

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA

UMA ABORDAGEM CLÁSSICA E BAYESIANA
PARA OS MODELOS DE GOMPERTZ E DE
RICHARDS HETEROSCEDÁSTICOS

Prescila Glaucia Christianini Buzolin

Orientador: Prof. Dr. Carlos Alberto Ribeiro Diniz

Dissertação apresentada ao Departamento de Estatística da Universidade Federal de São Carlos - DEs/UFSCar, como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Estatística.

São Carlos

Setembro de 2005

**Ficha catalográfica elaborada pelo DePT da
Biblioteca Comunitária da UFSCar**

B992ac

Buzolin, Prescila Glaucia Christianini.

Uma abordagem clássica e bayesiana para os modelos de Gompertz e de Richards heteroscedásticos / Prescila Glaucia Christianini Buzolin. -- São Carlos : UFSCar, 2006. 128 p.

Dissertação (Mestrado) -- Universidade Federal de São Carlos, 2005.

1. Teoria bayesiana de decisão estatística. 2. Inferência bayesiana. 3. Heteroscedasticidade. 4. Modelos de crescimento sigmoidais. I. Título.

CDD: 519.542 (20^a)

Agradecimentos

A Deus, pela Força durante estes anos de estudo.

Aos meus pais, Antonio Luiz Buzolin e Leonilia Christianini Buzolin, a minha irmã Lizandra, por acreditarem em mim e pelo incentivo durante a realização deste trabalho.

Em especial ao meu irmão Júnior (em memória), que, na medida do possível, esteve presente em todos os meus momentos de alegria e tristeza.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Carlos Alberto Ribeiro Diniz, pela maneira como conduziu este trabalho, incentivando-me a pesquisa, pela sua dedicação e por compartilhar comigo sua experiência.

Aos professores do Departamento da Estatística da UFSCar-Des pela dedicação e empenho ao ensino.

A todos que, direta ou indiretamente, acompanharam-me durante o desenvolvimento deste trabalho, o meu muito obrigada.

Resumo

Esta dissertação apresenta as abordagens Clássica e Bayesiana para os modelos de crescimento sigmoidais de Gompertz e de Richards.

São consideradas as suposições de homoscedasticidade e heteroscedasticidade multiplicativa dos erros.

Para a análise Clássica foi utilizado o método de máxima verossimilhança onde a obtenção das estimativas dos parâmetros ocorreu através de métodos iterativos.

Para a análise bayesiana, foram consideradas prioris não informativas de Jeffreys e para a obtenção dos resumos a posteriori utilizamos o algoritmo de Metropolis-Hastings. Ambos os métodos foram ilustrados através de dados simulados e reais.

Abstract

This work presents a classical and a Bayesian approaches to two sigmoidal growth curves, the Gompertz and the Richards models.

We consider the homoscedastic assumption and a multiplicative heteroscedastic structure.

For the classical approach we use the maximum likelihood method and for bayesian approach we consider non-informative priors. The posterioris summaries were obtained by the use of the Metropolis-Hastings algorithm.

The illustration of both approaches is made using a simulated and a real data set.

Sumário

1	Introdução	1
2	Análise Clássica	6
2.1	Introdução	6
2.2	Análise Clássica Homoscedástica	7
2.2.1	Modelo de Gompertz	7
2.2.2	Modelo de Richards	13
2.3	Análise Clássica Heteroscedástica	19
2.3.1	Introdução	19
2.3.2	Modelo de Gompertz	20
2.3.3	Modelo de Richards	23
3	Análise Bayesiana	28
3.1	Introdução	28
3.2	Análise Bayesiana Homoscedástica.	29
3.2.1	Modelo de Gompertz	29
3.2.2	Modelo de Richards	33
3.3	Análise Bayesiana Heteroscedástica	35
3.3.1	Introdução	35
3.3.2	Modelo de Gompertz	35
3.3.3	Modelo de Richards	38
4	Aplicação da Análise Clássica	43
4.1	Modelo de Gompertz	43
4.2	Modelo de Richards	51

5	Aplicação da Análise Bayesiana	60
5.1	Modelo de Gompertz	60
5.2	Modelo de Richards	70
6	Comparação da Análise Clássica com a Análise Bayesiana	81
6.1	Comparação através do Modelo de Gompertz	81
6.2	Comparação através do Modelo de Richards	86
7	Uma Aplicação	93
7.1	Análise Clássica	95
7.2	Análise Bayesiana	99
8	Conclusão	117
	Referências Bibliográficas	118

Capítulo 1

Introdução

A análise de dados de crescimento é de fundamental importância em diversas áreas de pesquisa científica. Biólogos são interessados em descrever o crescimento e tentar compreender sobre seus mecanismos. Químicos são interessados na formulação de produtos de reações químicas ao longo do tempo. Na agricultura são óbvias a economia e as vantagens administrativas em se conhecer como e quão rápido as plantações crescem e esse conhecimento pode ajudar na melhora das condições ambientais. Na medicina há interesse no crescimento infantil, em como os tumores crescem e o efeito dos tratamentos sobre seus crescimentos. Cientistas sociais tem interesse no crescimento da população, em novos partidos políticos, na oferta de alimentos e na demanda de energia.

Os modelos de crescimento podem ter vários níveis de complexidade e, dependendo do objetivo da pesquisa, o modelo considerado pode ser intratável do ponto de vista da inferência.

A maior parte dos modelos utilizados na análise de dados de crescimento são não lineares e comumente são deduzidos a partir de considerações teóricas do processo de estudo.

Em geral, em aplicações, temos interesse em modelar uma variável resposta que aumenta com o tempo e quando os dados são colocados em um gráfico observamos uma forma em "S" (Figura 1.1) com certa tendência a estabilização.

Uma curva sigmoidal inicia em algum ponto fixo, com a razão de crescimento aumentando monotonicamente até atingir o ponto de inflexão, e, logo em seguida, essa razão

decai até atingir algum valor final (Figura 1.2).

decrecimento

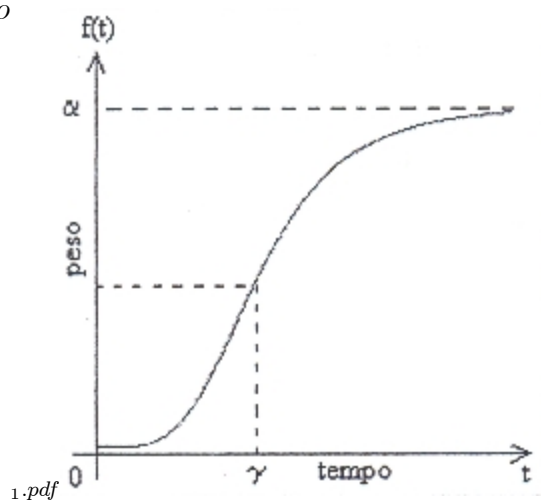


Figura 1.1.- Curva de crescimento

decrecimento

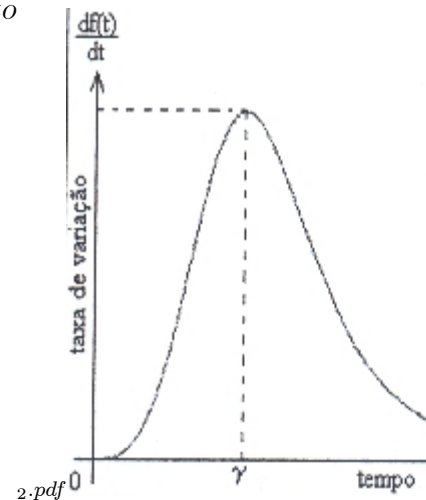


Figura 1.2.- Taxa de crescimento

Considere, por exemplo, o estudo de Pütter (1920) em que o crescimento animal pode ser interpretado como resultado da contraposição entre síntese de energia e consumo de energia, ou seja, das forças de anabolismo e catabolismo de materiais em construção no organismo (ver Fitzhugh, 1974). Haverá crescimento a medida que a construção de energia prevalece sobre o seu consumo. O organismo alcança um estado de equilíbrio se, e quando, os dois processos são equivalentes. Esta idéia pode ser expressa pela relação

$$\frac{dy}{dt} = \eta y^m - k y^n.$$

Em outras palavras, a mudança de peso é dada pela diferença entre os processos de síntese e consumo, η e k são constantes de anabolismo e catabolismo respectivamente, e as componentes m e n indicam que os últimos são proporcionais a alguma potência do peso corpóreo y .

Podemos citar também uma situação de crescimento onde existem evidências de que a razão de crescimento em uma particular variação do tempo é proporcional à quantidade final de crescimento, a qual pode ser expresso por $\frac{dy}{dt} = k(\alpha - y)$, onde k é a constante de proporcionalidade do crescimento padrão, α é o crescimento limite, isto é, o maior crescimento possível atingido e y é a resposta (altura, peso, produção, entre outras) observada em um particular tempo t .

Fazendo $z = \alpha - y$ em $\frac{dy}{dt} = k(\alpha - y)$ obtemos

$$\begin{aligned}\frac{\partial z}{\partial t} &= \frac{\partial y}{\partial t} \cdot \frac{\partial z}{\partial y} = k \cdot z \cdot (-1); \\ \frac{\partial z}{\partial t} &= -kz \iff z = \exp(-kt) \iff \exp(-kt) = \alpha - y,\end{aligned}\quad (1.1)$$

e

$$y = \alpha - \exp(-kt) \iff y = \alpha \left(1 - \frac{1}{\alpha} \exp(-kt)\right).$$

Denotando $\frac{1}{\alpha} = \beta$, temos $y = \alpha(1 - \beta \exp(-kt))$, que é a função de crescimento monomolecular (ver Draper e Smith 1981).

Assumindo que os y_i ; $i = 1, \dots, n$, são observações de y nos tempos t_1, t_2, \dots, t_n e considerando as expressões em 1.1, temos o seguinte modelo de regressão não linear

$$y_i = \alpha(1 - \beta \exp(-kt_i)) + \varepsilon_i$$

A literatura apresenta vários modelos de crescimento sigmóide (Seber e Wild, 1989; Ratkowsky, 1983), dos quais destacamos os modelos Logístico, Gompertz, Tipo-Weibull, Morgan-Mercer-Flodin e de Richards, dados abaixo.

$$\begin{aligned}y_i &= \alpha [1 + \exp(\beta - \gamma x_i)]^{-1} + \varepsilon_i && \text{(Logístico);} \\ y_i &= \alpha \exp[-\exp(\beta - \gamma x_i)] + \varepsilon_i && \text{(Gompertz);} \\ y_i &= \alpha - \beta \exp(-\gamma x_i^\delta) + \varepsilon_i && \text{(Tipo Weibull);} \\ y_i &= [\beta\gamma + \alpha x_i^\delta] [\gamma + x_i^\delta]^{-1} + \varepsilon_i && \text{(M.M.F.);} \\ y_i &= \alpha [1 + \exp(\beta - \gamma x_i)]^{-\frac{1}{\delta}} + \varepsilon_i && \text{(Richards),}\end{aligned}$$

onde ε_i é uma variável aleatória normalmente distribuída com média zero e variância constante σ^2 .

Em todos os modelos, o parâmetro α corresponde à assíntota da curva, ou o crescimento máximo, o parâmetro β corresponde ao intercepto no eixo y (isto é, o valor de y quando $x = 0$), ou o tamanho inicial e o parâmetro γ refere-se a taxa com a qual a resposta muda do valor inicial (determinado pela magnitude de β) para o valor final

(determinado pela magnitude de α), ou seja, determina a taxa de crescimento da curva. O parâmetro δ , presente em alguns modelos, fornece maior flexibilidade à curva. Todos os parâmetros possuem valores positivos.

Para fazer inferências nesses modelos, em geral, é considerado um processo iterativo. Os estimadores de mínimos quadrados e a construção de testes de hipóteses ou intervalos de confiança são baseados em resultados assintóticos. Para avaliar a precisão desses resultados, usualmente utilizamos medidas que avaliam a extensão do comportamento não linear, como alguns estudos de simulação (Ratkowsky, 1983).

Também é comum o uso do método de máxima verossimilhança (ver Kalbfleish, 1985) para estimação dos parâmetros do modelo e de resultados assintóticos usuais na construção de testes de hipóteses e intervalos de confiança.

Quando os resultados inferenciais obtidos não são muito precisos, consideramos diferentes parametrizações que podem melhorar a precisão dos resultados obtidos (Bates e Watts, 1981). Apesar disso, muitas vezes não é adequado utilizar transformação nos parâmetros originais, pois, em geral, estes parâmetros possuem interpretações físicas ou biológicas relacionadas ao experimento. Nestes casos, uma análise Bayesiana pode ser de grande interesse prático.

Quando a variância dos erros de um modelo variam, por exemplo, de acordo com o tamanho da variável explicativa, pode-se dizer que a suposição de homoscedasticidade não está satisfeita e o modelo pode ser chamado de heteroscedástico. Um tipo bastante comum de heteroscedasticidade acontece quando o incremento da variável explicativa é acompanhado por um aumento na dispersão dos pontos. Isso implica que a variância dos erros será tanto maior quanto maiores forem os valores da variável explicativa. Desta forma, se a heteroscedasticidade não for considerada nas análises, inferências sobre os parâmetros do modelo podem ser afetadas por alguns valores de erros relacionados com altos valores da variável explicativa.

Os modelos de crescimento existentes na literatura não levam em consideração a presença de heteroscedasticidade, mesmo quando ela existe. Toda análise clássica ou Bayesiana é feita considerando apenas modelos homoscedásticos.

Nesta dissertação apresentamos uma análise Clássica e Bayesiana dos modelos de Gompertz e de Richards envolvendo heteroscedasticidade.

No Capítulo 2 fazemos uma inferência clássica homoscedástica e heteroscedástica para os Modelos de Gompertz e de Richards utilizando as estimativas de máxima verossimilhança dos parâmetros e seus respectivos intervalos de confiança.

Inferência clássica utilizando bootstrap para o Modelo de Richards homoscedástico, com uma transformação de Box e Cox, foi estudada por Loibel (2004) e a análise clássica do Modelo de Gompertz foi estudada por Mazucheli (1994).

No Capítulo 3 apresentamos uma análise Bayesiana homoscedástica e heteroscedástica dos modelos de crescimento não linear de Gompertz e de Richards, considerando densidades *a priori* não informativas de Jeffreys. Nos dois modelos utilizamos o método Metropolis-Hastings para amostragem das condicionais desconhecidas. O algoritmo Metropolis-Hastings é utilizado quando *a posteriori* condicional a ser amostrada não é conhecida.

Análise Bayesiana para o Modelo de Gompertz homoscedástico foi desenvolvida por Mazucheli (1994) utilizando aproximação de Laplace nos cálculos das densidades *a posteriori* marginais e a análise Bayesiana para o Modelo de Richards homoscedástico utilizando método de simulação de Monte Carlo em Cadeias de Markov e, mais especificamente, o algoritmo de Gibbs Sampling em conjunto com o algoritmo Metropolis-Hastings, foi estudada por Loibel (2004).

Nos Capítulos 4 e 5 apresentamos uma aplicação simulada dos parâmetros em questão e no Capítulo 6 uma aplicação com dados reais.

Capítulo 2

Análise Clássica

2.1 Introdução

O Modelo de Gompertz é muito utilizado e é baseado na lei de mortalidade de Gompertz. O matemático holandês Benjamim Gompertz mostrou em 1825 que a taxa de mortalidade cresce em progressão geométrica. O gráfico da taxa de morte em escala logarítmica, apresenta-se como uma reta e é conhecida como função de Gompertz. Este modelo tem sido usado para crescimento individual de organismos (Kroll, Tornero, 1994) e também para crescimento de tumores, considerando, neste caso, o crescimento do número de células cancerosas (Cahales *et al.*, 2001).

O Modelo de Richards foi inicialmente usado para estudar o crescimento em organismos individuais (por exemplo, peso *versus* idade). Posteriormente, foi também utilizado para crescimento populacional. Esse modelo é uma generalização de outros modelos como o Logístico, o Gompertz, o Brody e o Von Bertalanffy. É interessante notar que todos esses modelos podem ser usados tanto para o crescimento dos indivíduos como para o crescimento das populações.

Neste capítulo faremos uma inferência clássica para os Modelos de Gompertz e de Richards, supondo homoscedasticidade e heteroscedasticidade, utilizando as estimativas de máxima verossimilhança dos parâmetros e seus respectivos intervalos de confiança.

2.2 Análise Clássica Homoscedástica

2.2.1 Modelo de Gompertz

O modelo de Gompertz é freqüentemente usado para estudos de populações e crescimento animal em situações onde o crescimento não é simétrico em torno do ponto de inflexão.

A razão de crescimento de Gompertz é dada pela seguinte equação diferencial:

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x} = k \cdot f(x) \cdot (\log \alpha - \log f(x)), \quad k > 0 \text{ e } \alpha > 0, \quad f(x) > 0 \quad \forall x \geq 0.$$

A função de Gompertz é determinada considerando:

$$z = \log \alpha - \log(f(x)) = \log \frac{\alpha}{f(x)};$$

$$\frac{\partial z}{\partial x} = \frac{\partial f(x)}{\partial x} \cdot \frac{\partial z}{\partial f(x)} = k \cdot f(x) \cdot z \cdot \left(\frac{-1}{f(x)} \right) = -kz.$$

Como $\frac{\partial z}{\partial x} = -kz$, podemos tomar

$$z = \exp [(-k)(x - \gamma)];$$

então:

$$\log \frac{\alpha}{f(x)} = \exp [(-k)(x - \gamma)];$$

$$-\log \frac{f(x)}{\alpha} = \exp [(-k)(x - \gamma)];$$

$$\log \frac{f(x)}{\alpha} = -\exp [(-k)(x - \gamma)];$$

$$\Leftrightarrow \frac{f(x)}{\alpha} = \exp (-\exp [(-k)(x - \gamma)]);$$

e

$$f(x) = \alpha \exp (-\exp [(-k)(x - \gamma)]), \quad -\infty < x < \infty.$$

Tomando $\beta = k\gamma$ e $k = \gamma$, temos:

$$f(x) = \alpha \exp(-\exp(\beta - \gamma x)), \quad -\infty < x < \infty.$$

Como

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x} = k \cdot f(x) \cdot \log \alpha - k \cdot f(x) \cdot \log(f(x)),$$

considerando a sua derivada e igualando a zero, encontramos o ponto de inflexão

$$\frac{\partial \left(\frac{\partial f(x)}{\partial x} \right)}{\partial x} = k \cdot \log \alpha - k \cdot \log(f(x)) - \frac{k f(x)}{f(x)} = 0;$$

$$k \cdot (\log \alpha - \log(f(x)) - 1) = 0;$$

$$k \cdot \log \frac{\alpha}{f(x)} = k \iff \frac{\alpha}{f(x)} = e \iff f(x) = \frac{\alpha}{e};$$

Assim, o ponto de inflexão ocorre em $x = \gamma$.

Para a curva de Gompertz, $\log y$ é monomolecular, isto significa que em muitas medidas de tamanho, como peso, área, comprimento e altura, podem ser dadas por curvas de crescimento com mesma forma.

Wrigh (1926) foi quem inicialmente utilizou este modelo como um modelo de crescimento, mas esta formulação foi totalmente empírica e em 1940, Medawar a utilizou como modelo de crescimento para coração de frangos (ver Seber e Wild, 1989).

Função de Verossimilhança

Na determinação da função de verossimilhança utilizamos uma certa parametrização do modelo de Gompertz. Considerando

$$f(x) = \alpha \exp(-\exp(\beta - \gamma x)), \quad -\infty < x < \infty$$

e tomando uma amostra de tamanho n , uma relação entre a variável resposta y e a variável independente x é dada por:

$$y_i = f(x_i) + \varepsilon_i,$$

ou seja,

$$y_i = \alpha \exp(-\exp(\beta - \gamma x_i)) + \varepsilon_i$$

onde (x_i, y_i) ; $i = 1, 2, \dots, n$; são pares de observações, α, β e γ são os parâmetros a serem estimados e ε_i ; $i = 1, 2, \dots, n$, são os erros independentes e identicamente distribuídos tal que $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$.

Podemos escrever a função de verossimilhança $L(\alpha, \beta, \gamma, \sigma^2)$ para α, β, γ e σ^2 da seguinte forma

$$L(\alpha, \beta, \gamma, \sigma^2) = \prod_{i=1}^n \left\{ (2\pi\sigma^2)^{-\frac{1}{2}} \cdot \exp \left[-\frac{[y_i - \alpha \cdot \exp(-\exp(\beta - \gamma x_i))]^2}{2\sigma^2} \right] \right\}.$$

Para facilitar a leitura, considere

$$\theta = (\alpha, \beta, \gamma) \quad \text{e} \quad a_i = \exp(\beta - \gamma x_i).$$

Assim,

$$L(\theta, \sigma^2) = (2\pi\sigma^2)^{-\frac{n}{2}} \cdot \exp \left[-\frac{\sum_{i=1}^n [y_i - \alpha \cdot \exp(-a_i)]^2}{2\sigma^2} \right].$$

Por definição, os estimadores de máxima verossimilhança $\hat{\theta}$ e $\hat{\sigma}^2$ são o valores que maximizam a função de verossimilhança $L(\theta, \sigma^2)$. Para simplificar os cálculos é comum determinarmos $\hat{\theta}$ e $\hat{\sigma}^2$ a partir da função log-verossimilhança

$$l(\theta, \sigma^2) \propto -\frac{n}{2} \log(\sigma^2) - \frac{\sum_{i=1}^n [y_i - \alpha \cdot \exp(-a_i)]^2}{2\sigma^2}.$$

Calculando as primeiras derivadas em relação a θ e σ^2 , temos

$$\frac{\partial l(\theta, \sigma^2)}{\partial \alpha} = \frac{1}{\sigma^2} \cdot \sum_{i=1}^n [y_i - \alpha \cdot \exp(-a_i)] \cdot \exp(a_i);$$

$$\frac{\partial l(\theta, \sigma^2)}{\partial \beta} = -\frac{1}{\sigma^2} \cdot \alpha \cdot \sum_{i=1}^n [y_i - \alpha \cdot \exp(-a_i)] \cdot a_i \cdot \exp(-a_i);$$

$$\frac{\partial l(\theta, \sigma^2)}{\partial \gamma} = \frac{1}{\sigma^2} \cdot \alpha \cdot \sum_{i=1}^n [y_i - \alpha \cdot \exp(-a_i)] \cdot x_i \cdot a_i \cdot \exp(a_i);$$

$$\frac{\partial l(\theta, \sigma^2)}{\partial \sigma^2} = -\frac{n}{2\sigma^2} + \frac{1}{2\sigma^4} \cdot \sum_{i=1}^n [y_i - \alpha \cdot \exp(-a_i)]^2.$$

O estimador de σ^2 pode ser obtido analiticamente resolvendo-se a equação

$$-\frac{n}{2\sigma^2} + \frac{1}{2\sigma^4} \cdot \sum_{i=1}^n (y_i - \alpha \cdot \exp(-a_i))^2 = 0;$$

isto é

$$-\sigma^2 n = -\sum_{i=1}^n (y_i - \alpha \cdot \exp(-a_i))^2.$$

Deste modo,

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \alpha \cdot \exp(-a_i))^2}{n}.$$

Os estimadores de α, β e γ são obtidos através da resolução do sistema

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n [y_i - \alpha \cdot \exp(-a_i)] \cdot \exp(a_i) = 0 \\ \sum_{i=1}^n [(y_i - \alpha \cdot \exp(-a_i))] \cdot a_i \cdot \exp(-a_i) = 0 \\ \sum_{i=1}^n [(y_i - \alpha \cdot \exp(-a_i))] \cdot x_i \cdot a_i \cdot \exp(a_i) = 0 \end{cases}.$$

Como a resolução analítica deste sistema é de extrema complexidade, temos que utilizar um método iterativo, como por exemplo, Newton-Raphson ou Quase-Newton para obtermos os estimadores de máxima verossimilhança de α, β e γ .

Inferências sobre os parâmetros α, β, γ e sobre σ^2

Geralmente a inferência sobre os parâmetros é feita considerando a normalidade assintótica dos estimadores de máxima verossimilhança (ver Kalbfleish, 1985). Assim, para amostras suficientemente grandes e sob certas condições de regularidade (ver Seber e Wild, 1989), o seguinte resultado é encontrado

$$\left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2 \right) \stackrel{a}{\sim} N_4 \left[(\theta, \sigma^2), I^{-1} \left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2 \right) \right],$$

onde $I\left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2\right)$ é a matriz informação de Fisher observada definida como (ver Seber e Wild, 1989)

$$I\left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2\right) = \begin{bmatrix} \frac{1}{\hat{\sigma}^2} F.{}^{\prime}(\theta) \cdot F.(\theta) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \frac{n}{2\hat{\sigma}^4} \end{bmatrix}, \quad (2.1)$$

onde

$$F.(\theta) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial \alpha} & \frac{\partial f_1}{\partial \beta} & \frac{\partial f_1}{\partial \gamma} \\ \frac{\partial f_2}{\partial \alpha} & \frac{\partial f_2}{\partial \beta} & \frac{\partial f_2}{\partial \gamma} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial \alpha} & \frac{\partial f_n}{\partial \beta} & \frac{\partial f_n}{\partial \gamma} \end{bmatrix} \Bigg|_{\theta=\hat{\theta}}.$$

Para o modelo em questão, temos $y_i = \alpha \cdot \exp(-a_i)$, então

$$F.(\theta) = \begin{bmatrix} \exp(-a_1) & -\alpha a_1 \exp(-a_1) & \alpha x_1 a_1 \exp(-a_1) \\ \exp(-a_2) & -\alpha a_2 \exp(-a_2) & \alpha x_2 a_2 \exp(-a_2) \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \exp(-a_n) & -\alpha a_n \exp(-a_n) & \alpha x_n a_n \exp(-a_n) \end{bmatrix} \Bigg|_{\theta=\hat{\theta}},$$

$$F.{}^{\prime}(\theta) = \begin{bmatrix} \exp(-a_1) & \exp(-a_2) & \dots & \exp(-a_n) \\ -\alpha a_1 \exp(a_1) & -\alpha a_2 \exp(a_2) & \dots & -\alpha a_n \exp(a_n) \\ \alpha x_1 a_1 \exp(-a_1) & \alpha x_2 a_2 \exp(-a_2) & \dots & \alpha x_n a_n \exp(-a_n) \end{bmatrix} \Bigg|_{\theta=\hat{\theta}},$$

onde $F.{}^{\prime}(\theta)$ é a matriz transposta de $F.(\theta)$.

Conseqüentemente, $F.{}^{\prime}(\theta) F.(\theta)$ é simétrica e tal que

$$F.{}^{\prime}(\theta) F.(\theta) = \begin{bmatrix} g_1 & -\alpha g_2 & \alpha g_3 \\ -\alpha g_2 & \alpha^2 g_4 & -\alpha^2 g_5 \\ \alpha g_3 & -\alpha^2 g_5 & \alpha^2 g_6 \end{bmatrix} \Bigg|_{\theta=\hat{\theta}}, \quad (2.2)$$

onde $g_1 = \sum_{i=1}^n \exp(-2a_i)$; $g_2 = \sum_{i=1}^n a_i \exp(-2a_i)$; $g_3 = \sum_{i=1}^n x_i a_i \exp(-2a_i)$;

$g_4 = \sum_{i=1}^n a_i^2 \exp(-2a_i)$; $g_5 = \sum_{i=1}^n x_i a_i^2 \exp(-2a_i)$ e $g_6 = \sum_{i=1}^n x_i^2 a_i^2 \exp(-2a_i)$.

