

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

**Análise bayesiana para modelos
de crescimento**

**JOSMAR MAZUCHELI
JORGE ALBERTO ACHCAR**

Nº 24

N O T A S



Instituto de Ciências Matemáticas de São Carlos

Instituto de Ciências Matemáticas de São Carlos

ISSN - 0103-2577

**Análise bayesiana para modelos
de crescimento**

**JOSMAR MAZUCHELI
JORGE ALBERTO ACHCAR**

Nº 24

**NOTAS DO ICMSC
Série Estatística**

**São Carlos
Fev./1996**

ANÁLISE BAYESIANA PARA MODELOS DE CRESCIMENTO

JOSMAR MAZUCHELI

JORGE ALBERTO ACHCAR

SÃO CARLOS

- 1996 -

ABSTRACT

“Considering some usual growth models (logistic, Gompertz, Type-Weibull, Morgan-Mercer-Flodin and Richards), we present a Bayesian analysis using a non-informative prior density for the parameters and the Laplace’s method for approximations of integrals. We also present some Bayesian techniques of discrimination of models and we illustrate with a data set.”

Análise Bayesiana Para Modelos de Crescimento

Josmar Mazucheli

Jorge Alberto Achcar

ICMSC-USP, C.P. 668

13560-970, São Carlos, S.P.

Resumo

“Considerando alguns modelos de crescimento usuais (logístico, Gompertz, Tipo-Weibull, Morgan-Mercer-Flodin e Richards), apresentamos uma análise Bayesiana usando uma priori não informativa para os parâmetros e o método de Laplace para aproximação de integrais. Também apresentamos algumas técnicas Bayesianas de discriminação de modelos e ilustramos com um conjunto de dados.”

Palavras Chaves: modelos de crescimento, análise Bayesiana, método de Laplace.

1. Introdução

A análise de dados de crescimento é muito comum em várias áreas de aplicação como em engenharia química, biologia ou ecologia. Em geral, temos interesse em modelar uma variável resposta que aumenta com o tempo e quando os dados são colocados num gráfico, observamos uma forma em “S” (ver figura 1) com certa tendência à estabilização.

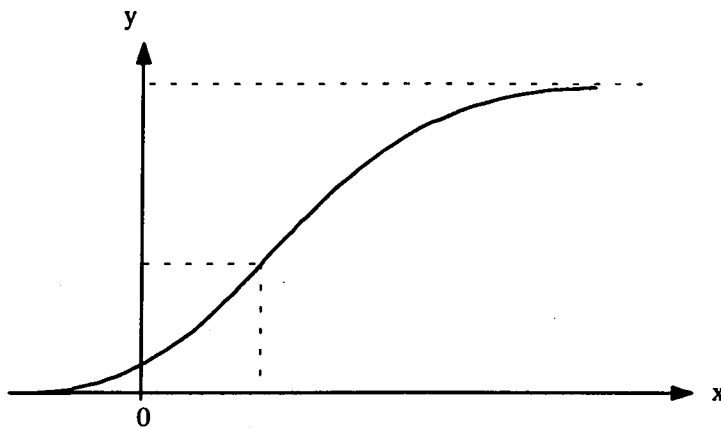


Figura 1 - Gráfico da variável resposta y versus uma variável independente x .

Para modelar esse tipo de comportamento, a literatura apresenta vários modelos de crescimento sigmóide (ver por exemplo, Seber e Wild, 1989; ou Ratkowsky, 1983), dos quais destacamos os modelos logístico, Gompertz, Tipo-Weibull, Morgan-Mercer-Flodin (M.M.F.) e Richards:

$$y_i = \frac{\alpha}{1 + \exp(\beta - \gamma x_i)} + \varepsilon_i \quad (\text{logístico})$$

$$y_i = \alpha \exp[-\exp(\beta - \gamma x_i)] + \varepsilon_i \quad (\text{Gompertz})$$

$$y_i = \alpha - \beta \exp(-\gamma x_i^\delta) + \varepsilon_i \quad (\text{Tipo-Weibull})$$

$$y_i = \frac{\beta\gamma + \alpha x_i^\delta}{\gamma + x_i^\delta} + \varepsilon_i \quad (\text{M.M.F.}) \quad (1)$$

$$y_i = \frac{\alpha}{[1 + \exp(\beta - \gamma x_i)]^\delta} + \varepsilon_i \quad (\text{Richards})$$

onde ε_i , ($i=1,2,\dots,n$), são os erros supostos como variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas com distribuição $N(0, \sigma^2)$.

Para as inferências de interesse nessa classe de modelos não-lineares, em geral, é considerando um processo iterativo (por exemplo, o método de Gauss-Newton) para encontrar os estimadores de mínimos quadrados e a construção de testes de hipóteses ou intervalos de confiança em geral, são baseados em resultados aproximados. Para avaliar a precisão desses resultados, usualmente o estatístico considera algumas medidas de não-linearidade (ver por exemplo, Bates e Watts, 1980), ou algumas medidas de vício dos estimadores dos parâmetros do modelo (ver, Box, 1971), ou algumas medidas de assimetria (ver por exemplo, Lowry e Morton, 1983), ou alguns estudos de simulação (ver por exemplo, Ratkowsky, 1983).

Nas aplicações de modelos não lineares, também é comum o uso do método de máxima verossimilhança para a estimação dos parâmetros do modelo e o uso dos resultados assintóticos usuais para os estimadores de máxima verossimilhança na construção de testes de hipóteses e intervalos de confiança.

Quando os resultados inferenciais obtidos não são muito precisos, usualmente o estatístico considera diferentes parametrizações que podem melhorar a precisão dos resultados obtidos (ver por exemplo, Bates e Watts, 1988).

Apesar disso, muitas vezes o pesquisador não quer formas transformadas dos parâmetros originais pois, em geral, esses parâmetros possuem interpretações físicas relacionadas ao experimento.

Assim, uma análise Bayesiana dos modelos não-lineares (1) pode ser de grande interesse prático.

2. Uma Análise Bayesiana Para os Modelos de Crescimento.

Sejam (x_i, y_i) , $(i=1,2,\dots,n)$, pares de observações cuja relação funcional é um modelo de regressão não-linear, usualmente escrito na forma:

$$y_i = f(x_i; \theta) + \varepsilon_i, \quad (2)$$

onde y_i é a variável resposta, x_i é uma variável independente, $\theta' = (\theta_1, \dots, \theta_m)$ é um vetor de parâmetros e ε_i é um erro aleatório. Além disso, em geral supomos que ε_i , $(i=1,2,\dots,n)$ são variáveis aleatórias com distribuição normal $N(0, \sigma^2)$.

