

Universidade do Minho
Escola de Ciências

Estimação de parâmetros de um modelo utilizando algoritmos de otimização sem restrições

Mestrado em Estatística para a Ciência de Dados
Otimização em Machine Learning

Ano Letivo de 2024/2025

Anita Margarida Antunes Ferreira, pg56093
Inês Margarida Gonçalves Gomes, pg55575
Rafaela Veloso Fernandes, pg54914
Rui Miguel Pereira Alves, pg55577

Braga, maio de 2025

Índice

1	Introdução	1
2	Descrição da Equação de <i>Horton</i>	2
3	Formulação do Problema de Minimização em Função dos Parâmetros Desconhecidos	3
4	Método do Gradiente	4
4.1	Descrição do método	4
4.2	Implementação do método	4
4.3	Avaliação do impacto do número de iterações no desempenho do método	5
5	Método de Newton	6
5.1	Descrição do Método	6
5.2	Implementação do método	7
5.3	Avaliação do impacto do número de iterações no desempenho do método	8
6	Método BFGS	9
6.1	Descrição do método	9
6.2	Implementação do método	10
6.3	Avaliação do impacto do número de iterações no desempenho do método	11
7	Método do Gradiente Conjugado de Fletcher-Reeves	11
7.1	Descrição do método	11
7.2	Implementação do método	12
7.3	Avaliação do impacto do número de iterações no desempenho do método	13
8	Comparação dos diferentes métodos	14
9	Conclusão	16
10	Referências	17
11	Anexos	
A	Resultados do Método do Gradiente	
B	Resultados do Método BFGS	
C	Resultados do Método Gradiente Conjugado de Fletcher-Reeves	
D	Comparação dos Métodos	

Índice de figuras

2.1	Curva de Infiltração (<i>Horton</i>)	3
4.1	Ajuste do modelo de <i>Horton</i> com o Método do Gradiente (10000 iterações).	5
4.2	Evolução do erro ao longo das iterações - Método do Gradiente.	5
5.1	Ajuste da função acumulada de <i>Horton</i> aos dados observados, utilizando o Método de Newton (1 iteração).	7
5.2	Ajuste do modelo de <i>Horton</i> aos dados experimentais com o Método de Newton com condição de Armijo (1 iteração).	8
6.1	Ajuste do modelo de <i>Horton</i> com BFGS (10000 iterações).	11

6.2	Evolução do erro ao longo das iterações - Método BFGS.	11
7.1	Ajuste do modelo e evolução do erro com o Método do Gradiente Conjugado de Fletcher-Reeves.	13
8.1	Ajuste da função de Horton aos dados	14
8.2	Comparação da evolução do erro	14
A.1	Resultados do Método do Gradiente com 200 iterações	
A.2	Resultados do Método do Gradiente com 1000 iterações	
A.3	Resultados do Método do Gradiente com 5000 iterações	
B.1	Resultados do Método BFGS com 200 iterações	
B.2	Resultados do Método BFGS com 1000 iterações	
B.3	Resultados do Método BFGS com 5000 iterações	
C.1	Resultados do Método Gradiente Conjugado de Fletcher-Reeves com 200 iterações	
C.2	Resultados do Método Gradiente Conjugado de Fletcher-Reeves com 1000 iterações	
C.3	Resultados do Método Gradiente Conjugado de Fletcher-Reeves com 5000 iterações	

Índice de tabelas

4.1	Parâmetros estimados, erro quadrático médio final e tempo de execução para diferentes números de iterações.	5
5.1	Parâmetros estimados com e sem condição de Armijo para uma iteração	8
6.1	Parâmetros estimados, erro quadrático médio final e tempo de execução com o método BFGS	11
7.1	Parâmetros estimados, erro quadrático médio final e tempo de execução com o método do Gradiente Conjugado	14
D.1	Comparação dos métodos de otimização com diferentes iterações	

1 Introdução

A infiltração da água no solo é um processo fundamental na hidrologia, com impacto direto em áreas como a agricultura, o planeamento urbano e a gestão sustentável dos recursos hídricos. A equação de *Horton* é um modelo clássico que descreve a diminuição gradual da taxa de infiltração ao longo do tempo até atingir um valor de equilíbrio. No entanto, a precisão deste modelo pode ser melhorada através da estimativa refinada dos seus parâmetros, que dependem das características do solo e podem ser obtidos com maior eficácia por meio de técnicas de otimização.

Este trabalho tem como objetivo estimar os parâmetros da equação de *Horton* com base em dados experimentais, através da aplicação de algoritmos clássicos de otimização sem restrições: o Método do Gradiente, o Método de *Newton*, o Método BFGS e o Método do Gradiente Conjugado de *Fletcher-Reeves*, usando a linguagem *python*. A abordagem começa com a formulação matemática do problema de minimização, seguida da respetiva implementação computacional, visando calibrar os parâmetros do modelo — f_0 , f_c e k — para que a curva teórica de infiltração acumulada se ajuste da forma mais precisa possível aos dados observados.

Foi utilizada a base de dados completa para garantir maior robustez nos resultados. Para avaliar o desempenho computacional dos métodos, registaram-se também os tempos de execução (em segundos) necessários para a sua conclusão.

Os métodos do Gradiente, BFGS e Gradiente Conjugado foram executados com diferentes limites máximos de iterações 10000, 5000, 1000 e 200. Nestes métodos considerou-se uma tolerância de 10^{-8} , que define o critério de paragem, e um passo fixo $\alpha = 10^{-7}$.

No Método de *Newton*, por ser uma função convexa, foi aplicado com apenas uma iteração, onde os cálculos foram iniciados com os valores $f_0 = 0.08$, $f_c = 0.1$ e $k = 0.01$. Estes valores iniciais foram uma estimativa mais próxima dos valores que se acreditam ser os reais.

A análise dos resultados permite avaliar o desempenho, a robustez e a eficiência computacional de cada método na calibração do modelo de *Horton*, ilustrando a aplicação prática de técnicas de otimização na modelação de fenómenos naturais e destacando a importância da otimização numérica na ciência de dados.

2 Descrição da Equação de Horton

Antes de proceder à análise da equação de Horton, é fundamental compreender, de forma aprofundada, o conceito de infiltração, uma vez que ele constitui a base física sobre a qual se fundamenta o modelo proposto.

A infiltração é a taxa com que a água penetra no solo pela superfície. Ela repõe a deficiência de humidade do solo, e o excesso move-se para baixo pela força da gravidade, processo chamado de escoamento profundo ou percolação, e alimenta o lençol freático. A infiltração (f) ocorre na capacidade máxima apenas quando a intensidade da chuva (i) é igual ou excede a capacidade de infiltração (f_p), que é definida como a taxa máxima na qual o solo, em uma determinada condição, é capaz de absorver água. No entanto, quando a intensidade da chuva é menor do que a capacidade de infiltração, e a taxa real de infiltração é menor que essa capacidade, as taxas de infiltração e de precipitação tornam-se aproximadamente iguais.

A infiltração (f) frequentemente começa com uma taxa elevada (20 a 25 cm/h) e diminui até atingir uma taxa constante (f_c) à medida que a chuva continua a ser chamada de f_p final (= 1,25 a 2,0 cm/h).

O modelo de infiltração de Horton descreve como a taxa de infiltração do solo evolui durante um evento de precipitação. Inicialmente, quando a chuva começa, a taxa de infiltração (f) é igual à taxa de infiltração inicial (f_0). Nesse momento, o solo ainda está seco e tem uma alta capacidade de absorver água, o que faz com que a taxa de infiltração seja bastante elevada, podendo até ser próxima à intensidade da precipitação (i).

Com o tempo, à medida que o evento de chuva continua e o solo começa a ficar saturado, a capacidade de infiltração diminui progressivamente. Isso ocorre de forma exponencial, e a taxa de infiltração aproxima-se de um valor constante chamado f_c , que representa a taxa final de infiltração quando o solo atinge a saturação.

A taxa de infiltração (f) a qualquer momento (t) é dada pela equação de Horton:

$$f(t) = f_c + (f_0 - f_c)e^{-kt}$$

$$k = \frac{f_c}{F_c}$$

Onde:

- f_0 = taxa inicial da capacidade de infiltração (cm/hora)
- f_c = taxa constante final de infiltração na saturação (cm/hora)
- k = constante que depende principalmente do solo e da vegetação
- e = base do logaritmo neperiano
- F_c = área sombreada na Fig. 2.1
- t = tempo desde o início da tempestade (hora)

A Fig. 2.1 mostra a curva de infiltração de Horton. A curva representa a diminuição da taxa de infiltração ao longo do tempo, começando com uma taxa inicial elevada e aproximando-se de uma taxa constante à medida que o solo se satura. A área sombreada representa o volume acumulado de infiltração ao longo do tempo até atingir o estado constante.

Conseguimos observar que ($f_0 = 5$ cm/h), ou seja, a taxa inicial de infiltração em $t=0$, é aproximadamente 5 cm/h.

Relativamente a ($f_c = 1$ cm/h), a curva de infiltração aproxima-se de forma assintótica de uma linha horizontal — essa linha representa o valor final e constante da taxa de infiltração, ou seja, quando o solo já está saturado e a infiltração estabiliza.