Substituindo 2.2 em 2.1 temos

$$I\left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2\right) = \frac{1}{\sigma^2} \begin{bmatrix} g_1 & -\alpha g_2 & \alpha g_3 & 0 \\ -\alpha g_2 & \alpha^2 g_4 & -\alpha^2 g_5 & 0 \\ \alpha g_3 & -\alpha^2 g_5 & \alpha^2 g_6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{n}{2\sigma^2} \end{bmatrix} \Bigg|_{\theta=\hat{\theta}; \sigma^2=\hat{\sigma}^2}. \quad (2.3)$$

Como $\left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2\right) \stackrel{a}{\sim} N\left(\left(\theta, \sigma^2\right), I^{-1}\left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2\right)\right)$, pelo teorema central do limite temos

$$z = \frac{\hat{\alpha} - \alpha}{\sqrt{I_{11}^{-1}\left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2\right)}} \stackrel{a}{\sim} N(0, 1),$$

os intervalos de confiança $(1 - p)$ assintóticos para α, β e γ são

$$Ic(\alpha) = \left[\hat{\alpha} - z_{-p/2} \cdot \sqrt{I_{11}^{-1}\left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2\right)}; \hat{\alpha} + z_{p/2} \cdot \sqrt{I_{11}^{-1}\left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2\right)} \right];$$

$$Ic(\beta) = \left[\hat{\beta} - z_{-p/2} \cdot \sqrt{I_{22}^{-1}\left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2\right)}; \hat{\beta} + z_{p/2} \cdot \sqrt{I_{22}^{-1}\left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2\right)} \right];$$

$$Ic(\gamma) = \left[\hat{\gamma} - z_{-p/2} \cdot \sqrt{I_{33}^{-1}\left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2\right)}; \hat{\gamma} + z_{p/2} \cdot \sqrt{I_{33}^{-1}\left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2\right)} \right].$$

O intervalo de confiança exato para σ^2 , pode ser obtido da estatística pivotal Q , dada por (ver Seber e Wild, 1989),

$$Q = \frac{\hat{n}\sigma^2}{\sigma^2},$$

cuja distribuição é qui-quadrado com $(n-3)$ graus de liberdade. O intervalo $100(1 - p)\%$ de confiança para σ^2 é, então, dado por

$$Ic\left(\sigma^2\right) = \left[\frac{\hat{n}\sigma^2}{\chi_{(n-3); p/2}^2}; \frac{\hat{n}\sigma^2}{\chi_{(n-3); (1-p)/2}^2} \right].$$

2.2.2 Modelo de Richards

A razão de crescimento, proposta por Richards em 1959, é uma generalização da razão de crescimento proposta por Von Bertalanffy em 1938 (ver Seber e Wild, 1989). com $\delta = \frac{2}{3}$ fixo, dada por

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x} = \eta(f(x))^\delta - \xi f(x) \quad (2.4)$$

sendo $f(x)$ o tamanho e x o tempo.

A taxa de crescimento do animal com peso $f(x)$ é a diferença entre as forças de anabolismo e catabolismo. Onde anabolismo é a síntese de um novo material e catabolismo é a perda contínua do material em construção.

Então a função de Richards é determinada considerando $\frac{\partial f}{\partial x} = 0$ em $f(x) = \alpha$, ou seja,

$$\eta \cdot \alpha^\delta - \xi \cdot \alpha = 0 \iff \xi = \eta \cdot \alpha^{\delta-1}. \quad (2.5)$$

Substituindo 2.5 em 2.4, temos:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \eta \cdot (f(x))^\delta - \eta \cdot \alpha^{\delta-1} \cdot f(x) \iff \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{k}{1-\delta} \cdot f(x) \cdot \left[\left(\frac{f(x)}{\alpha} \right)^{\delta-1} - 1 \right],$$

onde

$$k = \eta \cdot (1 - \delta) \cdot \alpha^{\delta-1},$$

por substituição

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{k}{1-\delta} \cdot (f(x))^\delta \cdot \left[\alpha^{1-\delta} - (f(x))^{1-\delta} \right], \quad \delta < 1$$

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{k}{1-\delta} \cdot (f(x))^\delta \cdot \left[(f(x))^{1-\delta} - \alpha^{1-\delta} \right], \quad \delta > 1$$

Considerando

$$y = \alpha^{1-\delta} - (f(x))^{1-\delta} \text{ se } \delta < 1 \text{ ou } y = (f(x))^{1-\delta} - \alpha^{1-\delta} \text{ se } \delta > 1$$

Pela regra da cadeia

$$\frac{\partial y}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial x} \cdot \frac{\partial y}{\partial f},$$

$$\frac{\partial y}{\partial x} = \frac{k}{1-\delta} \cdot f(x) \cdot \left[\left(\frac{f(x)}{\alpha} \right)^{\delta-1} - 1 \right] \cdot \left[-(1-\delta) \cdot (f(x))^\delta \right], \quad \delta < 1$$

ou

$$\frac{\partial y}{\partial x} = \frac{k}{1-\delta} \cdot f(x) \cdot \left[\left(\frac{f(x)}{\alpha} \right)^{\delta-1} - 1 \right] \cdot \left[(1-\delta) \cdot (f(x))^\delta \right], \quad \delta > 1;$$

$$\frac{\partial y}{\partial x} = -k \left(\alpha^{1-\delta} - (f(x))^{1-\delta} \right), \quad \delta < 1$$

ou

$$\frac{\partial y}{\partial x} = -k \left((f(x))^{1-\delta} - \alpha^{1-\delta} \right), \quad \delta > 1,$$

portanto

$$\frac{\partial y}{\partial x} = -k \cdot y \iff y = \exp[-k \cdot (x - c)];$$

$$\alpha^{1-\delta} - (f(x))^{1-\delta} = \exp[-k(x - c)] \quad \text{se } \delta < 1$$

ou seja,

$$f(x) = \left[\alpha^{1-\delta} - \exp[-k(x - c)] \right]^{\frac{1}{1-\delta}} \quad \text{se } \delta < 1;$$

e

$$(f(x))^{1-\delta} - \alpha^{1-\delta} = \exp[-k(x - c)] \quad \text{se } \delta > 1;$$

$$f(x) = \left[\alpha^{1-\delta} + \exp[-k(x - c)] \right]^{\frac{1}{1-\delta}} \quad \text{se } \delta > 1.$$

Fazendo $\partial^2 f / \partial^2 x = 0$ encontramos o ponto de inflexão da curva:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial^2 x} = \eta \cdot \delta \cdot (f(x))^{1-\delta} \cdot \frac{\partial f}{\partial x} - \eta \cdot \alpha^{\delta-1} \cdot \frac{\partial f}{\partial x} = 0;$$

$$\frac{\partial f}{\partial x} \cdot \left(\eta \cdot \delta \cdot (f(x))^{1-\delta} - \eta \cdot \alpha^{\delta-1} \right) = 0;$$

$$\eta \cdot \delta \cdot (f(x))^{1-\delta} = \eta \cdot \alpha^{\delta-1} \iff \left((f(x))^{1-\delta} \right)^{\frac{1}{\delta-1}} = \left(\frac{\alpha^{\delta-1}}{\delta} \right)^{\frac{1}{\delta-1}};$$

$$f(x) = \frac{\alpha}{\delta^{\frac{1}{\delta-1}}}, \quad \delta > 0.$$

Função de Verossimilhança

Utilizando esta parametrização do modelo de Richards

$$f(x) = \alpha [1 + \exp(\beta - \gamma x)]^{\frac{-1}{\delta}},$$

tomando uma amostra de tamanho n , a relação entre a variável resposta y e a variável independente x é dada por:

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

onde (x_i, y_i) , $i = 1, 2, \dots, n$, são os pares de observações, α, β, γ e δ os parâmetros a serem estimados e ε_i , $i = 1, 2, \dots, n$, os erros independentes e identicamente distribuídos tal que $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$.

Considerando a função de verossimilhança $L(\alpha, \beta, \gamma, \delta, \sigma^2 \mid \mathbf{x}, \mathbf{y})$, onde $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ e $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)$, para $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \sigma^2$ como

$$L(\alpha, \beta, \gamma, \delta, \sigma^2 \mid \mathbf{x}, \mathbf{y}) = \prod_{i=1}^n \left\{ (2\pi\sigma^2)^{-\frac{1}{2}} \cdot \exp \left[-\frac{\left[y_i - \alpha \cdot (1 + \exp(\beta - \gamma x_i))^{\frac{-1}{\delta}} \right]^2}{2\sigma^2} \right] \right\},$$

e fazendo $\theta = (\alpha, \beta, \gamma, \delta)$ e $a_i = \exp(\beta - \gamma x_i)$, temos

$$L(\theta, \sigma^2) = (2\pi\sigma^2)^{-\frac{n}{2}} \cdot \exp \left[-\frac{\sum_{i=1}^n \left[y_i - \alpha (1 + a_i)^{\frac{-1}{\delta}} \right]^2}{2\sigma^2} \right].$$

Calculando a função log-verossimilhança

$$l(\theta, \sigma^2) \propto -\frac{n}{2} \ln \sigma^2 - \frac{\sum_{i=1}^n \left[y_i - \alpha (1 + a_i)^{\frac{-1}{\delta}} \right]^2}{2\sigma^2},$$

e as suas primeiras derivadas, temos

$$\begin{aligned}\frac{\partial l(\theta, \sigma^2)}{\partial \alpha} &= \frac{1}{\sigma^2} \sum_{i=1}^n \left(y_i - \alpha (1 + a_i)^{\frac{-1}{\delta}} \right) (1 + a_i)^{\frac{-1}{\delta}}; \\ \frac{\partial l(\theta, \sigma^2)}{\partial \beta} &= -\frac{1}{\sigma^2 \delta} \sum_{i=1}^n \frac{\left(y_i - \alpha (1 + a_i)^{\frac{-1}{\delta}} \right) \alpha (1 + a_i)^{\frac{-1}{\delta}} a_i}{(1 + a_i)}; \\ \frac{\partial l(\theta, \sigma^2)}{\partial \gamma} &= \frac{1}{\sigma^2 \delta} \sum_{i=1}^n \frac{\left(y_i - \alpha (1 + a_i)^{\frac{-1}{\delta}} \right) \alpha (1 + a_i)^{\frac{-1}{\delta}} x_i a_i}{(1 + a_i)}; \\ \frac{\partial l(\theta, \sigma^2)}{\partial \delta} &= \frac{1}{\sigma^2 \delta^2} \sum_{i=1}^n \left(y_i - \alpha (1 + a_i)^{\frac{-1}{\delta}} \right) \alpha (1 + a_i)^{\frac{-1}{\delta}} \ln(1 + a_i); \\ \frac{\partial l(\theta, \sigma^2)}{\partial \sigma^2} &= -\frac{n}{2\sigma^2} + \frac{1}{2\sigma^4} \sum_{i=1}^n \left(y_i - \alpha (1 + a_i)^{\frac{-1}{\delta}} \right)^2.\end{aligned}$$

O estimador de σ^2 pode ser, desta forma, obtido analiticamente

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{\sum_{i=1}^n \left(y_i - \alpha (1 + a_i)^{\frac{-1}{\delta}} \right)^2}{n}.$$

Os estimadores de α, β e γ e δ são obtidos através da resolução do sistema abaixo, usando um método iterativo.

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=1}^n \left(y_i - \alpha (1 + a_i)^{\frac{-1}{\delta}} \right) (1 + a_i)^{\frac{-1}{\delta}} = 0; \\ \sum_{i=1}^n \left(y_i - \alpha (1 + a_i)^{\frac{-1}{\delta}} \right) \alpha (1 + a_i)^{\frac{-1}{\delta}} a_i = 0; \\ \sum_{i=1}^n \left(y_i - \alpha (1 + a_i)^{\frac{-1}{\delta}} \right) \alpha (1 + a_i)^{\frac{-1}{\delta}} x_i a_i = 0; \\ \sum_{i=1}^n \left(y_i - \alpha (1 + a_i)^{\frac{-1}{\delta}} \right) \alpha (1 + a_i)^{\frac{-1}{\delta}} \ln(1 + a_i) = 0. \end{array} \right.$$

Inferências sobre os parâmetros $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ e sobre σ^2 .

A análise clássica é feita considerando a distribuição assintótica dos estimadores de máxima verossimilhança

$$\left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2 \right) \stackrel{a}{\sim} N_5 \left[(\theta, \sigma^2), I^{-1} \left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2 \right) \right],$$

sendo $I^{-1} \left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2 \right)$ a Matriz Informação de Fisher definida por 2.1 agora com

$$F.(\theta) = \left[\begin{array}{cccc} \frac{\partial f_1}{\partial \alpha} & \frac{\partial f_1}{\partial \beta} & \frac{\partial f_1}{\partial \gamma} & \frac{\partial f_1}{\partial \delta} \\ \frac{\partial f_2}{\partial \alpha} & \frac{\partial f_2}{\partial \beta} & \frac{\partial f_2}{\partial \gamma} & \frac{\partial f_2}{\partial \delta} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial \alpha} & \frac{\partial f_n}{\partial \beta} & \frac{\partial f_n}{\partial \gamma} & \frac{\partial f_n}{\partial \delta} \end{array} \right] \Bigg|_{\theta=\hat{\theta}}$$

Considerando $y_i = \alpha (1 + a_i)^{-\frac{1}{\delta}}$, onde $a_i = \exp(\beta - \gamma x_i)$, temos

$$F.(\theta) = \left[\begin{array}{cccc} (1 + a_1)^{-\frac{1}{\delta}} & -\frac{\alpha (1 + a_1)^{-\frac{1}{\delta}} a_1}{\delta (1 + a_1)} & \frac{\alpha (1 + a_1)^{-\frac{1}{\delta}} x_1 a_1}{\delta (1 + a_1)} & \frac{\alpha (1 + a_1)^{-\frac{1}{\delta}} \ln(1 + a_1)}{\delta^2} \\ (1 + a_2)^{-\frac{1}{\delta}} & -\frac{\alpha (1 + a_2)^{-\frac{1}{\delta}} a_2}{\delta (1 + a_2)} & \frac{\alpha (1 + a_2)^{-\frac{1}{\delta}} x_2 a_2}{\delta (1 + a_2)} & \frac{\alpha (1 + a_2)^{-\frac{1}{\delta}} \ln(1 + a_2)}{\delta^2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ (1 + a_n)^{-\frac{1}{\delta}} & -\frac{\alpha (1 + a_n)^{-\frac{1}{\delta}} a_n}{\delta (1 + a_n)} & \frac{\alpha (1 + a_n)^{-\frac{1}{\delta}} x_n a_n}{\delta (1 + a_n)} & \frac{\alpha (1 + a_n)^{-\frac{1}{\delta}} \ln(1 + a_n)}{\delta^2} \end{array} \right] \Bigg|_{\theta=\hat{\theta}}$$

e

$$F.^{-1}(\theta) F.(\theta) = \left[\begin{array}{cccc} r_1 & -\frac{\alpha}{\delta} r_2 & \frac{\alpha}{\delta} r_3 & \frac{\alpha}{\delta^2} r_4 \\ -\frac{\alpha}{\delta} r_2 & \frac{\alpha^2}{\delta^2} r_5 & -\frac{\alpha^2}{\delta^2} r_6 & -\frac{\alpha^2}{\delta^3} r_7 \\ \frac{\alpha}{\delta} r_3 & -\frac{\alpha^2}{\delta^2} r_6 & \frac{\alpha^2}{\delta^2} r_8 & \frac{\alpha^2}{\delta^3} r_9 \\ \frac{\alpha}{\delta^2} r_4 & -\frac{\alpha^2}{\delta^3} r_7 & \frac{\alpha^2}{\delta^3} r_9 & \frac{\alpha^2}{\delta^4} r_{10} \end{array} \right] \Bigg|_{\theta=\hat{\theta}}, \quad (2.6)$$

onde $r_1 = \sum_{i=1}^n (1 + a_i)^{-\frac{2}{\delta}}$; $r_2 = \sum_{i=1}^n a_i (1 + a_i)^{-\frac{(\delta+2)}{\delta}}$; $r_3 = \sum_{i=1}^n a_i x_i (1 + a_i)^{-\frac{(\delta+2)}{\delta}}$;
 $r_4 = \sum_{i=1}^n (1 + a_i)^{-\frac{2}{\delta}} \cdot \ln(1 + a_i)$; $r_5 = \sum_{i=1}^n a_i^2 (1 + a_i)^{-\frac{(2\delta+2)}{\delta}}$; $r_6 = \sum_{i=1}^n a_i^2 x_i (1 + a_i)^{-\frac{(2\delta+2)}{\delta}}$;
 $r_7 = \sum_{i=1}^n a_i (1 + a_i)^{-\frac{(\delta+2)}{\delta}} \cdot \ln(1 + a_i)$; $r_8 = \sum_{i=1}^n a_i^2 x_i^2 (1 + a_i)^{-\frac{(2\delta+2)}{\delta}}$;
 $r_9 = \sum_{i=1}^n a_i x_i (1 + a_i)^{-\frac{(\delta+2)}{\delta}} \cdot \ln(1 + a_i)$ e $r_{10} = \sum_{i=1}^n (1 + a_i)^{-\frac{2}{\delta}} \cdot \ln^2(1 + a_i)$.

Substituindo 2.6 em 2.1

$$I\left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2\right) = \frac{1}{\sigma^2} \left[\begin{array}{cccc|c} r_1 & -\frac{\alpha}{\delta} r_2 & \frac{\alpha}{\delta} r_3 & \frac{\alpha}{\delta^2} r_4 & 0 \\ -\frac{\alpha}{\delta} r_2 & \frac{\alpha^2}{\delta^2} r_5 & -\frac{\alpha^2}{\delta^2} r_6 & -\frac{\alpha^2}{\delta^3} r_7 & 0 \\ \frac{\alpha}{\delta} r_3 & -\frac{\alpha^2}{\delta^2} r_6 & \frac{\alpha^2}{\delta^2} r_8 & \frac{\alpha^2}{\delta^3} r_9 & 0 \\ \frac{\alpha}{\delta^2} r_4 & -\frac{\alpha^2}{\delta^3} r_7 & \frac{\alpha^2}{\delta^3} r_9 & \frac{\alpha^2}{\delta^4} r_{10} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{n}{2\sigma^2} \end{array} \right] \Bigg|_{\theta=\hat{\theta}; \sigma^2=\hat{\sigma}^2}, \quad (2.7)$$

onde os intervalos de confiança ficam definidos por

$$Ic(\alpha) = \left[\hat{\alpha} - z_{-p/2} \cdot I_{11}^{-1/2} \left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2 \right); \hat{\alpha} + z_{p/2} \cdot I_{11}^{-1/2} \left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2 \right) \right];$$

$$Ic(\beta) = \left[\hat{\beta} - z_{-p/2} \cdot I_{22}^{-1/2} \left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2 \right); \hat{\beta} + z_{p/2} \cdot I_{22}^{-1/2} \left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2 \right) \right];$$

$$Ic(\gamma) = \left[\hat{\gamma} - z_{-p/2} \cdot I_{33}^{-1/2} \left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2 \right); \hat{\gamma} + z_{p/2} \cdot I_{33}^{-1/2} \left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2 \right) \right];$$

$$Ic(\delta) = \left[\hat{\delta} - z_{-p/2} \cdot I_{44}^{-1/2} \left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2 \right); \hat{\delta} + z_{p/2} \cdot I_{44}^{-1/2} \left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2 \right) \right].$$

Considerando a estatística pivotal Q , $Q = \frac{\hat{n}\sigma^2}{\sigma^2}$, (Seber e Wild, 1989), o intervalo de confiança 100(1-p)% para σ^2 é

$$Ic(\sigma^2) = \left[\frac{\hat{n}\sigma^2}{\chi_{(n-4); p/2}^2}; \frac{\hat{n}\sigma^2}{\chi_{(n-4); (1-p)/2}^2} \right],$$

onde $\chi_{n-4; p}^2$ é o p -ésimo quantil superior da distribuição qui-quadrado com (n-4) graus de liberdade.

2.3 Análise Clássica Heteroscedástica

2.3.1 Introdução

Quando os erros de um modelo variam, por exemplo, de acordo com o tamanho da variável explicativa, pode-se dizer que a suposição de homoscedasticidade não está satisfeita e o modelo pode ser chamado de heteroscedástico.

Na Figura 2 pode-se verificar um tipo bastante comum de heteroscedasticidade, onde o incremento da variável explicativa é acompanhado por um aumento ou diminuição na dispersão dos pontos. Isso implica que a variância dos erros será tanto maior ou menor quanto maiores forem os valores da variável explicativa.

Com isto, inferências sobre a estimação dos parâmetros a partir de um determinado modelo, podem ser facilmente afetadas por alguns valores de erros relacionados com altos valores da variável explicativa, quando esta heteroscedasticidade não for considerada nas análises.

2(*heteroscedasticidade*)

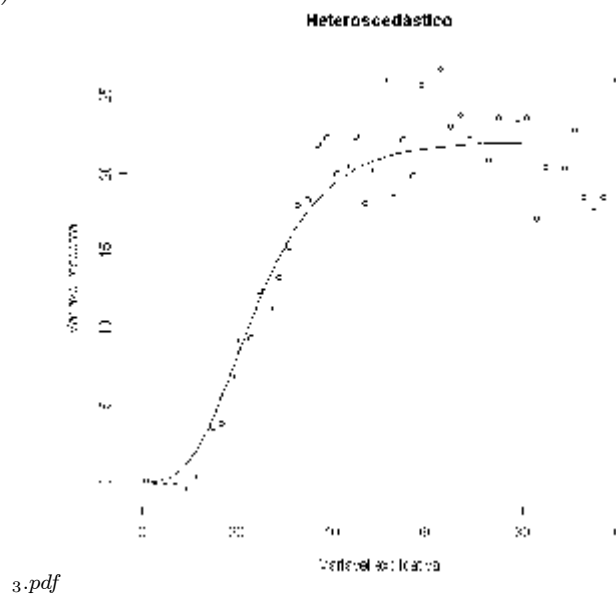


Figura 2 - Gráfico da dispersão heteroscedástica dos dados.

Os modelos de crescimento existentes na literatura não levam em consideração esta heteroscedasticidade, mesmo quando ela existe, e toda a análise clássica ou Bayesiana é feita considerando homoscedasticidade

Nesta seção propomos modelos de crescimento de Gompertz e de Richards heteroscedásticos como objetivo de precisar as estimativas dos parâmetros de cada modelo.

Supondo que os erros seguem distribuição normal com média zero e variância σ_i^2 , a estrutura heteroscedástica considerada neste trabalho é a multiplicativa, ou seja, a variância dos erros é proporcional a uma potência desconhecida de uma das variáveis explicativas,

$$\text{Var}(\varepsilon_i) = \sigma_i^2 = \sigma^2 x_i^\lambda,$$

com λ representando o grau de heteroscedasticidade e σ^2 um padrão comum entre todas as variâncias dos erros.

2.3.2 Modelo de Gompertz

Função de Verossimilhança

Considerando o Modelo de Gompertz

$$y_i = \alpha \exp(-a_i) + \varepsilon_i,$$

com

$$a_i = \exp(\beta - \gamma x_i),$$

e supondo que os erros são independentes e seguem distribuições normais $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma_i^2)$, ou $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2 x_i^\lambda)$, o vetor de erros $\boldsymbol{\varepsilon} = (\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n)'$ é tal que $\boldsymbol{\varepsilon} \sim N_n(0, \sigma^2 \Sigma)$, onde $\Sigma = \text{diag}(x_1^\lambda, \dots, x_n^\lambda)$. Assim, a função densidade de probabilidade para $\boldsymbol{\varepsilon}$ é dada por

$$f_{\boldsymbol{\varepsilon}} = \prod_{i=1}^n f_{\varepsilon_i}(\varepsilon_i),$$

onde $f_{\varepsilon_i}(\varepsilon_i) = (2\pi\sigma_i^2)^{-1/2} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma_i^2}\varepsilon_i^2\right\}$, $-\infty < \varepsilon_i < \infty$, considerando que $\varepsilon_i = (y_i - \alpha \exp(-a_i))$.

A função de verossimilhança $L(\theta, \sigma^2 | \mathbf{x}, \mathbf{y})$ é dada por

$$L(\theta, \sigma^2 | \mathbf{x}, \mathbf{y}) = \prod_{i=1}^n (2\pi\sigma_i^2)^{-1/2} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma_i^2}(y_i - \alpha \exp(-a_i))^2\right\},$$

onde $\theta = (\alpha, \beta, \gamma, \lambda)$.

A função log-verossimilhança é dada por:

$$\begin{aligned}
 l(\theta, \sigma^2 \mid \mathbf{x}, \mathbf{y}) &= \ln(L(\theta, \sigma, \lambda \mid \mathbf{x}, \mathbf{y})) = \\
 &= \ln \left\{ \prod_{i=1}^n (2\pi\sigma_i^2)^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_i^2} (y_i - \alpha \exp(-a_i))^2 \right\} \right\} \\
 &= \sum_{i=1}^n \ln \left[(2\pi\sigma_i^2)^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_i^2} (y_i - \alpha \exp(-a_i))^2 \right\} \right] \\
 &= \sum_{i=1}^n \left[-\frac{1}{2} \ln(2\pi) - \frac{1}{2} \ln \sigma_i^2 - \frac{1}{2\sigma_i^2} (y_i - \alpha \exp(-a_i))^2 \right] \\
 &= -\frac{n}{2} \ln(2\pi) - \frac{n}{2} \ln \sigma^2 - \frac{\lambda}{2} \sum_{i=1}^n \ln(x_i) - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \frac{(y_i - \alpha \exp(-a_i))^2}{\sigma^2 x_i^\lambda}.
 \end{aligned}$$

Calculando as primeiras derivadas de $l(\theta, \sigma^2 \mid \mathbf{x}, \mathbf{y})$ em relação a $\theta = (\alpha, \beta, \gamma, \lambda)$ e σ^2 , temos

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial l(\theta, \sigma^2)}{\partial \alpha} &= \frac{1}{\sigma^2} \cdot \sum_{i=1}^n \frac{[y_i - \alpha \cdot \exp(-a_i)]}{x_i^\lambda} \cdot \exp(a_i); \\
 \frac{\partial l(\theta, \sigma^2)}{\partial \beta} &= -\frac{1}{\sigma^2} \cdot \alpha \cdot \sum_{i=1}^n \frac{[y_i - \alpha \cdot \exp(-a_i)]}{x_i^\lambda} \cdot a_i \cdot \exp(-a_i); \\
 \frac{\partial l(\theta, \sigma^2)}{\partial \gamma} &= \frac{1}{\sigma^2} \cdot \alpha \cdot \sum_{i=1}^n \frac{[y_i - \alpha \cdot \exp(-a_i)]}{x_i^\lambda} \cdot x_i \cdot a_i \cdot \exp(a_i); \\
 \frac{\partial l(\theta, \sigma^2)}{\partial \lambda} &= -\frac{1}{2\sigma^2} \cdot \sum_{i=1}^n \frac{[y_i - \alpha \cdot \exp(-a_i)]}{x_i^\lambda} \cdot \log(x_i); \\
 \frac{\partial l(\theta, \sigma^2)}{\partial \sigma^2} &= -\frac{n}{2\sigma^2} + \frac{1}{2\sigma^4} \cdot \sum_{i=1}^n \frac{[y_i - \alpha \cdot \exp(-a_i)]^2}{x_i^\lambda}.
 \end{aligned}$$

O estimador de σ^2 pode ser obtido analiticamente resolvendo a equação

$$-\frac{n}{2\sigma^2} + \frac{1}{2\sigma^4} \cdot \sum_{i=1}^n \frac{[y_i - \alpha \cdot \exp(-a_i)]^2}{x_i^\lambda} = 0;$$

isto é

$$-\sigma^2 n = -\sum_{i=1}^n \frac{[y_i - \alpha \cdot \exp(-a_i)]^2}{x_i^\lambda}.$$

Deste modo,

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{\sum_{i=1}^n \left(y_i - \hat{\alpha} \cdot \exp(-a_i) \right)^2}{n \hat{x}_i^\lambda}.$$

Os estimadores de α, β, γ e λ , $\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}$ e $\hat{\lambda}$, são obtidos através da resolução do sistema

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=1}^n \frac{[y_i - \alpha \cdot \exp(-a_i)]}{x_i^\lambda} \cdot \exp(a_i) = 0 \\ \sum_{i=1}^n \frac{[y_i - \alpha \cdot \exp(-a_i)]}{x_i^\lambda} \cdot a_i \cdot \exp(-a_i) = 0 \\ \sum_{i=1}^n \frac{[y_i - \alpha \cdot \exp(-a_i)]}{x_i^\lambda} \cdot x_i \cdot a_i \cdot \exp(a_i) = 0 \\ \sum_{i=1}^n \frac{[y_i - \alpha \cdot \exp(-a_i)]}{x_i^\lambda} \cdot \log x_i = 0 \end{array} \right. .$$

Como a resolução analítica deste sistema é de extrema complexidade, temos que utilizar um método iterativo, como por exemplo, Newton-Raphson ou Quase-Newton para obtermos os estimadores de máxima verossimilhança de α, β, γ e λ .