A matriz de informação de Fisher para θ e σ^2 é dada por:

$$I(\theta, \sigma^2) = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sigma^2} \mathbf{F}'(\theta) \mathbf{F}(\theta) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0}' & \frac{n}{2\sigma^4} \end{bmatrix}, \quad (3)$$

onde $\mathbf{F}(\theta)$ é uma matriz de ordem $(n \times n)$ dada por: $\mathbf{F}(\theta) = \left[\frac{\partial f(x_i; \theta)}{\partial \theta_j} \right]$; $i=1,2,\dots,n$; $j=1,2,\dots,m$.

Uma priori não informativa para os parâmetros θ e σ^2 é dada (ver Seber e Wild, 1989) usando a regra de Jeffreys e assumindo independência a priori entre θ e σ^2 dada por:

$$\pi(\theta, \sigma^2) \propto \{ \det [\mathbf{F}'(\theta) \mathbf{F}(\theta)] \}^{\frac{1}{2}} \sigma^{-1}. \quad (4)$$

Considerando a densidade a priori não informativa (4), a densidade a *posteriori* conjunta para θ e σ^2 é dada por:

$$\pi(\theta, \sigma^2 / D) \propto |\mathbf{F}'(\theta)\mathbf{F}(\theta)|^{\frac{1}{2}} \sigma^{-(n+1)} \exp\left[-\frac{1}{2\sigma^2} S(\theta)\right], \quad (5)$$

onde $S(\theta) = \sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i, \theta)]^2$, e D representa um conjunto de dados observados.

Observar que considerando os modelos de crescimento logístico, Gompertz dados em (1) $\theta^t = (\alpha, \beta, \gamma)$ e considerando os modelos Tipo-Weibull, M.M.F. e Richards, $\theta^t = (\alpha, \beta, \gamma, \delta)$ e em geral precisamos utilizar um método de integração numérico ou de aproximação para obter as quantidades a *posteriori* de interesse (densidades a *posteriori* marginais, momentos a *posteriori* e densidades preditivas de interesse).

Um método muito utilizado para resolver integrais em inferência Bayesiana, especialmente quando o número de parâmetros não é muito grande, é dado pelo método de Laplace (ver por exemplo, Tierney e Kadane, 1986; ou Tierney, Kass e Kadane, 1989).

2.1. O Método de Laplace

Supor que temos interesse em calcular momentos a *posteriori* para funções $g(\theta)$ da forma:

$$E\{g(\theta)\} = \frac{\int g(\theta)\pi(\theta)L(\theta/D)d\theta}{\int \pi(\theta)L(\theta/D)d\theta}, \quad (6)$$

onde $g(\theta)$ é uma função de $\theta \in \mathcal{R}^m$, $\pi(\theta)$ é uma densidade a priori e $L(\theta/D)$ é a função de verossimilhança para θ dado um vetor de dados D ; e densidades a posteriori da forma:

$$\pi(\theta_1 / D) = \int \pi(\theta_1, \theta_2 / D) d\theta_2, \quad (7)$$

onde $\pi(\theta_1, \theta_2 / D)$ é uma densidade a posteriori conjunta para $\theta = (\theta_1, \theta_2)$, $\theta_1 \in \mathcal{R}^k$ e $\theta_2 \in \mathcal{R}^{m-k}$.

O método de aproximação para momentos a posteriori introduzido por Tierney e Kadane (1986) é baseado nas aproximações de Laplace para o numerador e denominador de (6). Essas aproximações assumem que a principal contribuição para as integrais está vindo de um máximo no interior do espaço paramétrico Θ . O método de Laplace para aproximação de integrais é usado para resolver integrais na forma:

$$I = \int f(\theta) \exp\{-nh(\theta)\} d\theta, \quad (8)$$

onde $-nh(\theta)$ é uma função com máximo em $\hat{\theta}$ e que satisfaz algumas condições usuais de regularidade.

Para aproximar integrais da forma (8) o método de Laplace assume uma expansão de h e f em série de Taylor em torno do máximo $\hat{\theta}$ de $-h$ (ver Tierney e Kadane, 1986; ou Kass, Tierney e Kadane, 1990).

Com θ unidimensional, a aproximação de Laplace para I é dada por:

$$\hat{I} \cong \left(\frac{2\pi}{n}\right)^{\frac{1}{2}} \sigma f(\hat{\theta}) \exp\{-nh(\hat{\theta})\}, \quad (9)$$

onde $\sigma = \{h''(\hat{\theta})\}^{-\frac{1}{2}}$.

No caso m-dimensional, ou seja, com $\theta \in \mathfrak{R}^m$, a aproximação de Laplace é dada por:

$$\hat{I} \cong (2\pi)^{\frac{m}{2}} \left\{ \det(n \sum_h^{-1} h(\hat{\theta})) \right\}^{-\frac{1}{2}} f(\hat{\theta}) \exp(-nh\hat{\theta}), \quad (10)$$

onde $\sum_h^{-1} h(\hat{\theta})$ é a matriz Hessiana de h calculada em $\hat{\theta}$, dada por:

$$\sum_h^{-1} h(\hat{\theta}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 h}{\partial \theta_1^2} & \frac{\partial^2 h}{\partial \theta_1 \theta_2} & \dots & \frac{\partial^2 h}{\partial \theta_1 \theta_m} \\ & \frac{\partial^2 h}{\partial \theta_2^2} & \dots & \frac{\partial^2 h}{\partial \theta_2 \theta_m} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & \frac{\partial^2 h}{\partial \theta_m^2} \end{bmatrix}$$

simetrica

Podemos considerar várias escolhas para f em (8). Quando f=1 em (8), o método de Laplace é conhecido como método de Laplace totalmente exponencial (ver Tierney e Kadane, 1986; ou Tierney, Kass e Kadane, 1989).