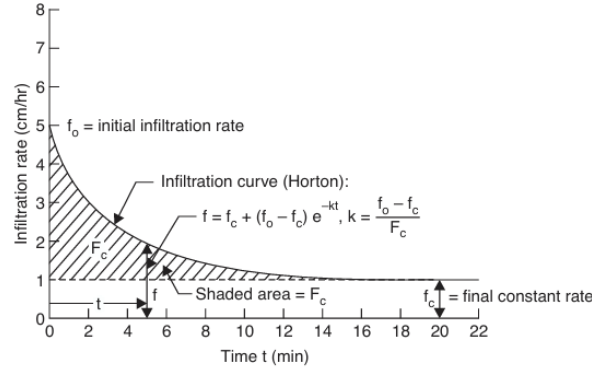


Figure 2.1: Curva de Infiltração (Horton)

A partir dos valores de (f_0) e (f_c) , conseguimos calcular qualquer valor de infiltração (f) para um dado tempo (t) . Além disso, se conhecermos um valor de (f_t) num instante específico, conseguimos determinar o valor de (k) pela substituição na equação e isolando com logaritmos naturais.

Esse modelo permite entender como a infiltração da água no solo diminui à medida que o solo vai se aproximando da saturação. É uma ferramenta importante para prever o comportamento do solo durante eventos de precipitação, ajudando a estimar a quantidade de escoamento superficial, tendo em conta as mudanças na capacidade de infiltração ao longo do tempo.

3 Formulação do Problema de Minimização em Função dos Parâmetros Desconhecidos

O objetivo deste trabalho é ajustar os parâmetros do modelo de Horton — f_0 , f_c e k — de modo a que a função teórica de infiltração acumulada se aproxime o mais possível dos dados experimentais recolhidos. Como os dados disponíveis correspondem à infiltração acumulada, é necessário integrar a expressão da taxa de infiltração para obter a função de infiltração total $F(t)$:

$$F(t; f_0, f_c, k) = f_c t + \frac{f_0 - f_c}{k} (1 - e^{-kt}). \quad (1)$$

Tendo em conta uma amostra experimental de n pontos (t_i, y_i) , com $i = 1, \dots, n$, onde y_i representa o valor observado de infiltração acumulada no instante t_i , a função custo \mathcal{E} será definida como o erro quadrático médio entre os valores previstos pelo modelo e os valores reais:

$$\mathcal{E}(f_0, f_c, k) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [F(t_i; f_0, f_c, k) - y_i]^2. \quad (2)$$

O problema de otimização consiste, portanto, em encontrar o ponto $(f_0^*, f_c^*, k^*) \in R^3$ que minimize a função de custo:

$$(f_0^*, f_c^*, k^*) = \arg \min_{f_0, f_c, k} \mathcal{E}(f_0, f_c, k). \quad (3)$$

A minimização será realizada utilizando quatro algoritmos distintos de otimização sem restrições: o método do gradiente, o método de Newton, o método quasi-Newton BFGS e o método do gradiente conjugado de Fletcher-Reeves. A cada iteração dos algoritmos, os parâmetros são atualizados, e a função custo é avaliada com base nos dados experimentais.

Neste projeto foram utilizados todos os ($n = 1799$) dados experimentais fornecidos pelo enunciado para o cálculo da função de custo em cada iteração. Esta abordagem assegura um compromisso entre fidelidade ao fenómeno real e viabilidade computacional.

Adicionalmente, poderão ser considerados cenários onde os parâmetros f_0 e f_c sejam previamente estimados com base em observações diretas, reduzindo o espaço de otimização a uma única variável, k .

4 Método do Gradiente

4.1 Descrição do método

O método do gradiente é um algoritmo iterativo utilizado para minimizar funções diferenciáveis. A direção de descida mais acentuada é dada pela direção oposta ao gradiente da função, isto é:

$$s^{(k)} = -\nabla F(w^{(k)}).$$

Este vetor define a direção na qual a função decresce mais rapidamente, pois maximiza o ângulo $\theta = \pi$ entre $s^{(k)}$ e $\nabla F(w^{(k)})$, minimizando o produto interno entre ambos:

$$s^{(k)T} \nabla F(w^{(k)}) = \|s^{(k)}\| \|\nabla F(w^{(k)})\| \cos(\theta).$$

A cada iteração, o vetor de parâmetros é atualizado segundo:

$$w^{(k+1)} = w^{(k)} + \eta^{(k)} s^{(k)} = w^{(k)} - \eta^{(k)} \nabla F(w^{(k)}),$$

onde $\eta^{(k)}$ é o passo (ou taxa de aprendizagem). O algoritmo termina quando a norma do gradiente for inferior a uma tolerância definida:

$$\|\nabla F(w^{(k)})\| < \varepsilon.$$

4.2 Implementação do método

Nesta secção é apresentada a interpretação referente à implementação, em linguagem *Python*, do algoritmo do gradiente aplicado ao problema de estimação dos parâmetros da função acumulada de *Horton*. O objetivo é encontrar os valores ótimos dos parâmetros f_0 , f_c e k que minimizem o erro entre os dados observados e os valores previstos pelo modelo. Para isso, utiliza-se o método do gradiente, que atualiza iterativamente os parâmetros com base no gradiente da função de erro. Considera-se uma tolerância de 10^{-8} , que define o critério de paragem, e um passo fixo $\alpha = 10^{-7}$, que controla a velocidade de atualização em cada iteração. O número máximo de iterações é testado com diferentes valores (200, 1000, 5000 e 10000), de forma a avaliar o seu impacto na convergência e na qualidade do ajuste. Todas as implementações seguem a mesma estrutura, apenas variando o número de iterações permitidas. Constatou-se, portanto, que o aumento do número de iterações não provocou alterações significativas nos parâmetros estimados nem no valor do erro quadrático médio. Este resultado indica que o método atingiu rapidamente um ponto de equilíbrio, tornando desnecessária a execução de mais iterações para obter melhorias relevantes.

De seguida, apresenta-se o gráfico do ajuste correspondente ao cenário com 10000 iterações, tanto o ajuste do modelo e a evolução do erro.

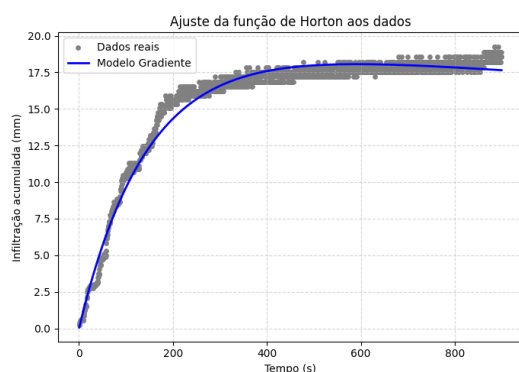


Figure 4.1: Ajuste do modelo de *Horton* com o Método do Gradiente (10000 iterações).

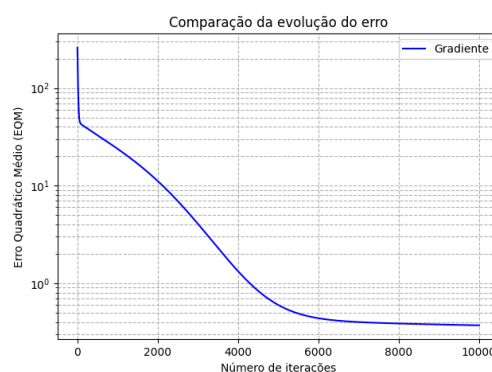


Figure 4.2: Evolução do erro ao longo das iterações - Método do Gradiente.

Os resultados obtidos mostram que o método do gradiente, apesar de ser uma técnica simples e bastante usada em problemas de otimização, se revelou eficaz no ajuste da função acumulada de *Horton*. Como evidenciado pelos gráficos, o modelo consegue acompanhar bem a curvatura dos dados reais, especialmente com um número elevado de iterações. A análise da evolução do erro quadrático médio ao longo das iterações demonstra uma descida progressiva e significativa até cerca de 6000 iterações, após o qual o erro estabiliza, indicando que o algoritmo converge de forma eficiente para uma solução estacionária. Embora os parâmetros estimados ainda sofram ligeiras alterações com o aumento do número de iterações, essas diferenças tornam-se pouco relevantes a partir de um certo ponto, sugerindo que o método atinge rapidamente uma região próxima de um mínimo local da função de custo. No entanto, o método apresenta algumas limitações importantes. Por ser uma técnica baseada apenas na primeira derivada, o método do gradiente não utiliza informação da curvatura da função (segunda derivada), o que pode tornar a descida mais lenta ou direcionada para mínimos locais. Além disso, a sua eficácia depende fortemente da escolha do passo (α) e do ponto inicial. Ainda assim, destaca-se que, com uma configuração adequada, o método foi capaz de produzir um ajuste robusto e estável, com bom desempenho tanto visual como numérico, mesmo em problemas com grande número de dados e comportamento não linear.

4.3 Avaliação do impacto do número de iterações no desempenho do método

Este subcapítulo analisa como a quantidade máxima de iterações influencia os resultados do método do gradiente. O objetivo é entender até que ponto aumentar o número de iterações traz benefícios significativos e identificar em que momento os ganhos passam a ser marginais.

Table 4.1: Parâmetros estimados, erro quadrático médio final e tempo de execução para diferentes números de iterações.

