"UM ESTUDO DE SIMULAÇÃO PARA AVALIAÇÃO DO COMPORTAMENTO DO MODELO DE MITSCHERLICH"

MARIA APARECIDA PERRE[a]
ELIZA ALVES LIMA[b]
CLEUSA ROCHA ASANOME[a]
JACINTA LUDOVICO[a]

RESUMO

A proposta deste trabalho é realizar um estudo do grau de não linearidade do modelo da primeira Aproximação de Mitscherlich, ou seja:

$$Y_i = \alpha \{ 1 - exp [-(X_i + \beta) \gamma] \} + e_i.$$

O objetivo é apresentar, de forma simples, alguns procedimentos que possam auxiliar os pesquisadores interessados em ajuste de modelos não lineares e em sua avaliação, para que as inferêneias realizadas realmente tenham o grau de confiabilidade desejado. A aplicação da metodologia foi realizada através do uso dos dados de Perre (1978). Na estimação dos parâmetros utilizou-se o método de Gauss-Newton, e para a avaliação das propriedades dos estimadores levou-se a efeito um estudo de simulação, gráficos e alguns testes. Com a finalidade de atingir os objetivos propostos, todos os procedimentos computacionais necessários à realização da metodologia foram executados no Núcleo de Processamento de Dados da Universidade Estadual de Londrina. Utilizou-se o Statistical Analysis System (S.A.S) e todos os complementos necessários foram programados em linguagem S.A.S,

PALAVRAS-CHAVE: *Regressão não-linear; Modelo de Mitscherlich.*

1 - INTRODUÇÃO

Um modelo de regressão se diz não-linear quando não é função linear dos seus parâmetros. Segundo DRAPER& SMITH (1966), quando informações teóricas com relação ao modelo levam a um modelo intrinsicamente não linear, deve-se, sempre que possível, preferir ajustar tal modelo em lugar de um modelo linear, talvez mais diferente da realidade.

Muitas vezes, nas aplicações, têm-se determinadas in-

[a] Departamento de Matemática Aplicada/CCE - Universidade Estadual de Londrina.
[b] Núcleo de Processamento de Dados/NPD — Universidade Estadual de Londrina.

formações ou suposições sobre o modelo, que podem ser representadas por um sistema de equações diferenciais, sendo que o modelo surge como solução desse sistema.

Este é o caso, entre outros, do modelo de Mitscherlich. Tal modelo é comumente usado na área de agricultura.

Nas últimas décadas houve progresso muito grande nas técnicas e algoritmos de otimização não linear, existindo uma vasta literatura sobre os mais variados métodos para numerosos tipos de problemas. Entretanto, segundo RATKOWSKY (1983), apesar da grande variedade de métodos existentes para obtenção de estimativas dos parâmetros de modelos não lineares, o estudo de suas propriedades "ainda está na sua infância".

O que normalmente tem ocorrido é que, ao ajustar um modelo não linear, faz-se toda inferência através de resultados conhecidos da teoria dos modelos lineares. Porém por não se conhecer o comportamento distribucional dos parâmetros dos modelos não-lineares a aplicação desses resultados pode não ser adequada.

É necessário estudar o comportamento do modelo e, segundo RATKOWSKY (1983), isso pode ser feito através de estudos de simulação. Esse procedimento poderá indicar se o grau de não linearidade é pequeno o suficiente para justificar a utilização dos resultados usuais da teoria dos modelos lineares como aproximação dos não lineares.

Este trabalho objetiva efetuar um estudo de simulação para analisar as propriedades distributivas dos estimadores dos parâmetros do modelo de Mitscherlich e, assim, analisar o comportamento não-linear desse modelo.

2 - MODELO

O modelo a ser estudado conhecido por Primeira Aproximação da Lei de Mitscherlich, é

$$Y_i = \propto [\, 1 - \exp(-(X_i + \beta)\ \gamma)\,] + e_i$$

onde

Y_i = variável dependente

X_i = variável independente

$\theta = (\propto \beta \gamma)'$, vetor de parâmetros

e_i = erros aleatórios independentes e com distribuição normal de média zero e variância σ^2.

