunto de X) de variáveis não básicas. O sistema itera utilizando uma pesquisa unidimensional por meio de uma variação do método de Newton.

## 2.3 Dados observados, modelo matemático e função objetivo:

Os dados utilizados na parametrização foram provenientes da avaliação de desempenho de 91 casos de sistemas de irrigação (Silva et al., 2006), contendo 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 randômica correspondente. Como (*X*) é ordenado em forma decrescente, então, para aplicar a função *Beta* acumulada, foi necessário transformar a variável (*a*) em (*P*), sendo $P=1-a$. Além disso, considerando que nesse tipo de problema de avaliação de desempenho da irrigação a variável usualmente fornecida é (*P*), 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:

$$x = \frac{X - X_{min}}{X_{max} - X_{min}} \tag{1}$$

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

Neste trabalho, a função *Beta* incompleta inversa ($F^{-1}$) de (*P*), dado ($\alpha, \beta$) como seus parâmetros, também otimizados por ambos os métodos, foi definida como[1]:

$$\hat{x} = F^{-1}\left(P \mid \alpha, \beta\right) = \left\{\hat{x} : F\left(\hat{x} \mid \alpha, \beta\right) = P\right\} \tag{2}$$

Em que:

$$P = F\left(\hat{x} \mid \alpha, \beta\right) = \frac{1}{B(\alpha, \beta)} \int_0^{\hat{x}} t^{\alpha - 1} (1 - t)^{\beta - 1}\, dt$$

e $B(\alpha, \beta)$ é função *Beta* completa no intervalo de 0 a 1, sendo $(0 \le t \le \hat{x})$.

Utilizando o pacote computacional *MATLAB*[2], os valores de ( $\hat{x}$ ) foram obtidos por meio da função "*betainv,*", $\hat{x} = betainv(P, \alpha, \beta)$.

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

$$\hat{X} = \hat{x}\left(X_{max} - X_{min}\right) + X_{min} \tag{3}$$

Uma vez executada a equação (3), é possível calcular a soma do quadrado dos erros ponderada pelo Grau de Liberdade (*GL*), de acordo com a equação (4).

$$SQE = \frac{\sum \left(X - \hat{X}\right)^2}{GL}, \tag{4}$$

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

[1] Apresentação da função *Beta* baseada no *Help* do *MATLAB Function Reference* © 1994-2006
[2] Sitio oficial do aplicativo. Disponível em: <http://www.mathworks.com/>. Acesso em: 25 de novembro de 2006.

A função objetivo, cujo retorno é também o critério de eficácia dos métodos de otimização (menores valores indicando maior eficácia), Equação (4), em que o melhor conjunto de parâmetros é aquele que gera o menor valor de SQE, foi implementada no ambiente de desenvolvimento do *MatLab* e utilizada por ambos os métodos para o calculo de SQE.

## 2.4 Procedimento de comparação dos modelos

O modelo beta foi ajustado pelos dois métodos, individualmente, em todos os 91 casos, gerando, em cada ajuste, um valor representativo da soma de quadrados das diferenças (SQE) entre os dados observados e os valores estimados pelo modelo, por meio da técnica dos mínimos quadrados (BECK; ARNOLD, 1977).

Para o método GRG2 os parâmetros foram ajustados de forma visual, comparando-se graficamente os valores estimados e observados até a obtenção de um resultado próximo a solução desejada. Além disso, o GRG2 foi executado mais de uma vez, utilizando-se do resultado anterior com o objetivo de melhorar a solução encontrada.

Para o *Downhill Simplex,* os pontos iniciais foram definidos por meio da geração de valores aleatórios com distribuição uniforme entre os limites estabelecidos como adequados para os parâmetros do modelo *Beta* (Tabela 1). Essa técnica de inicialização foi executada 3 vezes para cada caso e a melhor solução obtida na função objetivo foi utilizada nas análises subseqüentes.