Iterações	f_0	f_c	k	EQM (mm ²)	Tempo (s)
200	0.016326	0.030469	0.010181	39.730094	0.033322
1000	0.051139	0.023985	0.010031	23.863481	0.198631
5000	0.126521	0.000070	0.006938	0.599208	1.057050
10000	0.134198	-0.002292	0.006913	0.370324	1.860692

Assim, observa-se que o aumento do número de iterações conduz a uma melhoria progressiva nos parâmetros estimados e a uma redução significativa do erro quadrático médio. No entanto, os ganhos mais expressivos ocorrem nas primeiras iterações. Por exemplo, ao passar de 200 para 1000 iterações, o erro diminui de 39.73 mm² para 23.86 mm², representando uma melhoria substancial.

No entanto, ao aumentar de 5000 para 10000 iterações, o erro desce apenas de 0.5992 para 0.3703 mm², o que demonstra um ganho mais modesto. Além disso, nota-se que os parâmetros f_0 , f_c e k vão-se ajustando gradualmente, permitindo ao modelo captar melhor a forma da função acumulada. Este comportamento confirma que o método do gradiente converge de forma eficaz nas iterações iniciais, sendo menos sensível a aumentos elevados do número de passos. Assim, conclui-se que, para este problema, um número moderado de iterações já garante um bom equilíbrio entre qualidade do ajuste e tempo de execução.

5 Método de Newton

No presente trabalho, o Método de Newton é aplicado à minimização do erro quadrático médio (EQM) entre os dados experimentais e o modelo de Horton. A função objetivo é suficientemente suave e, na prática, comporta-se como convexa, o que justifica a adoção desta abordagem.

5.1 Descrição do Método

O Método de Newton é uma técnica iterativa clássica utilizada para resolver problemas de otimização não linear. É classificado como um *método de segunda ordem*, pois utiliza tanto o gradiente quanto a Hessiana da função objetivo para determinar a direção de descida.

Seja $F : R^n \rightarrow R$ uma função duas vezes continuamente diferenciável. A expansão de Taylor de segunda ordem em torno de um ponto $w^{(k)}$ permite aproximar a função por:

$$F(w^{(k)} + d) \approx F(w^{(k)}) + \nabla F(w^{(k)})^T d + \frac{1}{2} d^T \nabla^2 F(w^{(k)}) d.$$

Minimizando essa aproximação quadrática, obtemos a direção de Newton $s^{(k)}$, solução do sistema linear:

$$\nabla^2 F(w^{(k)}) s^{(k)} = -\nabla F(w^{(k)}).$$

A próxima iteração do método é dada por:

$$w^{(k+1)} = w^{(k)} + \eta^{(k)} s^{(k)},$$

onde $\eta^{(k)} > 0$ representa o comprimento do passo frequentemente escolhido via uma estratégia de procura unidimensional, como o critério de Armijo.

Se a Hessiana for definida positiva e $w^{(0)}$ estiver suficientemente próximo da solução w^* , então o método apresenta **convergência quadrática**, ou seja:

$$\|w^{(k+1)} - w^*\| \leq \gamma \|w^{(k)} - w^*\|^2, \quad \gamma > 0.$$

Além disso, quando F é uma função quadrática estritamente convexa, o método encontra a solução exata em, no máximo, n iterações.

Limitações do Método de Newton

O Método de Newton apresenta as seguintes limitações:

- A matriz Hessiana $\nabla^2 F(w^{(k)})$ pode ser **singular** ou **indefinida**, o que inviabiliza o cálculo de $s^{(k)}$.
- A direção $s^{(k)}$ pode não ser de descida, especialmente se $\nabla^2 F(w^{(k)})$ não for definida positiva.
- O custo computacional de calcular e inverter $\nabla^2 F(w^{(k)})$ cresce significativamente para problemas de alta dimensão.
- A convergência é **local**, ou seja, depende fortemente da escolha da aproximação inicial $w^{(0)}$.

5.2 Implementação do método

Nesta secção analisa-se a aplicação do Método de Newton ao problema de estimação dos parâmetros f_0 , f_c e k da função acumulada de *Horton*, com o objetivo de ajustar o modelo aos dados experimentais de infiltração acumulada. O método visa minimizar o erro quadrático médio (EQM) entre os valores previstos pelo modelo e os dados observados, utilizando uma abordagem baseada no gradiente e na matriz Hessiana da função de custo.

São considerados dois cenários: o primeiro adota um comprimento de passo fixo; o segundo recorre a uma linha de pesquisa com base na condição de Armijo, permitindo ajustar dinamicamente o passo e assegurar uma descida eficaz da função objetivo.

Os métodos foram iniciados com os valores $f_0 = 0.08$, $f_c = 0.1$ e $k = 0.01$, e foi utilizada uma tolerância de 10^{-8} como critério de paragem. Devido à natureza convexa do problema, ambos os métodos convergiram para o critério de paragem em apenas uma iteração.

A seguir, apresentam-se os gráficos de ajuste obtidos após essa única iteração, permitindo uma comparação visual entre os dois procedimentos.

Método de Newton sem Condição de Armijo

O Método de Newton foi iniciado com os valores $f_0 = 0.08$, $f_c = 0.1$ e $k = 0.01$, adotando-se uma tolerância de 10^{-8} como critério de paragem. Como a função de custo é diferenciável, convexa em torno da solução e possui uma matriz Hessiana definida positiva, o método convergiu para o critério de paragem em apenas uma iteração. Este comportamento está de acordo com a teoria do Método de Newton, segundo a qual, para funções suficientemente regulares, a convergência pode ser imediata quando o ponto de partida se encontra numa vizinhança do mínimo.

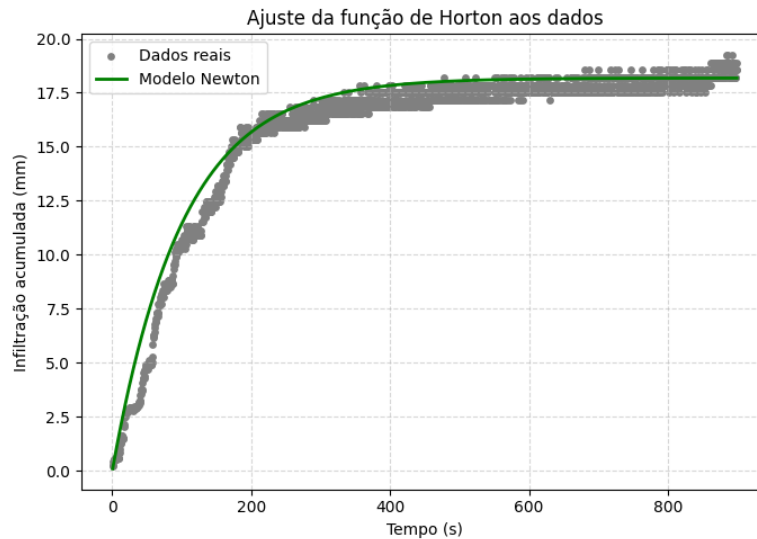


Figure 5.1: Ajuste da função acumulada de Horton aos dados observados, utilizando o Método de Newton (1 iteração).

A Figura 5.1 mostra o excelente desempenho do ajuste logo após a primeira iteração. O modelo resultante aproxima-se com elevada precisão da tendência dos dados observados.

Método de Newton com Condição de Armijo

Nesta secção, analisa-se a aplicação do Método de Newton com linha de pesquisa baseada na condição de Armijo, aplicada ao problema de estimação dos parâmetros da função acumulada de *Horton*. A condição

de Armijo, teoricamente, regula dinamicamente o comprimento do passo em cada iteração, assegurando uma descida efetiva da função objetivo.

A estimação foi iniciada com os valores $f_0 = 0.08$, $f_c = 0.1$ e $k = 0.01$, adotando-se uma tolerância de 10^{-8} como critério de paragem. Dado o carácter convexo da função de custo, o algoritmo convergiu para o critério de paragem em apenas uma iteração.

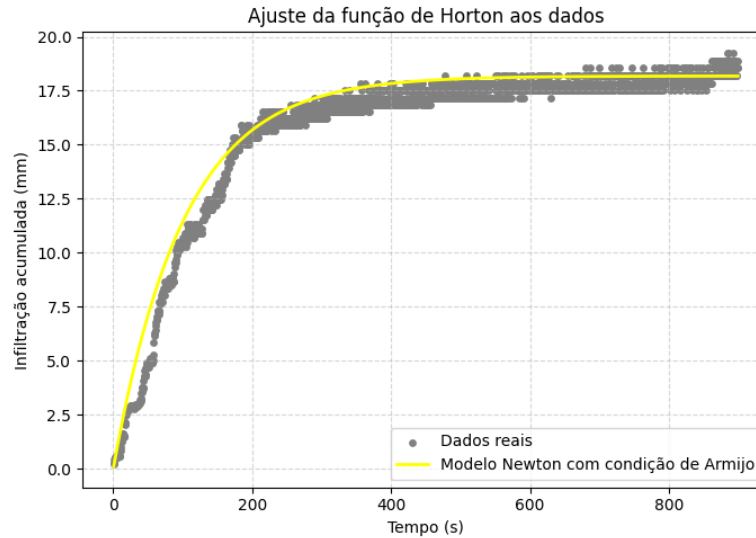


Figure 5.2: Ajuste do modelo de Horton aos dados experimentais com o Método de Newton com condição de Armijo (1 iteração).

