



Utilizando o LibreOffice Calc para modelagem não-linear

Por Rodolfo Marcondes Silva Souza

A utilização do computador e softwares em diversas áreas têm sido cada vez mais frequente nos dias atuais, sobretudo no meio acadêmico. Embora cada área/setor tem as suas especificidades, praticamente todos os computadores pessoais e notebooks têm algum pacote “office” instalado com inúmeras ferramentas para criação de textos, planilhas e apresentações.

Em algumas áreas onde são realizadas pesquisas, pode ser necessário fazer algum tipo de modelagem para ajudar a entender e explorar a interação entre duas ou mais variáveis, por exemplo, decréscimo da população de insetos em função da aplicação de

um determinado inseticida. Existem vários softwares que podem ser utilizados para resolver modelos não-lineares, como R (<http://cran.r-project.org/>) e o Scilab (<http://www.scilab.org/>), mas é necessário entender um pouco de lógica de programação, bem como a sintaxe do programa. O LibreOffice Calc dispõe de uma ferramenta na forma de extensão que pode ser utilizada para tal finalidade - o Solver.

Após um pequeno período como revisor e leitor da revista, vi que a grande parte dos artigos eram mais voltados para área de informática, então resolvi tentar escrever algo que demonstrasse a aplicação do LibreOffice

numa área um pouco mais específica. Nesse artigo demonstrarei uma das diversas formas em que o Solver pode ser aplicado. Para isso, vou utilizar dados de infiltração da água no solo e ajustar o modelo matemático de Haverkamp et al. (1994):

$$I(t) = S\sqrt{t} + [aS^2 + bK_s]t$$

Sendo:

I a infiltração acumulada [mm] em função do tempo **t** [s], **S** a sorvidade do solo [mm s-0,5] e **KS** a condutividade hidráulica do solo [mm s-1], **a** e **b** são constantes respectivamente iguais a 0,025 e 0,467.

O objetivo nesse modelo é, a partir dos dados de infiltração observados, fazer o ajuste do modelo matemático para obter os valores dos parâmetros S e Ks que fornecem informações hidráulicas do solo.