**Tabela 1 - Limites de valores para os parâmetros do modelo Beta**

| Parâmetros | Inferior | Superior |
|---|---|---|
| A | 0,001 | 20 |
| B | 0,001 | 15 |
| Min | 0,1 | 1 |
| Max | 0,1 | 3 |

Na função objetivo, cada valor da soma de quadrados foi dividido pela diferença entre o número de observações e o respectivo número de parâmetros do modelo (*GL*), resultando nos valores de SQE, os quais formaram o conjunto de dados utilizado na comparação estatística entre os métodos. O conjunto dos 91 valores de SQE, um conjunto para cada método, foi analisado na forma de histograma de freqüências, subdividido em sete classes, para ajuste à função probabilística mais adequada, possibilitando, assim, o emprego da técnica de comparação de curvas (SILVA & AZEVEDO, 2002) para a diferenciação dos métodos. Esse ajuste foi feito utilizando-se também o método dos mínimos quadrados.

O teste de significância **r** de *Pearson* (LEVIN, 1987) foi utilizado para verificar se a função estatística exponencial representava adequadamente a distribuição das probabilidades acumulas dos resíduos (SQE).

Para ilustrar as diferenças entre os métodos, foi incluído em um único gráfico cada traçado das funções exponenciais de probabilidade ajustadas aos valores pontuais das freqüências acumuladas dos valores de SQE, resultantes de cada método testado. Nesse esquema de representação, quanto mais próximo estiver a curva do eixo das probabilidades, menores são os valores de SQE e, consequentemente, melhor o método de otimização de parâmetros.

A fim de verificar a significância estatística das diferenças entre os métodos, utilizou-se a técnica de comparação de curvas com o teste **F** (SILVA & AZEVEDO, 2002). O nível crítico de probabilidade estabelecido para julgar a significância das diferenças foi de 5%.

# 3 Resultados e Discussão

Dentre os 91 casos analisados neste trabalho, o método *Downhill Simplex* obteve maior eficácia em 90 casos. No único caso em que o *GRG2* foi mais eficaz que o *Downhill Simplex*, alterando-se os valores iniciais dos parâmetros no *Downhill Simplex* para valores mais próximos do resultado, possibilitou que o retorno da função objetivo fosse menor que o do *GRG2*.

O *Downhill Simpl*ex foi mais eficaz apesar de uma aparente desvantagem em sua inicialização. Tal desvantagem se deve ao melhor ajuste dos valores iniciais fornecidos ao GRG2 pelo método visual, em comparação à inicialização pseudo-aleatória utilizada no *Downhill Simplex*. Destaca-se que, quando informado um ponto inicial para o GRG2 gerado com valores aleatórios, embora dentro dos limites estabelecidos (Tabela 1), porém, distantes da solução desejada, algumas vezes, o GRG2 convergiu para soluções inadequadas.

Na análise dos histogramas das freqüências os valores de SQE, que resultaram do ajuste de cada método aos 91 casos de avaliação de desempenho de sistemas de irrigação, foi constatado, por meio do teste de significância **r** de *Pearson* (LEVIN, 1987), cujo resultado revelou correlação superior a 0,97 para ambos os métodos, que a função estatística exponencial representava adequadamente a distribuição das probabilidades acumuladas desses resíduos.

Na Figura 2, são apresentados os pontos relativos às freqüências acumuladas de ocorrência dos valores de SQE de cada método, bem como as respectivas curvas da distribuição estatística exponencial ajustadas.