A Figura 5.2 sugere que, mesmo com uma única iteração, o modelo ajustado com a condição de Armijo consegue representar com elevada precisão a tendência global da infiltração acumulada observada, o que demonstra a eficiência e rapidez do algoritmo na convergência para uma solução ótima.

5.3 Avaliação do impacto do número de iterações no desempenho do método

Nesta secção, são comparados os desempenhos do Método de Newton com e sem a condição de Armijo, considerando para uma iteração. A Tabela 5.1 apresenta os valores estimados para os parâmetros f_0 , f_c e k , bem como o erro quadrático médio (EQM), para cada configuração.

Table 5.1: Parâmetros estimados com e sem condição de Armijo para uma iteração

Iterações	Método	f_0	f_c	k	EQM (mm ²)	Tempo (s)
1	Sem Armijo	0.1802	0.0000	0.0099	0.6588	0.000974
1	Com Armijo	0.1802	0.0000	0.0099	0.6588	0.000998

Tanto o Método de Newton com passo fixo como o com linha de pesquisa baseada na condição de Armijo convergiram para o critério de paragem logo na primeira iteração. Esta rápida convergência deve-se à natureza convexa da função de custo e à escolha adequada do ponto inicial, que permitiu que a direção de Newton levasse imediatamente a uma solução estacionária. Os tempos de execução registados foram de aproximadamente 0.000974 segundos para o método sem Armijo e 0.000998 segundos para o método com Armijo. O tempo ligeiramente superior neste último deve-se à realização da linha de pesquisa, necessária para verificar se a condição de Armijo está satisfeita. Após a primeira interação, os métodos satisfizeram o critério de paragem e terminaram instantaneamente, sem executar mais ciclos computacionais mensuráveis. Neste caso específico a introdução da condição de Armijo teve pouca importância prática, uma vez que dado a função ser convexa ambos os métodos convergiram apenas numa iteração.

Em todas as situações, os parâmetros finais estimados foram $f_0 \approx 0.1802$, $f_c \approx 0.0000$ e $k \approx 0.0099$, com um EQM de 0.6588 mm^2 . Estes resultados destacam a eficiência do Método de Newton quando aplicado a funções bem comportadas e com pontos iniciais adequados.

6 Método BFGS

6.1 Descrição do método

O algoritmo BFGS (Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno) é um método iterativo amplamente utilizado para otimização de funções não-lineares, especialmente em problemas onde é necessário encontrar o mínimo de uma função.

Desenvolvido em 1970 por Broyden, Fletcher, Goldfarb e Shanno, o algoritmo BFGS visa aproximar a matriz Hessiana, que é usada para fornecer informações sobre a curvatura da função de custo, de maneira eficiente e sem a necessidade de calcular explicitamente essa matriz em cada iteração. Por esse motivo, o método BFGS é uma das formas mais populares de Quasi-Newton e é frequentemente usado devido à sua eficiência.

A ideia principal do método é aproximar a função objetivo $F(w)$ por um modelo quadrático ao redor do ponto atual $w^{(k)}$. Esse modelo é dado por:

$$m^{(k)}(s^{(k)}) = F(w^{(k)}) + \nabla F(w^{(k)})^T s^{(k)} + \frac{1}{2} s^{(k)T} B^{(k)} s^{(k)}, \quad (4)$$

onde:

- $F(w^{(k)})$ é o valor da função objetivo no ponto atual,
- $\nabla F(w^{(k)})$ é o gradiente da função objetivo no ponto atual,
- $B^{(k)}$ é uma matriz simétrica e positiva definida que aproxima a Hessiana,
- $s^{(k)}$ é o vetor de direção de busca.

Este modelo quadrático $m^{(k)}(s^{(k)})$ é uma aproximação de $F(w)$ que facilita a otimização sem necessidade de calcular as segundas derivadas diretamente.

A minimização do modelo quadrático conduz à direção de descida:

$$s^{(k)} = -(B^{(k)})^{-1} \nabla F(w^{(k)}). \quad (5)$$

Depois de calcular a direção de busca $s^{(k)}$, o novo ponto é dado por:

$$w^{(k+1)} = w^{(k)} + \eta^{(k)} s^{(k)}, \quad (6)$$

onde $\eta^{(k)}$ representa o tamanho do passo, escolhido com base numa regra de linha, como as condições de Wolfe.

Após cada iteração, a matriz $B^{(k)}$ é atualizada para refletir as alterações no gradiente e na direção de busca, segundo a fórmula BFGS:

$$B^{(k+1)} = B^{(k)} + \frac{y^{(k)} y^{(k)T}}{y^{(k)T} s^{(k)}} - \frac{B^{(k)} s^{(k)} s^{(k)T} B^{(k)}}{s^{(k)T} B^{(k)} s^{(k)}}, \quad (7)$$

onde:

- $s^{(k)} = w^{(k+1)} - w^{(k)}$,
- $y^{(k)} = \nabla F(w^{(k+1)}) - \nabla F(w^{(k)})$.

O algoritmo BFGS realiza a otimização de funções não-lineares ao aproximar iterativamente a Hessiana e ao atualizar os parâmetros com base na curvatura estimada da função. A principal vantagem do método reside no facto de oferecer uma solução eficiente sem necessitar do cálculo exato da Hessiana, sendo uma alternativa atrativa ao método de Newton.

Pressupostos

- **Função objetivo diferenciável:** Assume-se que a função a ser minimizada é *suavemente diferenciável*, ou seja, possui gradiente contínuo.
- **Disponibilidade do gradiente:** O método requer que o *gradiente da função objetivo* esteja disponível e possa ser calculado com precisão.
- **Aproximação Hessiana inicial definida positiva:** A matriz inicial B_0 deve ser *simétrica e definida positiva*, geralmente escolhida como a matriz identidade.
- **Condição de curvatura:** A atualização garante que $B^{(k+1)}$ continue definida positiva apenas se for satisfeita a condição $s^{(k)T}y^{(k)} > 0$, onde

$$s^{(k)} = w^{(k+1)} - w^{(k)}, \quad y^{(k)} = \nabla F(w^{(k+1)}) - \nabla F(w^{(k)}).$$

Limitações

- **Custo de memória:** O método armazena e atualiza uma matriz $n \times n$, o que pode ser impraticável para problemas com alta dimensionalidade.
- **Violação da condição de curvatura:** Se $s^{(k)T}y^{(k)} \leq 0$, a matriz $B^{(k+1)}$ pode deixar de ser definida positiva, comprometendo a convergência.
- **Convergência local:** A convergência superlinear é garantida apenas em condições locais, como convexidade e boa aproximação inicial.
- **Sensibilidade numérica:** O desempenho pode ser afetado por *erros de arredondamento* e escolhas inadequadas na busca linear (*line search*).

6.2 Implementação do método

Nesta secção apresenta-se a implementação do algoritmo BFGS para estimar os parâmetros f_0 , f_c e k da função de infiltração acumulada de Horton, visando minimizar o erro quadrático médio (EQM) entre os dados observados e os valores previstos pelo modelo.

A implementação segue a formulação clássica do método Quasi-Newton BFGS, iniciando com a matriz identidade como aproximação da Hessiana inversa. A cada iteração, a direção de descida $s^{(k)}$ é calculada resolvendo o sistema:

$$B^{(k)}s^{(k)} = -\nabla F(w^{(k)}),$$

onde $B^{(k)}$ representa a matriz Hessiana inversa aproximada e $w^{(k)} = (f_0^{(k)}, f_c^{(k)}, k^{(k)})$ o vetor de parâmetros. O vetor é atualizado por:

$$w^{(k+1)} = w^{(k)} + \eta^{(k)}s^{(k)},$$

em que $\eta^{(k)}$ é o passo calculado por uma linha de pesquisa que verifica as condições de Wolfe (descida suficiente e curvatura). Esta linha de pesquisa foi implementada com um ajuste dinâmico do passo, aumentando ou reduzindo η conforme o comportamento da função objetivo.

A atualização de $B^{(k)}$ ocorre apenas se a condição de curvatura $s^{(k)T}y^{(k)} > 0$ for satisfeita, garantindo que a matriz B permanece definida positiva. A tolerância de convergência foi fixada em $\|\nabla F(w^{(k)})\| < 10^{-8}$, e testaram-se diferentes limites máximos de iterações, incluindo 200, 1000, 5000 e 10000.

Abaixo são apresentados dois gráficos representativos dos resultados com 10000 iterações: o ajuste da função de Horton aos dados reais e a evolução do EQM ao longo das iterações. Os resultados para os outros números de iterações estão em anexo.

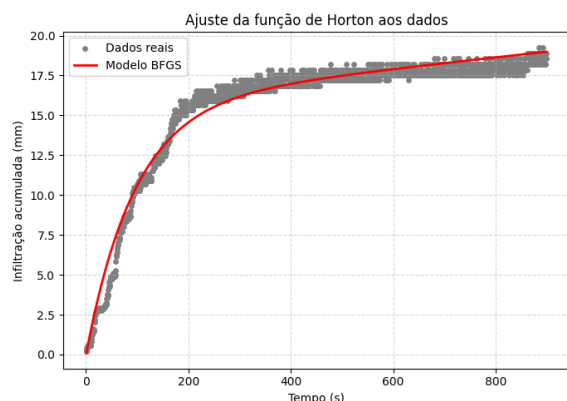


Figure 6.1: Ajuste do modelo de Horton com BFGS (10000 iterações).