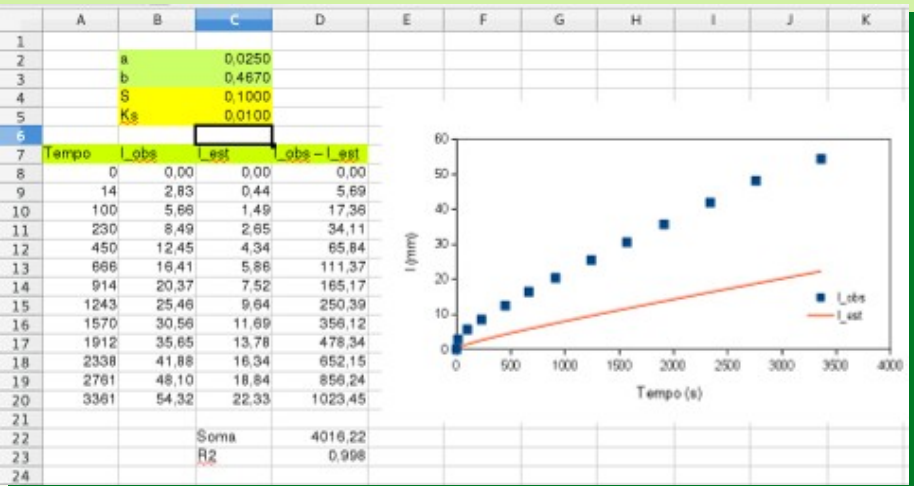
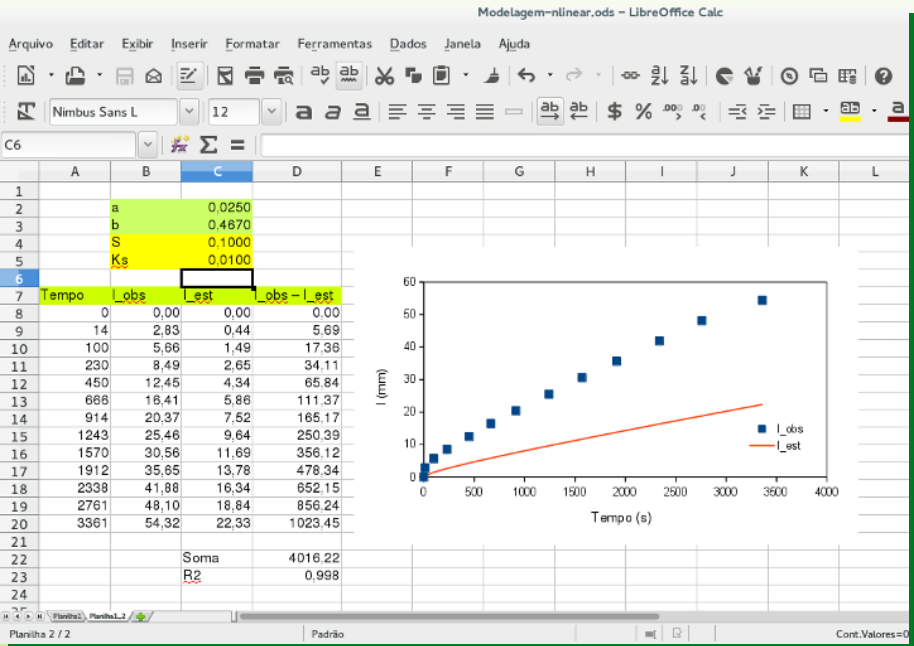
Antes de mostrar como organizar os dados na planilha, você precisa saber que o Solver vai resolver a equação pelo método dos mínimos quadrados, ou seja, a ferramenta vai simular os valores para os parâmetros da equação que deseja

saber e calcular o erro quadrado. O programa vai parar quando a soma do erro quadrado for a menor possível. Nesse artigo utilizei a versão 4.2 do LibreOffice. Sabendo disso vamos lá.

Montando a planilha

Nas colunas A e B, começando na linha 7, estão os valores do tempo e da infiltração observada (I_obs), respectivamente. Nas colunas B e C entre as linhas 2 e 5 coloquei os parâmetros do modelo de Haverkamp et al. (1994), lembrando que “a” e “b” são constantes e não vão ser alteradas durante os cálculos. Nas células C4 e C5 têm os valores que eu coloquei (“chute inicial”).

As duas figuras abaixo são uma visão geral de como a planilha deve ficar nesse tipo de aplicação do Solver. Também coloquei um gráfico com os dados observados (pontos azuis) e com a linha dos dados que serão estimados pelo modelo (linha laranja).



Na coluna C, iniciando na linha 7 são os valores estimados pelo modelo de Haverkamp et al. (1994), onde simplesmente escrevi a equação na planilha conforme a figura abaixo:

RQUAD		=(\$C\$4*RAIZ(A9))+(\$C\$2*\$C\$4^2+\$C\$3*\$C\$5)*A9						
	A	B	C	D	E	F	G	H
1								
2		a	0,0250					
3		b	0,4670					
4		S	0,1000					
5		K _s	0,0100					
6								
7	Tempo	l_obs	l_est	l_obs - l_est				
8	0	0,00	0,00	0,00				
9	14	2,83	0,44	2,39				
10	100	5,66	1,49	4,17				

Os síffões (\$) são para manter as células fixas, ou seja, quando arrastar a equação para baixo somente vai alterar a linha da coluna A (tempo); os parâmetros “a”, “b”, S e K_s permanecerão os mesmos. A coluna dos dados estimados deve ir até a mesma linha onde termina os dados observados, nesse caso até a linha 20.

