

Curso

# Modelos de Regressão Não Linear

Walmes Marques Zeviani

Laboratório de Estatística e Geoinformação (LEG)  
Departamento de Estatística (DEST)  
Universidade Federal do Paraná (UFPR)

II Conest - 07-09/11 - Curitiba/PR

# Agradecimentos

Ao PET Estatística (programa de educação tutorial);  
À comissão organizadora;  
Ao DEST e Setor de Ciências Exatas.

# Roteiro

- 1 Modelos de Regressão e Regressão não linear
- 2 Inferência e verossimilhança
- 3 Fundamentos dos MRNL
- 4 Parametrizações e reparametrizações
- 5 Práticas computacionais no ajuste de MRNL
- 6 Inferência sobre funções dos parâmetros
- 7 Medidas de curvatura
- 8 Modelos em delineamentos experimentais
- 9 Modelos de efeitos aleatórios
- 10 Modelagem a variância

Modelos de regressão

# A ideia

## A ideia

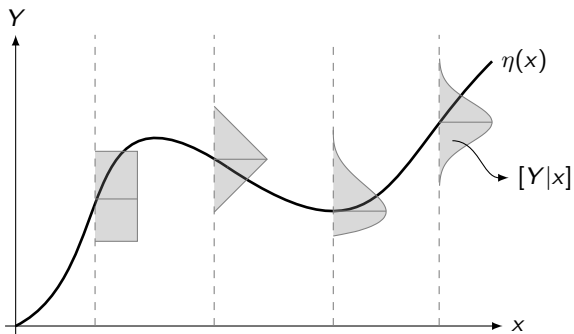


Figura 1: Representação esquemática genérica de um modelo de regressão.

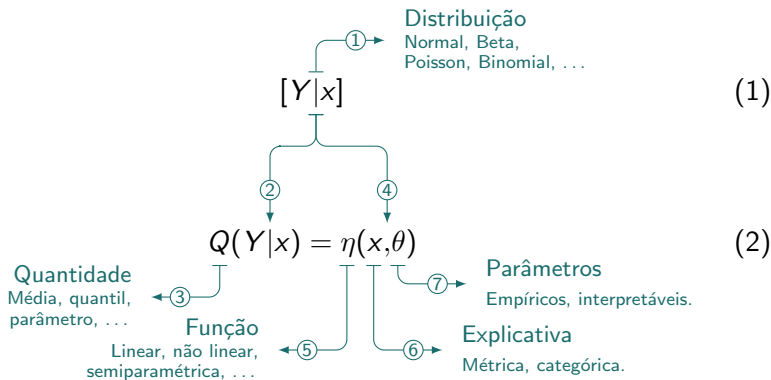


Figura 2: Representação esquemática da construção de um modelo de regressão.

Modelos de regressão

# Regressão linear simples

## Regressão linear simples

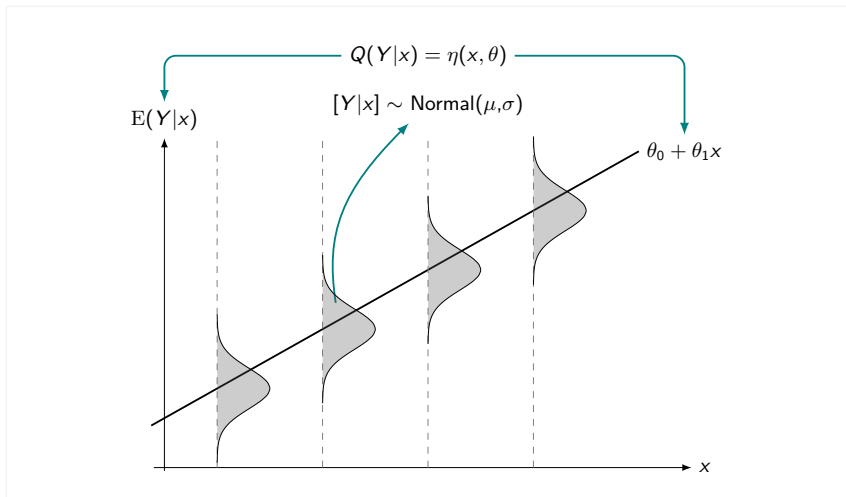


Figura 3: Modelo de regressão linear gaussiano.



Modelos de regressão

# Regressão não linear

## Regressão não linear

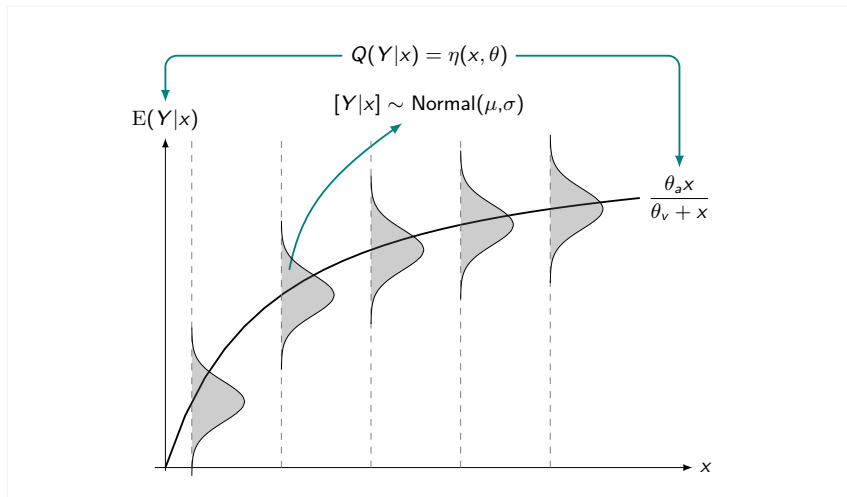


Figura 4: Modelo de regressão não linear gaussiano.

Modelos de regressão

# GLM, a família exponencial e outras

## GLM, a família exponencial e outras

- Também são modelos de regressão não linear;
- Distribuições da família exponencial (Binomial, Poisson, gama, normal, ...)
- Uma função **não linear** da esperança é ligada ao preditor linear

$$g(E(Y|x)) = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_p x_p = \eta(x, \beta).$$

- Funções de ligação:

Distribuição	$g(E(Y x))$	$E(Y x)$	função de ligação
Binomial	$\log\left(\frac{p}{1-p}\right)$	$\frac{1}{1+\exp\{-(\beta_0+\beta_1x)\}}$	logit
Poisson	$\log(\lambda)$	$\exp\{\beta_0 + \beta_1x\}$	log
Gama	$\frac{1}{\mu}$	$(\beta_0 + \beta_1x)^{-1}$	inversa
Normal	$\mu$	$\beta_0 + \beta_1x$	identidade

Modelos de regressão

# Regressão binomial - GLM

## Regressão binomial - GLM

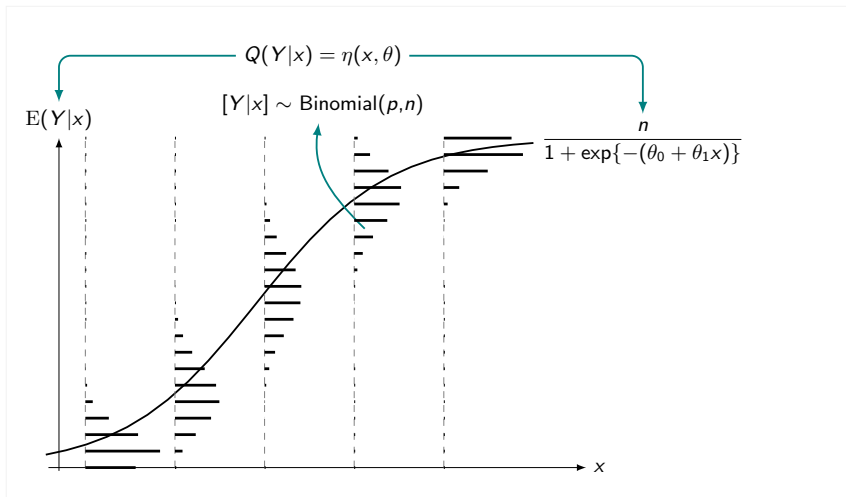


Figura 5: Modelo regressão binomial.

Modelos de regressão

# Regressão Poisson - GLM

## Regressão Poisson - GLM

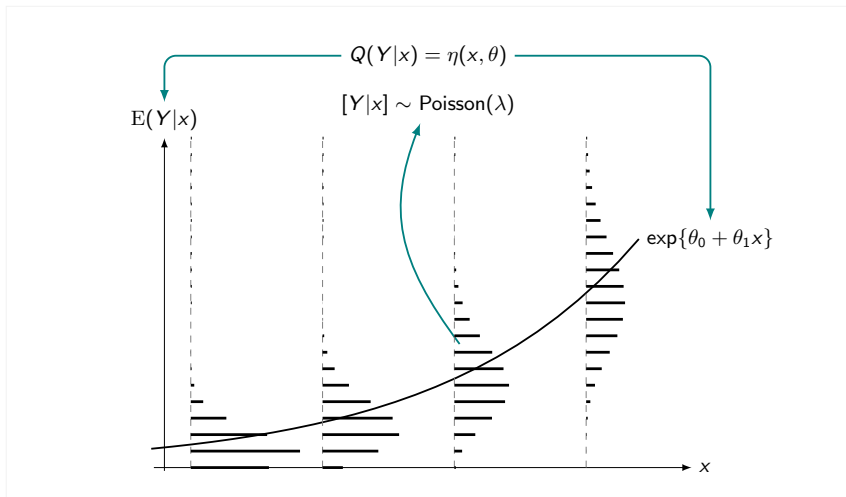


Figura 6: Modelo de regressão Poisson.