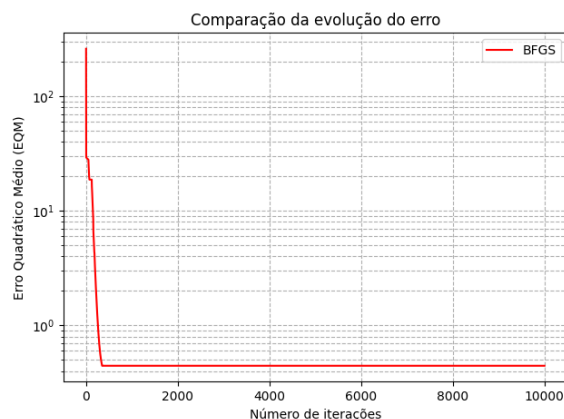


Figure 6.2: Evolução do erro ao longo das iterações - Método BFGS.

O gráfico do ajuste mostra que o modelo segue de perto a tendência dos dados observados, capturando adequadamente a natureza não linear do processo de infiltração. O gráfico da evolução do erro evidencia uma queda rápida nas primeiras 200 iterações, com estabilização clara a partir de aproximadamente 1000 iterações, característica esperada da eficiência do BFGS.

6.3 Avaliação do impacto do número de iterações no desempenho do método

Para avaliar o impacto do número de iterações no desempenho do método BFGS, testaram-se quatro configurações distintas: 200, 1000, 5000 e 10000 iterações. A Tabela 6.1 apresenta os parâmetros finais estimados, o valor do EQM e o tempo de execução para cada caso.

Table 6.1: Parâmetros estimados, erro quadrático médio final e tempo de execução com o método BFGS

Iterações	f_0	f_c	k	EQM (mm ²)	Tempo (s)
200	0.1419	0.0100	0.0105	2.8467	1.6833
1000	0.1692	0.0036	0.0105	0.4444	9.9683
5000	0.1692	0.0036	0.0105	0.4444	49.5078
10000	0.1692	0.0036	0.0105	0.4444	100.8626

Os resultados mostram que o BFGS é altamente eficiente: entre 200 e 1000 iterações há uma redução expressiva do erro (de 2.8467 mm² para 0.4444 mm²), mas entre 1000 e 10000 iterações o EQM estabiliza por completo, com ganhos marginais apenas em tempo computacional.

Desta forma, conclui-se que 1000 iterações são suficientes para alcançar um ponto ótimo com este método, oferecendo uma boa relação entre desempenho computacional e qualidade do ajuste. Limites superiores, como 5000 ou 10000 iterações, não trazem melhorias no EQM, apenas aumentam o tempo de execução. Isto valida o BFGS como um método robusto e rápido para problemas de ajuste de modelos não lineares.

7 Método do Gradiente Conjugado de Fletcher-Reeves

7.1 Descrição do método

O método do gradiente conjugado de Fletcher-Reeves foi introduzido na década de 1960 por Roger Fletcher e Charles M. Reeves, sendo um dos primeiros métodos desenvolvidos para resolver problemas de otimização não linear sem recurso à matriz Hessiana. A sua criação representou um avanço importante

na generalização do método das direções conjugadas, originalmente restrito à minimização de funções quadráticas.

Este método baseia-se na construção de uma sequência de direções de pesquisa conjugadas. Dois vetores p e q dizem-se conjugados relativamente a uma matriz definida positiva G se:

$$p^\top G q = 0.$$

A motivação central do método surge da equivalência entre resolver um sistema linear:

$$Aw = b,$$

e minimizar a função quadrática associada:

$$F(w) = \frac{1}{2} w^\top A w - b^\top w,$$

cujo gradiente é:

$$\nabla F(w) = Aw - b.$$

Para o caso geral de uma função diferenciável $F(w)$, o método define uma sequência de direções conjugadas $s^{(k)}$ com base nos gradientes sucessivos da função. A direção em cada iteração é dada por:

$$s^{(k)} = -\nabla F(w^{(k)}) + \beta^{(k-1)} s^{(k-1)},$$

onde o coeficiente de conjugação de Fletcher–Reeves é:

$$\beta^{(k-1)} = \frac{\|\nabla F(w^{(k)})\|^2}{\|\nabla F(w^{(k-1)})\|^2} = \frac{\nabla F(w^{(k)})^\top \nabla F(w^{(k)})}{\nabla F(w^{(k-1)})^\top \nabla F(w^{(k-1)})}.$$

A atualização do vetor de parâmetros segue então a forma:

$$w^{(k+1)} = w^{(k)} + \eta^{(k)} s^{(k)},$$

onde $\eta^{(k)}$ representa o comprimento do passo, obtido por uma regra de procura unidimensional, como o critério de Armijo, Wolfe ou valor fixo.

7.2 Implementação do método

A implementação do método do gradiente conjugado de Fletcher–Reeves para ajuste da função de infiltração de Horton seguiu uma estrutura iterativa clássica, baseada no cálculo sucessivo de direções conjugadas.

Partiu-se de uma estimativa inicial para os parâmetros f_0 , f_c e k , e a primeira direção foi definida como o gradiente negativo da função de custo. A cada iteração, o vetor de parâmetros é atualizado pela soma do vetor atual com a direção conjugada multiplicada por um passo fixo $\eta = 10^{-7}$, que se mostrou suficientemente pequeno para evitar instabilidades.

O código calcula o novo gradiente $g^{(k+1)}$ e o fator de conjugação de Fletcher–Reeves:

$$\beta^{(k)} = \frac{\|g^{(k+1)}\|^2}{\|g^{(k)}\|^2},$$

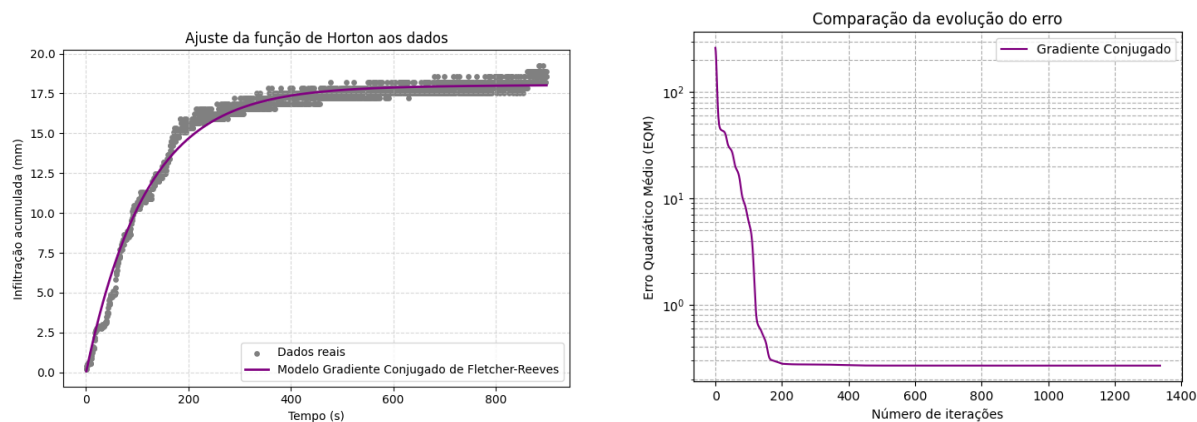
atualizando assim a nova direção como:

$$s^{(k+1)} = -g^{(k+1)} + \beta^{(k)} s^{(k)}.$$

A implementação omite a linha de pesquisa adaptativa, uma vez que os testes mostraram que a utilização de um passo fixo resultava em convergência estável sem comprometer significativamente a

qualidade do ajuste. A convergência foi controlada tanto pela norma do gradiente como pela norma da diferença entre iterações consecutivas.

Os gráficos seguintes ilustram o ajuste do modelo à função de Horton e a evolução do erro quadrático médio ao longo de 10000 iterações:



(a) Ajuste do modelo de *Horton* com o Método do Gradiente Conjugado (10000 iterações).

(b) Evolução do erro ao longo das iterações – Gradiente Conjugado.

Figure 7.1: Ajuste do modelo e evolução do erro com o Método do Gradiente Conjugado de Fletcher–Reeves.

O gráfico de ajuste mostra que o modelo obtido pelo método do gradiente conjugado de Fletcher–Reeves reproduz com elevada fidelidade a evolução da infiltração acumulada ao longo do tempo. A curva gerada acompanha de forma coesa a tendência geral dos dados experimentais, especialmente nas fases iniciais e intermédias, onde o fenómeno apresenta uma variação mais expressiva. Embora subsistam pequenas discrepâncias localizadas, nomeadamente em zonas de maior dispersão ou flutuação dos dados observados, a curvatura da função ajustada capta adequadamente a forma do processo físico subjacente.

Já o gráfico da evolução do erro quadrático médio evidencia uma descida muito acentuada nas primeiras iterações, em particular até cerca da iteração 200, após o que se observa uma estabilização clara dos valores. Este comportamento é característico de algoritmos eficientes, que aproveitam a informação direcional das primeiras iterações para uma redução significativa da função objetivo.