Na coluna D, faça a diferença entre os valores observado e estimado ao quadrado, devendo atualizar até a linha 20. Veja a demonstração abaixo.

RQUAD		=(C9-B9)^2				
	A	B	C	D	E	F
1						
2		a	0,0250			
3		b	0,4670			
4		S	0,1000			
5		K _s	0,0100			
6						
7	Tempo	l_obs	l_est	l_obs - l_est		
8	0	0,00	0,00	0,00		
9	14	2,83	0,44	2,39		
10	100	5,66	1,49	4,17		
11	230	8,49	2,65	5,84		

Na célula D22 coloque a função soma (**=SOMA(D8:D20)**) para que sejam somados os valores das “diferenças entre os valores observados e estimados ao quadrado”.


RQUAD					
	A	B	C	D	E
1					
2		a	0,0250		
3		b	0,4670		
4		S	0,1000		
5		Ks	0,0100		
6					
7	Tempo	<u>l_obs</u>	<u>l_est</u>	<u>l_obs - l_est</u>	
8	0	0,00	0,00	0,00	
9	14	2,83	0,44	5,69	
10	100	5,66	1,49	17,36	
11	230	8,49	2,65	34,11	
12	450	12,45	4,34	65,84	
13	666	16,41	5,86	111,37	
14	914	20,37	7,52	165,17	
15	1243	25,46	9,64	250,39	
16	1570	30,56	11,69	356,12	
17	1912	35,65	13,78	478,34	
18	2338	41,88	16,34	652,15	
19	2761	48,10	18,84	856,24	
20	3361	54,32	22,33	1023,45	
21					
22			Soma	=SOMA(D8:D20)	
23			R ²	0,998	
24					

Na célula D23 eu coloquei a função para mostrar o R² do ajuste (**=RQUAD(B8:B20;C8:C20)**), que dá uma ideia se o modelo ficou bem ajustado. Vale ressaltar que o R² não deverá ser o único parâmetro estatístico para avaliar a qualidade do ajuste. Dependendo do caso, outros testes/métodos estatísticos devem ser empregados.

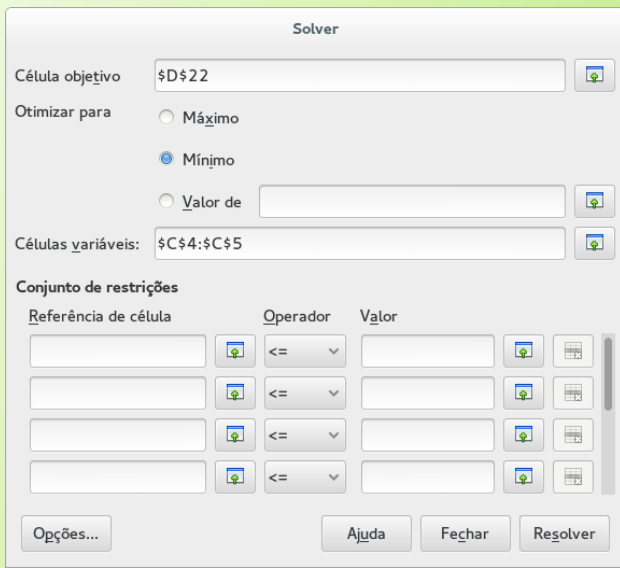
	A	B	C	D	E
1					
2		a	0,0250		
3		b	0,4670		
4		S	0,1000		
5		K _s	0,0100		
6					
7	Tempo	I _{obs}	I _{est}	I _{obs} - I _{est}	
8	0	0,00	0,00	0,00	
9	14	2,83	0,44	2,39	
10	100	5,66	1,49	4,17	
11	230	8,49	2,65	5,84	
12	450	12,45	4,34	8,11	
13	666	16,41	5,86	10,55	
14	914	20,37	7,52	12,85	
15	1243	25,46	9,64	15,82	
16	1570	30,56	11,69	18,87	
17	1912	35,65	13,78	21,87	
18	2338	41,88	16,34	25,54	
19	2761	48,10	18,84	29,26	
20	3361	54,32	22,33	31,99	
21					
22			Soma	187,27	
23			R2	=RQUAD(B8:B20;C8:C20)	
24					