2.2. Modelos Logístico e Gompertz

De (4), uma densidade a priori não informativa para $\theta^i = (\alpha, \beta, \gamma)$ e σ^2 é dada por:

$$\pi_j(\theta, \sigma^2) = \alpha^2 A_j^{\frac{1}{2}}(\beta, \gamma) \sigma^{-1},$$

onde $A_j(\beta, \gamma) = b_{j1} b_{j4} b_{j6} + 2b_{j2} b_{j3} b_{j5} - b_{j3}^2 b_{j4} - b_{j1} b_{j5}^2 - b_{j2}^2 b_{j6}$; j=1: modelo logístico ou j=2: modelo Gompertz; b_{ji} são dados por:

$$b_{11} = \sum_{i=1}^n (1 + a_{1i})^{-2}$$

$$b_{12} = \sum_{i=1}^n a_{1i} (1 + a_{1i})^{-3}$$

$$b_{13} = \sum_{i=1}^n x_i a_{1i} (1 + a_{1i})^{-3}$$

$$b_{14} = \sum_{i=1}^n a_{1i}^2 (1 + a_{1i})^{-4}$$

$$b_{15} = \sum_{i=1}^n x_i a_{1i}^2 (1 + a_{1i})^{-4}$$

$$b_{16} = \sum_{i=1}^n x_i^2 a_{1i}^2 (1 + a_{1i})^{-4}$$

$$b_{21} = \sum_{i=1}^n \exp(-2a_{2i})$$

$$b_{22} = \sum_{i=1}^n a_{2i} \exp(-2a_{2i})$$

$$b_{23} = \sum_{i=1}^n x_i a_{2i} \exp(-2a_{2i})$$

$$b_{24} = \sum_{i=1}^n a_{2i}^2 \exp(-2a_{2i})$$

$$b_{25} = \sum_{i=1}^n x_i a_{2i}^2 \exp(-2a_{2i})$$

$$b_{26} = \sum_{i=1}^n x_i^2 a_{2i}^2 \exp(-2a_{2i})$$

e $a_{i\bar{r}} = \exp(\beta - \gamma x_i)$.

Considerando-se a densidade a priori (11), a densidade a *posteriori* conjunta para α , β , γ e σ^2 é dada por:

$$\pi_j(\alpha, \beta, \gamma, \sigma^2 / D) \propto \alpha^2 A_j^{\frac{1}{2}}(\beta, \gamma) \sigma^{-1} \sigma^{-(n+1)} \exp\left[-\frac{1}{2\sigma^2} S_j(\alpha, \beta, \gamma)\right], \quad (12)$$

onde:

$$S_1(\alpha, \beta, \gamma) = \sum_{i=1}^n [y_i - \alpha(1 + a_{1i})^{-1}]^2 \quad (\text{modelo logístico}),$$

$$S_2(\alpha, \beta, \gamma) = \sum_{i=1}^n [y_i - \alpha \exp(a_{2i})]^2 \quad (\text{modelo Gompertz}).$$

Integrando (12) com relação a σ , obtém-se a densidade a *posteriori* conjunta para α , β e γ dada por:

$$\pi_j(\alpha, \beta, \gamma / D) \propto \frac{\alpha^2 A_j^{\frac{1}{2}}(\beta, \gamma)}{[S_j(\alpha, \beta, \gamma)]^{\frac{n}{2}}}. \quad (13)$$

Para determinar as densidades a *posteriori* marginais para α , β e γ usamos o método de Laplace. Por exemplo, para encontrarmos uma aproximação de Laplace para a densidade marginal para α , consideramos $f_j(\beta, \gamma) = A_j^{\frac{1}{2}}(\alpha, \beta, \gamma)$, e $-nh_{j\alpha}(\beta, \gamma) = -\frac{n}{2} \log [S_j(\alpha, \beta, \gamma)]$, $j=1,2$ em (8).

De forma similar, encontramos as densidades a *posteriori* marginais para β e γ , respectivamente (ver Mazucheli, 1995).

Também considerando-se a priori não-informativa (11), a densidade preditiva para uma observação futura y^* num dado valor fixado x^* da variável independente, é dada por:

$$\pi_j(y^* / y) = \iiint f_j(y^* / \theta, \sigma^2) \pi_j(\theta, \sigma^2 / D) d\sigma d\alpha d\beta d\gamma, \quad (14)$$

onde

$$f_1(y^* / \theta, \sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2} \left[y^* - \frac{\alpha}{1 + \exp(\beta - \gamma x^*)}\right]^2\right\},$$

$$f_2(y^* / \theta, \sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2} \left[y^* - \alpha \exp(-\exp(\beta - \gamma x^*))\right]^2\right\},$$

e,

$$\pi_j(\theta, \sigma^2 / y) \propto \alpha^2 A_j^{\frac{1}{2}}(\beta, \gamma) \sigma^{-(n+1)} \exp\left[-\frac{1}{2\sigma^2} S_j(\alpha, \beta, \gamma)\right].$$

Para aproximar a integral múltipla dada em (14), também usamos o método de Laplace.

Aproximação similares são obtidas para os modelos Tipo-Weibull, M.M.F. e Richards.

3. Discriminação de Modelos de Crescimento

Para discriminar modelos de crescimento sob o enfoque clássico, usualmente o estatístico considera medidas de vício (Box, 1971), medidas de curvatura (Bates e Watts, 1980), estudos de simulação ou medidas de assimetria.

Se as suposições básicas de erros independentes e identicamente distribuídos normais com média zero e variância constante σ^2 estiverem satisfeitas, o melhor modelo possível, dentre todos os propostos, é aquele que apresenta um comportamento mais próximo do comportamento linear, uma vez que a validade das inferências (previsões, intervalos de confiança, testes de hipóteses, etc.) dependem desse comportamento. Se o comportamento for distante do comportamento linear, as inferências podem não ser confiáveis, principalmente para pequenas amostras e, muitas vezes, parametrizações alternativas podem reverter esse fato.

Sob o enfoque Bayesiano, a discriminação pode ser conduzida através das muitas estratégias que são propostas na literatura. Dentre elas, destacamos:

- (i) Fator de Bayes (Jeffreys, 1939);
- (ii) Critério baseado no conceito de entropia (Box e Hill, 1967);
- (iii) Pseudo Fator de Bayes (Geisser e Eddy, 1979);
- (iv) Fator de Bayes a *Posteriori* (Aitkin, 1991);

Num artigo recente, Gelfand e Dey (1994) definem uma densidade preditiva genérica que engloba muitas das estratégias Bayesianas existentes.

O fator de Bayes é definido por:

$$FB = \frac{\bar{L}_1^{(FB)}}{\bar{L}_2^{(FB)}}, \quad (15)$$

onde $\bar{L}_j^{(FB)} = \int L(\theta_j / D, M_j) \pi(\theta_j) d\theta_j$, ($j = 1, 2$) é interpretado como a média a priori da função de verossimilhança $\bar{L}_j^{(FB)} = L(\theta_j / D, M_j)$, em relação a priori $\pi(\theta_j)$ e ao modelo M_j .