Importa referir que, embora o algoritmo tenha sido executado com um limite máximo de 10000 iterações, o gráfico apresentado mostra apenas cerca de 1300 iterações. Isto deve-se ao facto de o método ter atingido antecipadamente os critérios de paragem definidos, nomeadamente uma norma do gradiente inferior a 10^{-8} e uma diferença entre iterações consecutivas suficientemente pequena. Tal comportamento evidencia a rápida convergência do método, mesmo com um passo fixo reduzido, confirmando a sua robustez e adequação ao problema de ajuste do modelo de Horton.

7.3 Avaliação do impacto do número de iterações no desempenho do método

A Tabela 7.1 apresenta os parâmetros estimados, o EQM final e o tempo de execução para diferentes limites máximos de iterações (200, 1000, 5000 e 10000).

Table 7.1: Parâmetros estimados, erro quadrático médio final e tempo de execução com o método do Gradiente Conjugado

Iterações	f_0	f_c	k	EQM (mm ²)	Tempo (s)
200	0.1466	-0.0001	0.0081	0.2793	0.0334
1000	0.1525	0.0001	0.0085	0.2679	0.1962
5000	0.1526	0.0001	0.0085	0.2679	0.2323
10000	0.1526	0.0001	0.0085	0.2679	0.2999

Os resultados mostram que o método apresenta uma rápida redução do erro nas primeiras 200 iterações, sendo o EQM de 0.2793 mm². A partir de 1000 iterações, os valores de f_0 , f_c e k estabilizam, assim como o erro, em torno de 0.2679 mm². O tempo de execução permanece muito reduzido mesmo com 10000 iterações, evidenciando a leveza computacional do método.

Conclui-se que o método do gradiente conjugado de Fletcher–Reeves é eficaz na estimação dos parâmetros do modelo de Horton, fornecendo resultados robustos mesmo com passo fixo e sem atualização da Hessiana. O método oferece uma excelente relação custo-benefício computacional, convergindo rapidamente para soluções satisfatórias.

8 Comparação dos diferentes métodos

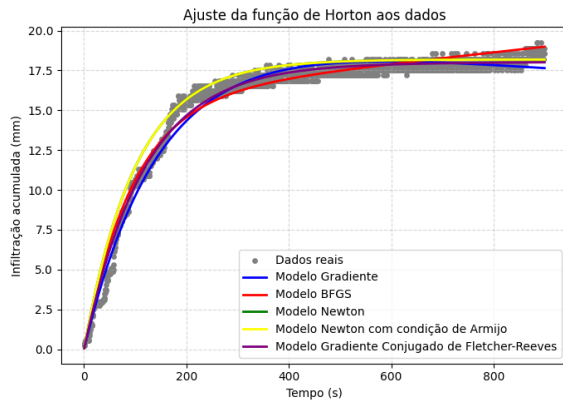


Figure 8.1: Ajuste da função de Horton aos dados

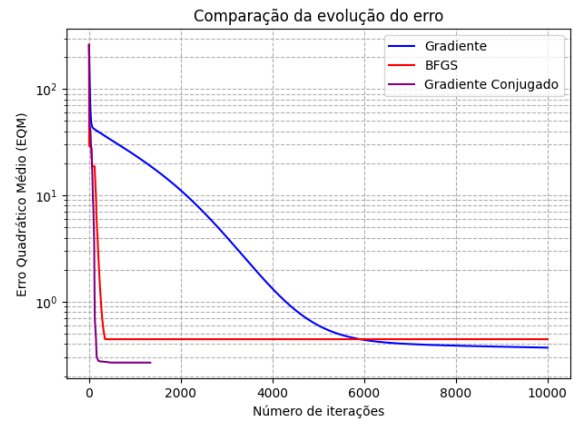


Figure 8.2: Comparação da evolução do erro

As figuras apresentam, respetivamente, o ajuste da função de Horton aos dados observados (Figura 8.1) e a comparação da evolução do erro ao longo das iterações (Figura 8.2). Com o apoio da Tabela D.1, disponível no Anexo D, é possível fazer uma análise mais detalhada do desempenho dos diferentes métodos de otimização.

Os valores estimados manualmente para os parâmetros f_0 e f_c foram calculados a partir dos dados experimentais usando as seguintes fórmulas:

$$f_0 = \frac{y_1 - y_0}{t_1 - t_0} = \frac{0.25794701 - 0.21740338}{0.5} = 0.081087 \text{ mm}^2/\text{s},$$

$$f_c = \frac{y_{n-1} - y_{n-2}}{t_{n-1} - t_{n-2}} = \frac{18.89690971 - 18.54126167}{0.5} = 0.711296 \text{ mm}^2/\text{s},$$

onde $y_0 = 0.21740338$ mm e $y_1 = 0.25794701$ mm são o primeiro e o segundo valores observados, respetivamente, e $y_{n-2} = 18.54126167$ mm e $y_{n-1} = 18.89690971$ mm são o penúltimo e último valor observado. Os tempos t_i têm intervalo constante de 0,5 segundos.

Comparando estes valores manuais com os parâmetros estimados pelos métodos de otimização, observam-se diferenças significativas. Por exemplo, o método do Gradiente com 10000 iterações apresenta $f_0 = 0.134198$ e $f_c = -0.002292$, sendo este último valor negativo e distante do valor manual estimado. O método do Gradiente Conjugado apresenta $f_0 = 0.152574$ e $f_c = 0.000118$, que, embora mais próximos do valor manual para f_0 , ainda diferem consideravelmente do valor manual para f_c . O método BFGS estima $f_0 = 0.169155$ e $f_c = 0.003569$, também inferiores aos valores calculados manualmente.

A razão para estas discrepâncias reside na fórmula utilizada para o cálculo de f_c , na qual apenas foram considerados os dois últimos valores da base de dados. Este procedimento torna f_c não representativo do declive final da curva de Horton, devido às oscilações nas medições dos dados. Assim, embora os valores de f_c estimados por cada modelo não coincidam exatamente com o valor previsto pela equação de Horton, os modelos seguiram adequadamente a tendência da curva e ajustaram-se bem aos dados. Este bom ajustamento é evidente na forma como os modelos conseguiram captar o comportamento geral da infiltração ao longo do tempo, apesar das variações locais nos dados.

Na comparação da evolução do erro (Figura 8.2), verifica-se que os métodos baseados em gradiente — Gradiente Simples e Gradiente Conjugado de Fletcher-Reeves — apresentam uma suave evolução do erro ao longo das iterações, com uma redução constante do erro quadrático médio (EQM). O Gradiente Conjugado alcança o menor EQM, 0.2679, após 10000 iterações, evidenciando um ajuste mais consistente. O Gradiente Simples também apresentou um bom desempenho, com EQM final de 0.3703. Já o método BFGS, embora tenha convergido rapidamente, resultou num EQM mais elevado de 0.4444, indicando um ajuste menos preciso.

No método de Newton, como se trata de uma função convexa, foi aplicada apenas uma iteração e, por isso, não está presente na Figura 8.2, que compara a evolução do erro ao longo das iterações. O valor do EQM obtido por este método foi 0.6588, superior aos demais. Salienta-se que os valores iniciais de f_0 , f_c e k foram uma estimativa mais próxima dos valores que se acreditam ser os reais.

No gráfico de ajuste (Figura 8.1), o modelo obtido com o Gradiente Conjugado segue de perto a curva dos dados observados, especialmente no início e meio do processo, refletindo o menor EQM. O Gradiente Simples também se ajusta bem, embora com um erro ligeiramente maior. O BFGS está mais afastado dos dados reais, o que explica o seu erro mais alto, enquanto o Newton, apesar de ter iniciado próximo, não conseguiu captar bem a variação dos dados devido à única iteração.

9 Conclusão

Este trabalho avaliou diversos métodos clássicos de otimização para estimar os parâmetros da função de *Horton*, ajustando-a a dados experimentais de infiltração acumulada. Foi utilizada a base de dados completa, assegurando maior robustez nos resultados, e aplicaram-se os métodos do Gradiente Simples, Gradiente Conjugado de *Fletcher-Reeves*, BFGS e *Newton*.

Como já foi referido, os métodos do Gradiente, BFGS e Gradiente Conjugado foram executados com diferentes limites máximos de iterações: 200, 1000, 5000 e 10000. Para estes métodos, considerou-se uma tolerância de 10^{-8} , que define o critério de paragem, e um passo fixo $\alpha = 10^{-7}$. O Método de *Newton*, devido a tratar-se de uma função convexa, convergiu em apenas uma iteração, os cálculos foram iniciados com os valores estimados próximos dos que se consideravam ser os reais.

Ao longo deste trabalho, discutiu-se a convergência dos diferentes métodos aplicados. Importa esclarecer que, sempre que afirmamos que um método convergiu, refere-se ao facto de este ter satisfeito o critério de paragem previamente definido — isto é, o algoritmo interrompeu as iterações quando a variação entre sucessivos valores estimados se tornou suficientemente pequena, indicando estabilidade na solução obtida.