Modelos de regressão

# Regressão beta

## Regressão beta

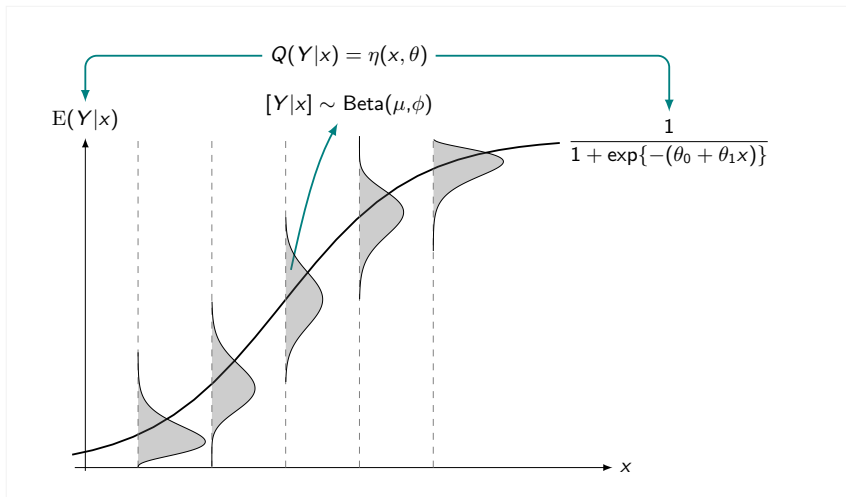


Figura 7: Modelo de regressão beta.

Modelos de regressão

# Regressão para a média e variância

## Regressão para a média e variância

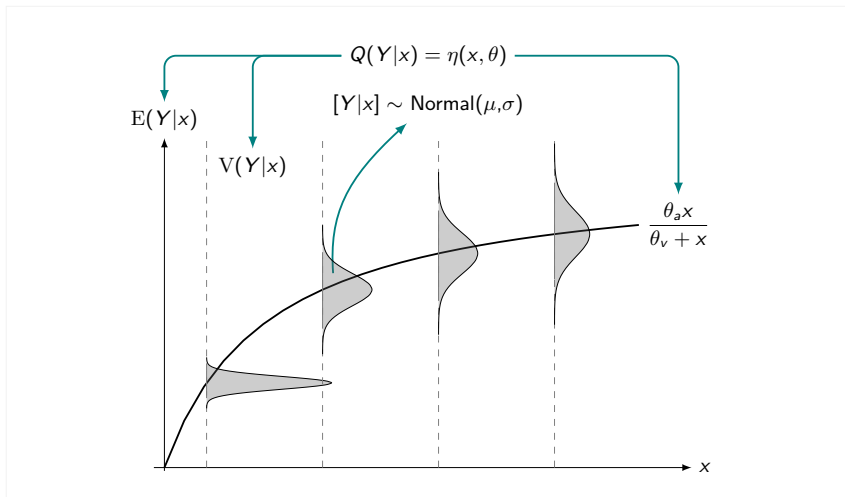


Figura 8: Modelo de regressão não linear gaussiano heterocedástico.

Modelos de regressão

# Fatores de efeito aleatório

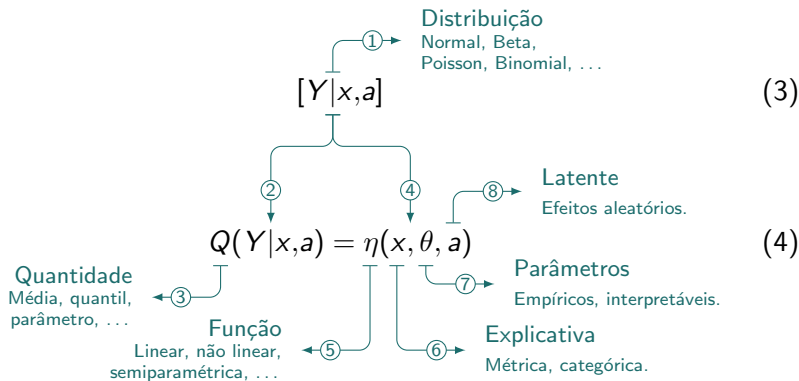


Figura 9: Representação esquemática da construção de um modelo de regressão com efeitos aleatórios.

## Regressão não linear com efeitos aleatórios

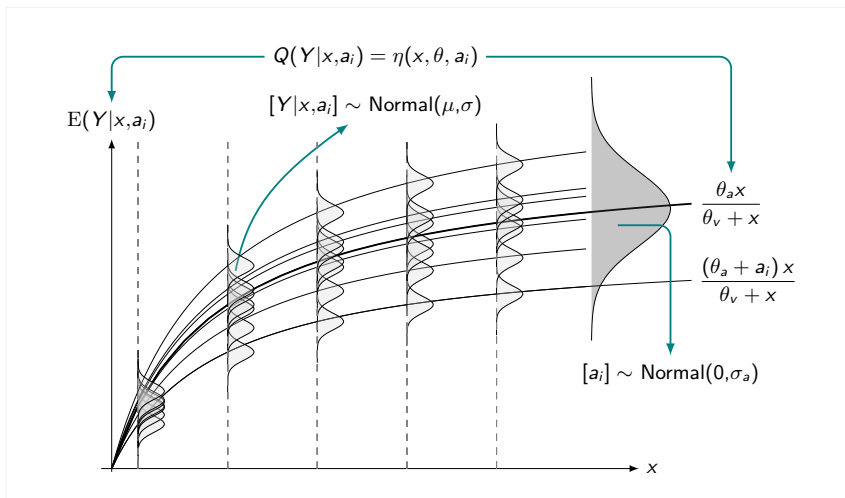


Figura 10: Modelo não linear de efeitos aleatórios.

# Modelos de regressão não linear



Modelos de regressão não linear

## Definição e motivação

## Definição

### Modelo linear nos parâmetros

$$\eta(x, \theta) = \theta_0 + \theta_1 x + \theta_2 x^2. \quad (5)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial \theta_0} = 1, \quad \frac{\partial \eta}{\partial \theta_1} = x, \quad \frac{\partial \eta}{\partial \theta_2} = x^2.$$

### Modelo não linear nos parâmetros

$$\eta(x, \theta) = \theta_a(1 - \exp\{-\theta_e(x - \theta_c)\}). \quad (6)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial \theta_a} = 1 - \exp\{-\theta_e(x - \theta_c)\}$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial \theta_e} = -\theta_a(\theta_c - x) \exp\{-\theta_e(x - \theta_c)\}$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial \theta_c} = -\theta_a \theta_e \exp\{-\theta_e(x - \theta_c)\}.$$

# Motivação

## Benefícios

- Têm sustentação baseado em princípios mecânicos ou informações prévias;
- Parâmetros são interpretáveis e de interesse para o pesquisador;
- Podem ser feitas previsões fora do domínio observado de  $x$ ;
- São parsimoniosos;

## Custos

- Requerem procedimentos iterativos de estimação;
- Métodos de inferência são aproximados;

Modelos de regressão não linear

# Propriedades da função e interpretação dos parâmetros

## Pontos característicos e formas

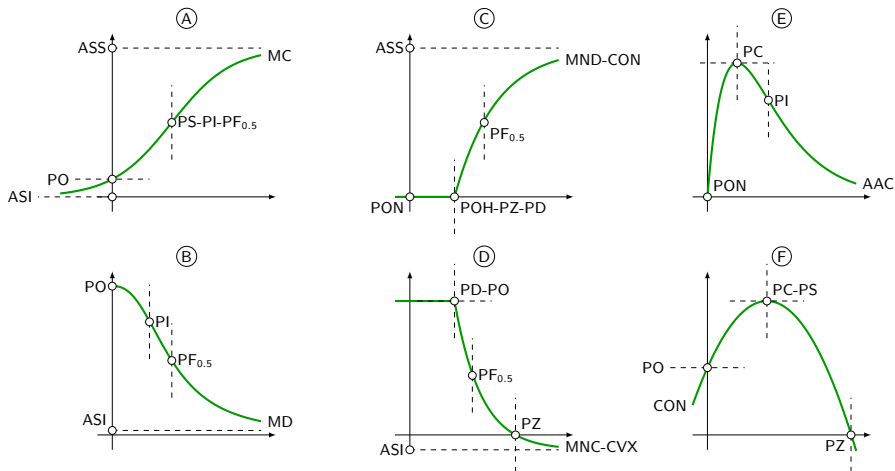


Figura 11: Funções não lineares com destaque para os pontos característicos e formas.