3 - ESTIMAÇÃO DOS PARÂMETROS

Existem muitos métodos de estimação de parâmetros de modelos não lineares. Usaremos o método de Gauss Newton. Uma descrição detalhada desse método pode ser encontrada em BARD (1974).

4 -AVALIAÇÃO DO COMPORTAMENTO NÃO LINEAR DO MODELO

Quando o modelo de regressão é linear nos parâmetros, os estimadores de mínimos quadrados são não viesados, tem variância mínima e são normalmente distribuídos, é claro, independentemente do tamanho da amostra. Porém quando o modelo é não linear, essas propriedades são válidas somente assintóticamente.

4.1 — Propriedades dos Estimadores

Consideremos o modelo de regressão não linear

$$Y_i = f(X_i, \theta) + e_i$$

Sob certas condições de regularidade, os estimadores de mínimos quadrados são assintótícamente não viesados, eficientes e normalmente distribuídos, isto é,

$$\hat{\theta} \sim N(\hat{\theta}, D(\hat{\theta})),$$

onde

$$D(\hat{\theta}) = (J'J)^{-1}\ \sigma^2$$

e J é o Jacobiano da função, ou, podemos dizer que:

D (q) é a inversa da matriz de informação de Fisher.

No caso de amostras pequenas, as propriedades dos estimadores de mínimos quadrados são desconhecidas. Entretanto, a medida que o tamanho da amostra aumenta, os resultados assintóticos vão se tornando mais aplicáveis.

Na prática, qual deve ser o tamanho da amostra necessário para que esses resultados sejam aproximados? Essa questão é muito complicada, segundo RATKOWSKY (1983) uma das melhores maneiras de fazer tal avaliação *é* também do modelo utilizado, pois existem modelos para os quais essas propriedades constituem uma boa aproximação mesmo quando as amostras são muito pequenas, enquanto que, para outros, essas aproximações não são adequadas nem para amostras muito grandes.

Quando *9,* o estimador de mínimos quadrados de q, tem um viés pequeno, uma distribuição próxima da normal e as variâncias reais são próximas daquelas dadas pela matriz de dispersão assintótica, dizemos que q exibe um comportamento "próximo do linear". Quanto mais próximo do linear for o comportamento de um estimador, mais válidos serão os vários testes e intervalos de confiança que fazem analogia com os modelos lineares.

Devemos avaliar se o modelo de interesse tem um comportamento próximo do linear. Segundo RATKOWSKI (1983) uma das melhores maneiras de fazer tal avaliação é através de estudo de simulação.

4.2 — Estudo de Simulação

Num estudo típico de simulação, a distribuição dos resíduos e_j é especificada e valores e1, *e2, ... e* n são gerados pseudo aleatoriamente através de uma sub-rotina de computador. Um valor para q*é* fixado e produz-se assim um conjunto de n observações Y_i, onde

$$Y_i = f(X_i, \theta) + ei$$

No nosso caso, ei ~ N (0, o^2) e os valores de θ e o^2 usados são $\hat{\theta}$ e s^2, a estimativa de mínimos quadrados e va-

 Semina, 10(4):221-224, 1989

riância residual, respectivamente, obtidos do conjunto original de dados.

Simulamos N desses conjuntos (de n observações) e para cada conjunto ajustamos o modelo por mínimos quadrados.

Se ocorrer convergência para cada um desses conjuntos de dados, teremos N valores de estimativas do tipo.

$$\hat{\theta}_i = (\hat{\theta}_{i1}, \hat{\theta}_{i2}, \ldots, \hat{\theta}_{ip}), i = 1,2,\ldots,N.$$

A partir dessas estimativas devemos examinar a distribuição conjunta de $\hat{\theta}_i$. Entretanto a análise de uma distribuição conjunta é tarefa muito complicada, e utilizamos então os resultados das análises das distribuições marginais de $\hat{\theta}_i$, na esperança de que através desse procedimento se possa avaliar aproximadamente o comportamento conjunto.