Um dos problemas relacionados ao fator de Bayes (15) para discriminar dois modelos é o uso de densidades a priori impróprias, pois $\bar{L}_j^{(FB)}$ também será imprópria, e (15) não pode ser usado como critério de comparação. Outra restrição relacionado ao uso do fator de Bayes é verificado quando $n \rightarrow \infty$, que pode implicar em $FB \rightarrow \infty$, dando evidências ao modelo M_1 , sendo este melhor ou não (paradoxo de Lindley).

No sentido de contornar os problemas associados ao fator de Bayes, várias modificações são sugeridas na literatura como as citadas em (iii) e (iv).

Gelfand e Dey (1994) introduzem a densidade preditiva,

$$f(y_1 / y_2, M_j) = \frac{\iint L(\theta_j, \sigma_j^2 / y_1, M_j) L(\theta_j, \sigma_j^2 / y_2, M_j) \pi(\theta_j, \sigma_j^2) d\sigma_j d\theta_j}{\iint L(\theta_j, \sigma_j^2 / y_2, M_j) \pi(\theta_j, \sigma_j^2) d\sigma_j d\theta_j}, \quad (16)$$

onde, $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)$ é o vetor de variáveis resposta; $\mathbf{y}_1 = (y_1, \dots, y_{n_1})$, $\mathbf{y}_2 = (y_1, \dots, y_{n_2})$ são subconjuntos arbitrários de \mathbf{y} , de tamanhos n_1 e n_2 respectivamente; $L(\theta_j, \sigma_j^2 / \mathbf{y}_1, M_j)$ é a função de verossimilhança do j -ésimo modelo de crescimento definidos em (1), $j=1, \dots, 5$, dado n_1 observações; $L(\theta_j, \sigma_j^2 / \mathbf{y}_2, M_j)$ é a função de verossimilhança do j -ésimo modelo dado n_2 observações e $\pi(\theta_j, \sigma_j^2)$ é a densidade a priori para o j -ésimo modelo.

Alguns casos especiais de (16) são:

- (i) $\mathbf{y}_1 = \mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)$ e $\mathbf{y}_2 = \emptyset$, resultando na densidade a *posteriori* marginal de θ_j e σ_j^2 . Neste caso o denominador de (16) é ignorado (ver por exemplo, Gelfand e Dey, 1994).
- (ii) $\mathbf{y}_1 = \{y_r\}$ e $\mathbf{y}_2 = \mathbf{y} - \{y_r\}$ produzindo a densidade $f(y_r / \mathbf{y}_{(-r)}, M_j)$ conhecida como densidade *cross-validation*, (ver por exemplo, Geisser, 1975 ou Stone, 1974),

onde $\mathbf{y}_{(r)} = (y_1, y_2, \dots, y_{r-1}, y_{r+1}, \dots, y_n)$. Geisser e Eddy (1979) consideram $\prod_{r=1}^n f(y_r / \mathbf{y}_{(r)}, M_j)$.

(iii) $\mathbf{y}_1 = \mathbf{y}_2 = \mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)$ o qual resulta na densidade *posteriori* preditiva proposta por Aitkin (1991). A idéia é ponderar a densidade conjunta de \mathbf{y} com relação a *posteriori* e não com relação a priori.

(iv) $\mathbf{y}_1 = (y_1, \dots, y_{n_1})$, $\mathbf{y}_2 = \{y_{n_1+1}\}$, calculando (16) seqüencialmente, isto é, até que $\mathbf{y}_1 = (y_1, \dots, y_{n-1})$ e $\mathbf{y}_2 = \{y_n\}$, obtêm-se às probabilidades utilizadas no critério de discriminação proposto por Box e Hill (1967).

A partir de (i) obtém-se Fator de Bayes definido em (15). A partir de (ii), obtém-se o Pseudo fator de Bayes (ver Geisser e Eddy, 1979), dado por:

$$\text{PSFB} = \frac{\prod_{r=1}^n f(y_r / \mathbf{y}_{(r)}, M_j)}{\prod_{r=1}^n f(y_r / \mathbf{y}_{(r)}, M_{j'})} \quad (j \neq j') \quad (17)$$

A partir de (iii), obtém-se o fator de Bayes a *posteriori* (ver Aitkin, 1991) dado por:

$$\text{FBPO} = \frac{f(\mathbf{y} / \mathbf{y}, M_j)}{f(\mathbf{y} / \mathbf{y}, M_{j'})} \quad (j \neq j') \quad (18)$$

e a partir de (iv) obtém-se as probabilidades utilizadas no critério baseado no conceito de entropia proposto por Box e Hill (1967).

Usando o método de Laplace e os modelos de crescimento (1), podemos obter formulas simples para os critérios introduzidos acima (ver Mazucheli, 1995).

4. Um Exemplo

Os dados da tabela (1) (introduzidos por Heyes e Brown, 1956) se referem à quantidade de água presente em células de raízes de feijão (variável dependente y), obtida em diferentes pontos das raízes (variável independente x).

x	y
0.5	1.3
1.5	1,3
2.5	1.9
3.5	3.4
4.5	5.3
5.5	7.1
6.5	10.6
7.5	16.0
8.5	16.4
9.5	18.3
10.5	20.9
11.5	20.5
12.5	21.3
13.5	21.2
14.5	20.9

Tabela 1 - Dados de Heyes e Brown.

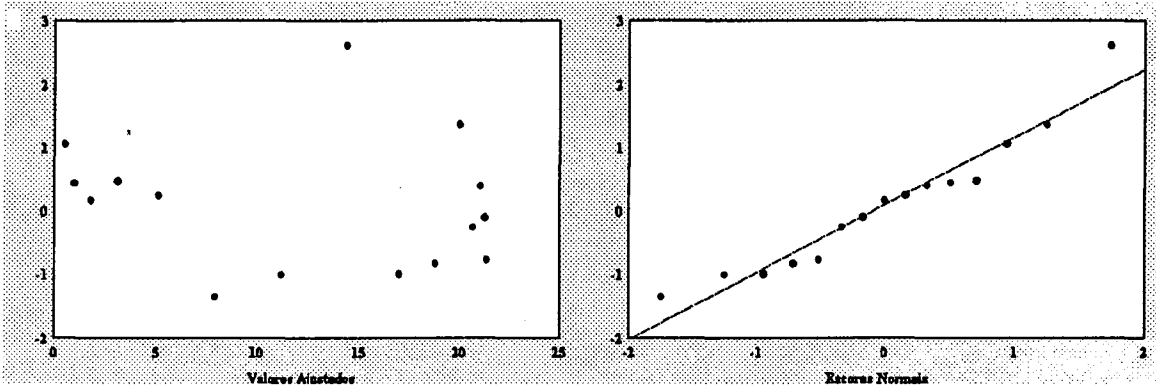
A partir de uma análise gráfica, verificamos uma forma similar à dada na figura (1). Portanto, decidimos analisar os dados considerando um dos cinco modelos dados em (1): logístico, Gompertz, Tipo-Weibull, Morgan-Mercer-Flodin e Richards.