# Estudo dos pontos característicos e formas

## Propriedades da função

- Pontos característicos, aspectos de forma e aparência;
  - Intercepto, assíntota, ponto de inflexão, ponto de máximo;
  - Monótona, segmentada, convexa;
  - Sigmóide, parabólica, exponencial;
- Estudar: 1) limites, 2) derivadas, 3) integrais, 4) inversas e 5) avaliações em certos pontos;

## Interpretação dos parâmetros

- Significado e unidade de medida;
- Estudar: 1) limites, 2) derivadas, 3) integrais, 4) inversas e 5) avaliações em certos pontos;

# Determinação das unidades de medida (dimensionalidade)

## Equação da reta

$$\eta(x) = \theta_0 + \theta_1 x, \quad (7)$$

## Michaelis-Menten

$$\eta(x) = \theta_a \frac{x}{\theta_v + x}, \quad (8)$$

# Parametrização e dimensionalidade

## Modelo logístico - parametrização de GLM

$$\eta(x) = \theta_a \frac{1}{1 + \exp\{\theta_0 + \theta_1 x\}}, \quad (9)$$

## Modelo logístico - parametrização centro/escala

$$\eta(x) = \theta_a \frac{1}{1 + \exp\{-(x - \theta_i)/\theta_s\}}, \quad (10)$$



## Parametrização e interpretação

Curva de lactação - parametrização da densidade da gama

$$\eta(x) = \theta_0 x^{\theta_1} \exp\{-\theta_2 x\}, \quad (11)$$

Curva de lactação - parametrização do ponto crítico (Zeviani, 2013, Tese)

$$\eta(x) = \theta_y \left(\frac{x}{\theta_x}\right)^{\theta_1} \exp\{\theta_1(1 - x/\theta_x)\}, \quad (12)$$

Modelos de regressão não linear

# Parametrizações interpretáveis



# Sistematização da reparametrização

## Função de parâmetros de interesse

$$\vartheta = g(\theta)$$

## Etapas para reparametrização

- 1 Escrever o parâmetro de interesse como função dos elementos de  $\theta$ , ou seja,

$$\vartheta = g(\theta);$$

- 2 Escolher um dos elementos de  $\theta = (\theta_i, \theta_{-i})$  para ser colocado em função de  $\vartheta$  de tal forma a obter

$$\theta_i = h(\theta_{-i}, \vartheta);$$

- 3 Substituir toda ocorrência de  $\theta_i$  em  $\eta(x, \theta)$  pela expressão obtida no passo anterior,  $h(\theta_{-i}, \vartheta)$ , fazendo as simplificações convenientes. Assim o modelo de regressão não linear

$$\eta(x, \theta_{-i}, \vartheta)$$

terá  $\vartheta$  como elemento do vetor de parâmetros  $\theta_\vartheta = (\theta_{-i}, \vartheta)$ .

## Fração de vida no Monomolecular (*inverse prediction*)

$$\eta(x, \theta) = \theta_a(1 - \exp\{-\theta_k x\})$$

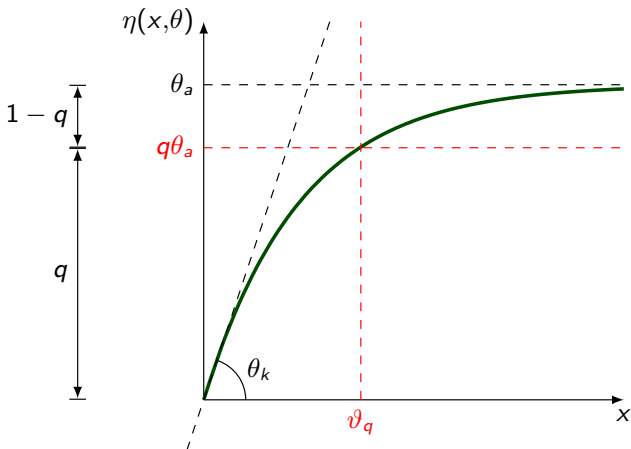


Figura 12: Curva do modelo Monomolecular com destaque para os seus parâmetros e sua forma de sua função.

## Aplicando a reparametrização

Passo 1 - Escrever...

$$q\theta_a = \theta_a(1 - \exp\{-\theta_k\vartheta_q\})$$

$$\vartheta_q = -\frac{\log(1 - q)}{\theta_k}.$$

Passo 2 - Inverter...

$$\theta_k = -\frac{\log(1 - q)}{\vartheta_q}.$$

Passo 3 - Substituir...

$$\eta(x, \theta_a, \vartheta_q) = \theta_a(1 - \exp\{x \log(1 - q)/\vartheta_q\}) \quad \begin{cases} \eta : \mathbb{R}^+ \mapsto \mathbb{R}^+, & 0 < q < 1 \\ \theta_a \geq 0 \text{ (Y)}, & \text{é a ASS} \\ \vartheta_q > 0 \text{ (X)}, & \text{é o PF}_q \end{cases} \quad (13)$$

Modelos de regressão não linear

# Algumas parametrizações interpretáveis de MRNL

**Tabela 1:** Reparametrizações desenvolvidas com ênfase na interpretação dos parâmetros de modelos de regressão não linear aplicados em Ciências Agrárias.

id	Modelo original	$\vartheta = g(\theta)$	$\theta_i = g^{-1}(\vartheta, \theta_{-i})$	Modelo reparametrizado
1	$\frac{\theta_a x}{\theta_v + x}$	$\vartheta_q = \theta_v \left( \frac{q}{1-q} \right)$	$\theta_v = \vartheta_q \left( \frac{1-q}{q} \right)$	$\frac{\theta_a x}{\vartheta_q \left( \frac{1-q}{q} \right) + x}$
2	$\frac{\theta_a}{1 + \left( \frac{\theta_x}{x} \right)^{\theta_c}}$	$\vartheta_q = \theta_v \left( \frac{1-q}{q} \right)^{-1/\theta_c}$	$\theta_v = \vartheta_q \left( \frac{1-q}{q} \right)^{1/\theta_c}$	$\frac{\theta_a}{1 + \frac{1-q}{q} \left( \frac{\vartheta_q}{x} \right)^{\theta_c}}$
3	$\frac{\theta_a}{1 + \left( \frac{x}{\theta_v} \right)^{\theta_c}}$	$\vartheta_q = \theta_v \left( \frac{1-q}{q} \right)^{1/\theta_c}$	$\theta_v = \vartheta_q \left( \frac{1-q}{q} \right)^{-1/\theta_c}$	$\frac{\theta_a}{1 + \frac{1-q}{q} \left( \frac{x}{\vartheta_q} \right)^{\theta_c}}$
4	$\frac{\theta_a x^{\theta_c}}{\theta_v + x^{\theta_c}}$	$\vartheta_q = \left( \frac{\theta_v q}{1-q} \right)^{1/\theta_c}$	$\theta_v = \vartheta_q^{\theta_c} \frac{1-q}{q}$	$\frac{\theta_a x^{\theta_c}}{\vartheta_q \left( \frac{1-q}{q} \right) + x^{\theta_c}}$
5	$\theta_a(1 - \exp\{-\theta_c x\})$	$\vartheta_q = -\frac{\log(1-q)}{\theta_c}$	$\theta_c = -\frac{\log(1-q)}{\vartheta_q}$	$\theta_a(1 - \exp\{x \log(1-q)/\vartheta_q\})$
6	$\begin{cases} \theta_a(1 - \exp\{-\theta_1(x - \theta_0)\}) & , x \geq \theta_0 \\ 0 & , x < \theta_0 \end{cases}$	$\vartheta_q = \frac{\log(1-q)}{\theta_1} + \theta_0$	$\theta_1 = \frac{\log(1-q)}{\vartheta_q - \theta_0}$	$\theta_a \left( 1 - \exp \left\{ \log(1-q) \left( \frac{x - \theta_0}{\vartheta_q - \theta_0} \right) \right\} \right)$
7	$\theta_0 - \theta_1 x^{\theta_2}$	$\vartheta_q = \frac{q^{1/\theta_2}}{\theta_1}$	$\frac{\theta_2 = \log(q) - \log(\theta_1)}{\log(\vartheta_q)}$	$\theta_0 - \theta_1 x^{\frac{\log(q) - \log(\theta_1)}{\log(\vartheta_q)}}$
8	$\theta_0 + \theta_1(1 - \theta_c^x)$	$\vartheta_q = \frac{\log(1+q/\theta_1)}{\log(\theta_c)}$	$\theta_1 = -\frac{q}{1 - \theta_c^{\vartheta_q}}$	$\theta_0 - q \left( \frac{1 - \theta_c^x}{1 - \theta_c^{\vartheta_q}} \right)$



**Tabela 2:** (cont.) Reparametrizações desenvolvidas com ênfase na interpretação dos parâmetros de modelos de regressão não linear aplicados em Ciências Agrárias.