O método do Gradiente Conjugado apresenta o melhor desempenho em termos de ajuste (menor EQM de 0.2679 com 10000 iterações), mas destaca-se também pela sua eficiência computacional, com um tempo de execução de apenas 0,30 segundos. O Gradiente Simples, embora tenha melhorado com o aumento do número de iterações, não atingiu o mesmo nível de precisão e foi mais lento (1,86 segundos para 10000 iterações). O método BFGS, por outro lado, mostrou-se computacionalmente muito mais pesado, com um tempo de 100,86 segundos para 10000 iterações, sem oferecer vantagem em termos de EQM (0,4444). Já o Método de *Newton*, com ou sem a condição de Armijo, obteve uma execução extremamente rápida (< 1 ms), mas resultou num EQM significativamente superior (0,6588), evidenciando um baixo poder de ajuste com uma única iteração. Assim, o Gradiente Conjugado oferece o melhor compromisso entre precisão e eficiência computacional entre os métodos testados.

Os valores calculados manualmente para os parâmetros $f_0 = 0.0811 \text{ mm}^2/\text{s}$ e $f_c = 0.7113 \text{ mm}^2/\text{s}$ foram comparados com as estimativas obtidas computacionalmente, e embora apresentem diferenças entre si, estas refletem as particularidades de cada abordagem. Ainda assim, os modelos mostraram-se eficazes ao captar a tendência global do fenómeno, demonstrando um ajustamento satisfatório aos dados observados.

Em suma, o método do Gradiente Conjugado destacou-se como o mais eficiente, apresentando o melhor equilíbrio entre qualidade do ajuste e tempo de execução. Por isso, revela-se a abordagem mais adequada para a estimação dos parâmetros da função de *Horton* neste estudo.

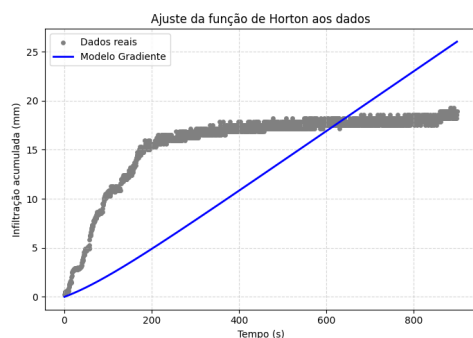
10 Referências

- [1] Raghunath, H. M. (2006). *Hydrology: Principles, Analysis and Design* (2^a ed.). New Age International (P) Ltd. https://mlsu.ac.in/econtents/4167_Hydrology_Principles-H%20M%20RAGHUNATH%20.pdf Pág.71
- [2] Duarte, M. S. (2017). *Modelação do processo de precipitação-escoamento e transportes associados: Influência da forma das bacias* (Dissertação de Mestrado). Universidade de Coimbra, Faculdade de Ciências e Tecnologia. Recuperado de <https://hdl.handle.net/10316/83088> Pág.20
- [3] Chong, E. K. P., & Zak, S. H. (2001). *An Introduction to Optimization* (2nd ed.). John Wiley & Sons, Inc. <https://www.gipsa-lab.grenoble-inp.fr/~ahmad.hably/Documents/IntroOptimization.pdf> Pág.180-184
- [4] Nocedal, J., & Wright, S. J. (2006). *Numerical Optimization* (2nd ed.). Springer Science+Business Media. <https://www.math.uci.edu/~qnie/Publications/NumericalOptimization.pdf> Pág.24
- [5] Morais, M. C. (2003). *Estatística Computacional — Módulo 1: Notas de apoio (Cap. 1)*. Secção de Estatística e Aplicações, Instituto Superior Técnico, Lisboa. Disponível em: <https://www.math.tecnico.ulisboa.pt/~mjmorais/notasECMCM-1.pdf> Pág.21-22

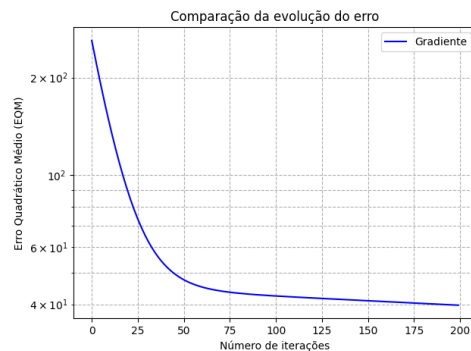
11 Anexos

A Resultados do Método do Gradiente

Esta secção apresenta os resultados gráficos obtidos com o Método do Gradiente para diferentes números de iterações.

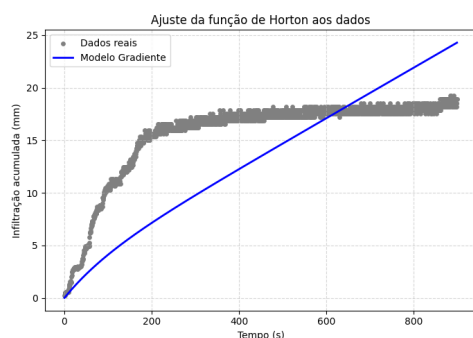


(a) Ajuste para 200 iterações

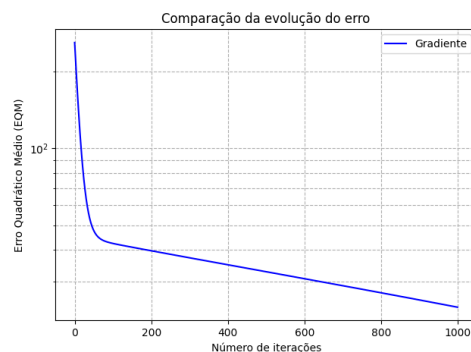


(b) Evolução do erro para 200 iterações

Figure A.1: Resultados do Método do Gradiente com 200 iterações

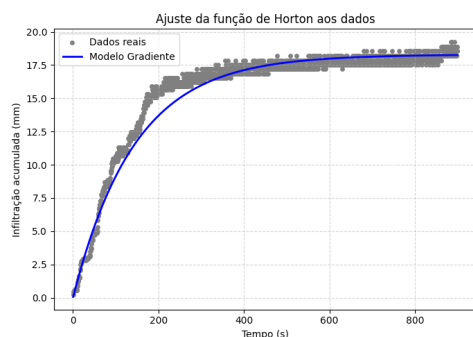


(a) Ajuste para 1000 iterações

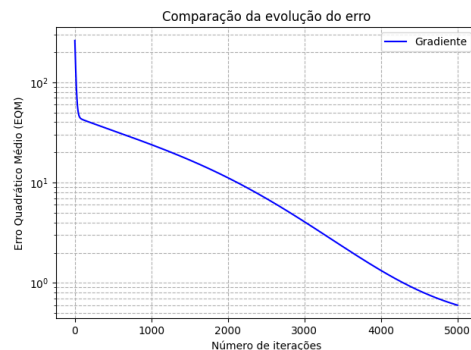


(b) Evolução do erro para 1000 iterações

Figure A.2: Resultados do Método do Gradiente com 1000 iterações



(a) Ajuste para 5000 iterações

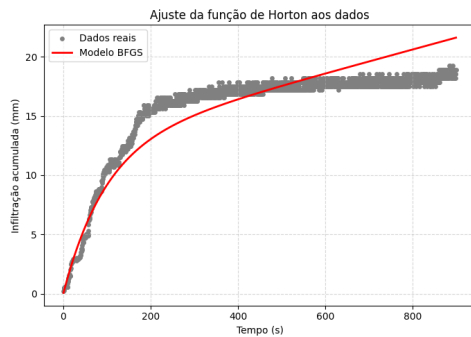


(b) Evolução do erro para 5000 iterações

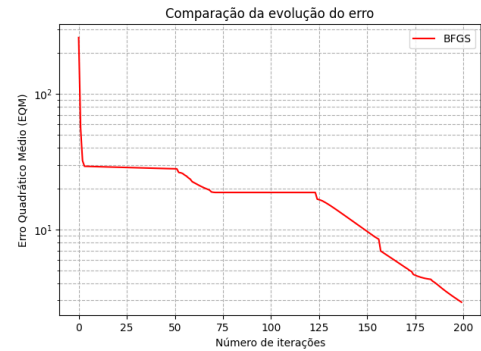
Figure A.3: Resultados do Método do Gradiente com 5000 iterações

B Resultados do Método BFGS

Esta secção apresenta os resultados gráficos obtidos com o Método BFGS para diferentes números de iterações.