A análise das distribuição marginais com base nas N estimativas dos parâmetros correspondentes pode ser feita através de uma análise descritiva, como também através de testes.

Apresentamos a seguir algumas medidas importantes para análise das distribuições.

Calculamos o excesso de variância (%) que é dada por

$$E_v = \frac{\tilde{s}_i^{\,2} - \hat{s}_i^{\,2}}{\hat{s}_i^{\,2}} \cdot 100$$

onde

$\hat{s}_i^2$ = é o i-ésimo elemento da diagonal da matriz de dispersão estimada (considerada real),

$\tilde{s}_i^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{j=1}^{N} (\hat{\theta}_{ij} - \hat{\theta}_i)$, variância amostral,

$i = 1,2,\ldots, p$.

Esse resultado, E_v, representa portanto a porcentagem na qual $\tilde{s}_j^2$ excede ou não a variância assintótica.

Podemos também obter uma estimativa da porcentagem do viés de θ_i que é dada pela diferença entre a média amostral, $\hat{\theta}_i$, e o "verdadeiro" valor do parâmetro, θ_i, ou seja:

$$(\%)\ \text{viés} = \frac{\hat{\theta}_i - \hat{\theta}_i}{\hat{\theta}_i} \cdot 100,$$

Para verificar se viés é nulo utilizamos a estatística

$$Z_i = \frac{\hat{\theta}_i - \hat{\theta}_i}{\sqrt{\frac{\hat{s}_i^2}{N}}}\ ; \text{considerando } Z \sim N(0,1)$$

A suposição de variância mínima pode ser verificada comparando-se a variância $\tilde{s}_i^2$ com a variância assintótica através da estatística

$$\chi_0^2 = \frac{(N-1)\,\tilde{s}_i^2}{\hat{s}_i^2}$$

onde

$\chi_0^2 \sim \chi^2_{(N-1)}$. Como N é grande, usamos a aproximação normal

$$Z = \sqrt{2\chi^2} - \sqrt{2(N-1) - 1}$$

Se os resultados forem todos significativos então existem evidencias de que os estimadores de mínimos quadrados não terão um comportamento "próximo do linear".

5 — RESULTADOS E DISCUSSÃO

Trabalhamos com os dados de PERRE (1978) e inicialmente obtivemos as estimativas dos parâmetros do modelo através do método de Gauss Newton.

A convergência, foi obtida após quinze iterações e as estimativas são:

$$\hat{\alpha} = 2{,}0566\ ;\ \hat{\beta} = 0{,}4221\ ;\ \hat{\gamma} = 1{,}1186$$

A matriz estimada de dispersão assintótica é

$$\hat{D}(\theta) = \begin{bmatrix} 7{,}34 \times 10^{-4} & 5{,}3 \times 10^{-4} & -1{,}82 \times 10^{-4} \\ & 9{,}73 \times 10^{-4} & -21{,}58 \times 10^{-4} \\ & & 62{,}7 \times 10^{-4} \end{bmatrix}$$

e o

$$QMR = 4{,}215 \times 10^{-4}$$

Geramos 1000 conjuntos de dados onde admitimos $e_i \sim N(0\,; 4{,}2145 \cdot 10^{-4})$ e

$$Y_i = 2{,}0566\,[(1\text{-}\exp(-1{,}1186(0{,}4221 + X_i))] + e_i$$

Cada novo conjunto de dados gerado foi justado pelo método de quadrados mínimos e obteve-se uma nova estimativa de $\hat{\theta}$ de θ.

As médias e variâncias amostrais para os estimadores de cada parâmetro foram obtidas e encontram-se na Tabela 1.

TABELA 1 – Média e Variância Amostral dos Parâmetros.