Inferências sobre os parâmetros $\alpha, \beta, \gamma, \lambda$ e sobre σ^2

Para amostras suficientemente grandes e sob certas condições de regularidade (ver Seber e Wild, 1989), considerando agora $\theta = (\alpha, \beta, \gamma, \lambda)$, temos

$$\left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2 \right) \underset{a}{\approx} N_5 \left[\left(\theta, \sigma^2 \right), I^{-1} \left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2 \right) \right],$$

com

$$I \left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2 \right) = \frac{1}{\hat{\sigma}^2} \begin{bmatrix} d_1 & -\alpha d_2 & \alpha d_3 & -\alpha d_4 & 0 \\ -\alpha d_2 & \alpha^2 d_5 & -\alpha^2 d_6 & \alpha d_7 & 0 \\ \alpha d_3 & -\alpha^2 d_6 & \alpha^2 d_8 & -\alpha d_9 & 0 \\ -\alpha d_4 & \alpha d_7 & -\alpha d_9 & \alpha d_{10} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{n}{2\hat{\sigma}^2} \end{bmatrix} \Bigg|_{\theta=\hat{\theta}; \sigma^2=\hat{\sigma}^2} . \quad (2.8)$$

onde $d_1 = \sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} \exp(-2a_i)$; $d_2 = \sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} a_i \exp(-2a_i)$; $d_3 = \sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda+1} a_i \exp(-2a_i)$;

$$d_4 = \sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} \exp(-2a_i) \log(x_i); \quad d_5 = \sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} a_i^2 \exp(-2a_i);$$

$$d_6 = \sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda+1} a_i^2 \exp(-2a_i); \quad d_7 = \sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} a_i \exp(-2a_i) \log(x_i);$$

$$d_8 = \sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda+2} a_i^2 \exp(-2a_i); \quad d_9 = \sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda+1} a_i \exp(-2a_i) \log(x_i) \quad e$$

$$d_{10} = \sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} \exp(-2a_i) \log(x_i).$$

Como $\left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2\right) \stackrel{a}{\sim} N_5\left((\theta, \sigma^2), I^{-1}\left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2\right)\right)$, pelo teorema central do limite temos

$$z = \frac{\hat{\alpha} - \alpha}{\sqrt{I_{11}^{-1}\left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2\right)}} \stackrel{a}{\sim} N(0, 1),$$

os intervalos de confiança $(1 - p)$ assintóticos para α, β, γ e λ são

$$Ic(\alpha) = \left[\hat{\alpha} - z_{-p/2} \cdot \sqrt{I_{11}^{-1}\left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2\right)}; \hat{\alpha} + z_{p/2} \cdot \sqrt{I_{11}^{-1}\left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2\right)} \right];$$

$$Ic(\beta) = \left[\hat{\beta} - z_{-p/2} \cdot \sqrt{I_{22}^{-1}\left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2\right)}; \hat{\beta} + z_{p/2} \cdot \sqrt{I_{22}^{-1}\left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2\right)} \right];$$

$$Ic(\gamma) = \left[\hat{\gamma} - z_{-p/2} \cdot \sqrt{I_{33}^{-1}\left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2\right)}; \hat{\gamma} + z_{p/2} \cdot \sqrt{I_{33}^{-1}\left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2\right)} \right];$$

$$Ic(\lambda) = \left[\hat{\lambda} - z_{-p/2} \cdot \sqrt{I_{44}^{-1}\left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2\right)}; \hat{\lambda} + z_{p/2} \cdot \sqrt{I_{44}^{-1}\left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2\right)} \right].$$

O intervalo de confiança exato para σ^2 é dado por

$$Ic(\sigma^2) = \left[\frac{n\hat{\sigma}^2}{\chi_{(n-4); p/2}^2}; \frac{n\hat{\sigma}^2}{\chi_{(n-4); (1-p)/2}^2} \right].$$

2.3.3 Modelo de Richards

Função de Verossimilhança

Considerando o modelo

$$f(x) = \alpha [1 + \exp(\beta - \gamma x)]^{-\frac{1}{\delta}},$$

e tomando uma amostra de tamanho n , a relação entre a variável resposta y e a variável independente x é dada por

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

onde (x_i, y_i) ; $i = 1, 2, \dots, n$; representa os pares de observações, α, β, γ e δ os parâmetros a serem estimados e ε_i ; $i = 1, 2, \dots, n$, os erros independentes e identicamente distribuídos tal que $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma_i^2)$.

Considerando a função de verossimilhança $L(\alpha, \beta, \gamma, \delta, \lambda, \sigma^2 | \mathbf{x}, \mathbf{y})$ para $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \lambda, \sigma^2$ como

$$L(\theta, \sigma^2 | \mathbf{x}, \mathbf{y}) = \prod_{i=1}^n (2\pi\sigma_i^2)^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_i^2} \left(y_i - \alpha [1 + a_i]^{\frac{-1}{\delta}} \right)^2 \right\},$$

onde $\theta = (\alpha, \beta, \gamma, \delta, \lambda)$.

A função log-verossimilhança é dada por

$$\begin{aligned} l(\theta, \sigma^2 | \mathbf{x}, \mathbf{y}) &= \ln(L(\theta, \sigma^2 | \mathbf{x}, \mathbf{y})) = \\ &= \ln \left\{ \prod_{i=1}^n (2\pi\sigma_i^2)^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_i^2} \left(y_i - \alpha [1 + a_i]^{\frac{-1}{\delta}} \right)^2 \right\} \right\} \\ &= \sum_{i=1}^n \ln \left[(2\pi\sigma_i^2)^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{\left(y_i - \alpha [1 + a_i]^{\frac{-1}{\delta}} \right)^2}{2\sigma_i^2} \right\} \right] \\ &= \sum_{i=1}^n \left[-\frac{1}{2} \ln(2\pi) - \frac{1}{2} \ln \sigma_i^2 - \frac{\left(y_i - \alpha [1 + a_i]^{\frac{-1}{\delta}} \right)^2}{2\sigma_i^2} \right] \\ &= -\frac{n}{2} \ln(2\pi) - \frac{\lambda}{2} \sum_{i=1}^n \ln(x_i) - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \frac{\left(y_i - \alpha [1 + a_i]^{\frac{-1}{\delta}} \right)^2}{\sigma^2 x_i^\lambda}. \end{aligned}$$

Calculando as suas primeiras derivadas em relação a θ e σ^2 , temos

$$\begin{aligned} \frac{\partial l(\theta, \sigma^2)}{\partial \alpha} &= \frac{1}{\sigma^2} \sum_{i=1}^n \left(y_i - \alpha (1 + a_i)^{\frac{-1}{\delta}} \right) (1 + a_i)^{\frac{-1}{\delta}}; \\ \frac{\partial l(\theta, \sigma^2)}{\partial \beta} &= -\frac{1}{\sigma^2 \delta} \sum_{i=1}^n \frac{\left(y_i - \alpha (1 + a_i)^{\frac{-1}{\delta}} \right) \alpha (1 + a_i)^{\frac{-1}{\delta}} a_i}{(1 + a_i)}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial l(\theta, \sigma^2)}{\partial \gamma} &= \frac{1}{\sigma^2 \delta} \sum_{i=1}^n \frac{\left(y_i - \alpha (1 + a_i)^{\frac{-1}{\delta}}\right) \alpha (1 + a_i)^{\frac{-1}{\delta}} x_i a_i}{(1 + a_i)}; \\ \frac{\partial l(\theta, \sigma^2)}{\partial \delta} &= \frac{1}{\sigma^2 \delta^2} \sum_{i=1}^n \left(y_i - \alpha (1 + a_i)^{\frac{-1}{\delta}}\right) \alpha (1 + a_i)^{\frac{-1}{\delta}} \log(1 + a_i); \\ \frac{\partial l(\theta, \sigma^2)}{\partial \lambda} &= -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \ln(x_i) + \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n \frac{\left(y_i - \alpha [1 + a_i]^{\frac{-1}{\delta}}\right)}{x_i^\lambda} \cdot \log(x_i) \\ \frac{\partial l(\theta, \sigma^2)}{\partial \sigma^2} &= -\frac{n}{2\sigma^2} + \frac{1}{2\sigma^4} \sum_{i=1}^n \frac{\left(y_i - \alpha [1 + a_i]^{\frac{-1}{\delta}}\right)^2}{x_i^\lambda}.\end{aligned}$$

O estimador de σ^2 pode ser obtido analiticamente

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{\sum_{i=1}^n \left(y_i - \hat{\alpha} (1 + a_i)^{\frac{-1}{\hat{\delta}}}\right)^2}{n \hat{x}_i^\lambda}.$$

Os estimadores de $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ e λ , são obtidos através da resolução do sistema abaixo, usando um método iterativo.

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=1}^n \left[x_i^{-\lambda} \left(y_i - \alpha (1 + a_i)^{\frac{-1}{\delta}} \right) \right] (1 + a_i)^{\frac{-1}{\delta}} = 0 \\ \sum_{i=1}^n \left[x_i^{-\lambda} \left(y_i - \alpha (1 + a_i)^{\frac{-1}{\delta}} \right) \right] \alpha (1 + a_i)^{\frac{-1}{\delta}} a_i = 0 \\ \sum_{i=1}^n \left[x_i^{-\lambda} \left(y_i - \alpha (1 + a_i)^{\frac{-1}{\delta}} \right) \right] \alpha (1 + a_i)^{\frac{-1}{\delta}} x_i a_i = 0 \\ \sum_{i=1}^n \left[x_i^{-\lambda} \left(y_i - \alpha (1 + a_i)^{\frac{-1}{\delta}} \right) \right] \alpha (1 + a_i)^{\frac{-1}{\delta}} \log(1 + a_i) = 0 \\ \sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} \left(y_i - \alpha (1 + a_i)^{\frac{-1}{\delta}} \right) \log(x_i) = 0 \end{array} \right.$$

Inferências sobre os parâmetros $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \lambda$ e sobre σ^2

Para amostras suficientemente grandes, com $\theta = (\alpha, \beta, \gamma, \delta, \lambda)$, temos

$$\left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2 \right) \stackrel{a}{\sim} N_6 \left[(\theta, \sigma^2), I^{-1} \left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2 \right) \right],$$

com

$$I\left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2\right) = \frac{1}{\sigma^2} \begin{bmatrix} k_1 & -\frac{\alpha}{\delta}k_2 & \frac{\alpha}{\delta}k_3 & \frac{\alpha}{\delta^2}k_4 & k_5 & 0 \\ -\frac{\alpha}{\delta}k_2 & \frac{\alpha^2}{\delta^2}k_6 & -\frac{\alpha^2}{\delta^2}k_7 & -\frac{\alpha^2}{\delta^3}k_8 & -\frac{\alpha^2}{\delta}k_9 & 0 \\ \frac{\alpha}{\delta}k_3 & -\frac{\alpha^2}{\delta^2}k_7 & \frac{\alpha^2}{\delta^2}k_{10} & \frac{\alpha^2}{\delta^3}k_{11} & -\frac{\alpha^2}{\delta}k_{12} & 0 \\ \frac{\alpha}{\delta^2}k_4 & -\frac{\alpha^2}{\delta^3}k_8 & \frac{\alpha^2}{\delta^3}k_{11} & \frac{\alpha^2}{\delta^4}k_{13} & -\frac{\alpha^2}{\delta^2}k_{14} & 0 \\ k_5 & -\frac{\alpha^2}{\delta}k_9 & -\frac{\alpha^2}{\delta}k_{12} & -\frac{\alpha^2}{\delta^2}k_{14} & \alpha^2k_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{n}{2\sigma^2} \end{bmatrix} \Bigg|_{\theta=\hat{\theta}; \sigma^2=\hat{\sigma}^2}, \quad (2.9)$$

onde

$$\begin{aligned} k_1 &= \sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} (1+a_i)^{-\frac{2}{\delta}}; & k_2 &= \sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} a_i (1+a_i)^{-\frac{(\delta+2)}{\delta}}; \\ k_3 &= \sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda+1} a_i (1+a_i)^{-\frac{(\delta+2)}{\delta}}; & k_4 &= \sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} (1+a_i)^{-\frac{2}{\delta}} \cdot \ln(1+a_i); \\ k_5 &= \sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} (1+a_i)^{-\frac{2}{\delta}} \log(x_i); & k_6 &= \sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} a_i^2 (1+a_i)^{-\frac{(2\delta+2)}{\delta}}; \\ k_7 &= \sum_{i=1}^n a_i^2 x_i^{-\lambda+1} (1+a_i)^{-\frac{(2\delta+2)}{\delta}}; & k_8 &= \sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} a_i (1+a_i)^{-\frac{(\delta+2)}{\delta}} \cdot \ln(1+a_i); \\ k_9 &= \sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} (1+a_i)^{-\frac{(\delta+2)}{\delta}} a_i \log(x_i); & k_{10} &= \sum_{i=1}^n a_i^2 x_i^{-\lambda+2} (1+a_i)^{-\frac{(2\delta+2)}{\delta}}; \\ k_{11} &= \sum_{i=1}^n a_i x_i^{-\lambda+1} (1+a_i)^{-\frac{(\delta+2)}{\delta}} \cdot \ln(1+a_i); & k_{12} &= \sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda+1} (1+a_i)^{-\frac{(\delta+2)}{\delta}} a_i \log(x_i); \\ k_{13} &= \sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} (1+a_i)^{-\frac{2}{\delta}} \cdot \ln^2(1+a_i); & k_{14} &= \sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} (1+a_i)^{-\frac{2}{\delta}} a_i \log(x_i) \ln(1+a_i); \\ & & k_{15} &= \sum_{i=1}^n x_i^{-2\lambda} (1+a_i)^{-\frac{2}{\delta}} \log^2(x_i). \end{aligned}$$

Os intervalos de confiança são definidos por

$$Ic(\alpha) = \left[\hat{\alpha} - z_{-p/2} \cdot I_{11}^{-1/2} \left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2 \right); \hat{\alpha} + z_{p/2} \cdot I_{11}^{-1/2} \left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2 \right) \right];$$

$$Ic(\beta) = \left[\hat{\beta} - z_{-p/2} \cdot I_{22}^{-1/2} \left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2 \right); \hat{\beta} + z_{p/2} \cdot I_{22}^{-1/2} \left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2 \right) \right];$$

$$Ic(\gamma) = \left[\hat{\gamma} - z_{-p/2} \cdot I_{33}^{-1/2} \left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2 \right); \hat{\gamma} + z_{p/2} \cdot I_{33}^{-1/2} \left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2 \right) \right];$$

$$Ic(\delta) = \left[\hat{\delta} - z_{-p/2} \cdot I_{44}^{-1/2} \left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2 \right); \hat{\delta} + z_{p/2} \cdot I_{44}^{-1/2} \left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2 \right) \right];$$
$$Ic(\lambda) = \left[\hat{\lambda} - z_{-p/2} \cdot I_{55}^{-1/2} \left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2 \right); \hat{\lambda} + z_{p/2} \cdot I_{55}^{-1/2} \left(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2 \right) \right].$$

E o intervalo de confiança $100(1-p)\%$ para σ^2 é dado por

$$Ic(\sigma^2) = \left[\frac{n\hat{\sigma}^2}{\chi_{(n-5); p/2}^2}; \frac{n\hat{\sigma}^2}{\chi_{(n-5); (1-p)/2}^2} \right].$$

Capítulo 3

Análise Bayesiana

3.1 Introdução

O procedimento clássico usual para análise de modelos não lineares utiliza um método iterativo para obtenção das estimativas dos parâmetros, porém as distribuições obtidas dos estimadores são assintóticas.

Um procedimento alternativo que pode contornar esse problema é o uso de métodos Bayesianos (ver Box e Tiao, 1973), o qual considera os parâmetros como variáveis aleatórias e não como constantes desconhecidas. Se a distribuição dos erros for suposta conhecida, podemos conduzir a análise sem a necessidade de envolvimento com teorias assintóticas (ver Mazucheli, 1994).

O uso de métodos Bayesianos, além de ser uma alternativa de análise, permite ainda a incorporação de conhecimento *a priori* através de uma densidade *a priori* que seja informativa e caso não exista conhecimento *a priori*, consideramos densidades *a priori* não informativas.

Neste capítulo apresentamos uma análise Bayesiana dos modelos de crescimento de Gompertz e de Richards, considerando densidades *a priori* não informativas de Jeffreys (ver exemplo Box e Tiao, 1973).

Nos dois modelos utilizamos o método Metropolis-Hastings para encontrar as estimativas dos parâmetros.

O algoritmo Metropolis-Hastings é utilizado quando *a posteriori* a ser amostrada, neste caso, a densidade condicional, não é conhecida.

Seja $q(\theta, \theta^*)$ uma transição, isto é, uma probabilidade do movimento de θ para θ^* . Geralmente o processo se move de θ para θ^* com mais frequência do que de θ^* para θ , violando a condição de reversibilidade

$$\pi(\theta) q(\theta, \theta^*) = \pi(\theta^*) q(\theta^*, \theta).$$

O algoritmo de Metropolis-Hastings é dado por

- 1) Inicie com um valor arbitrário $\theta^{(0)}$;
- 2) Gere θ^* de $q(\theta^{(j)}, \theta^*)$ e u de uma *Uniforme* $(0, 1)$;
- 3) Seja $\alpha = \min \left\{ 1, \frac{\pi(\theta^*) q(\theta^*, \theta^{(j)})}{\pi(\theta^{(j)}) q(\theta^{(j)}, \theta^*)} \right\}$;
- 4) Se $u \leq \alpha$, faça $\theta^{(j+1)} = \theta^*$, senão faça $\theta^{(j+1)} = \theta^{(j)}$;
- 5) Repita (2) e (3) até que a distribuição estacionária tenha sido obtida.

Os métodos para escolher $q(\theta, \theta^*)$ são

(a) $q(\theta, \theta^*) = q_1(\theta^*, \theta)$, onde $q_1(\cdot)$ é uma densidade multivariada. Neste caso, $\theta^* = \theta + \varepsilon$, onde ε é a variável incremento com distribuição $q_1(\cdot)$. Se $q_1(\varepsilon) = q_1(-\varepsilon)$ então

$$\alpha = \min \left\{ 1, \frac{\pi(\theta^*)}{\pi(\theta^{(j)})} \right\}.$$

(b) $q(\theta, \theta^*) = q_2(\theta^*)$. Forma uma cadeia independente da iteração anterior.

(c) Se $\pi(\theta) \propto \phi(\theta) h(\theta)$, onde $h(\theta)$ é uma densidade que pode ser amostrada e ϕ uniformemente limitada, tomamos $q(\theta, \theta^*) = h(\theta)$. Neste caso particular temos $\alpha =$

$$\min \left\{ 1, \frac{\phi(\theta^*)}{\phi(\theta^{(j)})} \right\}.$$

3.2 Análise Bayesiana Homoscedástica.

3.2.1 Modelo de Gompertz

Densidade *a priori* Não Informativa de Jeffreys

Uma das grandes vantagens do uso de métodos Bayesianos é que podemos incorporar na análise informação *a priori* sobre os parâmetros. E quando não temos opinião formada sobre os parâmetros, o grau do desconhecimento pode ser representado por uma *priori*

não informativa. Iniciamos com a densidade *a priori* não informativa de Jeffreys.

A densidade *a priori* não informativa de Jeffreys para os parâmetros $\theta = (\alpha, \beta, \gamma)$ e σ^2 é dada por:

$$p(\theta, \sigma^2) = \{\det [I(\theta, \sigma^2)]\}^{\frac{1}{2}}, \quad (3.1)$$

onde $I(\theta, \sigma^2)$ é a matriz informação de Fisher definida por 2.3.

Assumindo independência *a priori* entre θ e σ (ver Seber e Wild, 1989), temos

$$p(\theta, \sigma^2) = p(\theta) \cdot p(\sigma^2),$$

onde

$$p(\theta) \propto \{\det [F'(\theta) \cdot F(\theta)]\}^{\frac{1}{2}}$$

e

$$p(\sigma^2) \propto \frac{1}{\sigma},$$

conseqüentemente, *a priori* não informativa de Jeffreys para o modelo de Gompertz é dada por

$$p(\theta, \sigma^2) \propto \{\det [F'(\theta) \cdot F(\theta)]\}^{\frac{1}{2}} \cdot \frac{1}{\sigma}.$$

Considerando $F'(\theta) \cdot F(\theta)$ definido em 2.2, podemos escrever

$$\det [F'(\theta) \cdot F(\theta)] = \alpha^4 \{g_1 g_4 g_6 + 2g_2 g_3 g_5 - g_3^2 g_4 - g_1 g_5^2 - g_2^2 g_6\}.$$

Desta forma, *a priori* não informativa de Jeffreys é dada por

$$p(\theta, \sigma^2) \propto \frac{\alpha^2 A_1(\beta, \gamma)^{1/2}}{\sigma},$$

onde $A_1(\beta, \gamma)$ é dado por

$$A_1(\beta, \gamma) = g_1 g_4 g_6 + 2g_2 g_3 g_5 - g_3^2 g_4 - g_1 g_5^2 - g_2^2 g_6,$$

e g_1, g_2, g_3, g_4, g_5 e g_6 como definidos em 2.2.

Densidade *a posteriori* Conjunta para θ e σ

Especificada a densidade *a priori* não informativa para os parâmetros θ e σ temos, pelo Teorema de Bayes, que a densidade *a posteriori* conjunta para θ e σ^2 é dada por

$$p(\theta, \sigma^2 | \mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{p(\theta, \sigma^2) L(\theta, \sigma^2)}{\int \int p(\theta, \sigma^2) L(\theta, \sigma^2) d\sigma d\theta},$$

onde $L(\theta, \sigma)$ é a função de verossimilhança, definida no capítulo anterior por

$$L(\theta, \sigma^2 | \mathbf{x}, \mathbf{y}) = (2\pi\sigma)^{-\frac{n}{2}} \cdot \exp \left[-\frac{\sum_{i=1}^n [y_i - \alpha \cdot \exp(-a_i)]^2}{2\sigma^2} \right].$$

Fazendo as devidas substituições, temos

$$p(\theta, \sigma^2 | \mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{\alpha^2 A_1(\beta, \gamma)^{1/2} \sigma^{-(n+1)} \exp \left[-\frac{1}{2\sigma^2} S_1(\theta) \right]}{\int \int \alpha^2 A_1(\beta, \gamma)^{1/2} \sigma^{-(n+1)} \exp \left[-\frac{1}{2\sigma^2} S_1(\theta) \right] d\sigma d\theta},$$

ou, simplesmente,

$$p(\theta, \sigma^2 | \mathbf{x}, \mathbf{y}) \propto \alpha^2 A_1(\beta, \gamma)^{1/2} \sigma^{-(n+1)} \exp \left[-\frac{1}{2\sigma^2} S_1(\theta) \right],$$

onde

$$S_1(\theta) = \sum_{i=1}^n [y_i - \alpha \cdot \exp(-a_i)]^2 \quad \text{e} \quad A_1(\beta, \gamma) \quad \text{como definido anteriormente.}$$

Integrando $p(\theta, \sigma^2 | \mathbf{x}, \mathbf{y})$ com respeito a σ e fazendo a seguinte reparametrização

$$\omega = \frac{\sum_{i=1}^n [y_i - \alpha \cdot \exp(-a_i)]^2}{2} \quad \text{isto é} \quad \omega = \frac{S_1(\theta)}{2}$$

$$\psi^{1/2} = \sigma, \quad d\sigma = \frac{1}{2} \psi^{-1/2} d\psi, \quad \text{e} \quad \alpha = \frac{n}{2},$$

obtemos

$$\begin{aligned}
p(\alpha, \beta, \gamma) &\propto \alpha^2 A_1^{1/2}(\beta, \gamma) \int_0^\infty \frac{1}{\sigma^{n+1}} \exp\left\{-\frac{\omega}{\sigma^2}\right\} d\sigma \\
&\propto \alpha^2 A_1^{1/2}(\beta, \gamma) \int_0^\infty \frac{1}{\psi^{\frac{n+1}{2}}} \exp\left\{-\frac{\omega}{\psi}\right\} \frac{1}{2} \psi^{-\frac{1}{2}} d\psi \\
&\propto \alpha^2 \cdot A_1^{1/2}(\beta, \gamma) \cdot \frac{1}{2} \cdot \int_0^\infty \frac{1}{\psi^{\frac{n}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2}}} \exp\left\{-\frac{\omega}{\psi}\right\} d\psi \\
&\propto \alpha^2 \cdot A_1^{1/2}(\beta, \gamma) \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\omega^\alpha} \cdot \int_0^\infty \frac{\omega^\alpha}{\psi^{\alpha+1}} \exp\left\{-\frac{\omega}{\psi}\right\} d\psi \\
&\propto \frac{\alpha^2 \cdot A_1^{1/2}(\beta, \gamma)}{2 \cdot \left(\frac{S_1(\theta)}{2}\right)^{n/2}} \propto \frac{\alpha^2 \cdot A_1^{1/2}(\beta, \gamma)}{(S_1(\theta))^{n/2}}.
\end{aligned}$$

Logo a densidade *a posteriori* conjunta para α, β, γ é dada por

$$p(\alpha, \beta, \gamma \mid \mathbf{x}, \mathbf{y}) \propto \frac{\alpha^2 A_1^{1/2}(\beta, \gamma)}{(S_1(\theta))^{n/2}}.$$

Posterioris condicionais para α, β, γ

Como há uma grande dificuldade em obter as posterioris marginais exatas, trabalhamos com as *posterioris* condicionais, ou seja

$$p(\alpha \mid \beta, \gamma) \propto \frac{\alpha^2}{(S_1(\theta))^{n/2}};$$

$$p(\beta \mid \alpha, \gamma) \propto \frac{A_1^{1/2}(\beta, \gamma)}{(S_1(\theta))^{n/2}};$$

$$p(\gamma \mid \alpha, \beta) \propto \frac{A_1^{1/2}(\beta, \gamma)}{(S_1(\theta))^{n/2}}.$$

3.2.2 Modelo de Richards

Densidade *a priori* Não Informativa de Jeffreys

Utilizando no Modelo de Richards *a priori* não informativa de Jeffreys dada por 3.1 para os parâmetros θ e σ^2 , com $\theta = (\alpha, \beta, \gamma, \delta)$, e assumindo independência *a priori* entre θ e σ^2 temos

$$p(\theta, \sigma^2) = p(\theta) \cdot p(\sigma^2),$$

onde

$$p(\theta) \propto \{\det [F'(\theta) \cdot F(\theta)]\}^{\frac{1}{2}}$$

e

$$p(\sigma^2) \propto \frac{1}{\sigma}$$

e, portanto,

$$p(\theta, \sigma^2) \propto \{\det [F'(\theta) \cdot F(\theta)]\}^{\frac{1}{2}} \cdot \frac{1}{\sigma}$$

com $F'(\theta) \cdot F(\theta)$ definido em 2.6, podemos escrever

$$\begin{aligned} \det (F'(\theta) \cdot F(\theta)) &= \frac{\alpha^6}{\delta^8} (-2r_2r_4r_6r_9 - 2r_3r_4r_6r_7 + 2r_2r_4r_7r_8 + 2r_3r_4r_5r_9 \\ &+ 2r_1r_6r_7r_9 - 2r_2r_3r_7r_9 - r_4^2r_5r_8 + r_4^2r_6^2 + r_3^2r_7^2 - r_1r_7^2r_8 - r_1r_5r_9^2 \\ &+ r_2^2r_9^2 + r_1r_5r_8r_{10} + 2r_2r_3r_6r_{10} - r_3^2r_5r_{10} - r_1r_6^2r_{10} - r_2^2r_8r_{10}). \end{aligned}$$

a priori não informativa de Jeffreys para o Modelo de Richards é, então,

$$p(\theta, \sigma^2) \propto \frac{\alpha^3}{\delta^4} \cdot A_2^{1/2}(\beta, \gamma, \delta) \cdot \frac{1}{\sigma},$$

onde

$$\begin{aligned} A_2(\beta, \gamma, \delta) &= -2r_2r_4r_6r_9 - 2r_3r_4r_6r_7 + 2r_2r_4r_7r_8 + 2r_3r_4r_5r_9 \\ &+ 2r_1r_6r_7r_9 - 2r_2r_3r_7r_9 - r_4^2r_5r_8 + r_4^2r_6^2 + r_3^2r_7^2 - r_1r_7^2r_8 - r_1r_5r_9^2 \\ &+ r_2^2r_9^2 + r_1r_5r_8r_{10} + 2r_2r_3r_6r_{10} - r_3^2r_5r_{10} - r_1r_6^2r_{10} - r_2^2r_8r_{10}). \end{aligned}$$

Densidade *a posteriori* Conjunta para θ e σ^2

Utilizando o Teorema de Bayes, encontramos *a posteriori* conjunta para θ e σ

$$p(\theta, \sigma^2 | \mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{p(\theta, \sigma^2) L(\theta, \sigma^2)}{\int \int p(\theta, \sigma^2) L(\theta, \sigma^2) d\sigma d\theta}.$$

Sabendo que

$$L(\theta, \sigma^2 | \mathbf{x}, \mathbf{y}) = (2\pi\sigma^2)^{-\frac{n}{2}} \cdot \exp \left[-\frac{\sum_{i=1}^n \left[y_i - \alpha (1 + a_i)^{-\frac{1}{\delta}} \right]^2}{2\sigma^2} \right],$$

fazendo

$$S_2(\theta) = \sum_{i=1}^n \left[y_i - \alpha \cdot (1 + a_i)^{-1/\delta} \right]^2,$$

podemos escrever a densidade *a posteriori* conjunta de θ e σ^2 como

$$p(\theta, \sigma^2 | \mathbf{x}, \mathbf{y}) \propto \frac{\alpha^3}{\delta^4} A_2(\beta, \gamma, \delta)^{1/2} \frac{1}{\sigma} \sigma^{-n} \exp \left[-\frac{S_2(\theta)}{2\sigma^2} \right].$$

Integrando $p(\theta, \sigma^2 | \mathbf{x}, \mathbf{y})$ com respeito a σ , temos *a posteriori* conjunta para $\alpha, \beta, \gamma, \delta$

$$p(\alpha, \beta, \gamma, \delta | \mathbf{x}, \mathbf{y}) \propto \int_0^{\infty} \frac{\alpha^3}{\delta^4} A_2^{1/2}(\beta, \gamma, \delta) \frac{1}{\sigma^{n+1}} \exp \left\{ -\frac{S_2(\theta)}{2\sigma^2} \right\} d\sigma,$$

$$p(\alpha, \beta, \gamma, \delta | \mathbf{x}, \mathbf{y}) \propto \frac{\alpha^3 A_2^{1/2}(\beta, \gamma, \delta)}{\delta^4 (S_2(\theta))^{n/2}}$$

Posterioris condicionais para $\alpha, \beta, \gamma, \delta$.