Resolvendo o modelo

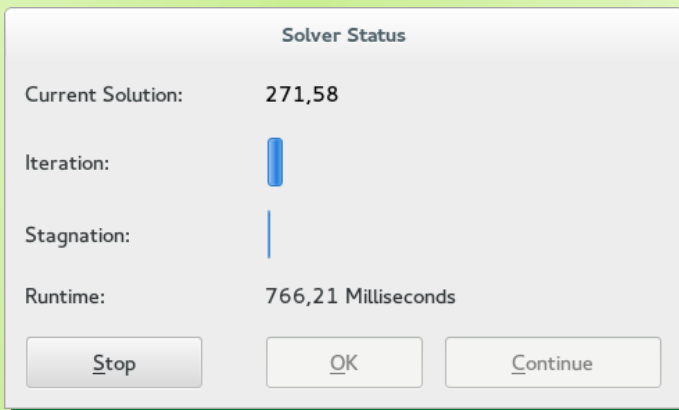
Para abrir o Solver vá em **Ferramentas → Solver...**

A janela será aberta para que sejam definidos os parâmetros do Solver. Para escolher as células clique no botão .

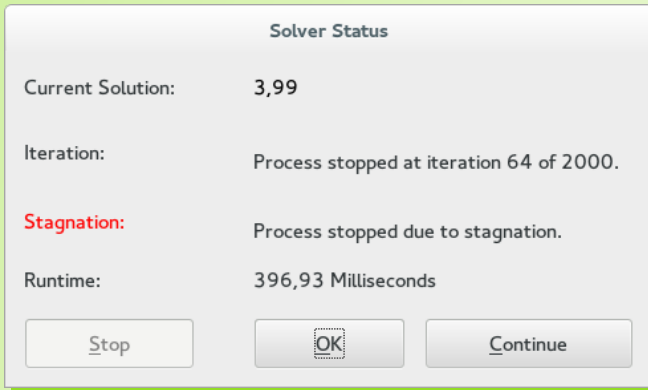
Em **Célula objetivo** escolha a célula onde está a soma das diferenças ao quadrado (Célula D22). Em **Otimizar para** marque a opção **Mínimo**. Em **Células variáveis:** escolha as células onde estão os valores de S e K_s, respectivamente, C4 e C5. Nessa última opção você clica, segura e arrasta o cursor do para escolher as duas ao mesmo tempo. No final (nessa aplicação) as opções do Solver devem ficar como mostrado na figura abaixo:



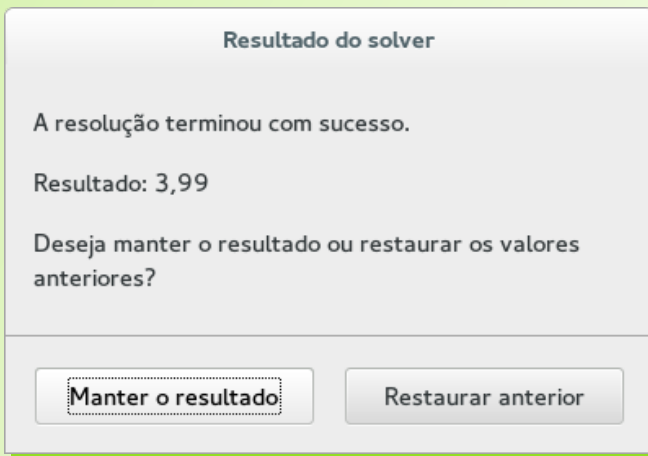
Clique em **Resolver** e aguarde um pouco.