id	Modelo original	$\vartheta = g(\theta)$	$\theta_i = g^{-1}(\vartheta, \theta_{-i})$	Modelo reparametrizado
9	$\begin{cases} \theta_0 + \theta_1 x & , x \leq \theta_b \\ \theta_0 + \theta_1 \theta_b & , x > \theta_b \end{cases}$	$\vartheta_b = \theta_0 + \theta_1 \theta_b$	$\theta_0 = \vartheta_b - \theta_1 \theta_b$	$\begin{cases} \vartheta_b + \theta_1(x - \theta_b) & , x \leq \theta_b \\ \vartheta_b & , x > \theta_b \end{cases}$
10	$\begin{cases} \theta_0 + \theta_1 x & , x \leq \theta_b \\ \theta_0 + \theta_1 \theta_b + \theta_2(x - \theta_b) & , x > \theta_b \end{cases}$	$\vartheta_b = \theta_0 + \theta_1 \theta_b$	$\theta_0 = \vartheta_b - \theta_1 \theta_b$	$\begin{cases} \vartheta_b + \theta_1(x - \theta_b) & , x \leq \theta_b \\ \vartheta_b + \theta_2(x - \theta_b) & , x > \theta_b \end{cases}$
11	$\theta_0 + \theta_1 x + \theta_2 x^2$	$\vartheta_x = -\frac{\theta_1}{2\theta_2}$ $\vartheta_y = \theta_0 + \theta_1 \vartheta_x + \theta_2 \vartheta_x^2$	$\theta_1 = 2\theta_2 \vartheta_x$ $\theta_0 = \vartheta_y - \theta_1 \vartheta_x - \theta_2 \vartheta_x^2$	$\vartheta_y + \theta_2(x - \vartheta_x)^2$
12	$\begin{cases} \theta_0 + \theta_1 x + \theta_2 x^2, & x \leq -\theta_1/(2\theta_2) \\ \theta_0 + \theta_1 \left(\frac{-\theta_1}{2\theta_2}\right) + \theta_2 \left(\frac{-\theta_1}{2\theta_2}\right)^2, & x > -\theta_1/(2\theta_2) \end{cases}$	$\vartheta_x = -\frac{\theta_1}{2\theta_2}$ $\vartheta_y = \theta_0 + \theta_1 \vartheta_x + \theta_2 \vartheta_x^2$	$\theta_1 = 2\theta_2 \vartheta_x$ $\theta_0 = \vartheta_y - \theta_1 \vartheta_x - \theta_2 \vartheta_x^2$	$\begin{cases} \vartheta_y + \theta_2(x - \vartheta_x)^2 & , x \leq \vartheta_x \\ \vartheta_y & , x > \vartheta_x \end{cases}$
13	$x(\theta_0 + \theta_1 x)^{-1/\theta_2}$	$\vartheta_x = \frac{\theta_0}{\theta_1} \left(\frac{\theta_2}{1 - \theta_2}\right)^{1/\theta_2}$ $\vartheta_y = \vartheta_x \left(\frac{1 - \theta_2}{\theta_0}\right)^{1/\theta_2}$	$\theta_1 = \frac{\theta_0}{\vartheta_x} \left(\frac{\theta_2}{-1\theta_2}\right)^{-\theta_2}$ $\theta_0 = (1 - \theta_2) \left(\frac{\vartheta_y}{\vartheta_x}\right)^{-\theta_2}$	$\vartheta_y \frac{x}{\vartheta_x} \left(1 - \theta_2 \left(1 - \frac{x}{\vartheta_x}\right)\right)^{-1/\theta_2}$
14	$\theta_0 x^{\theta_1} \exp\{-\theta_2 x\}$	$\vartheta_x = \theta_1/\theta_2$ $\vartheta_y = \theta_0(\theta_1/\theta_2) \exp\{-\theta_1\}$ $\vartheta_p = \theta_2^{(\theta_1+1)}$	$\theta_1 = \theta_2 \vartheta_x$ $\theta_0 = \vartheta_y \left(\frac{1}{\vartheta_x}\right)^{\theta_1} \exp\{\theta_1\}$ $\theta_2 = \vartheta_p^{-1/(\theta_1+1)}$	$\vartheta_y \left(\frac{x}{\vartheta_x}\right)^{\theta_1} \exp\{\hat{\theta}_1(1 - x/\vartheta_x)\}$ $\hat{\theta}_1 : \hat{\theta}_1 - \vartheta_x \vartheta_p^{-1/(\hat{\theta}_1+1)}$

**Tabela 3:** (cont.) Reparametrizações desenvolvidas com ênfase na interpretação dos parâmetros de modelos de regressão não linear aplicados em Ciências Agrárias.

id	Modelo original	$\vartheta = g(\theta)$	$\theta_i = g^{-1}(\vartheta, \theta_{-i})$	Modelo reparametrizado
15	$\frac{\theta_a}{1 + \exp\{\theta_0 + \theta_1 x\}}$	$\frac{1}{\theta_1} \left( \log \left( \frac{1-q}{q} \right) - \theta_0 \right)$ $\vartheta_q =$ $\vartheta_t = -\frac{\theta_1}{4}$	$\log \left( \frac{1-q}{q} \right) - \theta_1 \vartheta_q$ $\theta_0 =$ $\theta_1 = -4\vartheta_t$	$\frac{\theta_a}{1 + \left( \frac{1-q}{q} \right) \exp\{-4\vartheta_t(x - \vartheta_q)\}}$
16	$\theta_a \exp\{-\exp\{\theta_0 + \theta_1 x\}\}$	$\vartheta_q = \frac{\log(-\log(q)) - \theta_0}{\theta_1}$	$\theta_1 = \frac{\log(-\log(q)) - \theta_0}{\vartheta_x}$	$\theta_a \exp\{\log(q) \exp\{\theta_0(1 - x/\vartheta_x)\}\}$
17	$\theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{(1 + \exp\{\theta_a + x\})^{\theta_m}}$	$\vartheta_i = -\theta_a - \log(\theta_m)/\theta_n$ $\vartheta_s = -\frac{\theta_n(\theta_s - \theta_r)}{(1 - 1/\theta_m)^{\theta_m+1}}$	$\theta_a = -\vartheta_i - \log(\theta_m)/\theta_n$ $\theta_s - \theta_r =$ $-\frac{\vartheta_s}{\theta_n} (1 + 1/\theta_m)^{\theta_m+1}$	$\theta_r - \frac{\vartheta_s}{\theta_n} \frac{(1 + 1/\theta_m)^{\theta_m+1}}{(1 + \exp\{\theta_n(x - \vartheta_i)\}/\theta_m)^{\theta_m}}$

Aspectos de inferência

# Especificação e estimação

# Especificação e estimação

## Especificação

$$Y|x \stackrel{iid}{\sim} \text{Gaussiana}(\mu = \eta(x, \theta), \sigma^2). \quad (14)$$

## Estimação

- Minimizar a soma de quadrados

$$\text{SQD}(\theta) = \sum_{i=1}^n (y_i - \eta(x_i, \theta))^2. \quad (15)$$

- Maximizar a (log)-verossimilhança

$$\ell(\theta, \sigma^2) = -\frac{n}{2} \log(2\pi) - \frac{n}{2} \log(\sigma^2) - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (y_i - \eta(x_i, \theta))^2. \quad (16)$$

Aspectos de inferência

# Funções de verossimilhança de modelos extendidos

## Funções de verossimilhança de modelos estendidos

### Modelo para a média e variância

$$\ell(\theta, \varphi) = -\frac{n}{2} \log(2\pi) - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \left\{ \log(\eta_{\sigma^2}(z, \varphi)) + \frac{(y_i - \eta_{\mu}(x_i, \theta))^2}{\eta_{\sigma^2}(z, \varphi)} \right\}. \quad (17)$$

### Modelo para a média e variância

- $\eta_{\mu}(x, \theta)$  : modelo para  $E(Y|x)$ ;
- $\eta_{\sigma^2}(z, \varphi)$  : modelo para  $\text{Var}(Y|x)$ .

## Funções de verossimilhança de modelos estendidos

### Modelo não linear de efeitos aleatórios

$$L(\theta, \Psi, \sigma^2) = \prod_{i=1}^I \int \prod_{j=1}^{n_i} \phi(y_{ij}, \eta(x_{ij}, \theta, b_i), \sigma^2) \cdot \phi(b_i, 0, \Psi) db_i \quad (18)$$

### Michaelis-Mentem com efeito aleatório em $\theta_a$

- $y_{ij} | x_{ij}, b_i \sim \text{Gaussiana}(\eta(x_{ij}, \theta, b_i), \sigma^2)$ ;
- $b_i \sim \text{Gaussiana}_k(0, \Psi)$ ;
- $y_{ij} | x_{ij}, b_i$  e  $b_i$  são independentes.