Novamente, pela dificuldade em obter as *posterioris* marginais exatas, calculamos as *posterioris* condicionais para cada parâmetro

$$p(\alpha/\beta, \gamma, \delta) \propto \frac{\alpha^3}{(S_2(\theta))^{n/2}};$$

$$p(\beta/\alpha, \gamma, \delta) \propto \frac{A_2^{1/2}(\beta, \gamma, \delta)}{(S_2(\theta))^{n/2}};$$

$$p(\gamma/\alpha, \beta, \delta) \propto \frac{A_2^{1/2}(\beta, \gamma, \delta)}{(S_2(\theta))^{n/2}};$$

$$p(\delta/\alpha, \beta, \gamma) \propto \frac{A_2^{1/2}(\beta, \gamma, \delta)}{\delta^4 (S_2(\theta))^{n/2}}.$$

Estas *posteriors* condicionais não possuem um núcleo com uma distribuição conhecida, desta forma utilizamos o algoritmo de Metropolis-Hastings para a análise Bayesiana do modelo.

3.3 Análise Bayesiana Heteroscedástica

3.3.1 Introdução

Nesta seção vamos propor modelos de crescimento de Gompertz e de Richards heteroscedásticos com uma abordagem bayesiana. O objetivo principal é a busca de melhores estimativas para os parâmetros de cada modelo.

Supondo que os erros seguem distribuição normal com média zero e variância σ_i^2 , a estrutura heteroscedástica considerada é a multiplicativa, onde a variância dos erros é proporcional a uma potência desconhecida de uma das variáveis explicativas,

$$Var(\varepsilon_i) = \sigma_i^2 = \sigma^2 x_i^\lambda,$$

com λ representando o grau de heteroscedasticidade e σ^2 um padrão comum entre todas as variâncias dos erros.

3.3.2 Modelo de Gompertz

Iniciando com o Modelo de Gompertz

$$y_i = \alpha \exp(-a_i) + \varepsilon_i,$$

como definido no estudo Capítulo 2.

Inferência Bayesiana sobre α, β, γ com λ e σ^2 desconhecidos

Considerando λ e σ desconhecidos, atribuímos uma densidade *a priori* não informativa de Jeffreys para $\theta = (\alpha, \beta, \gamma, \lambda)$, uma densidade *a priori* não informativa de Jeffreys para σ^2 .

a priori não informativa de Jeffreys para θ é dada por

$$p(\theta) \propto \frac{\alpha^2 \sqrt{A_1(\beta, \gamma, \lambda)}}{\sigma},$$

onde

$$\begin{aligned} A_1(\beta, \gamma, \lambda) = & -2d_2d_4d_6d_9 - 2d_3d_4d_6d_7 + 2d_2d_4d_7d_8 + 2d_3d_4d_5d_9 \\ & + 2d_1d_6d_7d_9 - 2d_2d_3d_7d_9 - d_4^2d_5d_8 + d_4^2d_6^2 + d_3^2d_7^2 - d_1d_7^2d_8 - d_1d_5d_9^2 \\ & + d_2^2d_9^2 + d_1d_5d_8d_{10} + 2d_2d_3d_6d_{10} - d_3^2d_5d_{10} - d_1d_6^2d_{10} - d_2^2d_8d_{10}. \end{aligned}$$

e *a priori* de Jeffreys para σ^2 é

$$p(\sigma^2) \propto \frac{1}{\sigma}. \quad (3.2)$$

Supondo independência entre θ e σ^2 , temos a densidade *a priori* conjunta de θ e σ^2 dada por

$$p(\theta, \sigma^2) = p(\theta)p(\sigma^2) \propto \frac{1}{\sigma^2} \alpha^2 A_1(\beta, \gamma, \lambda)^{\frac{1}{2}}.$$

Pelo Teorema de Bayes, a densidade *a posteriori* conjunta de θ e σ^2 é

$$\begin{aligned} p(\theta, \sigma^2 | \mathbf{x}, \mathbf{y}) & \propto \frac{1}{\sigma^2} \alpha^2 A_1(\beta, \gamma, \lambda)^{\frac{1}{2}} L(\theta, \sigma | \mathbf{x}, \mathbf{y}) \\ & \propto \frac{1}{\sigma^2} \alpha^2 A_1(\beta, \gamma, \lambda)^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (3.3)$$

$$\times \prod_{i=1}^n \left[(2\pi\sigma^2 x_i^\lambda)^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} x_i^{-\lambda} (y_i - \alpha \exp(-a_i))^2 \right\} \right] \quad (3.4)$$

$$\begin{aligned} & \propto \alpha^2 A_1(\beta, \gamma, \lambda)^{\frac{1}{2}} (\sigma^2)^{-1-\frac{n}{2}} \left[\prod_{i=1}^n (x_i^\lambda)^{-1/2} \right] \\ & \times \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} (y_i - \alpha \exp(-a_i))^2 \right\}. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Integrando $p(\theta, \sigma^2 | \mathbf{x}, \mathbf{y})$ com respeito a σ , temos a densidade *a posteriori* conjunta

de α, β, γ e λ ,

$$p(\alpha, \beta, \gamma, \lambda \mid \mathbf{x}, \mathbf{y}) \propto \alpha^2 A_1(\beta, \gamma, \lambda)^{1/2} \prod_{i=1}^n (x_i^\lambda)^{-1/2} \\ \times \int_0^\infty \sigma^{-\frac{(n+1)}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} (y_i - \alpha \exp(-a_i))^2 \right\} d\sigma$$

Considerando o fato que $d\sigma^2/d\sigma = 2\sigma$, ou seja, $d\sigma = (2\sigma^2)^{-1/2} d\sigma^2$, temos

$$p(\alpha, \beta, \gamma, \lambda \mid \mathbf{x}, \mathbf{y}) \propto \alpha^2 A_1(\beta, \gamma, \lambda)^{1/2} \prod_{i=1}^n (x_i^\lambda)^{-1/2} \\ \times \int_0^\infty (\sigma^2)^{-\frac{1}{2}-\frac{n}{2}-1} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} (y_i - \alpha \exp(-a_i))^2 \right\} d\sigma^2 \\ \propto \alpha^2 A_1(\beta, \gamma, \lambda)^{1/2} \prod_{i=1}^n (x_i^\lambda)^{-1/2} \left(\sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} (y_i - \alpha \exp(-a_i))^2 \right)^{-(n+1)/2} \\ \times \int_0^\infty (\sigma^2)^{-\left(\frac{n+1}{2}+1\right)} \left(\sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} (y_i - \alpha \exp(-a_i))^2 \right)^{(n+1)/2} \\ \times \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} (y_i - \alpha \exp(-a_i))^2 \right\} d\sigma^2.$$

Visto que $\int_0^\infty (\sigma^2)^{-\left(\frac{n+1}{2}+1\right)} \left(\sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} (y_i - \alpha \exp(-a_i))^2 \right)^{(n+1)/2}$

$$\times \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} (y_i - \alpha \exp(-a_i))^2 \right\} d\sigma^2 = 1$$

uma vez que o integrando corresponde a uma distribuição Gama Invertida de parâmetros $\frac{n+1}{2}$ e $\sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} (y_i - \alpha \exp(-a_i))^2$,

a *posteriori* conjunta de α, β, γ e λ é, portanto,

$$p(\alpha, \beta, \gamma, \lambda \mid \mathbf{x}, \mathbf{y}) \propto \frac{\alpha^2 A_1(\beta, \gamma, \lambda)^{1/2} \left(\prod_{i=1}^n x_i^\lambda \right)^{-1/2}}{\left(\sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} (y_i - \alpha \exp(-a_i))^2 \right)^{(n+1)/2}} \quad (3.6)$$

As determinações das *posteriors* marginais via integração da *posteriori* conjunta presente em 3.6 é analiticamente impraticável. Utilizamos, portanto, as densidades *a poste-*

priori condicionais, dadas por

$$\begin{aligned}
 p(\alpha | \beta, \gamma, \lambda) &\propto \frac{\alpha^2}{\left(\sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} (y_i - \alpha \exp(-a_i))^2 \right)^{(n+1)/2}}; \\
 p(\beta | \alpha, \gamma, \lambda) &\propto \frac{A_1(\beta, \gamma, \lambda)^{1/2}}{\left(\sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} (y_i - \alpha \exp(-a_i))^2 \right)^{(n+1)/2}}; \\
 p(\gamma | \alpha, \beta, \lambda) &\propto \frac{A_1(\beta, \gamma, \lambda)^{1/2}}{\left(\sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} (y_i - \alpha \exp(-a_i))^2 \right)^{(n+1)/2}}; \\
 p(\lambda | \alpha, \beta, \gamma) &\propto \frac{A_1(\beta, \gamma, \lambda)^{1/2} \left(\prod_{i=1}^n x_i^\lambda \right)^{-1/2}}{\left(\sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} (y_i - \alpha \exp(-a_i))^2 \right)^{(n+1)/2}}.
 \end{aligned}$$

3.3.3 Modelo de Richards

Aqui propomos o Modelo de Richards heteroscedástico já estudado na parte clássica.

$$y_i = \alpha [1 + a_i] \frac{-1}{\delta} + \varepsilon_i, \quad \varepsilon_i \sim N(0, \sigma_i^2).$$

Inferência Bayesiana sobre α, β, γ e δ considerando λ e σ^2 desconhecidos

Considerando λ e σ^2 desconhecidos, atribuiremos as densidades *prioris* não informativas de Jeffreys para $\theta = (\alpha, \beta, \gamma, \delta, \lambda)$ e σ^2 .

a priori não informativa de Jeffreys para θ é dada por

$$p(\theta) \propto \frac{\alpha^3 A_2(\beta, \gamma, \delta, \lambda)^{1/2}}{\delta^4 \sigma}, \quad (3.7)$$

onde

$$\begin{aligned}
A_2(\beta, \gamma, \delta, \lambda) = & 2k_3k_5k_8k_9k_{11} - 2k_3k_4k_8k_9k_{12} - 2k_4k_5k_7k_8k_{12} \\
& + 2k_4k_5k_7k_9k_{11} - 2k_4k_5k_8k_9k_{10} - 2k_3k_4k_7k_8k_{15} \\
& - 2k_3k_4k_7k_9k_{14} - 2k_3k_5k_7k_8k_{14} - 2k_3k_5k_7k_9k_{13} \\
& - 2k_2k_4k_9k_{11}k_{12} - 2k_2k_5k_8k_{11}k_{12} + 2k_4k_5k_6k_{11}k_{12} \\
& - 2k_2k_3k_8k_{11}k_{15} + 2k_2k_3k_8k_{12}k_{14} - 2k_2k_3k_9k_{11}k_{14} \\
& + 2k_2k_3k_9k_{12}k_{13} - 2k_2k_4k_7k_{11}k_{15} + 2k_2k_4k_7k_{12}k_{14} \\
& + 2k_2k_4k_8k_{10}k_{15} + 2k_2k_4k_9k_{10}k_{14} - 2k_2k_5k_7k_{11}k_{14} \\
& + 2k_2k_5k_7k_{12}k_{13} + 2k_2k_5k_8k_{10}k_{14} + 2k_2k_5k_9k_{10}k_{13} \\
& + 2k_3k_4k_6k_{11}k_{15} - 2k_3k_4k_6k_{12}k_{14} + 2k_3k_5k_6k_{11}k_{14} \\
& - 2k_3k_5k_6k_{12}k_{13} - 2k_4k_5k_6k_{10}k_{14} + 2k_2k_3k_7k_{13}k_{15} \\
& + 2k_1k_8k_9k_{11}k_{12} + 2k_1k_7k_8k_{11}k_{15} - 2k_1k_7k_8k_{12}k_{14} \\
& + 2k_1k_7k_9k_{11}k_{14} - 2k_1k_7k_9k_{12}k_{13} - 2k_1k_8k_9k_{10}k_{14} \\
& + 2k_1k_6k_{11}k_{12}k_{14} + k_1k_6k_{10}k_{13}k_{15} - 2k_2k_3k_7k_{14}^2 \\
& - 2k_2k_4k_8k_{12}^2 - 2k_2k_5k_9k_{11}^2 - 2k_3k_4k_9^2k_{11} + 2k_3k_5k_8^2k_{12} \\
& + 2k_4k_5k_7^2k_{14} - 2k_5^2k_7k_8k_{11} + 2k_4^2k_7k_9k_{12} + 2k_3^2k_8k_9k_{14} \\
& - k_1k_6k_{10}k_{14}^2 - k_1k_6k_{12}^2k_{13} - k_1k_6k_{11}^2k_{15} - k_1k_9^2k_{10}k_{13} \\
& - k_1k_8^2k_{10}k_{15} - k_5^2k_6k_{10}k_{13} - k_4^2k_6k_{10}k_{15} - k_1k_7^2k_{13}k_{15} \\
& - k_3^2k_6k_{13}k_{15} - 2k_2^2k_{11}k_{12}k_{14} - k_2^2k_{10}k_{13}k_{15} + k_1k_8^2k_{12}^2 \\
& + k_1k_9^2k_{11}^2 + k_1k_7^2k_{14}^2 + k_4^2k_6k_{12}^2 + k_5^2k_6k_{11}^2 + k_3^2k_6k_{14}^2 \\
& + k_4^2k_9^2k_{10} + k_5^2k_8^2k_{10} + k_3^2k_9^2k_{13} + k_5^2k_7^2k_{13} + k_3^2k_8^2k_{15} \\
& + k_4^2k_7^2k_{15} + k_2^2k_{10}k_{14}^2 + k_2^2k_{12}^2k_{13} + k_2^2k_{11}^2k_{15}
\end{aligned}$$

Adotando também a densidade *a priori* de Jeffreys para σ^2 dada por 3.2, temos que, supondo independência *a priori* entre θ e σ^2 , a densidade *a priori* conjunta de θ e σ^2 é dada por

$$p(\theta, \sigma^2) = p(\theta)p(\sigma^2) \propto \frac{\alpha^3 A_2(\beta, \gamma, \delta, \lambda)^{1/2}}{\delta^4 \sigma^2}.$$

Pelo Teorema de Bayes, a densidade *a posteriori* conjunta de θ e σ^2 é dada por

$$\begin{aligned}
 p(\theta, \sigma^2 \mid \mathbf{x}, \mathbf{y}) &\propto \frac{\alpha^3 A_2(\beta, \gamma, \delta, \lambda)^{1/2}}{\delta^4 \sigma^2} L(\theta, \sigma \mid \mathbf{x}, \mathbf{y}) & (3.8) \\
 &\propto \frac{\alpha^3 A_2(\beta, \gamma, \delta, \lambda)^{1/2}}{\delta^4 \sigma^2} \\
 &\quad \times \prod_{i=1}^n \left[(2\pi\sigma^2 x_i^\lambda)^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} x_i^{-\lambda} \left(y_i - \alpha \left[1 + a_i \right]^{\frac{-1}{\delta}} \right)^2 \right\} \right] \\
 &\propto \frac{\alpha^3 A_2(\beta, \gamma, \delta, \lambda)^{1/2}}{\delta^4 \sigma^2} (\sigma^2)^{-\frac{n}{2}} \prod_{i=1}^n (x_i^\lambda)^{-1/2} \\
 &\quad \times \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} \left(y_i - \alpha \left[1 + a_i \right]^{\frac{-1}{\delta}} \right)^2 \right\} \\
 &\propto \frac{\alpha^3 A_2(\beta, \gamma, \delta, \lambda)^{1/2}}{\delta^4} (\sigma^2)^{-1-\frac{n}{2}} \prod_{i=1}^n (x_i^\lambda)^{-1/2} \\
 &\quad \times \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} \left(y_i - \alpha \left[1 + a_i \right]^{\frac{-1}{\delta}} \right)^2 \right\}.
 \end{aligned}$$

Integrando $p(\theta, \sigma^2 \mid \mathbf{x}, \mathbf{y})$ com respeito a σ , temos a densidade *a posteriori* conjunta de $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ e λ

$$\begin{aligned}
 p(\theta \mid \mathbf{x}, \mathbf{y}) &\propto \frac{\alpha^3 A_2(\beta, \gamma, \delta, \lambda)^{1/2}}{\delta^4} \prod_{i=1}^n (x_i^\lambda)^{-1/2} \\
 &\quad \times \int_0^\infty \sigma^{-\frac{(n+1)}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} \left(y_i - \alpha \left[1 + a_i \right]^{\frac{-1}{\delta}} \right)^2 \right\} d\sigma.
 \end{aligned}$$

Considerando que $d\sigma^2/d\sigma = 2\sigma$, ou seja, $d\sigma = (2\sigma^2)^{-1/2} d\sigma^2$, temos

$$\begin{aligned}
p(\theta | \mathbf{x}, \mathbf{y}) &\propto \frac{\alpha^3 A_2(\beta, \gamma, \delta, \lambda)^{1/2}}{\delta^4} \prod_{i=1}^n (x_i^\lambda)^{-1/2} \\
&\times \int_0^\infty (\sigma^2)^{-\frac{1}{2} - \frac{n}{2} - 1} \exp \left\{ -\frac{\sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} \left(y_i - \alpha [1 + a_i] \frac{-1}{\delta} \right)^2}{2\sigma^2} \right\} d\sigma^2 \\
&\propto \frac{\alpha^3 A_2(\beta, \gamma, \delta, \lambda)^{1/2}}{\delta^4} \prod_{i=1}^n (x_i^\lambda)^{-1/2} \left(\sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} \left(y_i - \alpha [1 + a_i] \frac{-1}{\delta} \right)^2 \right)^{-(n+1)/2} \\
&\times \int_0^\infty (\sigma^2)^{-\left(\frac{n+1}{2} + 1\right)} \left(\sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} \left(y_i - \alpha [1 + a_i] \frac{-1}{\delta} \right)^2 \right)^{(n+1)/2} \\
&\times \exp \left\{ -\frac{\sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} \left(y_i - \alpha [1 + a_i] \frac{-1}{\delta} \right)^2}{2\sigma^2} \right\} d\sigma^2.
\end{aligned}$$

Visto que $\int_0^\infty (\sigma^2)^{-\left(\frac{n+1}{2} + 1\right)} \left(\sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} \left(y_i - \alpha [1 + a_i] \frac{-1}{\delta} \right)^2 \right)^{(n+1)/2} \times \exp \left\{ -\frac{\sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} \left(y_i - \alpha [1 + a_i] \frac{-1}{\delta} \right)^2}{2\sigma^2} \right\} d\sigma^2 = 1$, pois é a integral de uma distribuição

Gama Invertida de

parâmetros $\frac{n+1}{2}$ e $\sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} \left(y_i - \alpha [1 + a_i] \frac{-1}{\delta} \right)^2$, a *posteriori* conjunta de $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ e λ é

$$p(\alpha, \beta, \gamma, \delta, \lambda | \mathbf{x}, \mathbf{y}) \propto \frac{\alpha^3 A_2(\beta, \gamma, \delta, \lambda)^{1/2} \left(\prod_{i=1}^n x_i^\lambda \right)^{-1/2}}{\delta^4 \left(\sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} \left(y_i - \alpha [1 + a_i] \frac{-1}{\delta} \right)^2 \right)^{(n+1)/2}} \quad (3.9)$$

As determinações das *posteriors* marginais via integração da *posteriori* conjunta presente em 3.9 não é uma tarefa simples. A integral é analiticamente impraticável de ser

resolvida. Isto requer o uso de densidades *a posteriori* condicionais dadas por:

$$\begin{aligned}
 p(\alpha \mid \beta, \gamma, \delta, \lambda) &\propto \frac{\alpha^3}{\left(\sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} \left(y_i - \alpha [1 + a_i] \frac{-1}{\delta} \right)^2 \right)^{(n+1)/2}}; \\
 p(\beta \mid \alpha, \gamma, \delta, \lambda) &\propto \frac{A_2(\beta, \gamma, \delta, \lambda)^{1/2}}{\left(\sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} \left(y_i - \alpha [1 + a_i] \frac{-1}{\delta} \right)^2 \right)^{(n+1)/2}}; \\
 p(\gamma \mid \alpha, \beta, \delta, \lambda) &\propto \frac{A_2(\beta, \gamma, \delta, \lambda)^{1/2}}{\left(\sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} \left(y_i - \alpha [1 + a_i] \frac{-1}{\delta} \right)^2 \right)^{(n+1)/2}}; \\
 p(\delta \mid \alpha, \beta, \gamma, \lambda) &\propto \frac{A_2(\beta, \gamma, \delta, \lambda)^{1/2}}{\delta^4 \left(\sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} \left(y_i - \alpha [1 + a_i] \frac{-1}{\delta} \right)^2 \right)^{(n+1)/2}}; \\
 p(\lambda \mid \alpha, \beta, \gamma, \delta) &\propto \frac{A_2(\beta, \gamma, \delta, \lambda)^{1/2} \left(\prod_{i=1}^n x_i^\lambda \right)^{-1/2}}{\left(\sum_{i=1}^n x_i^{-\lambda} \left(y_i - \alpha [1 + a_i] \frac{-1}{\delta} \right)^2 \right)^{(n+1)/2}}.
 \end{aligned}$$

Capítulo 4

Aplicação da Análise Clássica

4.1 Modelo de Gompertz

Para implementação de métodos iterativos, os valores iniciais dos parâmetros são essenciais para a convergência do algoritmo.

Os valores iniciais para os parâmetros foram obtidos segundo Ratkowsky (1983) da seguinte forma

i) O primeiro passo para obter as estimativas iniciais dos parâmetros, o qual é igualmente válido para outros modelos, é plotar o gráfico *y versus x*. Uma estimativa inicial razoável de α , denotada por α_0 , pode ser obtida visualmente por uma assíntota ao maior valor aproximado da resposta de *y* quando *x* tende ao infinito.

ii) Através da linearização de

$$z_0 = \log \left[-\log \left[\frac{y_0}{\alpha_0} \right] \right] = \beta - \gamma x_0.$$

obtemos os valores iniciais de β e γ , denotados por β_0 e γ_0 , respectivamente.

iii) Os valores ajustados de α_0 , β_0 e γ_0 podem ser usados como estimativas iniciais para obter a estimativa de máxima verossimilhança dos parâmetros assumindo erros aditivos ou multiplicativos, usando o algoritmo de Gauss-Newton ou Quase-Newton.

Nesta seção, ilustramos a metodologia desenvolvida para o modelo de Gompertz no Capítulo 2 através de dados simulados.

Os valores utilizados para a geração dos dados foram $\alpha = 150$; $\beta = 1,7$; $\gamma = 0,1$ e

$\sigma^2 = 1$. Para obtenção dos dados homoscedásticos e heteroscedásticos foram utilizados os valores de $\lambda = 0; 0,5; 1$ e 2 . Foram obtidas amostras de tamanhos $n = 10, n = 50$ e $n = 100$, através da função `mvrnorm` do software R-Gui 2.0.0.

A análise clássica foi implementada através da análise das estimativas de máxima verossimilhança, dos erros padrão e dos intervalos de confiança assintóticos. Esses valores foram obtidos com o uso do software SAS, através da função `NLMIXED`.

A Figura 3 apresenta o diagrama da dispersão dos dados em torno da curva sigmóide para os valores de λ especificados em cada gráfico utilizando uma amostra $n = 10$.

A Figura 4 apresenta o diagrama de dispersão dos dados em torno da curva sigmóide para os valores de λ especificados em cada gráfico em uma amostra $n = 50$.

A Figura 5 apresenta o diagrama da dispersão dos dados em torno da curva sigmóide para os valores de λ especificados em cada gráfico para uma amostra $n = 100$.