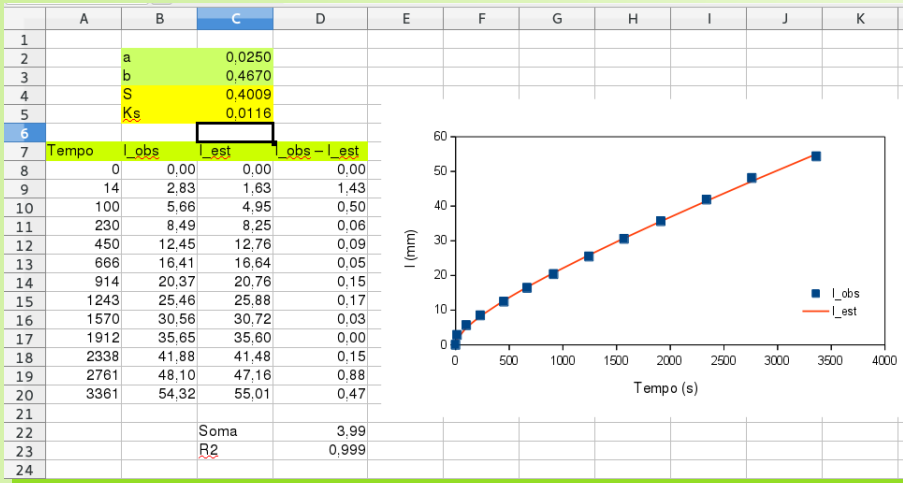
Quando o programa encontrar o menor valor ele para, mas você pode insistir e pedir para que sejam feitas mais tentativas clicando em **Continue**. Caso você julgue que está bom a solução encontrada clique em **OK**.



Nesse caso o menor valor da soma das diferenças ao quadrado foi de 3,99. Clique em **Manter o resultado**.



Observe que o programa alterou os valores das células C4 (Sorvidade) e C5 (Condutividade hidráulica). Conseqüentemente os valores estimados pelo modelo (coluna I_est) e R² também mudaram. No gráfico, a linha laranja (valores estimados) passou a “tocar” todos os pontos dos valores observados, o que indica que o modelo ficou bem ajustado.



O programa calculou os parâmetros S e K_s até encontrar a solução desejada (menor soma das diferenças ao quadrado), de forma que o parâmetro S passou a ser igual a 0,4009 e K_s igual a 0,0116.

S	0,4009
Ks	0,0116

Considerações finais

A interpretação dos resultados finais é algo um pouco específico de cada área/modelo etc. Como o objetivo aqui era apenas mostrar uma aplicação do LibreOffice Calc para resolver um modelo não-linear, não fiz a interpretação dos resultados obtidos, mas garanto que nesse exemplo, o ajuste do modelo ficou muito bom.

O Solver depende de valores iniciais dos parâmetros que você deseja conhecer, nesse caso S e K_s , para começar a resolver o modelo.

Não deixe as células dos parâmetros que entrarão na opção “Células variáveis:” em branco. Quando mais próximo forem esses valores iniciais, “o chute”, mais rápido e melhor será resolvido o modelo.

Existem inúmeras aplicações da ferramenta Solver. Nesse caso mostrei uma aplicação que utilizo na área de Física do Solo (Agronomia). Você pode querer resolver um modelo para ver a taxa de decaimento da radioatividade de um determinado material ou taxa de decrescimento de uma população de insetos em função da esterilidade dos insetos machos para prever a nova população após um tempo X . Isso não importa! Se o modelo não for tão complexo e se você organizar os dados de forma correta, conseguirá resolver no LibreOffice Calc com o Solver.



Rodolfo Marcondes Silva Souza - Engenheiro Agrônomo, Mestre em Produção Vegetal pela Universidade Federal Rural de Pernambuco - UFRPE e doutorando em Tecnologias Energéticas e Nucleares na Universidade Federal de Pernambuco - UFPE. Revisor na revista LibreOffice Magazine e usuário de software livre desde 2008.