Usando o método de Gauss-Newton, com critério de convergência $\delta \leq 1e - 10$ ou 50 iterações, obtemos as estimativas de mínimos quadrados dos parâmetros (ver tabela 2).

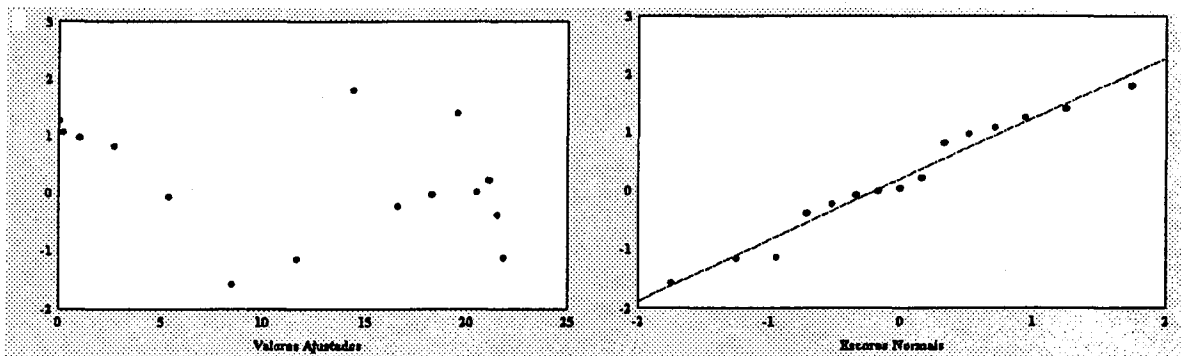
Modelo	Estimativas					Iterações
	α	β	γ	δ	σ^2	
logístico	21.5089	3.9573	0.6222	-	0.5175	5
Gompertz	22.5066	2.1063	0.3881	-	1.0492	9
Weibull	21.1036	19.8147	0.0018	3.1796	0.4952	4
M.M.F.	22.0772	1.6531	5586.05	4.5601	0.5791	7
Richards	21.2040	5.6919	0.7772	1.6189	0.5021	7

Tabela 2 - Estimativas de Mínimos Quadrados.

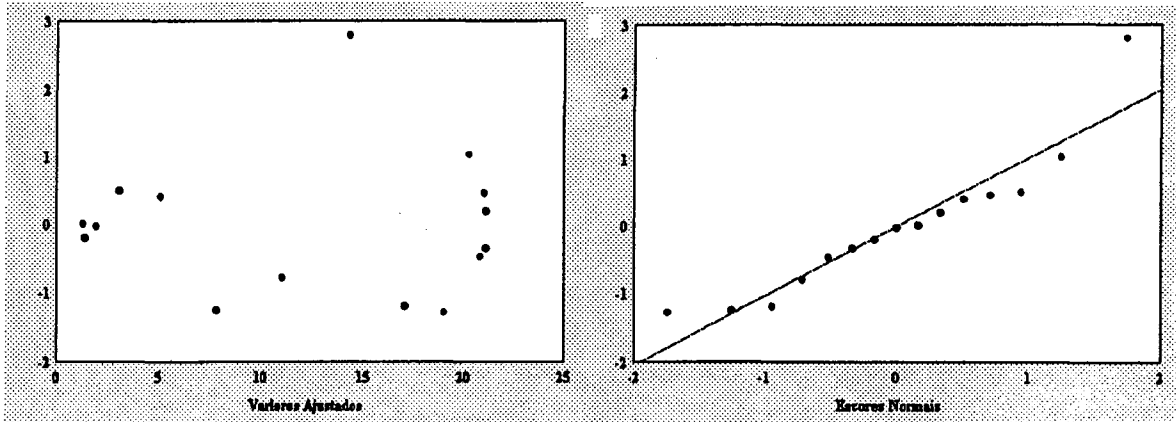
Na figura (2) temos os gráficos de resíduos considerando os cinco modelos de crescimento (ver 1). Observar que, podemos ter dúvidas sobre qual modelo melhor se ajusta ao dados.



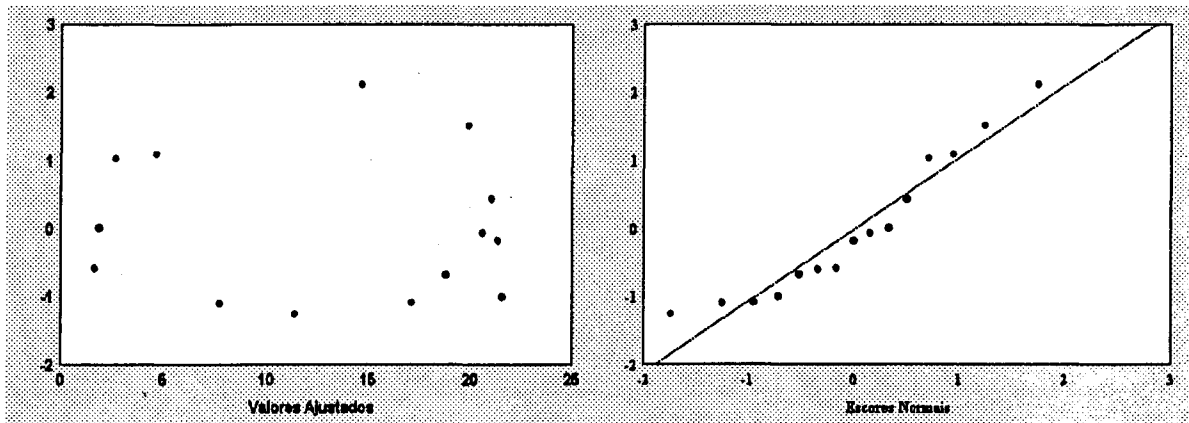
Modelo logístico.