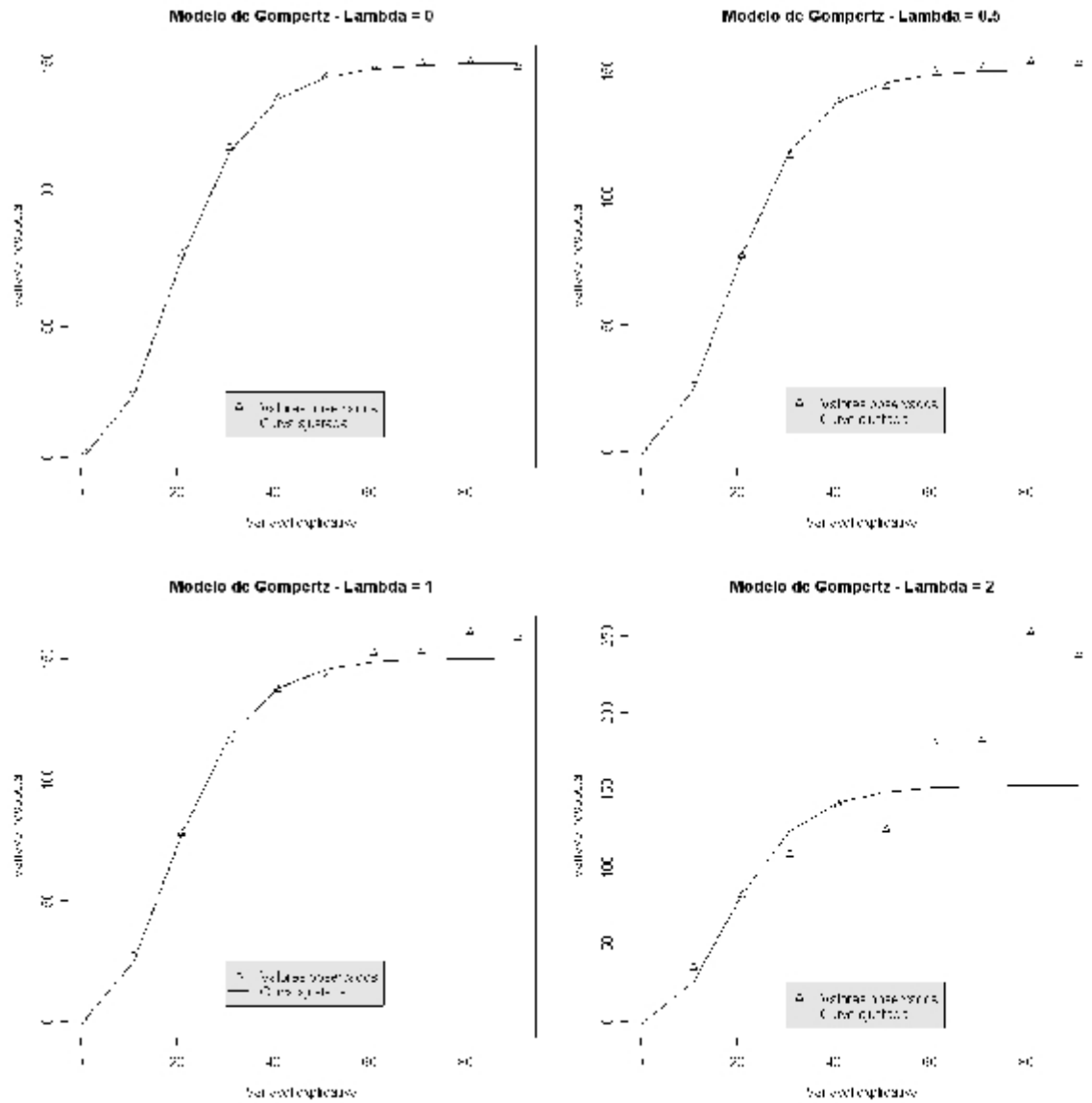


Figura 3 - Gráfico da Heteroscedasticidade para o Modelo de Gompertz com amostras de tamanho 10

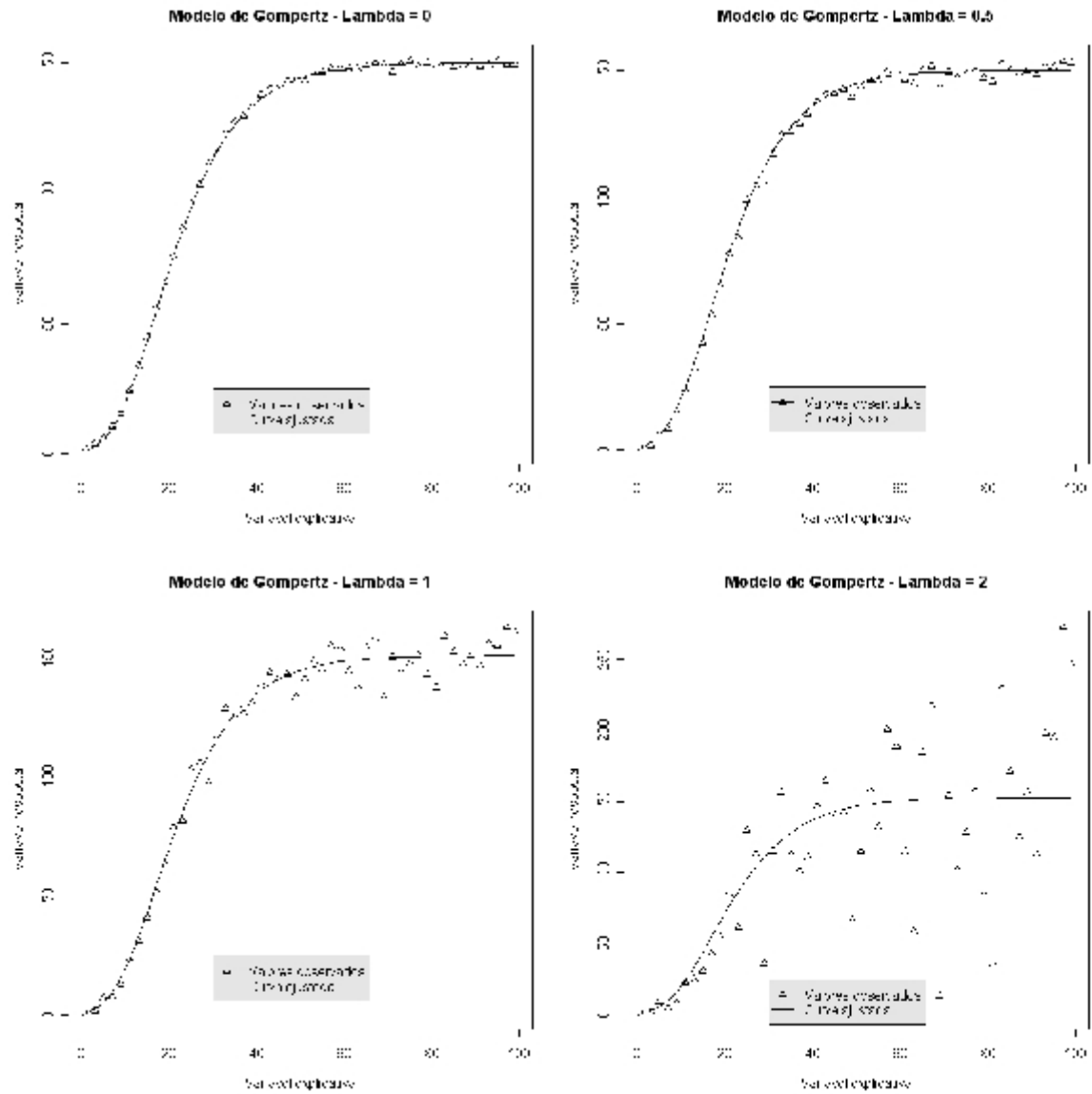


Figura 4 - Gráfico da Heteroscedasticidade para o Modelo de Gompertz com amostras de tamanho 50

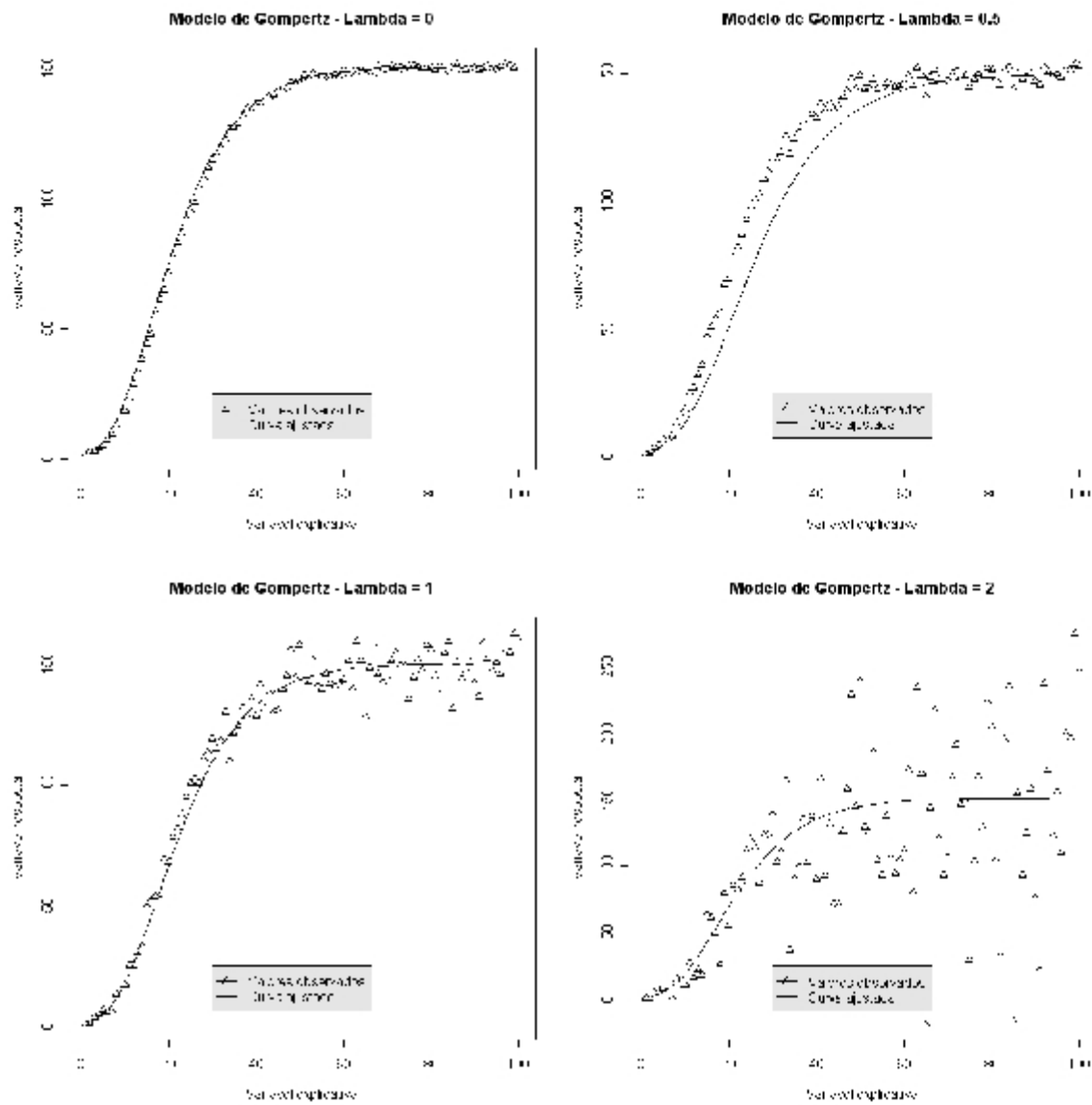


Figura 5 - Gráfico da Heteroscedasticidade para o Modelo de Gompertz com amostras de tamanho 100.

As Tabelas 1, 2 e 3 apresentam o resumo da inferência clássica feita para o modelo de Gompertz para uma amostra de tamanho $n=10$, $n=50$ e $n=100$, respectivamente.

Tabela1 - Resumo da Análise Clássica para o Modelo de Gompertz n=10

Com valores reais $\alpha = 150$; $\beta = 1,7$; $\gamma = 0,1$; $\sigma^2 = 1$

$\lambda = 0$	Parâmetros	EMV	Erro Padrão	IC(95%)
	α	149,920	0,416	[148,965; 150,835]
	β	1,699	0,026	[1,642; 1,760]
	γ	0,099	0,001	[0,097; 0,103]
	σ^2	0,409	0,476	[0,360; 1,471]
$\lambda = 0,5$	Parâmetros	EMV	Erro Padrão	IC(95%)
	α	150,135	1,183	[147,180; 152,555]
	β	1,704	0,043	[1,608; 1,801]
	γ	0,101	0,003	[0,094; 0,106]
	λ	0,511	0,181	[0,493; 1,758]
	σ^2	0,238	0,330	[-0,463; 0,944]
$\lambda = 1$	Parâmetros	EMV	Erro Padrão	IC(95%)
	α	150,435	1,278	[142,440; 157,050]
	β	1,706	0,065	[1,553; 1,848]
	γ	0,101	0,005	[0,088; 0,111]
	λ	1,074	0,861	[0,067; 2,758]
	σ^2	0,145	0,226	[-0,331; 0,649]
$\lambda = 2$	Parâmetros	EMV	Erro Padrão	IC(95%)
	α	152,845	1,979	[132,095; 203,135]
	β	1,740	0,106	[1,291; 2,009]
	γ	0,106	0,017	[0,049; 0,147]
	λ	2,021	0,826	[1,234; 2,600]
	σ^2	0,119	0,179	[-0,242; 0,505]

Tabela2 - Resumo da Análise Clássica para o Modelo de Gompertz n=50

Com valores reais $\alpha = 150$; $\beta = 1,7$; $\gamma = 0,1$; $\sigma^2 = 1$

$\lambda = 0$	Parâmetros	EMV	Erro Padrão	IC(95%)
	α	150,010	0,199	[149,610; 150,405]
	β	1,699	0,016	[1,666; 1,733]
	γ	0,099	0,001	[0,098; 0,102]
	σ^2	0,715	0,462	[0,050; 1,761]
$\lambda = 0,5$	Parâmetros	EMV	Erro Padrão	IC(95%)
	α	150,090	0,403	[149,285; 150,893]
	β	1,697	0,025	[1,649; 1,741]
	γ	0,101	0,001	[0,097; 0,1025]
	λ	0,513	0,198	[0,129; 0,906]
	σ^2	0,955	0,361	[0,226; 1,659]
$\lambda = 1$	Parâmetros	EMV	Erro Padrão	IC(95%)
	α	150,220	1,149	[147,920; 152,500]
	β	1,694	0,047	[1,635; 1,783]
	γ	0,098	0,003	[0,094; 0,105]
	λ	1,015	0,200	[0,638; 1,411]
	σ^2	0,933	0,357	[0,215; 1,625]
$\lambda = 2$	Parâmetros	EMV	Erro Padrão	IC(95%)
	α	151,645	2,901	[133,650; 169,510]
	β	1,688	0,150	[1,377; 2,003]
	γ	0,098	0,012	[0,074; 0,124]
	λ	2,037	0,200	[1,647; 2,433]
	σ^2	0,923	0,345	[0,216; 1,595]

$$(\alpha=150; \beta=1.7; \gamma=0.1; \lambda = 0; \sigma^2=1)$$

Tabela3 - Resumo da Análise Clássica para o Modelo de Gompertz n=100

$\lambda = 0$	Parâmetros	EMV	Erro Padrão	IC(95%)
	α	150,035	0,141	[149,740; 150,310]
	β	1,634	0,012	[1,626; 1,721]
	γ	0,100	0,001	[0,098; 0,101]
	σ^2	0,964	0,376	[0,209; 1,667]
$\lambda = 0,5$	Parâmetros	EMV	Erro Padrão	IC(95%)
	α	150,090	0,406	[149,280; 150,890]
	β	1,697	0,023	[1,651; 1,742]
	γ	0,099	0,001	[0,097; 0,102]
	λ	0,512	0,199	[0,129; 0,907]
	σ^2	0,952	0,356	[0,225; 1,647]
$\lambda = 1$	Parâmetros	EMV	Erro Padrão	IC(95%)
	α	150,250	1,147	[147,920; 152,520]
	β	1,695	0,044	[1,602; 1,782]
	γ	0,095	0,003	[0,094; 0,105]
	λ	1,013	0,199	[0,638; 1,411]
	σ^2	0,935	0,262	[0,217; 1,625]
$\lambda = 2$	Parâmetros	EMV	Erro Padrão	IC(95%)
	α	151,644	2,901	[133,650; 169,510]
	β	1,686	0,150	[1,376; 2,000]
	γ	0,097	0,012	[0,073; 0,124]
	λ	2,038	0,200	[1,647; 2,433]
	σ^2	0,922	0,345	[0,218; 1,576]

Analisando as estimativas de máxima verossimilhança, percebemos que estão muito próximas dos valores reais dos parâmetros, independentemente do grau de heteroscedasticidade e do tamanho da amostra, com exceção do parâmetro σ^2 , que tem suas estimativas bem distantes do valor real quando a amostra é pequena, n=10. Os erros padrão e os intervalos de confiança sofrem uma pequena variação com a mudança do grau de he-

teroscedasticidade.

4.2 Modelo de Richards

Os valores iniciais para os parâmetros foram obtidos segundo Ratkowsky (1983), da seguinte forma

i) O primeiro passo para obter a estimativa inicial dos parâmetros, é plotar o gráfico y versus x . Uma estimativa inicial razoável de α , denotada por α_0 , pode ser obtida visualmente por uma assíntota ao maior valor aproximado da resposta de y quando x tende ao infinito.

ii) Através da linearização de

$$z_0 = \log \left[\log \left(\frac{\alpha_0}{y_0} \right)^\delta - 1 \right] = \beta - \gamma x_0.$$

obtemos os valores iniciais de β e γ , denotados por β_0 e γ_0 , respectivamente.

iii) A estimativa δ_0 de δ é encontrada no gráfico dos dados na forma y versus x através de uma estimativa do ponto de inflexão denotado por (x_f, y_f) seguindo uma aproximação usada por Causton(1969), onde $x_f = \frac{\beta - \log \delta}{\gamma}$ e $y_f = \alpha (1 + \delta)^{-1/\delta}$

Logo, por duas observações visuais do gráfico de y versus x . obtém-se:

(1) a assíntota α_0

(2) o ponto de inflexão (x_f, y_f) ,

e estamos aptos a determinar o ajuste das estimativas iniciais dos quatro parâmetros $\alpha_0, \beta_0, \gamma_0$ e δ_0 para, então começarmos o procedimento do algoritmo de Gauss-Newton ou Quase-Newton.

Nesta seção, ilustramos a metodologia desenvolvida para o Modelo de Richards no Capítulo 2 através de dados simulados.

Os valores utilizados para a geração dos dados foram $\alpha = 150$; $\beta = 1,7$; $\gamma = 0,2$, $\delta = 0,02$ e $\sigma^2 = 1$. Para obtenção dos dados homoscedásticos e heteroscedásticos foram utilizados os valores de $\lambda = 0$; $0,5$; 1 e 2 . Foram obtidas amostras de tamanhos $n = 10$, $n = 50$ e $n = 100$, através da função `mvrnorm` do software R-Gui 2.0.0.

A análise clássica foi implementada através da análise das estimativas de máxima

verossimilhança, dos erros padrão e dos intervalos de confiança assintóticos. Esses valores foram obtidos com o uso do software SAS, através da função NLMIXED.

A Figura 6 apresenta o diagrama da dispersão dos dados em torno da curva sigmóide para os valores de λ especificados em cada gráfico para uma amostra $n = 10$.

A Figura 7 apresenta o diagrama da dispersão dos dados em torno da curva sigmóide para os valores de λ especificados em cada gráfico para uma amostra $n = 50$.

A Figura 8 apresenta o diagrama da dispersão dos dados em torno da curva sigmóide para os valores de λ especificados em cada gráfico para uma amostra $n = 100$.

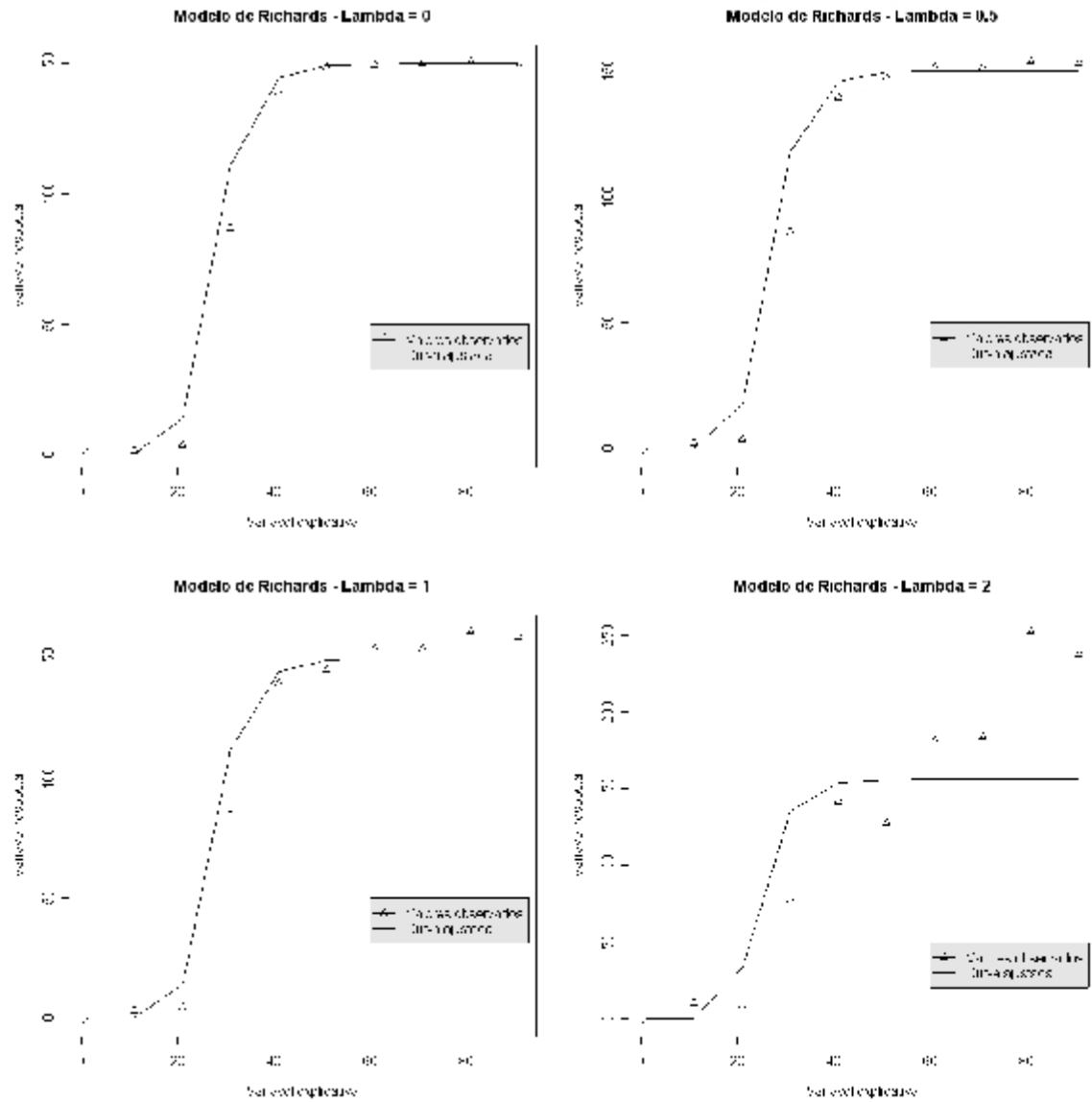


Figura 6 - Gráfico da Heteroscedasticidade para o Modelo de Richards com amostras de tamanho 10

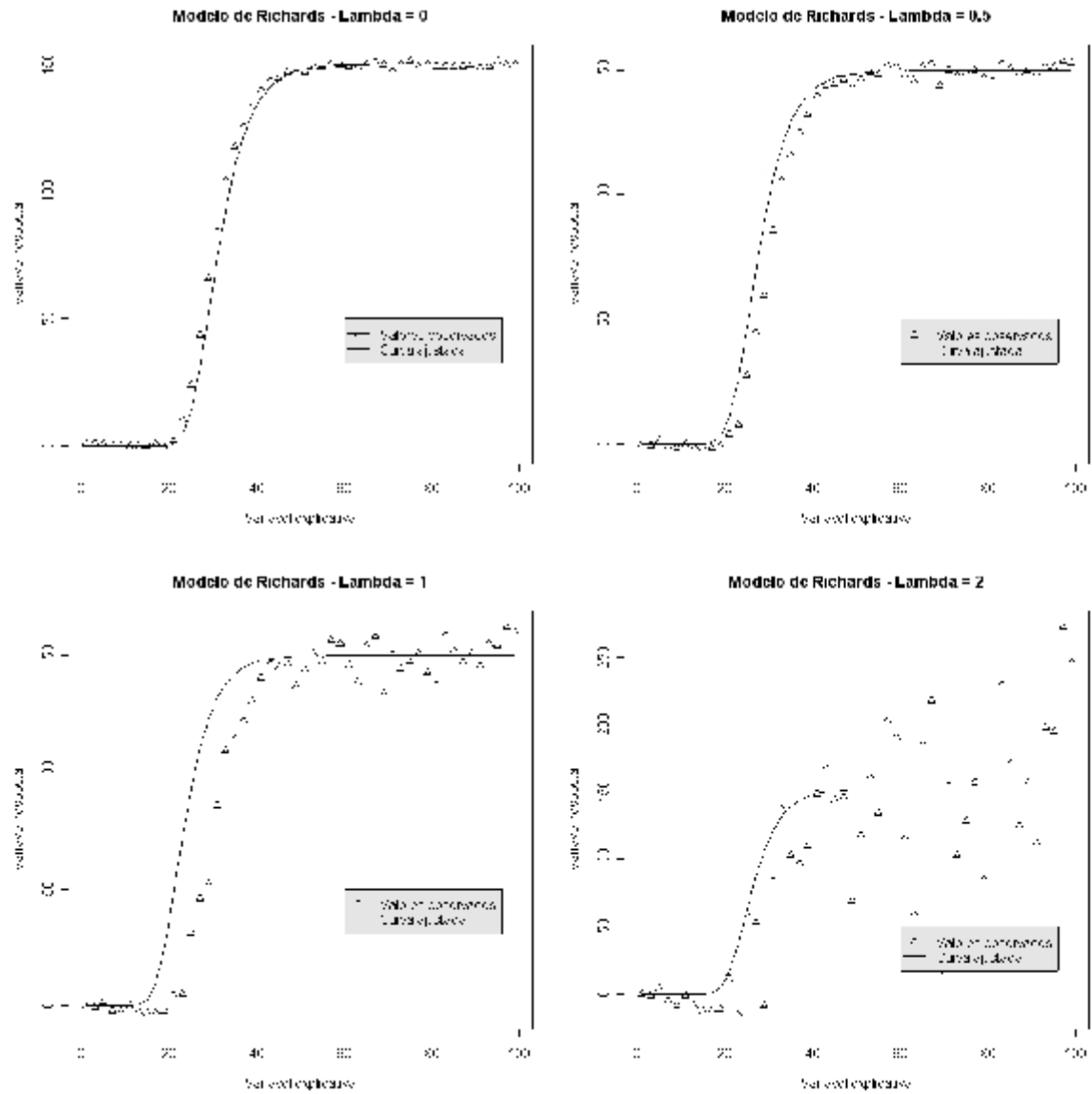


Figura 7 - Gráfico da Heteroscedasticidade para o Modelo de Richards com amostras de tamanho 50

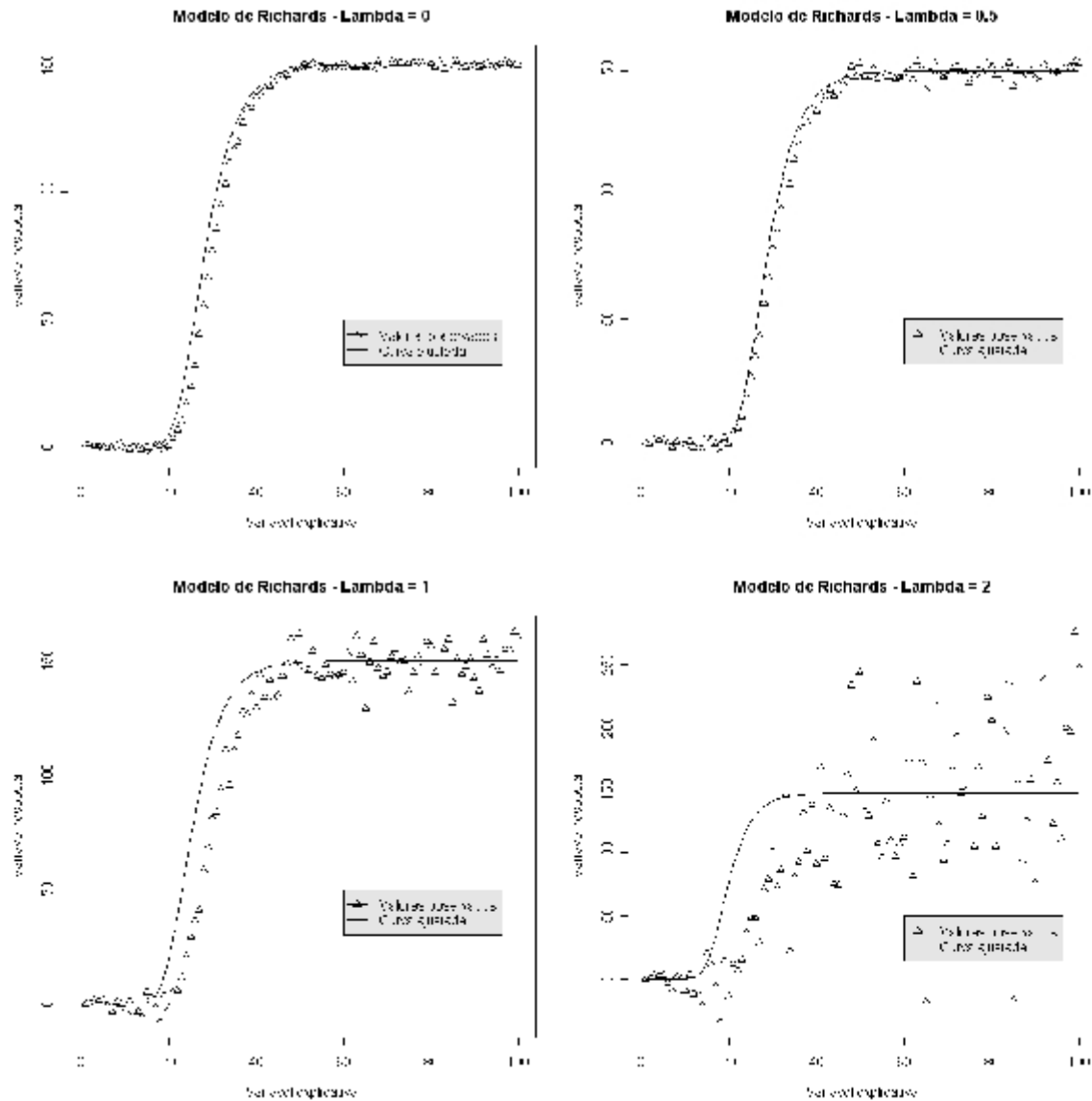


Figura 8 - Gráfico da Heteroscedasticidade para o Modelo de Richards com amostras de tamanho 100

As Tabelas 4, 5 e 6, apresentam os resumos da inferência clássica feita para o Modelo de Richards para amostras de tamanho $n=10$, $n=50$ e $n=100$, respectivamente.

