

IMPLEMENTAÇÃO DO ALGORITMO DE BOX E HILL PARA A DISCRIMINAÇÃO ENTRE MODELOS COMPETITIVOS.

Roberto Francisco Marques Mendes

Aluno da Universidade Braz Cubas - Bolsa PIBIC/CNPQ

Orientador: Dr. Ralf Gielow, Pesquisador, Divisão de Ciências Meteorológicas

O algoritmo de Box e Hill, com base no conceito de entropia da informação e no teorema Bayes, é um procedimento sequencial para a discriminação entre m modelos que competem para representar um determinado fenômeno ou sistema n -dimensional, assim como indica uma maneira para melhorar esta discriminação, considerando dados observacionais e respectivos erros de medida.

Assim, para cada modelo atribui-se inicialmente sua probabilidade (igual ou não às dos demais) e, dispondo de M pontos experimentais ou observacionais (M maior que o número de parâmetros em qualquer modelo), ajusta-se cada modelo a estes pontos - por regressão não linear - obtendo-se os parâmetros correspondentes e a variância de cada ajuste. Então, utilizando-se o teorema de Bayes, atualizam-se as probabilidades dos modelos. A seguir, através da maximização de uma função discriminação, determina-se o ponto para a realização de nova observação, cujo resultado - após reajuste dos parâmetros de cada modelo e de sua probabilidade -, é utilizado para melhorar a discriminação; prossegue-se assim sucessivamente, até clara discriminação em favor de um dos modelos.

A implementação do algoritmo, feita de forma amigável para o usuário, divide-se em dois módulos: o primeiro, utilizando um analisador sintático simplificado, gera um arquivo de dados referentes aos modelos, enquanto o segundo, a partir deste arquivo e dos dados observados, realiza os ajustes e determina a discriminação entre modelos, indicando também como realizar observações adicionais para melhorar a discriminação. Para os ajustes não-lineares de parâmetros, utiliza-se o algoritmo de Marquardt, modificado por Nash. Os códigos estão escritos em linguagem C e Mathematica, mas seu uso não exige conhecimento destas linguagens.

Finalmente, apresenta-se a aplicação do algoritmo à discriminação entre quatro modelos para representar a cinética química de uma reação $A \rightarrow B$, em que a concentração de A depende da temperatura e do tempo de reação, chegando-se a uma perfeita discriminação, mesmo quando se parte de probabilidades a priori completamente erradas, deste modo demonstrando a robustez do método.