## Funções de verossimilhança de modelos estendidos

### Michaelis-Mentem com efeito aleatório em $\theta_a$

- $\eta(x_{ij}, \theta, a_i) = \frac{(\theta_a + a_i) x_{ij}}{\theta_v + x_{ij}}$
- $y_{ij} | x_{ij}, a_i \sim \text{Gaussiana}(\eta(x_{ij}, \theta, a_i), \sigma^2)$ ;
- $a_i \sim \text{Gaussiana}_1(0, \sigma_a^2)$ ;
- $y_{ij} | x_{ij}, a_i$  e  $a_i$  são independentes.

$$L(\theta, \sigma_a^2, \sigma^2) = \prod_{i=1}^I \int \prod_{j=1}^{n_i} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left\{-\frac{(y_{ij} - \eta(x_{ij}, \theta, a_i))^2}{2\sigma^2}\right\} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_a^2}} \exp\left\{-\frac{a_i^2}{2\sigma_a^2}\right\} da_i.$$



Aspectos de inferência

# Inferência baseada em verossimilhança sobre $\theta$

## Inferência baseada em verossimilhança sobre $\theta$

- A  $\ell(\theta)$  é uma função não quadrática em  $\theta$ :

$$\ell(\theta, \sigma^2) = -\frac{n}{2} \log(2\pi) - \frac{n}{2} \log(\sigma^2) - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (y_i - \eta(x_i, \theta))^2.$$

- IC( $\theta_i$ ) são obtidos por perfilamento da log-verossimilhança:

$$\ell_p(\theta_i, \hat{\theta}_{-i}) = \max_{\theta_{-i}} \ell(\theta_i, \theta_{-i})$$

- Sob  $H_0: \theta_i = \theta_{i0}$

$$2(\ell(\hat{\theta}_i, \hat{\theta}_{-i}) - \ell(\theta_{i0}, \hat{\theta}_{-i})) \sim \chi_r^2.$$

- Um IC com cobertura nominal de  $1 - \alpha$  é obtido por

$$\theta_i : \{2(\ell(\hat{\theta}_i, \hat{\theta}_{-i}) - \ell(\theta_i, \hat{\theta}_{-i})) \leq \chi_{\alpha, r}^2\}$$

- Requer maior esforço computacional.

Aspectos de inferência

# Inferência assintótica sobre $\theta$

# Inferência assintótica sobre $\theta$

## Incerteza sobre $\theta$

- Utiliza os resultados de modelos lineares;
- No caso geral em que  $\mathbf{V}$  é a variância de  $Y|X$

$$\hat{\theta} \sim \text{Normal}(\theta, (F^T \mathbf{V}^{-1} F)^{-1}). \quad (19)$$

- No caso de  $\mathbf{V} = \sigma^2 \mathbf{I}$

$$\hat{\theta} \sim \text{Normal}(\theta, \sigma^2 (F^T F)^{-1}). \quad (20)$$

- IC( $\theta_i$ ) obtém-se com

$$\text{IC}(\theta_i) = \hat{\theta}_i \pm z_{\alpha/2} \sqrt{\sigma^2 (F^T F)^{-1}_{ii}}. \quad (21)$$

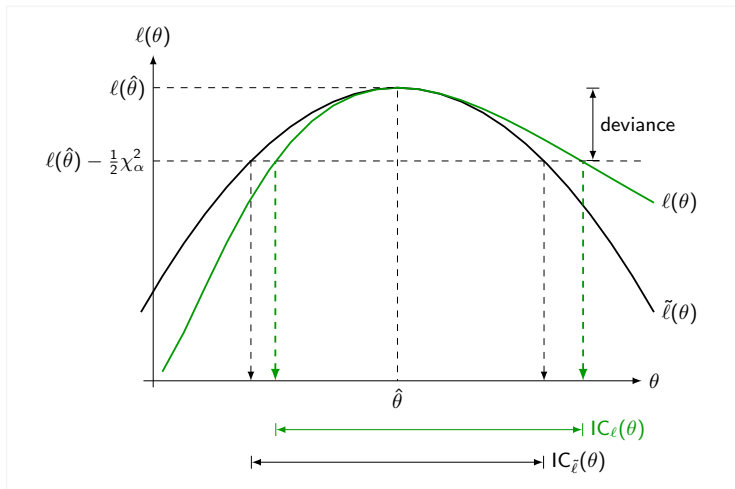


Figura 13: Intervalo de confiança para  $\theta$  baseado na função de log-verossimilhança e na sua aproximação quadrática.

# Estimação e inferência

Estimação e inferência

# Método Gauss-Newton

# Método Gauss-Newton

## Método Gauss-Newton

$$\theta^{(u+1)} = \theta^{(u)} + (F^{(u)\top} F^{(u)})^{-1} F^{(u)\top} (y - \eta(x, \theta^{(u)})), \quad (22)$$

em que

$$F = \frac{\partial \eta(x, \theta)}{\partial \theta^\top} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \eta(x_1, \theta)}{\partial \theta_1} & \dots & \frac{\partial \eta(x_1, \theta)}{\partial \theta_p} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial \eta(x_n, \theta)}{\partial \theta_1} & \dots & \frac{\partial \eta(x_n, \theta)}{\partial \theta_p} \end{bmatrix} \quad (23)$$

- $\theta^{(0)}$  são valores iniciais para os parâmetros;
- $\theta^{(u)}$  é a estimativa de  $\theta$  após  $u$  iterações;
- $F$  também é usada para obter bandas de predição (assintóticas).



Estimação e inferência

SQs, teste da falta de ajuste e  $R^2$

## Partição das somas de quadrados (corrigido para o modelo nulo)

Fonte	GL	SQ	QM
Regressão	$p - 1$	$SQM = \hat{\theta}^T F^T y - n\bar{y}^2$	$SQM/(p - 1)$
Resíduos	$n - p$	$SQR = y^T y - \hat{\theta}^T F^T y$	$SQR/(n - p)$
Total	$n - 1$	$SQT = y^T y - n\bar{y}^2$	

Coeficiente de determinação -  $R^2$ 

$$R^2 = 1 - \frac{SQR}{SQT} \quad (24)$$

## Partição da soma de quadrados dos resíduos

$$\begin{aligned} \text{SQR} &= \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^{n_i} (y_{ij} - \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^{n_i} (y_{ij} - \bar{y}_i + \bar{y}_i - \hat{y}_i)^2 \\ &= \text{SQep} + \text{SQfa} \end{aligned}$$

## Teste da falta de ajuste

$$\frac{\frac{\text{SQfa}}{m-2}}{\frac{\text{SQep}}{n-m}} \sim F_{m-2, n-m} \quad (25)$$

## Em outras palavras...

$E(Y|x_i) = \eta(x_i, \theta)$ : modelo não linear vs.  $E(Y|x_i) = \mu_i$ : modelo de médias por nível.

Estimação e inferência

# Avaliação dos pressupostos

## Avaliação dos pressupostos

$$Y|x \sim \text{Normal}(\eta(x, \theta), \sigma^2) \quad (26)$$

Suposição	Avaliação
1 Observações independentes.	Garantido pelo plano experimental.
2 $\eta(x, \theta)$ ser adequado para $E(Y x)$ .	Gráfico do modelo ajustado sobre os valores observados. Gráfico dos resíduos em função dos valores ajustados. Teste da falta de ajuste.
3 $\sigma^2 \propto 1$ ou variância constante.	Gráficos dos valores absolutos dos resíduos padronizados em função dos valores ajustados.
4 $Y x$ ter distribuição normal.	Gráfico quantil-quantil dos resíduos padronizados sobre a distribuição normal. Não é a normalidade de $Y$ (marginal) mas a de $Y x$ (condicional).



# SUPOSIÇÕES

Se Deus quiser, não é o que estamos pensando

 minilua.com

# Tópicos em ajuste de MRNL

Tópicos em ajuste de MRNL

## Informação de gradiente



# Informação de gradiente

script-04infograd.R

- Modelo para perda de peso (wtloss)

$$\eta(x, \theta) = \theta_0 + \theta_1 2^{-x/\theta_k};$$

- Derivadas parciais

$$\frac{\partial \eta}{\partial \theta_0} = 1$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial \theta_1} = 2^{-x/\theta_k}$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial \theta_k} = \theta_1 \log(2) (x/\theta_k^2) 2^{-x/\theta_k}$$

- Modelo linear-platô

$$\eta(x, \theta) = \begin{cases} \theta_0 + \theta_1 x, & x \leq \theta_b \\ \theta_0 + \theta_1 \theta_b, & x > \theta_b \end{cases}$$

- Derivadas

	$x \leq \theta_b$	$x > \theta_b$
$\frac{\partial \eta}{\partial \theta_0}$	1	1
$\frac{\partial \eta}{\partial \theta_1}$	$x$	$\theta_b$

Tópicos em ajuste de MRNL

# Método gráfico interativo

## Método gráfico interativo

`script05-mgi.R`

- Consiste em aproximar à mão livre a função aos dados;
- O ajuste parte da aproximação feita à mão;
- Tem a vantagem de aprender sobre a função e reduzir número de iterações.