Tabela 4 - Resumo da Análise Clássica para o Modelo de Richards $n = 10$
 com valores reais $\alpha = 150$; $\beta = 1,7$; $\gamma = 0,2$; $\delta = 0,02$ e $\sigma^2 = 1$

$\lambda = 0$	Parâmetros	EMV	Erro Padrão	IC(95%)
	α	149,885	0,348	[149,095; 150,620]
	β	1,319	0,856	[0,371; 2,584]
	γ	0,209	0,009	[0,188; 0,229]
	δ	0,019	0,065	[0,010; 0,056]
	σ^2	0,292	0,238	[-0,242; 0,823]
$\lambda = 0,5$	Parâmetros	EMV	Erro Padrão	IC(95%)
	α	149,795	0,989	[147,395; 151,975]
	β	1,321	0,649	[0,160; 2,386]
	γ	0,220	0,025	[0,163; 0,279]
	δ	0,017	0,164	[0,016; 0,549]
	λ	0,502	0,041	[0,088; 0,949]
	σ^2	0,265	0,190	[-0,187; 0,680]
$\lambda = 1$	Parâmetros	EMV	Erro Padrão	IC(95%)
	α	149,775	0,995	[147,505; 151,990]
	β	1,295	0,579	[0,050; 2,262]
	γ	0,211	0,019	[0,171; 0,255]
	δ	0,018	0,113	[0,016; 0,413]
	λ	0,913	0,429	[0,077; 2,010]
	σ^2	0,357	0,296	[-0,239; 1,065]
$\lambda = 2$	Parâmetros	EMV	Erro Padrão	IC(95%)
	α	156,060	1,231	[138,605; 198,660]
	β	1,487	0,712	[0,912; 2,956]
	γ	0,241	0,179	[0,154; 0,640]
	δ	0,018	0,479	[0,017; 0,108]
	λ	2,282	0,484	[1,245; 3,377]
	σ^2	0,493	0,458	[-0,458; 1,524]

Tabela 5 - Resumo da Análise Clássica para o Modelo de Richards $n=50$
 com valores reais $\alpha = 150$; $\beta = 1,7$; $\gamma = 0,2$; $\delta = 0,02$ e $\sigma^2 = 1$

$\lambda = 0$	Parâmetros	EMV	Erro Padrão	IC(95%)
	α	149,950	0,179	[149,585; 150,310]
	β	1,778	0,911	[0,116; 2,679]
	γ	0,204	0,005	[0,194; 0,213]
	δ	0,015	0,052	[0,013; 0,171]
	σ^2	0,772	0,405	[0,014; 1,575]
$\lambda = 0,5$	Parâmetros	EMV	Erro Padrão	IC(95%)
	α	149,880	0,509	[148,855; 150,915]
	β	1,398	0,930	[0,247; 2,175]
	γ	0,208	0,011	[0,186; 0,230]
	δ	0,019	0,108	[0,017; 0,127]
	λ	0,598	0,267	[0,045; 1,139]
	σ^2	0,787	0,415	[0,020; 1,645]
$\lambda = 1$	Parâmetros	EMV	Erro Padrão	IC(95%)
	α	149,910	0,418	[147,55; 152,94]
	β	1,240	1,371	[0,798; 2,391]
	γ	0,222	0,026	[0,092; 0,279]
	δ	0,028	0,233	[0,021; 0,132]
	λ	1,068	0,249	[0,517; 1,565]
	σ^2	0,868	0,444	[0,028; 1,696]
$\lambda = 2$	Parâmetros	EMV	Erro Padrão	IC(95%)
	α	152,250	1,571	[128,725; 170,900]
	β	1,990	1,249	[0,1661; 2,496]
	γ	0,233	0,106	[0,129; 1,844]
	δ	0,024	0,635	[0,013; 0,471]
	λ	2,068	0,262	[1,512; 2,594]
	σ^2	0,849	0,393	[-0,058; 1,683]

Tabela 6 - Resumo da Análise Clássica para o Modelo de Richards $n=100$
 com valores reais $\alpha = 150$; $\beta = 1,7$; $\gamma = 0,2$; $\delta = 0,02$ e $\sigma^2 = 1$

$\lambda = 0$	Parâmetros	EMV	Erro Padrão	IC(95%)
	α	150,005	0,126	[149,750; 150,260]
	β	1,227	1,116	[1,003; 3,423]
	γ	0,199	0,001	[0,196; 0,203]
	δ	0,018	0,001	[0,011; 0,019]
	σ^2	0,884	0,188	[0,259; 1,160]
$\lambda = 0,5$	Parâmetros	EMV	Erro Padrão	IC(95%)
	α	149,866	0,366	[149,140; 150,592]
	β	1,445	1,300	[0,435; 2,724]
	γ	0,207	0,008	[0,191; 0,223]
	δ	0,016	0,081	[0,015; 0,157]
	λ	0,551	0,194	[0,165; 0,937]
	σ^2	0,949	0,355	[0,245; 1,654]
$\lambda = 1$	Parâmetros	EMV	Erro Padrão	IC(95%)
	α	149,760	0,321	[147,820; 151,900]
	β	1,149	1,541	[0,148; 2,574]
	γ	0,209	0,018	[0,179; 0,247]
	δ	0,023	0,162	[0,015; 0,177]
	λ	0,984	0,197	[0,598; 1,394]
	σ^2	1,001	0,371	[0,243; 1,719]
$\lambda = 2$	Parâmetros	EMV	Erro Padrão	IC(95%)
	α	147,280	1,558	[132,720; 162,305]
	β	1,339	2,633	[-1,793; 9,315]
	γ	0,271	0,124	[0,021; 0,524]
	δ	0,026	0,188	[0,024; 1,229]
	λ	2,048	0,193	[1,655; 2,435]
	σ^2	0,899	0,331	[0,224; 1,563]

Analisando as estimativas de máxima verossimilhança percebemos que as mesmas estão muito próximas dos valores reais dos parâmetros, independente do valor de λ (grau de heteroscedasticidade) e do tamanho da amostra, com exceção do parâmetro σ^2 , que tem suas estimativas bem distantes do valor real quando a amostra é pequena ($n = 10$) e do parâmetro β , que teve suas estimativas um pouco distantes do valor real. Os erros padrão e os intervalos de confiança sofrem uma pequena variação com a mudança do grau de heteroscedasticidade.

Capítulo 5

Aplicação da Análise Bayesiana

5.1 Modelo de Gompertz

Como tivemos dificuldade em reconhecer o núcleo *das posterioris* condicionais de cada parâmetro buscamos uma função envelope que pudesse ser utilizada na geração das amostras dos parâmetros.

Na determinação da função envelope para α utilizamos uma sequência de valores de α e contruímos graficamente sua densidade a partir *da posteriori* condicional, mantendo fixos os valores dos outros parâmetros. Em seguida encontramos uma função, no caso uma Gama, que envolvesse o máximo possível a densidade condicional plotada. O processo foi repetido para os outros parâmetros.

Disponibilizadas as funções envelope, iniciamos o processo Metropolis-Hastings. Foram geradas 2 cadeias de 20.000 valores para cada um dos parâmetros α , β , γ e λ . Em cada cadeia descartamos os primeiros 3.000 valores com o objetivo de estabilizá-la. Dos 17.000 valores restantes tomando 1 de cada 10, uma amostra de 1.700 valores foi utilizada para caracterizar a distribuição *a posteriori* de cada parâmetro.

A análise de convergência das cadeias geradas foi realizada através do procedimento CODA, implementado no software R, utilizando o diagnóstico de Gelman & Rubin verificando-se que as cadeias apresentaram convergência.

As Figuras 9 e 10 mostram algumas determinações das funções envelope para os parâmetros, considerando diferentes valores de λ e diferentes tamanhos amostrais.

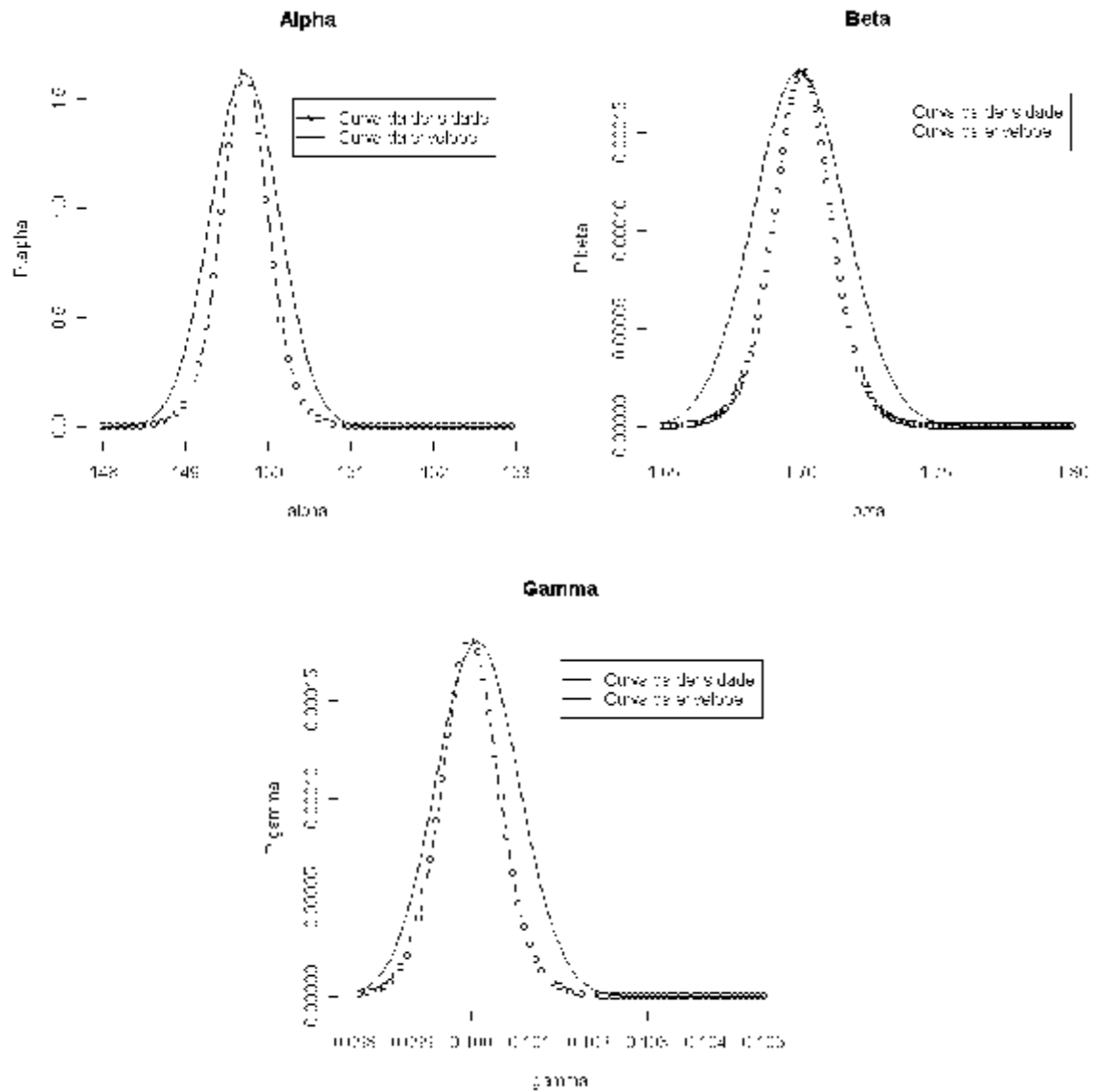


Figura 9 - Determinação de função envelope considerando $n = 10$ e $\lambda = 0$.

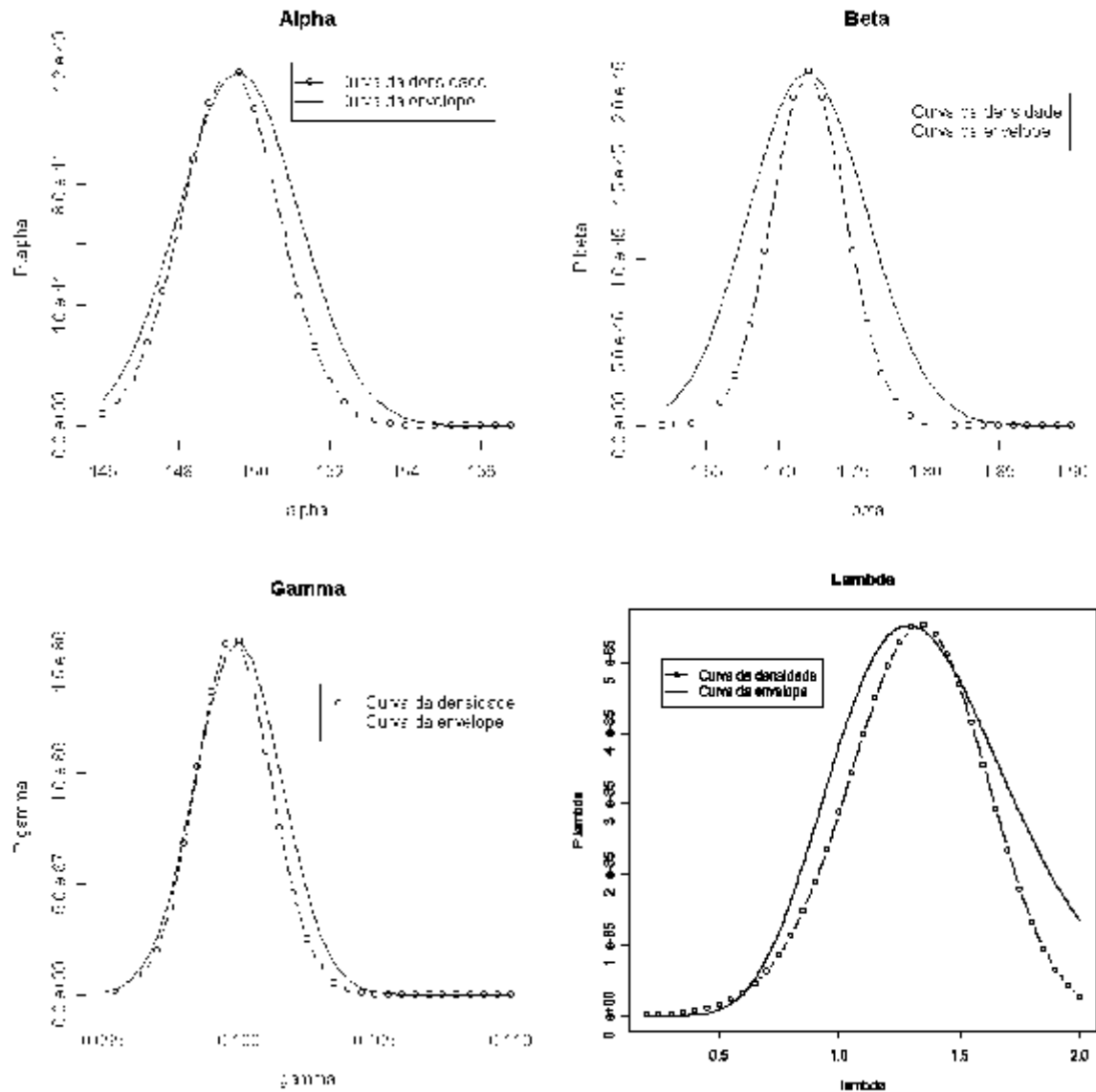


Figura 10 - Determinação de função envelope considerando $n = 50$ e $\lambda = 1$.

As Figuras 11, 12, 13 e 14 mostram os gráficos de Gelman & Rubin e os Traços *a posteriori* de cada parâmetro, considerando amostras com $n = 10$ e $\lambda = 0$ (homoscedástico) e $n = 50$ e $\lambda = 1$ (heteroscedasticidade moderada).

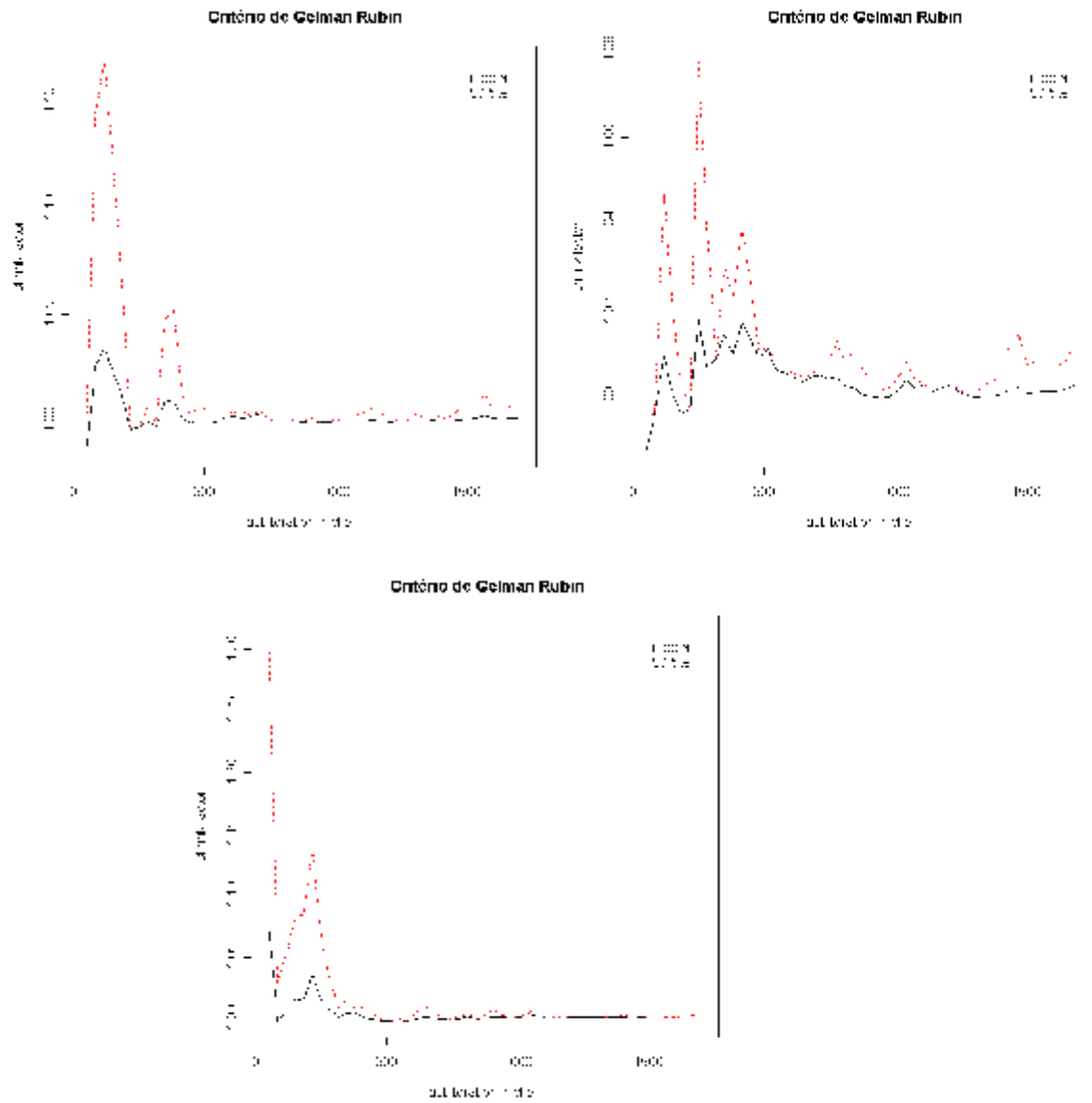


Figura 11-Gráficos de Gelman & Rubin para uma amostra $n = 10$ e $\lambda = 0$, para os parâmetros α , β e γ , respectivamente.

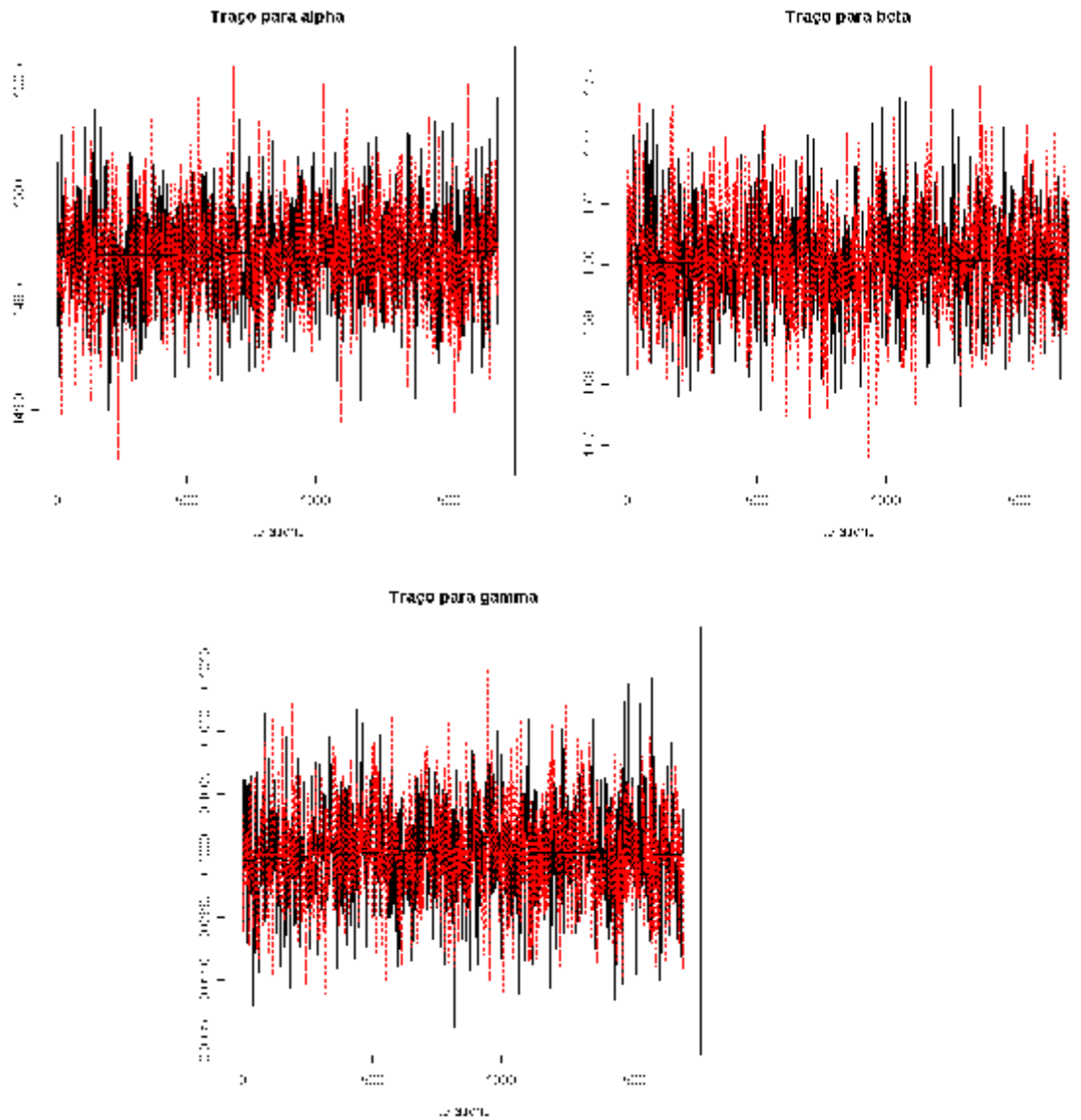


Figura 12-Gráficos dos Traços *a posteriori* para uma amostra $n = 10$ e $\lambda = 0$, para os parâmetros α , β e γ , respectivamente.

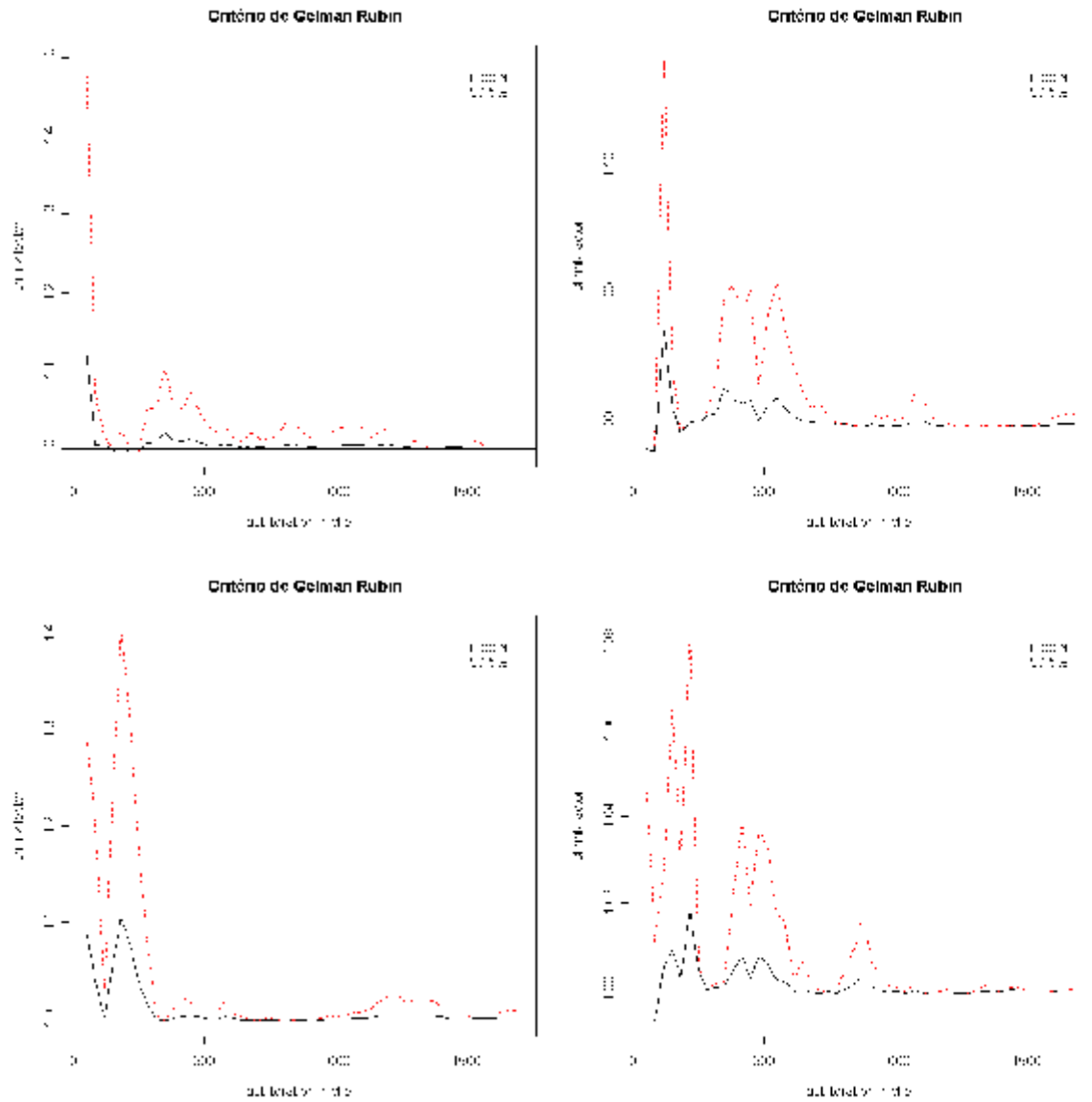


Figura 13-Gráficos de Gelman & Rubin para uma amostra $n = 50$ e $\lambda = 1$, para os parâmetros α , β , γ e λ , respectivamente.