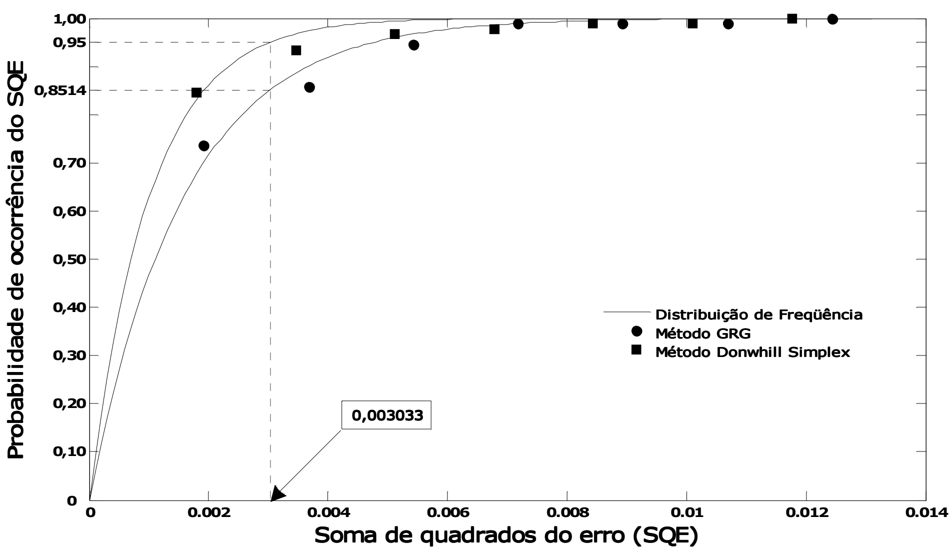


**Figura 2 –** Curvas da distribuição estatística exponencial, ajustadas às freqüências acumuladas de ocorrência dos valores de SQE de cada método, resultantes de 91 casos de avaliação de desempenho de irrigação, indicando níveis de probabilidade em cada método (seguimentos tracejados horizontais), correspondentes ao valor de SQE igual a 0.003033.

A aplicação do teste **F** (SILVA & AZEVEDO, 2002), utilizado para verificar a significância estatística das diferenças entre os métodos, revelou valor de F=4,747 para 1 e 12 graus de liberdade, respectivamente, no numerador e denominador. O valor de probabilidade foi de 0,029%. Assim, pode-se afirmar que os métodos são estatisticamente diferentes ao nível de 5% de significância.

Pela disposição das curvas da distribuição estatística exponencial, ajustadas às freqüências acumuladas de valores de SQE de cada método (Figura 2), o *Downhill Simplex* foi o método que revelou melhor desempenho, pois quanto mais próximo a curva estiver do eixo das probabilidades, menores são seus valores de SQE e, consequentemente, melhor é o método de otimização de parâmetros.

Na adoção do método *Downhill Simplex* como referência (Figura 2) e, ao se considerar o valor de SQE = 0,003033, correspondente à probabilidade de 95%, infere-se que a chance de se obter valores de SQE superiores a 0,003033 é de 5%. Para o método GRG2, essa chance é de 14,86%. Assim, pode-se avaliar a magnitude do ganho em precisão que pode ser obtido com a adoção do método *Downhill Simplex* em relação ao método GRG2 para este problema.

# 4 Conclusões

1. O método mais eficaz para ajustar os parâmetros da função *Beta* foi o *Downhill Simplex;*
2. O *Downhill Simplex* promoveu ganhos expressivos em precisão quanto a soma os quadrados dos erros;
3. Recomenda-se cautela no uso do *Solver* do *Microsoft Excel* para o ajuste de modelos não-lineares.

# 5 Referências

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. et al. (Eds). **Nutrient Digestion And Utilization in Farm Animals: Modelling Approaches**, Cap. 23, CABI Publishing, 2006.

BECK, J. V.; ARNOLD, K. L. **Parameter estimation**. New York: Wiley, 1977. 501p.

LAPPONI, C. J. R. **Estatística Usando o Excel**. 4. ed. Rio de Janeiro:Editora Campus, 2005. 476p.

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

LEVIN, J. **Estatística aplicada a ciências humanas.** 2.ed. São Paulo: Harbra, 1987. 392p.

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.

SILVA, E. M. da; LIMA, J. E. F. W.; RODRIGUES, L.N.; AZEVEDO, J. A. de; Comparação de modelos matemáticos não-lineares empregados na análise de desempenho de sistemas de irrigação. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, Brasília, v. 41, n. 6, p. 1049-1052, jun. 2006.

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.

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