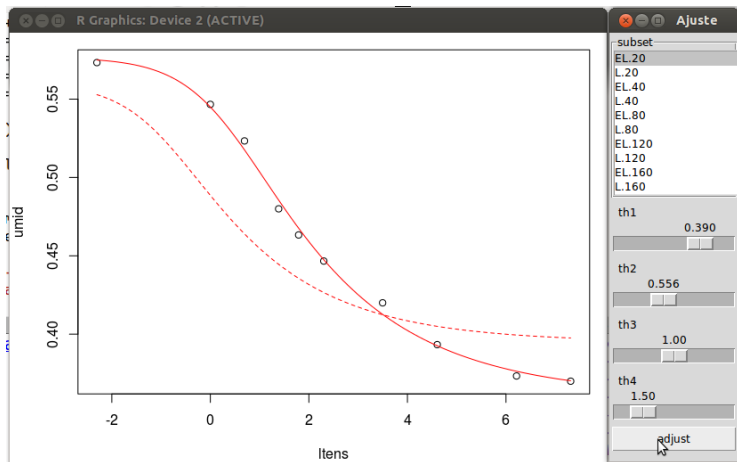


Figura 14: Método gráfico interativo baseado nos recursos do pacote rpanel para ajuste de modelos não lineares.

Tópicos em ajuste de MRNL

# Modelos self-start

## Modelos self-start

### `script06-selfstart.R`

- São funções que auto-providenciam valores iniciais;
- Reduz intervenção do usuário então facilita automação;
- Nem todo modelo possui self-start implementada.

Tópicos em ajuste de MRNL

# Modelos parcialmente lineares



## Modelos parcialmente lineares

`script07-plinear.R`

- Tiram vantagem do modelo ser parcialmente linear;
- Estimação dividida em duas fases: analítica (linear) e numérica (não linear);
- Reduz custo computacional.

## Modelos parcialmente lineares

- Modelo para perda de peso (wtloss)

$$\eta(x, \theta) = \theta_0 + \theta_1 2^{-x/\theta_k}$$

- Derivadas

$$\frac{\partial \eta}{\partial \theta_0} = 1$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial \theta_1} = 2^{-x/\theta_k}$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial \theta_k} = \theta_1 \log(2) (x/\theta_k^2) 2^{-x/\theta_k}$$

- O modelo é parcialmente linear em  $\theta_0$  e  $\theta_1$ ;
- $\eta(x, \theta) = \theta_0 + \theta_1 f(x)$ ,  $f(x) = 2^{-x/\theta_k}$
- $\theta_0$  e  $\theta_1$  usam solução de sistema linear;
- $\theta_k$  usa Gauss-Newton;
- Reduz de 3 para 1 dimensão;

## Modelos parcialmente lineares

- Modelo para ganho de peso (turk0)

$$\eta(x, \theta) = \theta_0 + \theta_1(1 - \exp\{-\theta_k x\})$$

- Derivadas

$$\frac{\partial \eta}{\partial \theta_0} = 1$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial \theta_1} = 1 - \exp\{-\theta_k x\}$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial \theta_k} = x\theta_1(\exp\{-\theta_k x\})$$

- O modelo é parcialmente linear em  $\theta_0$  e  $\theta_1$ ;
- $\eta(x, \theta) = \theta_0 + \theta_1 f(x)$ ,  $f(x) = 1 - \exp\{-\theta_k x\}$ ;
- $\theta_0$  e  $\theta_1$  usam solução de sistema linear;
- $\theta_k$  usa Gauss-Newton;
- Reduz de 3 para 1 dimensão;

## Modelos parcialmente lineares

- Modelo linear-platô

$$\eta(x, \theta) = \begin{cases} \theta_0 + \theta_1 x, & x \leq \theta_b \\ \theta_0 + \theta_1 \theta_b, & x > \theta_b \end{cases}$$

- Derivadas

	$x \leq \theta_b$	$x > \theta_b$
$\frac{\partial \eta}{\partial \theta_0}$	1	1
$\frac{\partial \eta}{\partial \theta_1}$	$x$	$\theta_b$

- O modelo é parcialmente linear em  $\theta_0$  e  $\theta_1$ ;
- $\theta_0$  e  $\theta_1$  usam solução de sistema linear;
- $\theta_b$  usa Gauss-Newton;
- Reduz de 3 para 1 dimensão;

## Modelos parcialmente lineares

- Modelo van Genuchten

$$\eta(x, \theta) = \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{(1 + (\theta_a x)^{\theta_n})^{1-1/\theta_n}}$$

- Derivadas

$$\frac{\partial \eta}{\partial \theta_r} = 1 - \frac{1}{(1 + (\theta_a x)^{\theta_n})^{1-1/\theta_n}}$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial \theta_s} = \frac{1}{(1 + (\theta_a x)^{\theta_n})^{1-1/\theta_n}}$$

- O modelo é parcialmente linear em  $\theta_r$  e  $\theta_s$ ;
- $\eta(x, \theta) = \theta_r + (\theta_s - \theta_r)f(x)$ ,  $f(x) = \frac{1}{(1 + (\theta_a x)^{\theta_n})^{1-1/\theta_n}}$ ;
- $\theta_r$  e  $\theta_s$  usam solução de sistema linear;
- $\theta_a$  e  $\theta_n$  usam Gauss-Newton;
- Reduz de 4 para 2 dimensões;

# Inferência sobre funções dos parâmetros

Inferência sobre funções dos parâmetros

## Método delta

# Método delta

## Distribuição amostral de $\hat{\theta}$

- Método para aproximar a distribuição de uma função  $g$  de variáveis aleatórias;
- Baseado na aproximação linear da função  $g$ ,

$$g(x) \approx g(x_0) + g'(x_0)(x - x_0);$$

- Depende do quão linear é a função na região de interesse;
- Depende da distribuição das v.a. envolvidas;
- No caso de MRNL  $\hat{\theta}$  são as variáveis aleatórias.



## Método delta

### Distribuição amostral de $\hat{\theta}$

$$\hat{\theta} \sim \text{Normal}(\theta, \Sigma_{\theta}). \quad (27)$$

Seja  $\hat{v} = g(\hat{\theta})$  uma função, então pode ser mostrado que uma aproximação em série de Taylor de primeira de  $g$  em torno de  $\theta$  implica em

- $$E(\hat{v}) = g(\theta);$$

- $$\text{Var}(\hat{v}) = D\Sigma_{\theta}D^{\top}, \quad \text{em que } D = \left. \frac{\partial g(\theta)}{\partial \theta^{\top}} \right|_{\theta=\hat{\theta}}.$$

- $$\hat{v} \sim \text{Normal}(g(\theta), D\Sigma_{\theta}D^{\top}).$$

- Um intervalo de confiança  $1 - \alpha$  obtém-se por

$$\hat{v} \pm z_{\alpha/2} \sqrt{\text{Var}(\hat{v})},$$

- $\hat{\Sigma}_{\theta}$  é usada no lugar de  $\Sigma_{\theta}$ .

Inferência sobre funções dos parâmetros  
Inferência sobre  $\hat{y} = \eta(x, \hat{\theta})$

Inferência sobre  $\hat{y} = \eta(x, \hat{\theta})$ Inferência sobre o valor predito  $\hat{y}$  (`script08-bandas.R`)

$$\hat{y} = \eta(x, \hat{\theta}) = g(\hat{\theta}), \quad (28)$$

Pelo método delta tem-se que

- $$\hat{y} \sim \text{Normal}(\eta(x, \hat{\theta}), F \Sigma_{\theta} F^{\top}).$$

- $$F = \left. \frac{\partial \eta(x, \theta)}{\partial \theta^{\top}} \right|_{\theta = \hat{\theta}}.$$

- Um intervalo de confiança  $1 - \alpha$  obtém-se por

$$\hat{y} \pm z_{\alpha/2} \sqrt{F \Sigma_{\theta} F^{\top}},$$

- Com isso obtém-se as bandas de confiança para os valores preditos.

Inferência sobre funções dos parâmetros

## Outras formas de inferir sobre $g(\theta)$

## Outras formas de inferir sobre $g(\theta)$

### script09-inffun.R

- **Bootstrap paramétrico:** soma desvios de distribuição normal aos valores ajustados, gera novas amostras do modelo  $\eta(x, \hat{\theta})$ , ajusta para obter  $\vartheta^\bullet = g(\hat{\theta}^\bullet)$ . Repete  $B$  vezes e infere a partir da distribuição empírica de  $\vartheta^\bullet$ ;
- **Bootstrap não paramétrico:** soma os resíduos do próprio ajuste (amostra com reposição deles) aos valores ajustados, gera novas amostras do modelo  $\eta(x, \hat{\theta})$ , ajusta para obter  $\vartheta^\circ = g(\hat{\theta}^\circ)$ . Repete  $B$  vezes e infere a partir da distribuição empírica de  $\vartheta^\circ$ ;
- **Simulação Monte Carlo:** simula valores de  $\theta$  de acordo com sua distribuição amostral, no caso  $\hat{\theta} \sim \text{Normal}(\theta, \Sigma_\theta)$ . Obtém-se  $\vartheta^* = g(\hat{\theta}^*)$ . Repete  $B$  vezes e infere a partir da distribuição empírica de  $\vartheta^*$ ;