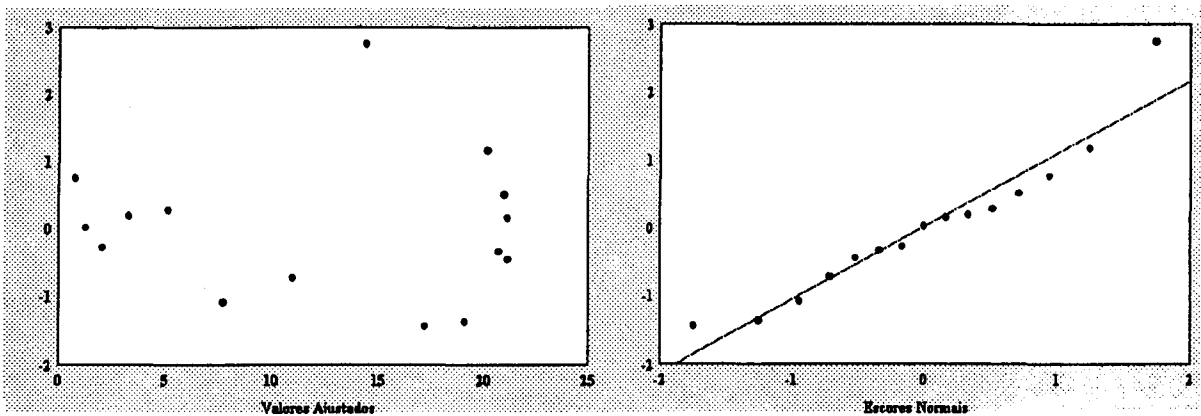
Modelo Gompertz.



Modelo T. Weibull.



Modelo M.M.F.



Modelo Richards.

Figura 2- Gráficos de Resíduos e Escores Normais.

A partir das medidas de curvatura de Bates e Watts (1980), (ver tabela 3), e comparando as medidas “IN” (curvatura intrínseca) e “PE” (curvatura paramétrica), com os valores críticos $1/(2\sqrt{F_{(3,12;0.95)}}) = 0.2676$ para modelos de três parâmetros, e $1/(2\sqrt{F_{(4,11;0.95)}}) = 0.2723$ para os modelos de quatro parâmetros, podemos observar que só o modelo Richards apresenta curvatura intrínseca significativa, indicando assim que para o conjunto de dados da tabela (1), a curvatura do espaço de estimação não é razoavelmente pequena. Com respeito à curvatura paramétrica, o modelo logístico, é o modelo que apresenta menor não linearidade devido ao efeito dos parâmetros, apesar de ser, de certa forma, significativa.

A partir das medidas de vícios dos parâmetros, (ver Box, 1971), podemos verificar quais parâmetros são os maiores responsáveis pela falta de não linearidade paramétrica, (ver tabela 4).

Modelo	Curvaturas Máximas	
	IN	PE
logístico	0.1070*	0.3717**
Gompertz	0.2318*	0.8799**
Weibull	0.2319*	13.2534**
M.M.F.	0.2102*	24.9338**
Richards	0.2948**	4.2680**

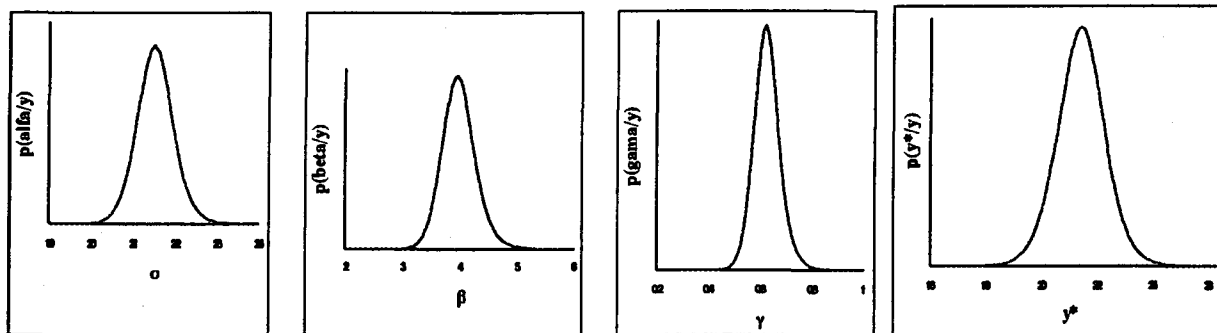
Tabela 3 - Medidas de Curvatura (*: Não Significativa ; **: Significativa).

Modelo	Estimativa do Vício				Porcentagem do Vício			
	α	β	γ	δ	α	β	γ	δ
logístico	0.0154	0.0173	0.0028	-	0.0714	0.4381	0.4439	-
Gompertz	0.0608	0.0225	0.0038	-	0.2703	1.0659	0.9759	-
Weibull	0.0217	0.0311	0.0002	0.0222	0.1028	0.1571	11.4855	0.6975
M.M.F.	0.0524	0.0131	3091.382	0.0367	0.2374	0.7942	55.3410	0.8051
Richards	0.0389	0.2522	0.0329	0.1030	0.1835	4.4310	4.2322	6.3632

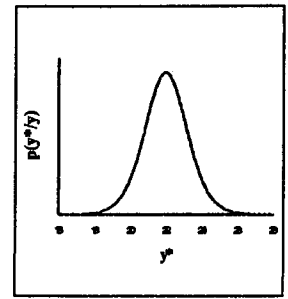
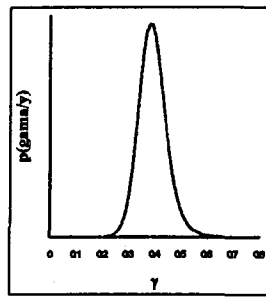
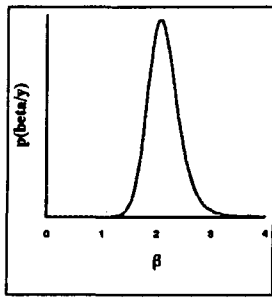
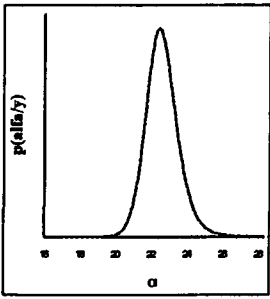
Tabela 4 - Medida de Vício e Porcentagem do Vício ($100 * \text{vício} / \hat{\theta}$).