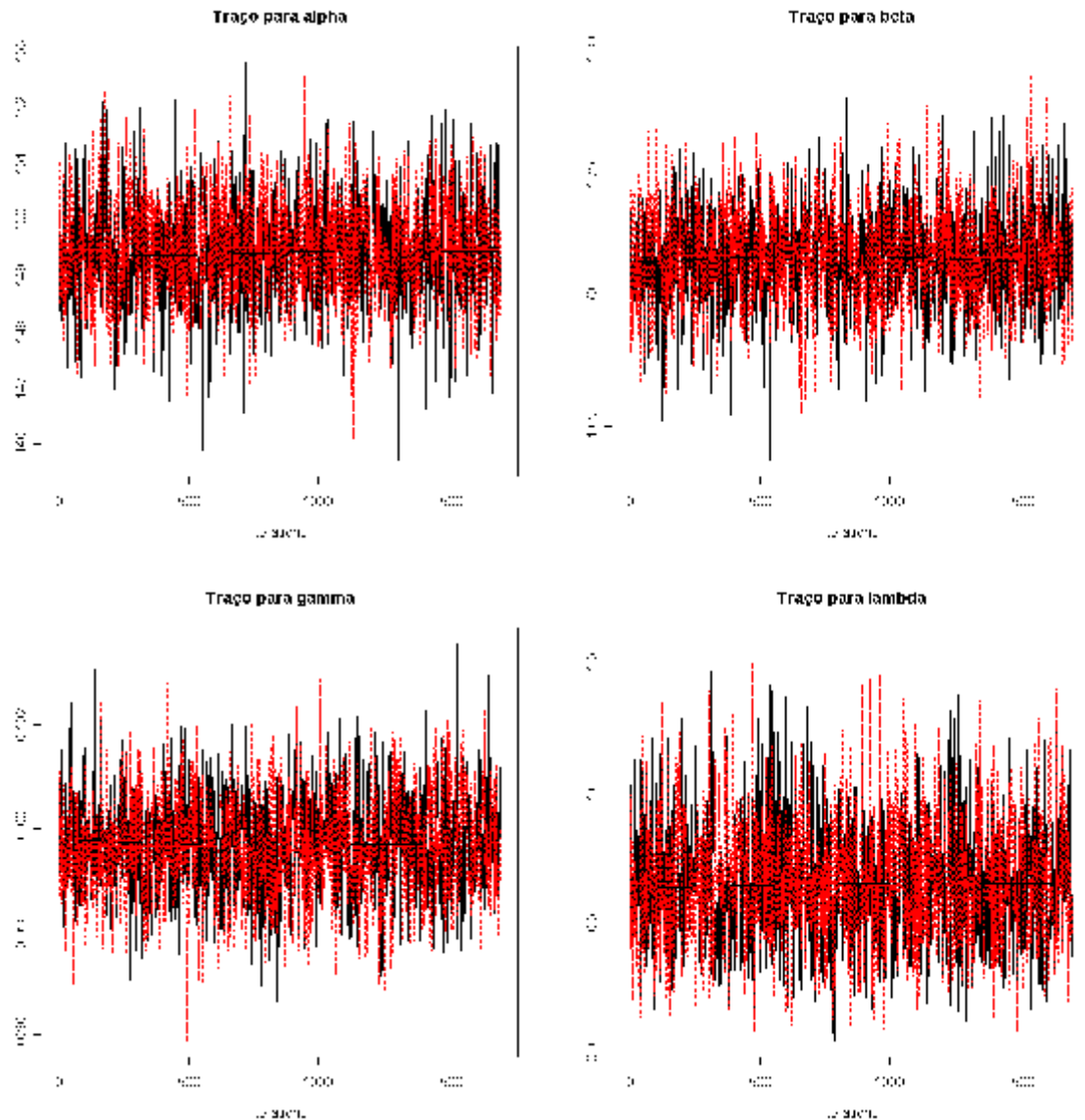


Figura 14-Gráficos dos Traços *a posteriori* para uma amostra $n = 50$ e $\lambda = 1$, para os parâmetros α , β , γ e λ , respectivamente.

Observamos que há uma uniformidade nos traços *a posteriori* e que o critério de convergência de G & R foi satisfeito.

Para implementar a metodologia Bayesiana foi utilizada a função MCMC (Markov Chain Monte Carlo) no pacote CODA do software R-Gui 2.0.0.

Foram obtidas as médias *a posteriori*, os erros padrão e os intervalos de credibilidade para cada parâmetro em questão.

As Tabelas 7, 8 e 9 mostram os resumos Bayesianos para o Modelo de Gompertz.

Tabela 7 - Resumo da Análise Bayesiana para o Modelo de Gompertz $n = 10$ com valores reais $\alpha = 150$; $\beta = 1,7$; $\gamma = 0,1$

$\lambda = 0$	Parâmetros	Média	Erro Padrão	IC(95%)
	α	149,700	0,023	[149,200; 150,200]
	β	1,701	0,009	[1,682; 1,719]
	γ	0,101	0,00004	[0,099; 0,102]
$\lambda = 0,5$	Parâmetros	Média	Erro Padrão	IC(95%)
	α	149,532	0,778	[148,000; 151,100]
	β	1,719	0,019	[1,680; 1,757]
	γ	0,099	0,001	[0,098; 0,102]
	λ	0,354	0,145	[0,119; 0,678]
$\lambda = 1$	Parâmetros	Média	Erro Padrão	IC(95%)
	α	148,684	1,823	[145,000; 152,200]
	β	1,747	0,026	[1,697; 1,800]
	γ	0,098	0,001	[0,096; 0,102]
	λ	0,864	0,169	[0,553; 1,231]
$\lambda = 2$	Parâmetros	Média	Erro Padrão	IC(95%)
	α	145,315	2,025	[123,900; 167,100]
	β	1,863	0,099	[1,666; 2,061]
	γ	0,094	0,007	[0,081; 0,108]
	λ	1,734	0,231	[1,283; 2,199]

Tabela 8 - Resumo da Análise Bayesiana para o Modelo de Gompertz $n = 50$ com valores reais $\alpha = 150$; $\beta = 1,7$; $\gamma = 0,1$

$\lambda = 0$	Parâmetros	Média	Erro Padrão	IC(95%)
	α	149,900	0,172	[149,500; 150,200]
	β	1,706	0,006	[1,693; 1,718]
	γ	0,091	0,0002	[0,090; 0,100]
$\lambda = 0,5$	Parâmetros	Média	Erro Padrão	IC(95%)
	α	149,745	0,462	[148,800; 150,600]
	β	1,709	0,012	[1,684; 1,734]
	γ	0,101	0,0006	[0,098; 0,102]
	λ	0,438	0,159	[0,175; 0,785]
$\lambda = 1$	Parâmetros	Média	Erro Padrão	IC(95%)
	α	149,468	0,988	[147,600; 151,400]
	β	1,717	0,021	[1,675; 1,760]
	γ	0,090	0,001	[0,087; 0,101]
	λ	0,758	0,254	[0,300; 1,293]
$\lambda = 2$	Parâmetros	EMV	Erro Padrão	IC(95%)
	α	147,905	1,360	[135,500; 160,500]
	β	1,770	0,072	[1,633; 1,913]
	γ	0,097	0,005	[0,087; 0,107]
	λ	1,973	0,097	[1,785; 2,169]

Tabela 9 - Resumo da Análise Bayesiana para o Modelo de Gompertz $n = 100$ com valores reais $\alpha = 150$; $\beta = 1, 7$; $\gamma = 0, 1$

$\lambda = 0$	Parâmetros	Média	Erro Padrão	IC(95%)
	α	149,900	0,093	[149,700; 150,100]
	β	1,738	0,061	[1,654; 1,891]
	γ	0,091	0,0002	[0,089; 0,100]
$\lambda = 0, 5$	Parâmetros	Média	Erro Padrão	IC(95%)
	α	149,700	0,302	[149,100; 150,200]
	β	1,702	0,009	[1,685; 1,719]
	γ	0,090	0,004	[0,089; 0,101]
	λ	0,601	0,192	[0,2382; 0,980]
$\lambda = 1$	Parâmetros	Média	Erro Padrão	IC(95%)
	α	149,209	0,556	[148,100; 150,300]
	β	1,705	0,016	[1,671; 1,738]
	γ	0,099	0,001	[0,098; 0,101]
	λ	1,170	0,154	[0,872; 1,475]
$\lambda = 2$	Parâmetros	EMV	Erro Padrão	IC(95%)
	α	146,526	1,156	[138,300; 154,700]
	β	1,701	0,049	[1,609; 1,797]
	γ	0,101	0,003	[0,099; 0,102]
	λ	1,898	0,143	[1,233; 2,102]

Verificamos que as médias *a posteriori* estão bem próximas dos valores verdadeiros dos parâmetros, exceto o valor da estimativa de α que parece ser afetado pela presença de alta heteroscedasticidade. Os intervalos de credibilidade de α também parecem ser afetados pela presença de alta heteroscedasticidade, no sentido em que os mesmos vão aumentando com λ .

5.2 Modelo de Richards

Similarmente ao procedimento desenvolvido no modelo de Gompertz, no modelo de Richards também tivemos que ir em busca de funções envelope devido a dificuldade em reconhecer o núcleo *das posterioris* condicionais de cada parâmetro

Disponibilizadas as funções envelope, iniciamos o processo Metropolis-Hastings. Foram geradas 2 cadeias de 20.000 valores para cada um dos parâmetros α , β , γ , δ e λ . Em cada cadeia também descartamos os primeiros 3.000 valores com o objetivo de estabilizá-la e dos valores restantes tomamos uma amostra de 1.700 valores, selecionada considerando passos de 10 em 10. A amostra foi utilizada para caracterizar a distribuição *a posteriori* de cada parâmetro.

A análise de convergência das cadeias geradas também foi realizada através do procedimento CODA através do diagnóstico de Gelman & Rubin.

As Figuras 15 e 16 mostram algumas determinações das funções envelope para os

parâmetros, considerando diferentes valores de λ e diferentes tamanhos amostrais.

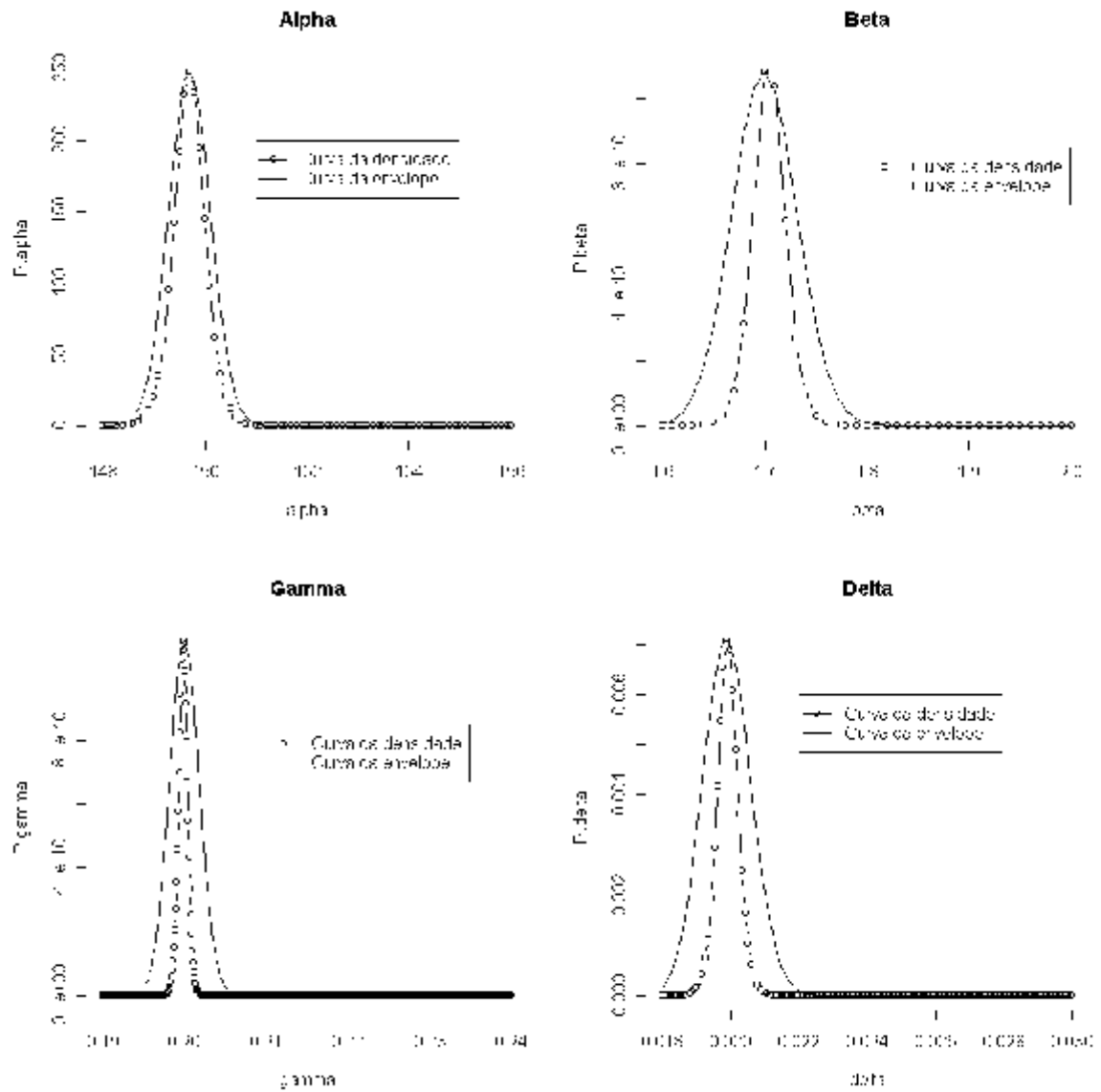


Figura 15 - Determinação de função envelope considerando $n = 10$ e $\lambda = 0$.

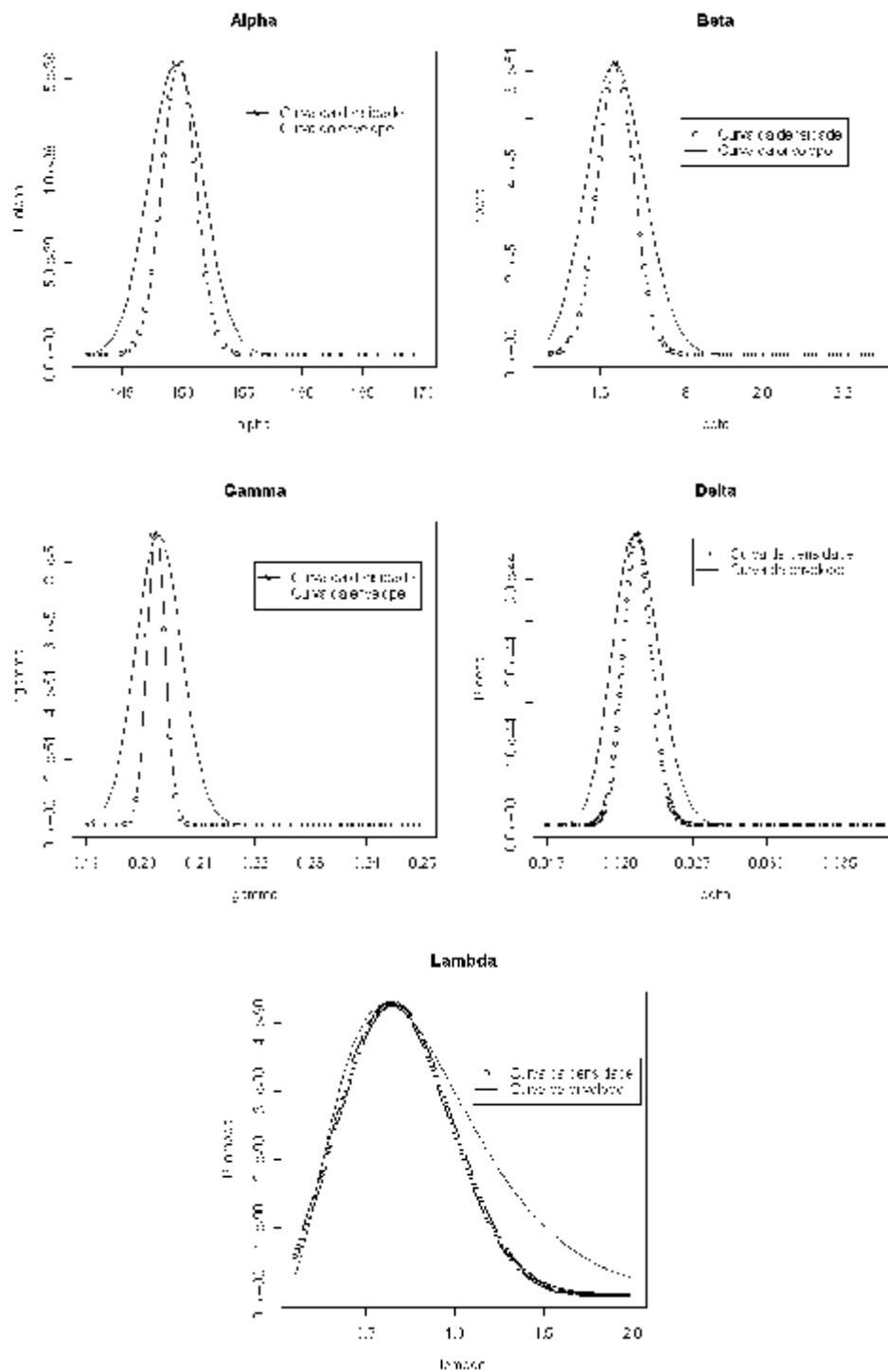


Figura 16 - Determinação de função envelope considerando $n = 50$ e $\lambda = 1$.

As Figuras 17, 18, 19 e 20 mostram os gráficos de Gelman & Rubin e os Traços *a posteriori* de cada parâmetro, considerando amostras com $n = 10$ e $\lambda = 0$ (homoscedástico) e $n = 50$ e $\lambda = 1$ (heteroscedasticidade moderada).

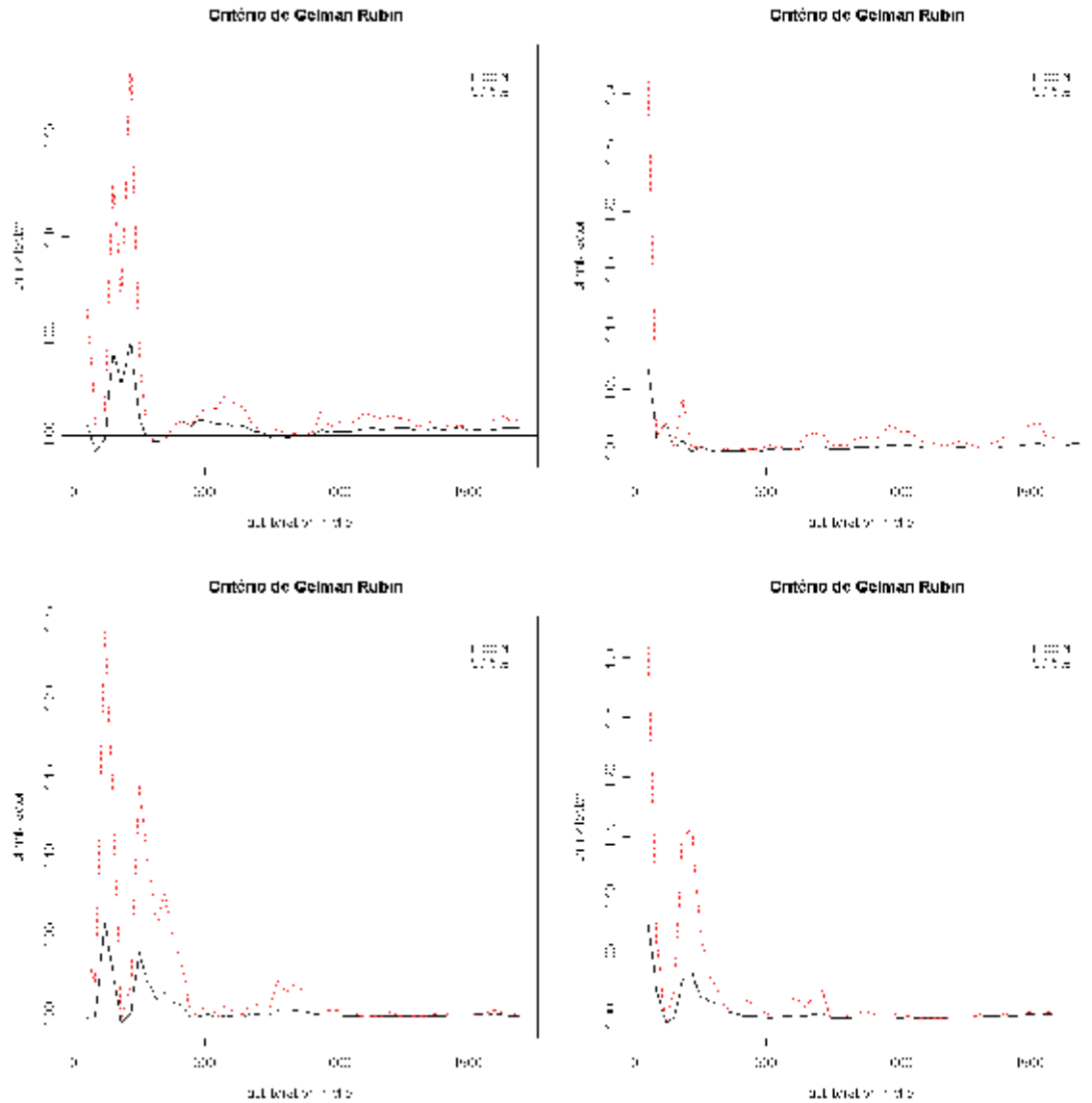


Figura 17-Gráficos de Gelman & Rubin para uma amostra $n = 10$ e $\lambda = 0$, para os parâmetros α , β , γ e δ , respectivamente.

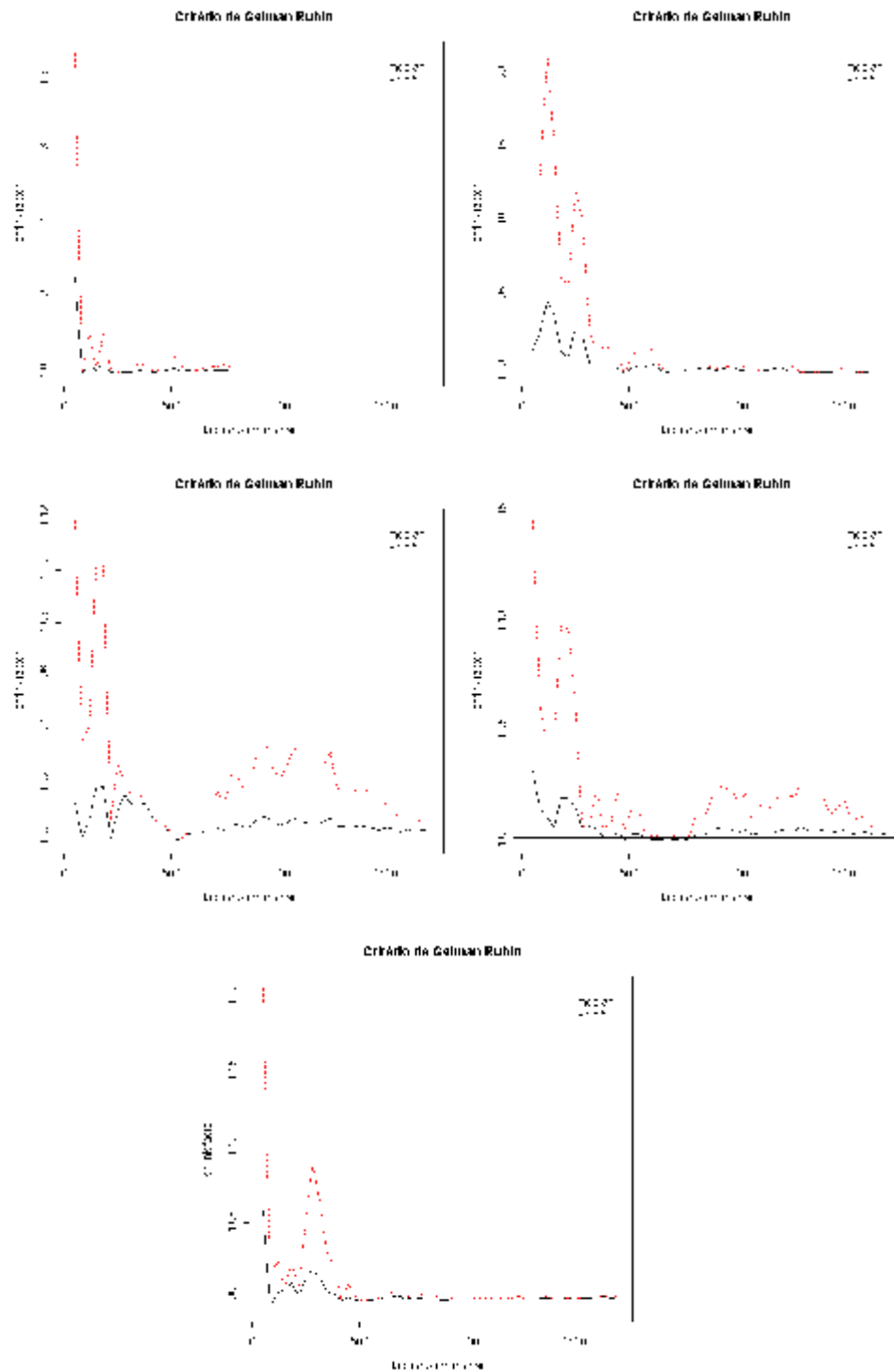


Figura 18-Gráficos de Gelman & Rubin para uma amostra $n = 50$ e $\lambda = 1$, para os parâmetros α , β , γ , δ e λ , respectivamente.