## Inclinação no ponto de inflexão da CRAS

$$\eta(x) = \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{(1 + (\theta_a x)^{\theta_n})^{\theta_m}}$$

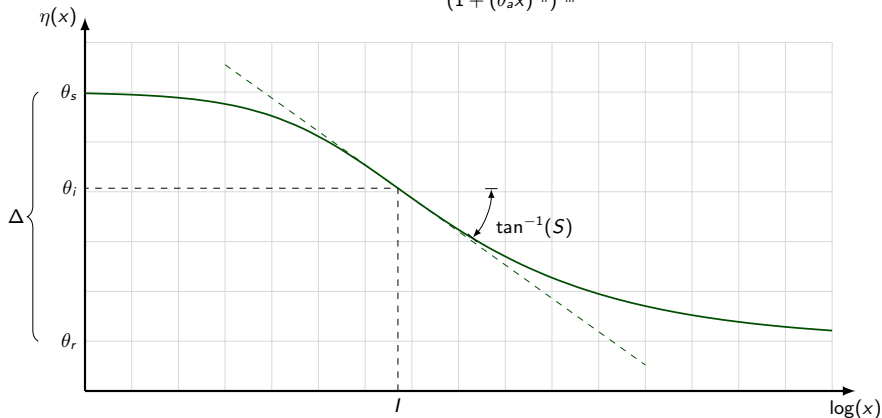


Figura 15: Gráfico do modelo van Genuchten com destaque para interpretação dos parâmetros.

## Modelo van Genuchten para retenção de água no solo

$$\eta(x, \theta) = \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{(1 + (\theta_a x)^{\theta_n})^{1-1/\theta_n}} \quad (29)$$

Parâmetro  $S = g(\theta)$ 

$$S = g(\theta) = -\theta_n(\theta_s - \theta_r) \left(1 + \frac{1}{\theta_m}\right)^{-\theta_m-1}, \quad \text{em que } \theta_m = 1 - 1/\theta_n. \quad (30)$$

Modelo van Genuchten reparametrizado para  $S$ 

$$\eta(x, \theta_S) = \theta_r - \frac{S}{\theta_n} \frac{\left(\frac{2\theta_n-1}{\theta_n-1}\right)^{2-1/\theta_n}}{\left(1 + \left(\frac{\theta_n}{\theta_n-1}\right) \exp\{\theta_n(x-l)\}\right)^{1-1/\theta_n}}, \quad (31)$$

em que  $l$  representa a tensão no ponto de inflexão.

# Medidas de não linearidade



Medidas de não linearidade

# Medidas de curvatura

## Medidas de curvatura

### Curvatura de uma função $f(x)$

$$\kappa = \frac{f''(x)}{(1 + (f'(x))^2)^{3/2}} \quad (32)$$

### Curvatura de Bates e Watts

- Generalizaram para uma função  $n$ -dimensional de  $p$  variáveis ( $\theta$ ),

$$y_\theta = \eta(x, \theta),$$

e padronizaram para ser invariante a escala dos dados e permitir comparação entre diferentes modelos;

- A curvatura total pode ser decomposta em duas, via projeção em espaços ortogonais;
- Curvatura intrínseca: corresponde ao afastamento da suposição de planicidade, ou seja, de  $y_\theta$  representar um hiper-plano. Não muda com parametrizações do modelo.
- Curvatura devido ao efeito de parâmetros: corresponde ao afastamento da suposição de coordenadas com espaçamento regular com relação a variação de  $\theta_i$ . Muda com a reparametrização do modelo.
- Em modelos lineares ambas as curvaturas são zero.

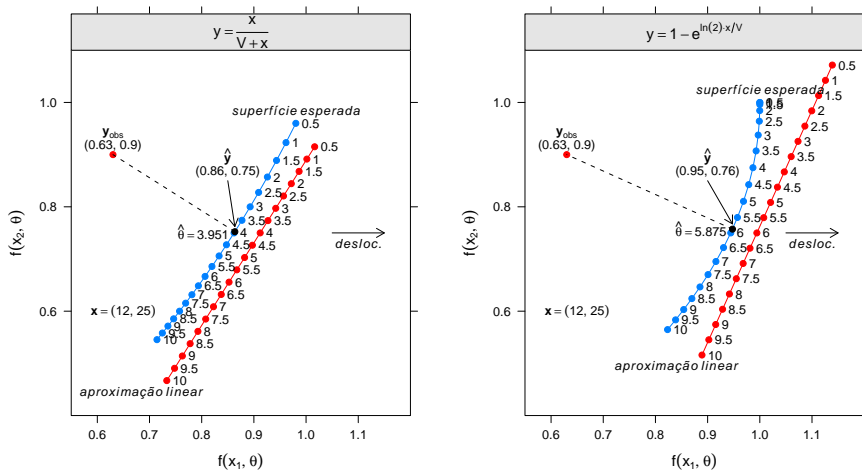


Figura 16: Figura esquemática para exemplificar as definições das medidas de curvatura.

Medidas de não linearidade

Vício

## Vício

- Calcula o vício aproximado para as estimativas baseado em aproximação;
- 

$$B(\theta_i) = (F^T F)^{-1} F \left( -\frac{\sigma^2}{2} (F^T F)^{-1} H_i \right),$$

em que

$$H_i = \frac{\partial^2 \eta(x, \theta)}{\partial \theta_i \theta^T} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \eta(x_1, \theta)}{\partial \theta_i \theta_1} & \dots & \frac{\partial \eta(x_1, \theta)}{\partial \theta_i \theta_p} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial \eta(x_n, \theta)}{\partial \theta_i \theta_1} & \dots & \frac{\partial \eta(x_n, \theta)}{\partial \theta_i \theta_p} \end{bmatrix} \quad (33)$$

- Vício absoluto
- Vício relativo ao parâmetro
- Vício relativo ao erro padrão

$$B(\theta);$$

$$\frac{B(\theta)}{\hat{\theta}};$$

$$\frac{B(\theta)}{ep(\hat{\theta})};$$

# Estudios de caso

Estudos de caso

# Modelos de efeito aleatório

# Modelos de efeito aleatório

## Tópicos

- Liberação de potássio no solo por resíduos orgânicos;
- Modelo não linear de duas fases de liberação;
- Medidas repetidas no tempo.



## Modelos de efeito aleatório

### Modelo considerado

- Monomolecular reparametrizado para meia vida

$$\eta(x, \theta) = \theta_a(1 - \exp\{-\theta_c x\}) = \theta_a(1 - \exp\{-\log(2)x/\theta_v\}). \quad (34)$$

- Extensão para duas fases de liberação

$$\eta(x, \theta) = \theta_a(1 - \exp\{-\log(2)x/\theta_v\}) + \theta_d x \quad (35)$$

- Inclusão do efeito aleatório de unidade experimental

$$\eta(x, \theta, a_i) = \eta(x, \theta) = (\theta_a + a_i)(1 - \exp\{-\log(2)x/\theta_v\}) + \theta_d x \quad (36)$$

- $\theta_a$ : assíntota superior;  $\theta_c$ : taxa de liberação instântanea na origem;  $\theta_v$ : tempo de meia vida;  $\theta_d$ : taxa de lenta liberação;  $a_i$ : termo aleatório,  $a_i \sim N(0, \sigma_a)$ ;

# Modelos de efeito aleatório

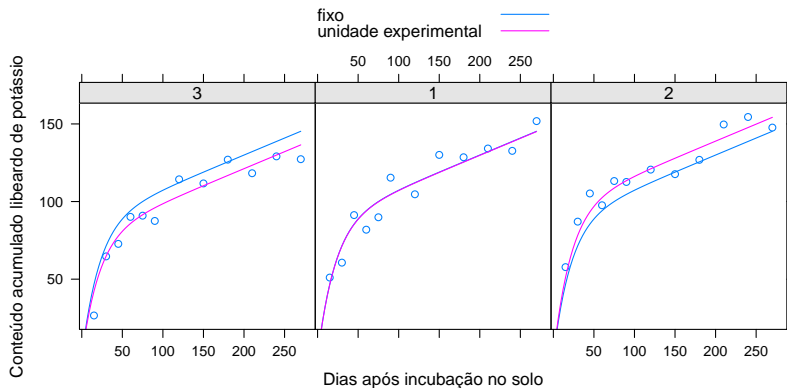


Figura 17: Conteúdo de potássio acumulado liberado em função do tempo com destaque para a predição ao nível populacional e nível de unidade experimental.

Estudos de caso

# Modelos resposta platô

# Modelos resposta platô

## Tópicos

- Produção de soja em função do conteúdo de potássio e nível de umidade do solo;
- Parametrizações alternativas do modelo quadrático platô;
- Comparação entre modelos segmentados.