PARÂMETRO	MÉDIA	VARIÂNCIA
$\hat{\alpha}$	2,05825	0,000753845
$\hat{\beta}$	0,4223605	0,00100317
$\hat{\gamma}$	1,12051	0,00620143

Calculamos os viéses da média dos parâmetros e aplicamos o teste para verificar se são nulos. Os resultados foram os seguintes:

TABELA 2 – Viés da Média dos Parâmetros

PARÂMETRO	VIÉS (%)	Z
$\hat{\alpha}$	0,08	1,91 (n.s)
$\hat{\beta}$	0,36	1,55 (n.s)
$\hat{\gamma}$	0,17	0,78 (n.s)

Na Tabela 3 podemos observar os valores relativos ao excesso da variância e seu teste.

TABELA 3 – Excesso de Variância dos Parâmetros

PARÂMETRO	EXCESSO DE VARIÂNCIA %	Z
$\hat{\alpha}$	2,7	0,61 (n.s)
$\hat{\beta}$	3,1	0,698 (n.s)
$\hat{\gamma}$	– 1,09	– 0,23 (n.s)

Aplicando-se o Teste de Kolmogoroff para normalidade encontramos o seguinte.

TABELA 4 – Teste de Normalidade

PARÂMETRO	D	α
$\hat{\alpha}$	0,0296	0,033
$\hat{\beta}$	0,0308	0,021
$\hat{\gamma}$	0,0243	>.15

Podemos dizer que os estimadores dos parâmetros se aproximam de uma distribuição normal, sendo que $\hat{\beta}$ e $\hat{\gamma}$ apresentam um comportamento um pouco pior. Pode-se ver isso através do histograma onde se nota certa assimetria nas suas distribuições.

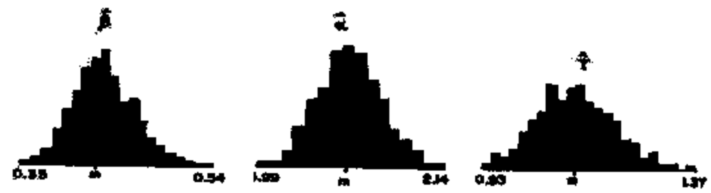

FIGURA 1 – Histogramas dos resultados de simulação de $\hat{\beta}$, $\hat{\alpha}$ e $\hat{\gamma}$

Porém à luz desses resultados podemos supor que para esse conjunto de dados os estimadores dos parâmetros apresentam comportamento próximo de linear.

Os dados utilizados no desenvolvimento deste trabalho (Perre-1978) constam abaixo:

X	0	1	2	3
Y	0,775	1,630	1,936	2,002

ABSTRACT

The objective of this paper is to show the results of the study on the non-linearity degreee of the Mitscherlich model. Some procedures are presented in a simple way in order to help researchers in their needs in adjusting and in evaluating non-linear models with a high degree of reliability in their inferences. The Gauss-Newton method has been used in the estimation of parameters. Simulations, diagrams and tests have been used to evaluate the characteristics of the estimators. To achieve the proposed objectives, all needed computational procedures have been executed in the Computer Center of Londrina State University. The data, jrom Perre (1978), have been submitted to StatisticalAnalysis System (SAS).

KEY WORDS: *Non-linear regression; Mitscherlich model.*

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1 – BARD, Y. *Nonlinear parameter estimation.* New York Academic Press, 1974, 342p.

2 – DRAPER, N.R. & SMITH, H. *Applied regression analysis.* Nova York, John Wiley, 1966. 407p.

3 – RATKOWSKY, A.D.. *Nonlinear Regression Modeling.* New York, Marcel Dekker, 1983. 276p.

4 – PERRE, M.A.. *Segunda Aproximação de Mitscherlich, $Y = A(1-10^{-c(x+b)}\ 10^{-k(x+b)^2})$ aplicada à adubação mineral.* Piracicaba, 1978. 98 p. Tese (Dissertação de mestrado). Escola Superior de Agricultura Luiz de Queiroz.

Recebido para publicação em 31/10/89