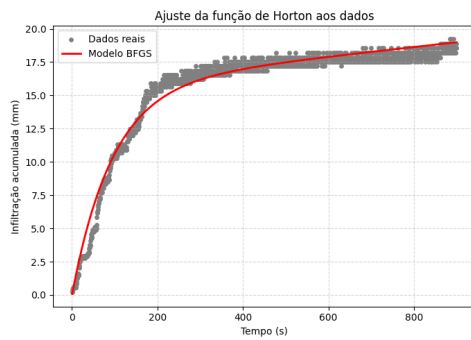


(a) Ajuste para 200 iterações

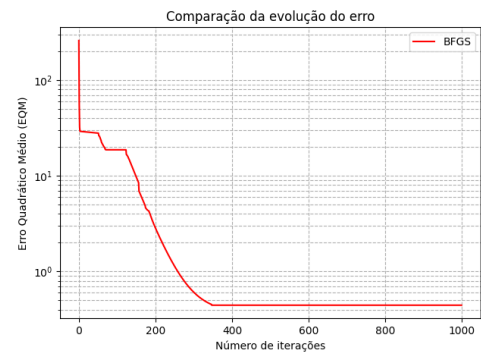


(b) Evolução do erro para 200 iterações

Figure B.1: Resultados do Método BFGS com 200 iterações

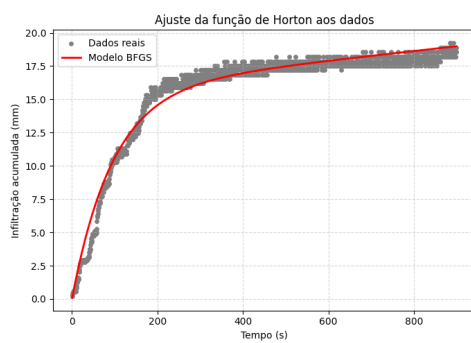


(a) Ajuste para 1000 iterações

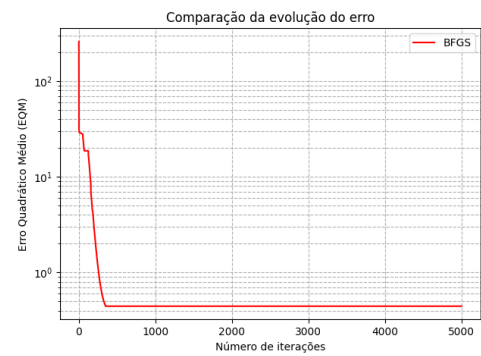


(b) Evolução do erro para 1000 iterações

Figure B.2: Resultados do Método BFGS com 1000 iterações



(a) Ajuste para 5000 iterações



(b) Evolução do erro para 5000 iterações

Figure B.3: Resultados do Método BFGS com 5000 iterações

C Resultados do Método Gradiente Conjugado de Fletcher-Reeves

Esta secção apresenta os resultados gráficos obtidos com o Método Gradiente Conjugado de Fletcher-Reeves para diferentes números de iterações.

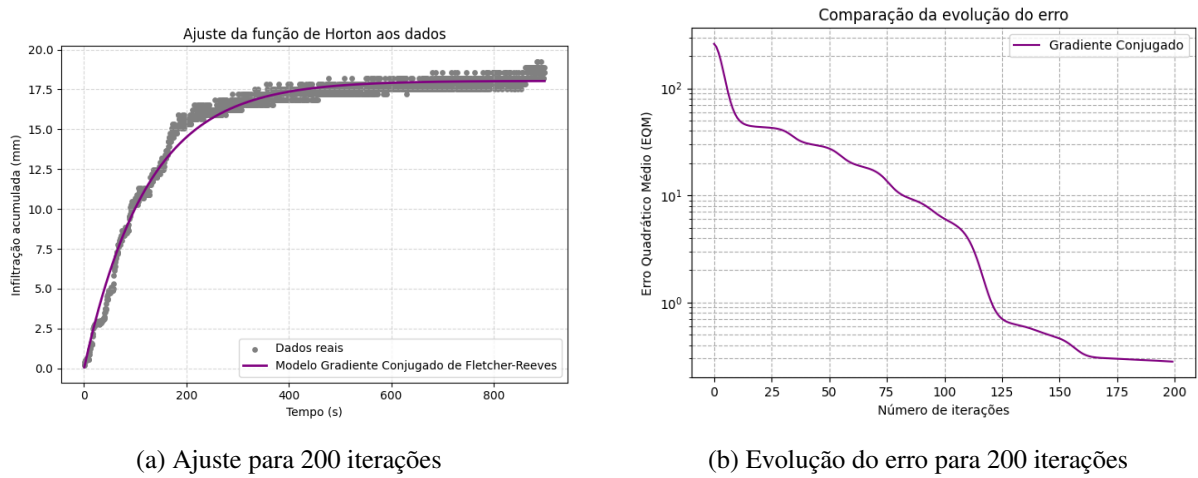


Figure C.1: Resultados do Método Gradiente Conjugado de Fletcher-Reeves com 200 iterações

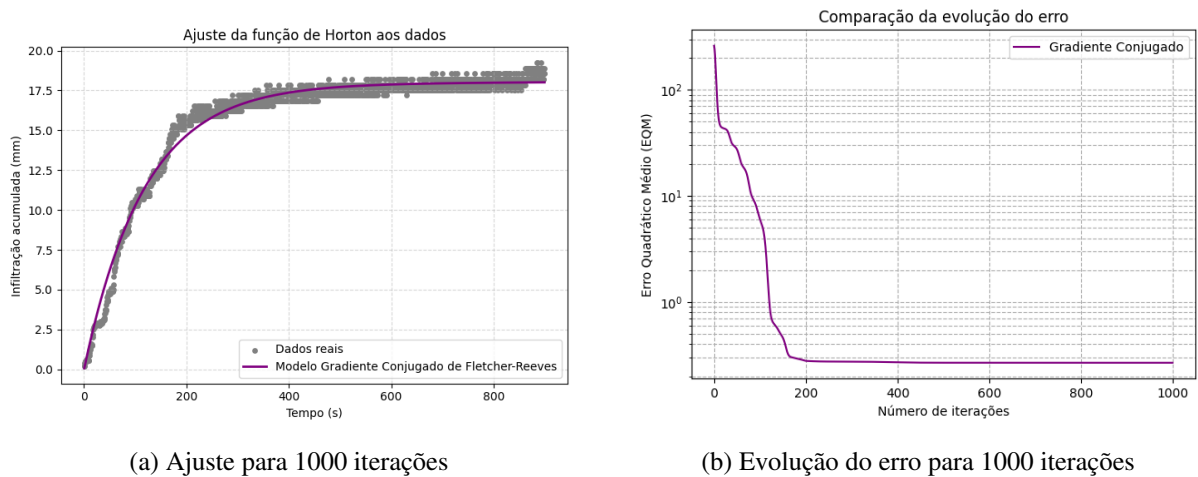
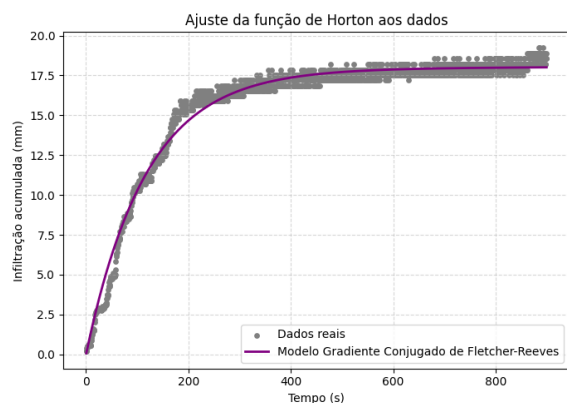
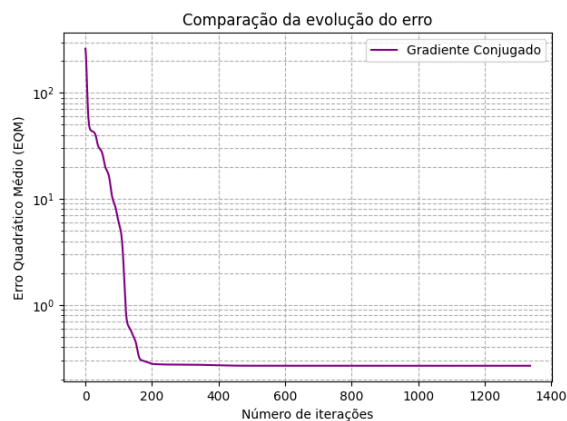


Figure C.2: Resultados do Método Gradiente Conjugado de Fletcher-Reeves com 1000 iterações



(a) Ajuste para 5000 iterações



(b) Evolução do erro para 5000 iterações

Figure C.3: Resultados do Método Gradiente Conjugado de Fletcher-Reeves com 5000 iterações

D Comparação dos Métodos

Table D.1: Comparação dos métodos de otimização com diferentes iterações

Método	Iterações	f_0	f_c	k	EQM (mm ²)	Tempo (s)
Gradiente	200	0.016326	0.030469	0.010181	39.730094	0.033322
	1000	0.051139	0.023985	0.010031	23.863481	0.198631
	5000	0.126521	0.000070	0.006938	0.599208	1.057050
	10000	0.134198	-0.002292	0.006913	0.370324	1.860692
BFGS	200	0.141881	0.010047	0.010486	2.846678	1.683317
	1000	0.169155	0.003569	0.010495	0.444365	9.968285
	5000	0.169155	0.003569	0.010495	0.444365	49.507791
	10000	0.169155	0.003569	0.010495	0.444365	100.862605
Newton (sem Armijo)	1	0.180197	$< 1 \times 10^{-6}$	0.009911	0.658829	$< 1 \times 10^{-6}$
Newton (com Armijo)	1	0.180197	$< 1 \times 10^{-6}$	0.009911	0.658829	$< 1 \times 10^{-6}$
Grad. Conjugado (FR)	200	0.146633	-0.000051	0.008112	0.279328	0.033391
	1000	0.152546	0.000116	0.008511	0.267874	0.196237
	5000	0.152574	0.000118	0.008513	0.267874	0.232279
	10000	0.152574	0.000118	0.008513	0.267874	0.299927