# Modelos resposta platô

## Modelos considerados

- Parametrização original (polinômio)

$$\eta(x, \theta) = \begin{cases} \theta_0 + \theta_1 x + \theta_2 x^2 & x \leq \theta_b \\ \theta_0 + \theta_1 \theta_b + \theta_2 \theta_b^2 & x > \theta_b \end{cases}, \text{ em que } \theta_b = \frac{-\theta_1}{2\theta_2}. \quad (37)$$

- Parametrização para o ponto crítico (canônica)

$$\eta(x, \theta) = \begin{cases} \theta_y + \theta_2(x - \theta_b), & x \leq \theta_b \\ \theta_y, & x > \theta_b \end{cases}. \quad (38)$$

- Parametrização mista

$$\eta(x, \theta) = \begin{cases} \theta_0 + \theta_1 x - \frac{\theta_1 x^2}{2\theta_b}, & x \leq \theta_b \\ \theta_0 + \frac{\theta_1 \theta_b}{2}, & x > \theta_b \end{cases}. \quad (39)$$

- $\theta_0$ : intercepto;  $\theta_1$ : c. angular;  $\theta_2$ : c. curvatura;  $\theta_y$ : valor de máximo/mínimo da função;  $\theta_x$ : valor na abscissa correspondente ao  $\theta_y$ ;

## Modelos resposta platô

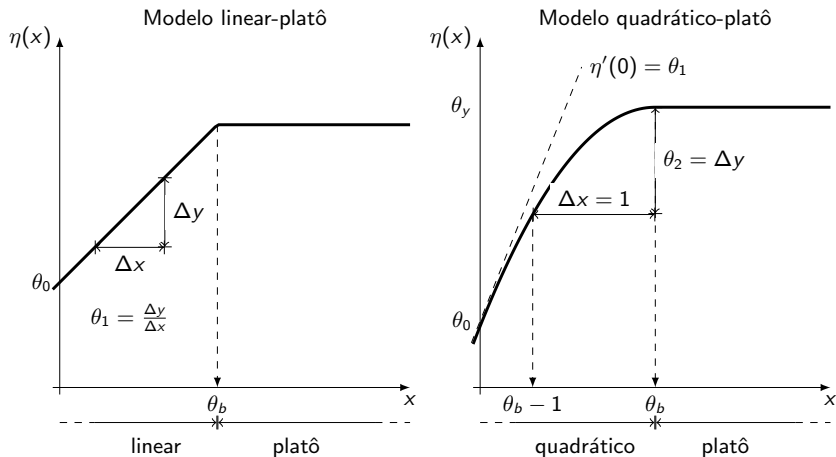


Figura 18: Modelo linear-platô (esq) e quadrático-platô (dir) com destaque para a interpretação cartesiana dos parâmetros.

## Modelos resposta platô

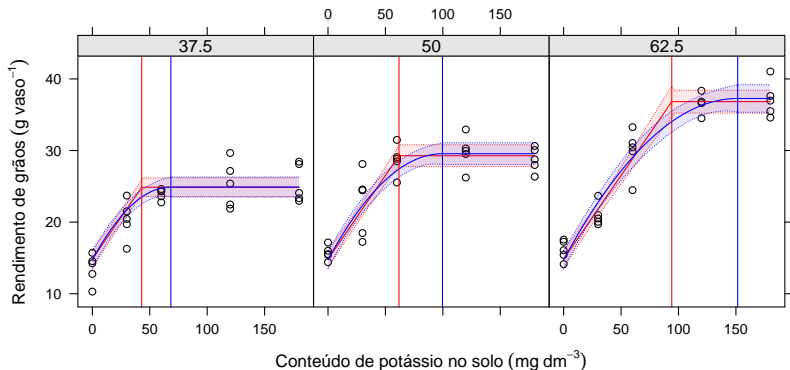


Figura 19: Resultados do ajuste dos modelos linear-platô e quadrático-platô aos dados de produção de soja em função do conteúdo de potássio do solo e nível de umidade.

Estudos de caso

# Produção de algodão em função da desfolha



# Produção de algodão em função da desfolha

## Tópicos

- Produção de algodão em função da desfolha artificial em cada estágio fenológico;
- Parametrização para o nível de dano econômico;
- Compara parametrizações por curvatura e gráficos dos contornos de confiança.

## Produção de algodão em função da desfolha

### Modelos considerados

- Modelo potência

$$\eta(x, \theta) = \theta_0 + \theta_1 x^{\theta_c}, \quad \theta_c > 0. \quad (40)$$

- Parametrização para evitar problemas de borda

$$\eta(x, \theta) = \theta_0 + \theta_1 x^{\exp\{\theta_c\}}, \quad -\infty < \theta_c < \infty. \quad (41)$$

- Parametrização para o nível de dano econômico

$$\eta(x, \theta) = \theta_0 + \theta_1 x^{\frac{\log(q) - \log(\theta_1)}{\log(\vartheta_q)}}. \quad (42)$$

- $\theta_0$ : intercepto;  $\theta_1$ : queda de produção com desfolha máxima;  $\theta_c$  e  $\theta_c$ : indicadores de concavidade;  $\vartheta_q$ : desfolha correspondente a uma queda de  $q$  unidades na produção;

## Produção de algodão em função da desfolha

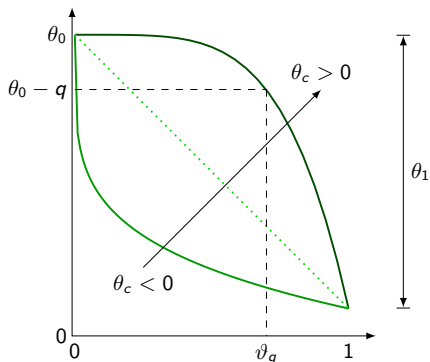
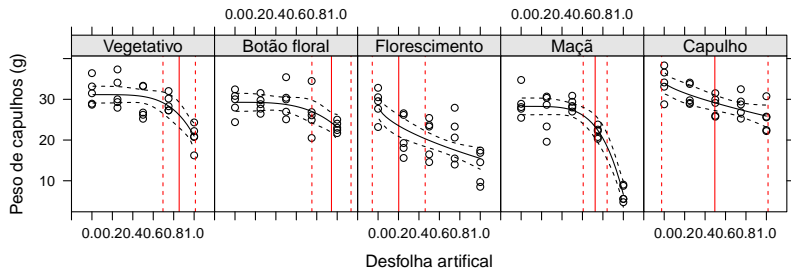


Figura 20: Modelo potência com ênfase para a interpretação dos parâmetros.

# Produção de algodão em função da desfolha



**Figura 21:** Resultados do ajuste do modelo potência reparametrizados aos dados de produção de capulhos em função da desfolha em cada estágio fenológico do algodão. Linhas verticais destacam a estimativa intervalar para o nível de dano econômico.

Estudos de caso

# Curva de crescimento com modelagem da variância

# Curva de crescimento com modelagem da variância

## Tópicos

- Peso de frutos de goiaba em função dos dias após antese;
- Atribuição de um modelo para a média e outro para a variância;
- Avaliação dos pressupostos e seleção do melhor modelo.

## Curva de crescimento com modelagem da variância

### Modelos considerados

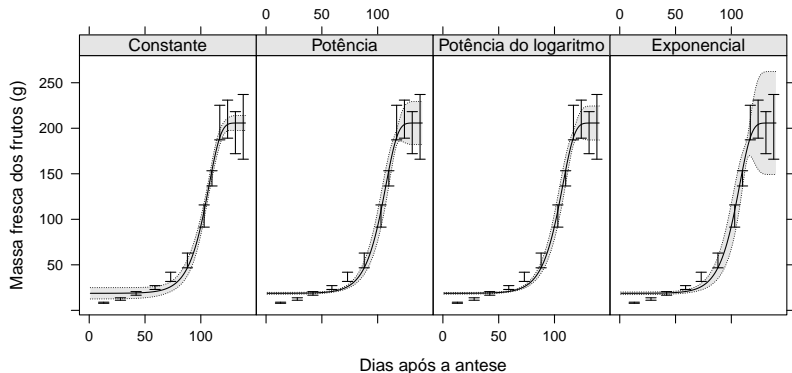
- Modelo para a média,  $E(Y|x)$

$$\eta(x, \theta) = \theta_a - (\theta_a - \theta_b) \cdot \exp(-\exp(\theta_t \cdot (daa - \theta_i))). \quad (43)$$

- Modelos para a variância,  $\text{Var}(Y|x)$

$$\text{Var}(Y|x) = \begin{cases} g_0(\sigma) = \sigma^2 & \text{(constante)} \\ g_1(daa, \delta, \sigma) = \sigma^2 \cdot \exp\{2\delta \cdot daa\} & \text{(exponencial)} \\ g_2(daa, \delta, \sigma) = \sigma^2 \cdot |daa|^{2\delta} & \text{(potência)} \\ g_3(daa, \delta, \sigma) = \sigma^2 \cdot |\ln daa|^{2\delta} & \text{(potência do logaritmo)} \end{cases} \quad (44)$$

## Curva de crescimento com modelagem da variância



**Figura 22:** Resultados dos ajustes dos diferentes modelos para a variância para os dados de peso de frutos de goiaba em função dos dias após a antese. Bandas correspondem ao intervalo de confiança para o valor predito e as barras são o intervalo de confiança para a média em cada coleta.



# Considerações finais

# Obrigado!!!



Laboratório de Estatística  
e Geoinformação