É evidente que uma reparametrização poderia reduzir esses efeitos de não linearidade, mas em geral, o pesquisador tem interesse em obter inferências para os parâmetros em sua forma original.

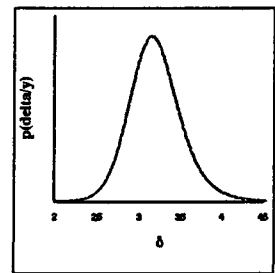
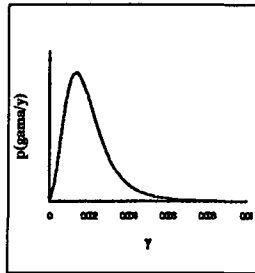
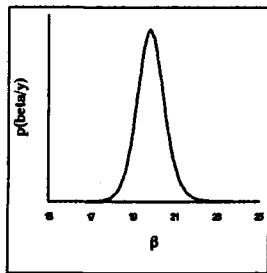
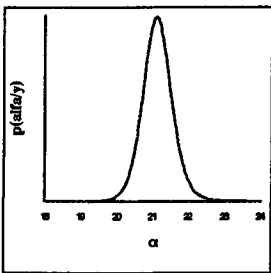
Considerando-se a priori não informativa (4) e usando o método de Laplace (ver seção 2.1), obtemos gráficos das densidades a *posteriori* e preditivas (um valor $x^*=15$ da variável independente) de interesse (ver figura 3).



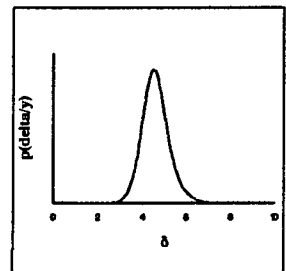
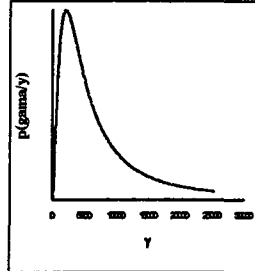
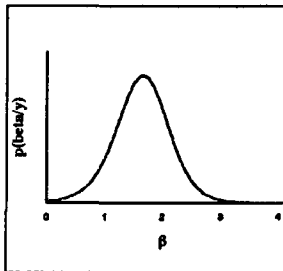
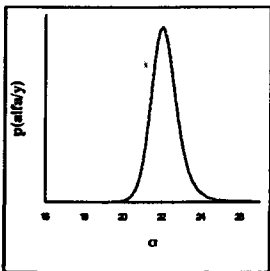
Modelo logístico.



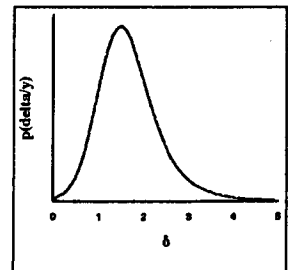
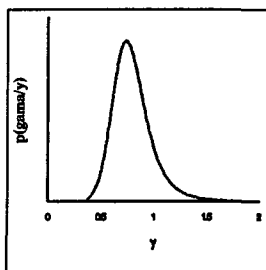
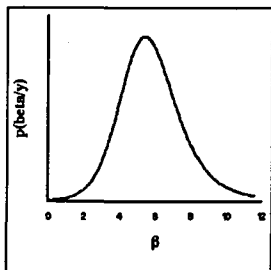
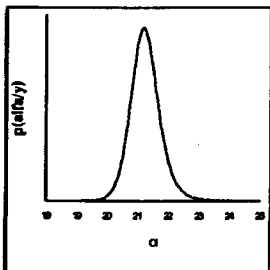
Modelo Gompertz.



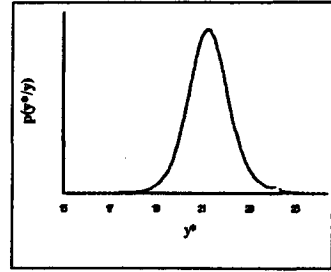
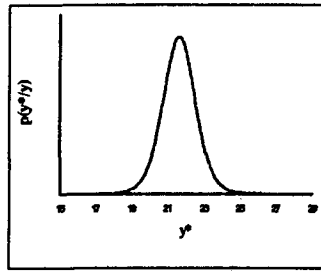
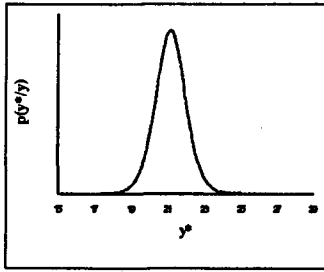
Modelo Tipo-Weibull.



Modelo Morgan-Mercer-Flodin.



Modelo Richards.



Modelo Tipo-Weibull

Modelo M.M.F.

Modelo Richards

Figura 3- Densidades a posteriori marginais e preditivas em $x^*=15$.

Sob o enfoque Bayesiano, podemos discriminar os cinco modelos de crescimento propostos.

Inicialmente, considerando-se a técnica proposta por Box e Hill (1967), assumindo mesma probabilidade a priori para todos os modelos, isto é, $\pi_{j,n_1} = 0.2$ e $n_1 = 12$ observações, temos na tabela (5) as probabilidades a posteriori, em cada etapa sequencial. Para calcular esses valores, usamos o método de Laplace de integração.

n	$\pi_{n,1}$	$\pi_{n,2}$	$\pi_{n,3}$	$\pi_{n,4}$	$\pi_{n,5}$
12	0.2329	0.0927	0.2408	0.1959	0.2377
13	0.2680	0.0587	0.2384	0.2050	0.2298
14	0.2861	0.0294	0.2613	0.1786	0.2447
15	0.2687	0.0132	0.3145	0.1291	0.2745
Modelo	logístico	Gompertz	Weibull	M.M.Flodin	Richards

Tabela 5 - Probabilidades a posteriori dos 5 modelos.

A partir da tabela (5), observar que existe maior evidência para o modelo Tipo-Weibull.

Considerando comparações somente entre modelos de mesma dimensão a partir do procedimento proposto por Box e Hill (1967) e usando o método de Laplace, temos na tabela (6), as probabilidades a *posteriori* para cada modelo.

Observar que entre os modelos logístico e Gompertz, ficamos com o modelo logístico. Comparando-se os três modelos Tipo-Weibull, Morgan-Mercer-Flodin, e Richards, o melhor modelo seria dado pelo modelo Tipo-Weibull (ver tabela 6).

n	$\pi_{n,1}$	$\pi_{n,2}$	$\pi_{n,3}$	$\pi_{n,4}$	$\pi_{n,5}$
12	0.7153	0.2847	0.3571	0.2904	0.3524
13	0.8203	0.1797	0.3541	0.3045	0.3413
14	0.9069	0.0931	0.3817	0.2609	0.3574
15	0.9530	0.0470	0.4380	0.1798	0.3822
modelo	logístico	Gompertz	T-Weibull	M.M.F.	Richards

Tabela 6 - Probabilidades a *posteriori* dos modelos de mesma dimensão

Na tabela (7), temos os resultados de discriminação Bayesiana, usando o Fator de Bayes, o Pseudo Fator de Bayes e o Fator de Bayes a *Posteriori* introduzidos na seção (3) e considerando o método de Laplace para aproximação de integrais.

Procedimento	M_1 vs. M_2	M_1 vs. M_3	M_1 vs. M_4	M_1 vs. M_5
F. Bayes	63.8777	0.3042	0.6861	0.3587
F. Bayes <i>Posteriori</i>	200.4549	0.5287	0.7107	0.5867
P. Fator Bayes	58.0387	0.0003	0.4804	0.4939

Tabela 7 - Discriminação Bayesiana Baseada no Fator de Bayes.

Na tabela (8), temos os resultados de discriminação Bayesiana para modelos de mesma dimensão.

Procedimento	M_3 vs. M_4	M_3 vs. M_5
F. Bayes	2.2557	1.1792
F. Bayes <i>Posteriori</i>	3.2355	1.1096
P. Fator Bayes	4414.8697	13402.248

Tabela 8 - Discriminação Bayesiana - Modelos de Mesma Dimensão.

A partir dos resultados das tabela (7) e (8), novamente concluímos que o modelo Tipo-Weibull seria destacado como o melhor, mas quando comparamos modelos de mesma dimensão, o modelo M_1 (logístico) é claramente superior.

REFERÊNCIAS

- AITKIN, M. (1991). *Posterior Factor*. *J. R. Stat. Soc.*, B, 53, 111-142.
- BATES, D. M.; WATTS, D. G. (1980). *Relative Curvature Measures of Nonlinearity*. *J. R. Stat. Soc.*, B, 42, 1-25.
- BATES, D. M.; WATTS, D. G. (1988). *Nonlinear Regression Analysis and its Applications*. Wiley: New York. BEALE, E. M. L. (1960). *Confidence Regions in Nonlinear Estimation*. *J. R. Statist. Soc.*, B, 22, 41-76.
- BOX, G. E. P.; HILL, W. J. (1967). *Discrimination Among Mechanistic Models*, *Technometrics*, 9, 57-71.
- BOX, M. J. (1971). *Bias in Nonlinear Estimation*. *J. R. Stat. Soc.*, B, 33, 171,201.
- GEISSER, S.; EDDY, W. F. (1979). *A Predictive Approach to Model Selection*. *J. Am. Stat. Assoc.*, 74, 153-160.

- GELFAND, A. E.; DEY, D. K. (1994). *Bayesian Model Choice: Asymptotic and Exact Calculations*. J. R. Stat. Soc., B, 3, 501-514.
- HEYES, K. K.; BROWN, R. (1956). *Growth and Cellular Differential*, in F. L. Milthorpe (ED.), *The Growth of Leaves*, Butterworth, London.
- JEFFEYS, H. (1939). *Theory of Probability*. Oxford University Press.
- KASS, R. E.; TIERNEY, L.; KADANE, J. B. (1990). *The Validity of Posterior Expansions Based on Laplace's Method*. In *Essays in Honor of George A. Barnard*, Ed. J. Hodges, North-Holland, Amsterdam, 473-488.
- LOWRY, R. K.; MORTON, R. (1983). *An Asymmetry Measure for Estimators in Non-Linear Regression Models*. Proc. 44th Session Inst., Madrid, Contributed Papers, Vol. 1, 351-354.
- MAZUCHELI, J. (1995). *Análise Bayesiana e Discriminação de Modelos Não Lineares*. Dissertação de Mestrado. ICMCS-USP.
- RATKOWSKY, D. A. (1983). *Nonlinear Regression Models*. Marcel Dekker: New York.
- RATKOWSKY, D. A. (1990). *Handbook of Nonlinear Regression Models*. Marcel Dekker: New York.
- SEBER, G. A. F.; Wild, C. J. (1989). *Nonlinear Regression*. Wiley: New York.
- STONE, M. (1974). *Cross-Validatory Choice and Assessment of Statistical Predictions (with Discussion)*. J. R. Stat. Soc. B, 36, 111-147.
- TIERNEY, L.; KADANE, J. B. (1986). *Accurate Approximations For Posterior Moments and Marginal Densities*. J. Am. Stat. Assoc., 81, 82-86.
- TIERNEY, L.; KASS, R. E.; KADANE, J. B. (1989). *Approximate Marginal Densities For Non-Linear Functions*. Biometrika, 76, 425-433.

NOTAS DO ICMSC

SÉRIE ESTATÍSTICA

- 023/96 ANDRADE, M.G.; SOARES, S.; CRUZ Jr., G.; VINHAL, C.D.N - Uma abordagem estocástica para o planejamento a longo prazo da operação de sistema hidrotérmicos.
- 022/95 ACHCAR, J. - A generalized Moranda software reliability model: a bayesian approach.
- 021/95 RODRIGUES, J. - Inference for the software reliability using asymmetric loss functions: A hierarchical Bayes approach.
- 020/95 RODRIGUES, J.; BOLFARINE, H.; CORDEIRO, G.M. - Nonlinear quasi-bayesian theory and the inverse linear regression.
- 019/95 LEANDO, R.A.; ACHCAR, J.A.; - Generation of bivariate lifetime data assuming the Block & Basu exponential
- 018/95 ACHCAR, J.A.; - Use of approximate bayesian inference for software reliability
- 017/95 ACHCAR, J.A.; FAVORETTI, A.C. - Accurate inferences for the Michaelis-Menten model
- 016/95 RODRIGUES, J.; CHITTA, S.P. - Bayesian Analysis in M/M/1 queues using Sampling Methods
- 015/95 ACHCAR, J.A.; PEGORIN M.A. - Laplace's approximations for posterior expectations when the mode is not in the parameter space.
- 014/94 ACHCAR, J. A.; FOGO, J.C. - Accurate inferences for the reliability function considering accelerated life tests.