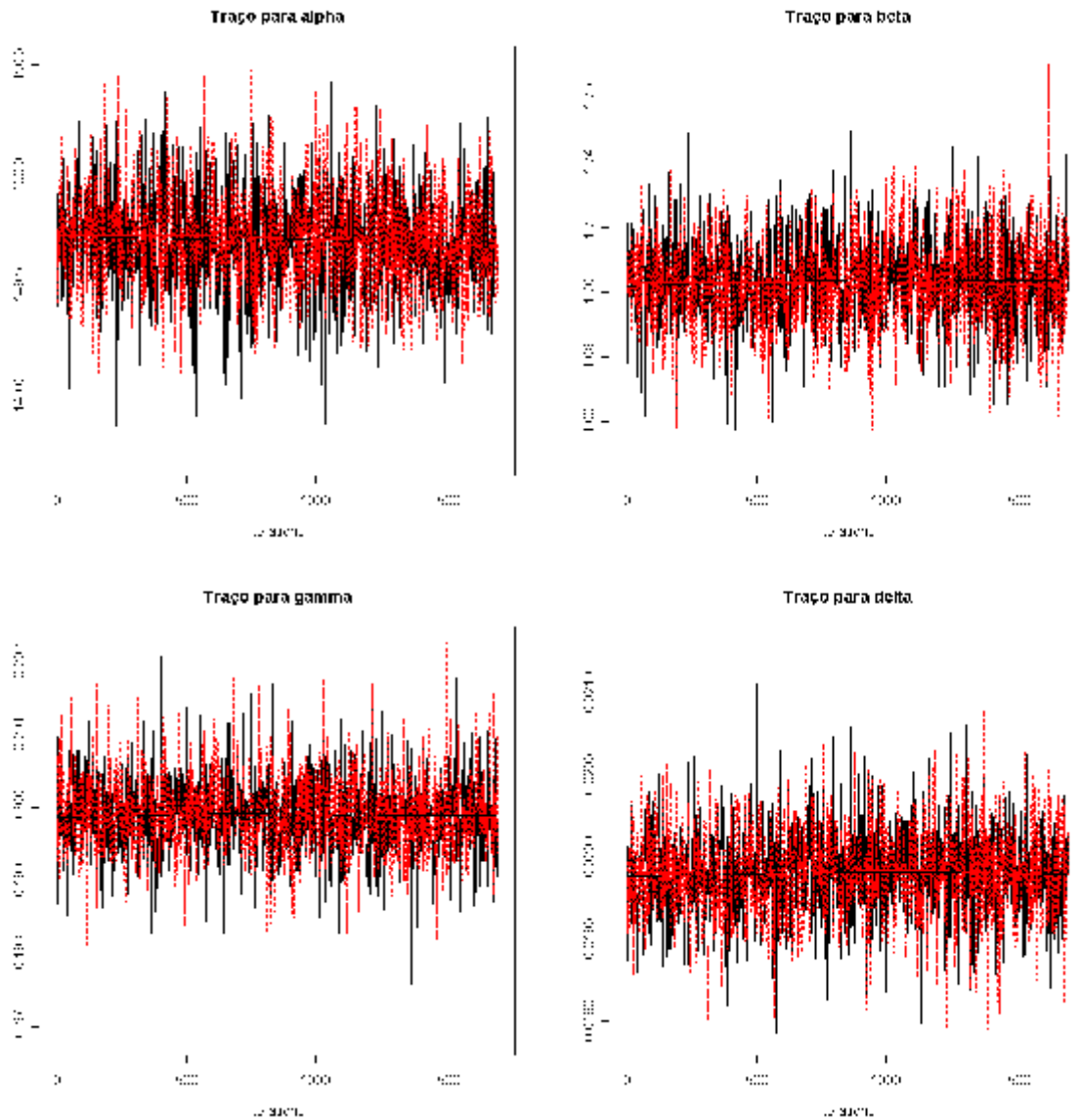


Figura 19 -Gráficos dos Traços *a posteriori* para uma amostra $n = 10$ e $\lambda = 0$, para os parâmetros α , β , γ e δ , respectivamente.

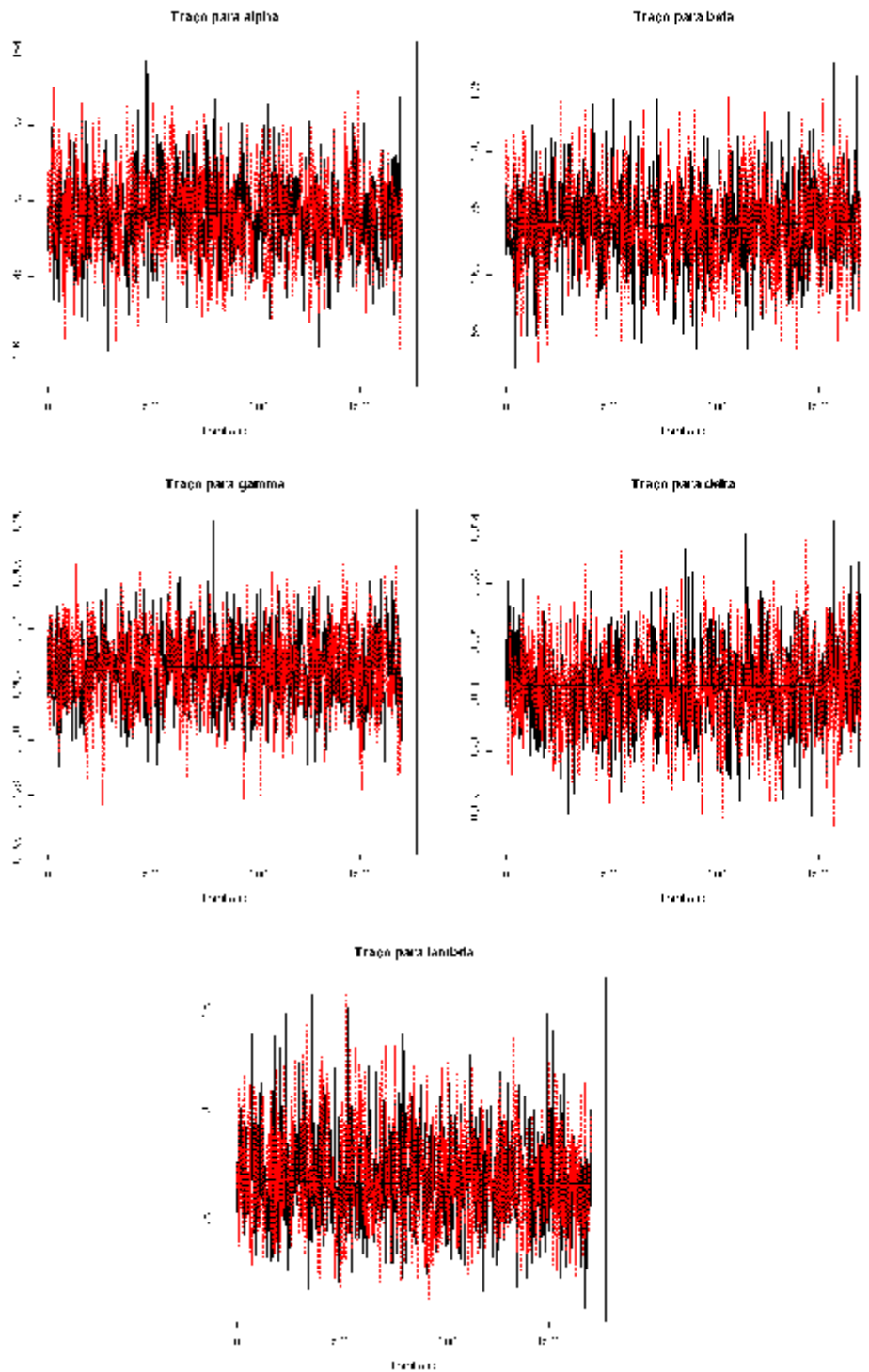


Figura 20-Gráficos dos Traços *a posteriori* para uma amostra $n = 50$ e $\lambda = 1$, para os parâmetros α , β , γ , δ e λ , respectivamente.

Novamente observamos que há uma uniformidade nos traços *a posteriori* e que o critério de convergência de G & R foi satisfeito.

Similar ao modelo de Gompertz, a implementação da metodologia Bayesiana foi através da função MCMC (Markov Chain Monte Carlo) no pacote CODA do software R-Gui 2.0.0. Foram obtidas as médias *a posteriori*, os erros padrão e os intervalos de credibilidade para cada parâmetro em questão.

As Tabelas 10, 11 e 12 mostram os resumos Bayesianos para o Modelo de Richards.

Tabela 10 - Resumo da Análise Bayesiana para o Modelo de Richards $n = 10$
com valores reais $\alpha = 150$; $\beta = 1,7$; $\gamma = 0,2$; $\delta = 0,02$.

$\lambda = 0$	Parâmetros	Média	Erro Padrão	IC(95%)
	α	149,700	0,246	[149,200; 150,200]
	β	1,703	0,014	[1,675; 1,731]
	γ	0,199	0,001	[0,198; 0,201]
	δ	0,019	0,0002	[0,018; 0,020]
$\lambda = 0,5$	Parâmetros	Média	Erro Padrão	IC(95%)
	α	150,059	0,184	[146,400; 153,700]
	β	1,697	0,033	[1,633; 1,760]
	γ	0,203	0,002	[0,197; 0,204]
	δ	0,021	0,001	[0,018; 0,022]
	λ	0,525	0,138	[0,056; 0,591]
$\lambda = 1$	Parâmetros	Média	Erro Padrão	IC(95%)
	α	149,360	1,669	[146,100; 152,700]
	β	1,644	0,038	[1,569; 1,719]
	γ	0,202	0,003	[0,196; 0,208]
	δ	0,021	0,002	[0,018; 0,024]
	λ	0,737	0,133	[0,499; 1,013]
$\lambda = 2$	Parâmetros	Média	Erro Padrão	IC(95%)
	α	146,295	2,723	[129,400; 164,200]
	β	1,631	0,125	[1,396; 1,878]
	γ	0,216	0,010	[0,195; 0,238]
	δ	0,026	0,006	[0,014; 0,040]
	λ	1,607	0,205	[1,218; 2,018]

Tabela 12 - Resumo da Análise Bayesiana para o Modelo de Richards $n = 50$ com valores reais $\alpha = 150$; $\beta = 1,7$; $\gamma = 0,2$; $\delta = 0,02$.

$\lambda = 0$	Parâmetros	Média	Erro Padrão	IC(95%)
	α	149,900	0,181	[149,500; 150,300]
	β	1,708	0,008	[1,691; 1,726]
	γ	0,199	0,0002	[0,198; 0,200]
	δ	0,019	0,0001	[0,019; 0,020]
$\lambda = 0,5$	Parâmetros	Média	Erro Padrão	IC(95%)
	α	148,939	1,813	[145,400; 152,500]
	β	1,673	0,018	[1,637; 1,709]
	γ	0,201	0,001	[0,199; 0,202]
	δ	0,021	0,0003	[0,019; 0,021]
	λ	0,409	0,175	[0,128; 0,795]
$\lambda = 1$	Parâmetros	Média	Erro Padrão	IC(95%)
	α	149,673	1,199	[147,300; 152,100]
	β	1,641	0,038	[1,567; 1,715]
	γ	0,202	0,001	[0,199; 0,205]
	δ	0,021	0,001	[0,019; 0,023]
	λ	0,699	0,242	[0,281; 1,212]
$\lambda = 2$	Parâmetros	Média	Erro Padrão	IC(95%)
	α	154,206	2,172	[140,600; 168,500]
	β	1,456	0,152	[1,168; 1,765]
	γ	0,210	0,007	[0,196; 0,224]
	δ	0,024	0,003	[0,018; 0,031]
	λ	1,779	0,202	[1,398; 2,179]

Tabela 13 - Resumo da Análise Bayesiana para o Modelo de Richards $n = 100$
 com valores reais $\alpha = 150$; $\beta = 1,7$; $\gamma = 0,2$; $\delta = 0,02$.

$\lambda = 0$	Parâmetros	Média	Erro Padrão	IC(95%)
	α	150,001	0,124	[149,700; 150,200]
	β	1,704	0,006	[1,694; 1,717]
	γ	0,199	0,0002	[0,199; 0,200]
	δ	0,019	0,0001	[0,019; 0,020]
$\lambda = 0,5$	Parâmetros	Média	Erro Padrão	IC(95%)
	α	147,624	1,771	[143,800; 151,100]
	β	1,697	0,013	[1,670; 1,724]
	γ	0,200	0,001	[0,199; 0,201]
	δ	0,025	0,0002	[0,019; 0,026]
	λ	0,582	0,118	[0,365; 0,830]
$\lambda = 1$	Parâmetros	Média	Erro Padrão	IC(95%)
	α	148,962	0,894	[147,200; 150,700]
	β	1,693	0,031	[1,632; 1,754]
	γ	0,201	0,001	[0,198; 0,202]
	δ	0,023	0,001	[0,019; 0,025]
	λ	1,129	0,166	[0,809; 1,452]
$\lambda = 2$	Parâmetros	Média	Erro Padrão	IC(95%)
	α	144,705	2,767	[133,5; 156,100]
	β	1,620	0,140	[1,348; 1,892]
	γ	0,202	0,006	[0,189; 0,213]
	δ	0,027	0,002	[0,015; 0,028]
	λ	1,772	0,084	[1,567; 1,869]

Os resultados encontrados foram similares aos encontrados no modelo de Gompertz. Verificamos que as médias *a posteriori* estão bem próximas dos valores verdadeiros dos parâmetros, exceto o valor da estimativa de α que parece ser afetado pela presença de alta heteroscedasticidade.

Capítulo 6

Comparação da Análise Clássica com a Análise Bayesiana

Para a comparação das metodologias clássica e Bayesiana na modelagem dos dados, foram geradas 200 amostras. Foram obtidas as médias, os erros quadráticos médios e as probabilidades de cobertura de cada parâmetro dos modelos, considerando os graus de heteroscedasticidade $\lambda = 0; 0,5; 1$ e 2 e tamanhos amostrais dos dados gerados $n = 10, 50$ e 100 para verificar se diferentes tamanhos amostrais e diferentes graus de heteroscedasticidade influenciavam na estimação dos parâmetros.

6.1 Comparação através do Modelo de Gompertz

Na Tabela 14, temos as médias obtidas em cada caso. Podemos verificar que, em geral, as médias clássicas e Bayesianas estão muito próximas, com exceção das médias de α considerando heteroscedasticidade média ($\lambda = 1$) no caso Bayesiano e forte ($\lambda = 2$) nos casos Clássico e Bayesiano, onde as médias sofreram leve alterações.

Na Tabela 15 verificamos que os erros quadráticos médios no método clássico são maiores que no método Bayesiano, principalmente com a presença de heteroscedasticidade média ($\lambda = 1$) e forte ($\lambda = 2$). O tamanho da amostra parece não influenciar na obtenção dos erros quadráticos médios..

As Taxas de Cobertura, apresentadas na Tabela 16, apresentam desvantagens no método clássico em relação ao método bayesiano, pois em todos os casos as taxas de

cobertura clássicas são menores que as taxas Bayesianas. Percebemos, também, a influência do tamanho amostral, pois para amostras pequenas ($n = 10$) temos taxas de cobertura abaixo de 85% (no caso do parâmetro γ , com $\lambda = 0,5$ e $n = 10$, a taxa de cobertura é da ordem de 65%). A presença de heteroscedasticidade parece não influenciar nas taxas de cobertura.

Tabela 14 - Médias obtidas através de 200 amostras.

(Valores Reais: $\alpha = 150$; $\beta = 1,7$; $\gamma = 0,1$)

Médias Clássicas $\lambda = 0$				Médias Bayesianas $\lambda = 0$			
Parâmetros	$n = 10$	$n = 50$	$n = 100$	Parâmetros	$n = 10$	$n = 50$	$n = 100$
α	149,920	150,010	150,035	α	150,183	149,254	152,459
β	1,699	1,699	1,634	β	1,673	1,686	1,713
γ	0,099	0,099	0,100	γ	0,101	0,100	0,099
Médias Clássicas $\lambda = 0,5$				Médias Bayesianas $\lambda = 0,5$			
Parâmetros	$n = 10$	$n = 50$	$n = 100$	Parâmetros	$n = 10$	$n = 50$	$n = 100$
α	150,135	150,090	150,090	α	150,582	150,676	149,226
β	1,704	1,697	1,697	β	1,974	1,961	1,708
γ	0,101	0,101	0,081	γ	0,099	0,107	0,101
λ	0,511	0,513	0,512	λ	0,424	0,431	0,474
Médias Clássicas $\lambda = 1$				Médias Bayesianas $\lambda = 1$			
Parâmetros	$n = 10$	$n = 50$	$n = 100$	Parâmetros	$n = 10$	$n = 50$	$n = 100$
α	150,435	150,220	150,250	α	152,459	152,458	151,479
β	1,706	1,694	1,695	β	1,713	1,712	1,703
γ	0,101	0,098	0,095	γ	0,099	0,098	0,101
λ	1,074	1,015	1,013	λ	0,987	0,998	0,997
Médias Clássicas $\lambda = 2$				Médias Bayesianas $\lambda = 2$			
Parâmetros	$n=10$	$n=50$	$n=100$	Parâmetros	$n=10$	$n=50$	$n=100$
α	152,845	151,645	151,644	α	150,302	149,513	143,044
β	1,740	1,688	1,686	β	1,777	1,798	1,683
γ	0,106	0,098	0,097	γ	0,097	0,096	0,101
λ	2,021	2,037	2,038	λ	1,756	1,875	1,989

Tabela 15 - Erros quadráticos médios obtidos com 200 amostras..

(Valores Reais $\alpha = 150$; $\beta = 1,7$; $\gamma = 0,1$)

Erros Clássicos $\lambda = 0$				Erros Bayesianos $\lambda = 0$			
Parâmetros	n=10	n=50	n=100	Parâmetros	n=10	n=50	n=100
α	0,317	0,049	0,019	α	0,110	0,026	0,0694
β	0,002	0,0002	0,0001	β	0,0001	0,0003	0,0003
γ	0,00004	0,0001	0,00003	γ	0,00001	0,00001	0,00001

Erros Clássicos $\lambda = 0,5$				Erros Bayesianos $\lambda = 0,5$			
Parâmetros	n = 10	n = 50	n = 100	Parâmetros	n = 10	n = 50	n = 100
α	0,262	0,163	0,162	α	0,571	0,136	0,046
β	0,008	0,0005	0,0004	β	0,0004	0,0002	0,0003
γ	0,00003	0,00001	0,00002	γ	0,00004	0,00001	0,00001
λ	0,309	0,044	0,045	λ	0,005	0,010	0,012

Erros Clássicos $\lambda = 1$				Erros Bayesianos $\lambda = 1$			
Parâmetros	n = 10	n = 50	n = 100	Parâmetros	n = 10	n = 50	n = 100
α	1,479	1,310	1,321	α	0,394	0,695	0,294
β	0,036	0,002	0,002	β	0,0003	0,0002	0,0003
γ	0,00001	0,00007	0,00006	γ	0,00001	0,00003	0,00001
λ	0,851	0,046	0,047	λ	0,001	0,001	0,001

Erros Clássicos $\lambda = 2$				Erros Bayesianos $\lambda = 2$			
Parâmetros	n = 10	n = 50	n = 100	Parâmetros	n = 10	n = 50	n = 100
α	1,773	1,152	1,242	α	0,187	0,8454	0,131
β	0,047	0,023	0,022	β	0,001	0,001	0,001
γ	0,207	0,0002	0,0001	γ	0,0001	0,0001	0,0002
λ	0,516	0,048	0,048	λ	0,026	0,003	0,022

Tabela 16 - Taxas de cobertura obtidas com 200 amostras.

(Valores Reais: $\alpha = 150$; $\beta = 1,7$; $\gamma = 0,1$)

Coberturas Clássicas $\lambda = 0$				Coberturas Bayesianas $\lambda = 0$			
Parâmetros	$n = 10$	$n = 50$	$n = 100$	Parâmetros	$n = 10$	$n = 50$	$n = 100$
α	84,00%	92,50%	97,50%	α	94,50%	96,50%	97,00%
β	70,50%	80,00%	88,00%	β	71,50%	89,50%	97,50%
γ	74,00%	90,50%	95,00%	γ	95,50%	95,00%	94,00%

Coberturas Clássicas $\lambda = 0,5$				Coberturas Bayesianas $\lambda = 0,5$			
Parâmetros	$n = 10$	$n = 50$	$n = 100$	Parâmetros	$n = 10$	$n = 50$	$n = 100$
α	78,50%	96,00%	96,00%	α	93,50%	95,50%	82,00%
β	76,50%	80,50%	87,50%	β	94,50%	94,50%	81,00%
γ	65,50%	95,00%	95,00%	γ	97,50%	95,00%	96,50%
λ	83,500%	94,00%	94,00%	λ	91,50%	90,00%	91,50%

Coberturas Clássicas $\lambda = 1$				Coberturas Bayesianas $\lambda = 1$			
Parâmetros	$n = 10$	$n = 50$	$n = 100$	Parâmetros	$n = 10$	$n = 50$	$n = 100$
α	79,50%	96,00%	95,50%	α	97,00%	98,00%	97,50%
β	79,50%	78,50%	86,50%	β	97,50%	97,00%	98,50%
γ	76,00%	96,00%	96,50%	γ	94,00%	94,00%	94,00%
λ	82,00%	93,50%	94,00%	λ	93,50%	94,50%	97,00%

Coberturas Clássicas $\lambda = 2$				Coberturas Bayesianas $\lambda = 2$			
Parâmetros	$n = 10$	$n = 50$	$n = 100$	Parâmetros	$n = 10$	$n = 50$	$n = 100$
α	80,50%	93,50%	93,50%	α	96,00%	94,50%	91,00%
β	70,50%	78,00%	86,00%	β	94,50%	97,50%	94,00%
γ	72,50%	96,50%	96,50%	γ	93,50%	94,40%	96,00%
λ	82,50%	89,00%	89,50%	λ	87,50%	95,00%	98,50%

6.2 Comparação através do Modelo de Richards

Na Tabela 17 podemos verificar que as médias clássicas e Bayesianas para o parâmetro α estão afastadas do valor real quando consideramos heteroscedasticidade média ($\lambda = 1$) e forte ($\lambda = 2$). O parâmetro β é subestimado no método clássico, principalmente para baixa e média heteroscedasticidade. Já os outros parâmetros parecem não sofrerem influência do tamanho amostral nem da presença de heteroscedasticidade.

Na Tabela 18, temos os erros quadráticos médios. O método Bayesiano apresentou menores erros quadráticos em comparação com o método clássico. Um alto grau de heteroscedasticidade afeta os erros quadráticos médios no caso clássico e, de uma maneira geral, os erros quadráticos médios decrescem com o aumento da amostra.

As Taxas de Cobertura, apresentadas na Tabela 19, apresentam desvantagens no método clássico em relação ao método bayesiano, pois em todos os casos, as taxas de cobertura clássicas são menores que as taxas Bayesianas.

Tabela 17 - Médias obtidas através de 200 amostras.

(Valores Reais $\alpha=150$; $\beta=1,7$; $\gamma=0,2$; $\delta = 0,02$)

Médias Clássicas $\lambda = 0$				Médias Bayesianas $\lambda = 0$			
Parâmetros	$n = 10$	$n = 50$	$n = 100$	Parâmetros	$n = 10$	$n = 50$	$n = 100$
α	149,885	149,950	150,005	α	153,329	149,666	141,337
β	1,319	1,777	1,227	β	1,697	1,599	1,763
γ	0,209	0,204	0,199	γ	0,204	0,242	0,156
δ	0,019	0,016	0,012	δ	0,013	0,027	0,014

Médias Clássicas $\lambda = 0,5$				Médias Bayesianas $\lambda = 0,5$			
Parâmetros	$n = 10$	$n = 50$	$n = 100$	Parâmetros	$n = 10$	$n = 50$	$n = 100$
α	149,795	149,880	149,866	α	150,119	149,074	150,582
β	1,321	1,398	1,145	β	1,393	1,715	1,974
γ	0,171	0,208	0,207	γ	0,246	0,195	0,199
δ	0,022	0,019	0,016	δ	0,022	0,019	0,018
λ	0,512	0,598	0,551	λ	0,471	0,438	0,424

Médias Clássicas $\lambda = 1$				Médias Bayesianas $\lambda = 1$			
Parâmetros	$n = 10$	$n = 50$	$n = 100$	Parâmetros	$n = 10$	$n = 50$	$n = 100$
α	149,775	149,910	149,760	α	153,329	142,005	160,394
β	1,295	1,242	1,149	β	1,697	1,232	1,332
γ	0,211	0,222	0,209	γ	0,204	0,244	0,279
δ	0,019	0,028	0,023	δ	0,013	0,023	0,019
λ	0,913	1,068	0,984	λ	1,224	1,311	1,545

Médias Clássicas $\lambda = 2$				Médias Bayesianas $\lambda = 2$			
Parâmetros	$n = 10$	$n = 50$	$n = 100$	Parâmetros	$n = 10$	$n = 50$	$n = 100$
α	156,060	152,250	147,280	α	159,503	150,582	149,231
β	1,487	1,599	1,534	β	2,271	1,974	1,788
γ	0,241	0,233	0,271	γ	0,195	0,204	0,283
δ	0,019	0,014	0,025	δ	0,012	0,013	0,023
λ	2,282	2,068	2,048	λ	1,761	1,897	1,954

Tabela 18 - Erros quadráticos médios obtidos com 200 amostras.

(Valores Reais $\alpha=150$; $\beta=1,7$; $\gamma=0,2$; $\delta = 0,02$)

Erros Clássicos $\lambda = 0$				Erros Bayesianos $\lambda = 0$			
Parâmetros	$n = 10$	$n = 50$	$n = 100$	Parâmetros	$n = 10$	$n = 50$	$n = 100$
α	0,380	0,037	0,015	α	0,003	0,001	0,049
β	1,833	0,241	0,305	β	0,0003	0,0005	0,0003
γ	0,022	0,0003	0,0002	γ	0,00001	0,00002	0,00003
δ	0,001	0,003	0,004	δ	0,0005	0,0002	0,0001

Erros Clássicos $\lambda = 0,5$				Erros Bayesianos $\lambda = 0,5$			
Parâmetros	$n = 10$	$n = 50$	$n = 100$	Parâmetros	$n = 10$	$n = 50$	$n = 100$
α	1,705	0,291	0,154	α	0,001	0,0004	0,072
β	1,442	1,112	0,590	β	0,001	0,001	0,001
γ	0,061	0,015	0,008	γ	0,0001	0,0002	0,0004
δ	0,001	0,0002	0,0008	δ	0,004	0,003	0,004
λ	1,026	0,099	0,043	λ	0,0001	0,001	0,005

Erros Clássicos $\lambda = 1$				Erros Bayesianos $\lambda = 1$			
Parâmetros	$n = 10$	$n = 50$	$n = 100$	Parâmetros	$n = 10$	$n = 50$	$n = 100$
α	1,561	0,448	0,096	α	0,0003	0,011	0,042
β	1,908	1,615	1,869	β	0,0004	0,0002	0,0004
γ	0,045	0,039	0,029	γ	0,0001	0,0002	0,0001
δ	0,001	0,001	0,0004	δ	0,0003	0,0001	0,0002
λ	0,583	0,102	0,048	λ	0,0008	0,001	0,002

Erros Clássicos $\lambda = 2$				Erros Bayesianos $\lambda = 2$			
Parâmetros	$n = 10$	$n = 50$	$n = 100$	Parâmetros	$n = 10$	$n = 50$	$n = 100$
α	1,609	1,811	1,047	α	0,565	0,727	0,726
β	1,957	1,849	1,660	β	0,001	0,001	0,0019
γ	1,685	1,314	1,401	γ	0,0003	0,0001	0,0001
δ	0,622	0,082	1,587	δ	0,0002	0,0002	0,0002
λ	1,217	0,223	0,036	λ	0,004	0,007	0,0007

Tabela 19- Taxas de cobertura obtidas com 200 amostras.

(Valores Reais $\alpha=150$; $\beta=1,7$; $\gamma=0,2$; $\delta = 0,02$)

Coberturas Clássicas $\lambda = 0$				Coberturas Bayesianas $\lambda = 0$			
Parâmetros	$n = 10$	$n = 50$	$n = 100$	Parâmetros	$n = 10$	$n = 50$	$n = 100$
α	89,00%	92,50%	96,50%	α	95,00%	95,00%	96,00%
β	70,00%	83,50%	98,00%	β	96,500%	93,50%	97,50%
γ	84,40%	94,00%	88,00%	γ	90,50%	95,00%	92,50%
δ	83,50%	91,00%	84,00%	δ	89,00%	95,50%	94,00%
Coberturas Clássicas $\lambda = 0,5$				Coberturas Bayesianas $\lambda = 0,5$			
Parâmetros	$n = 10$	$n = 50$	$n = 100$	Parâmetros	$n = 10$	$n = 50$	$n = 100$
α	86,00%	92,00%	93,50%	α	95,50%	92,50%	93,50%
β	72,50%	73,50%	82,00%	β	93,50%	97,00%	94,50%
γ	90,00%	95,00%	92,50%	γ	93,50%	97,00%	97,50%
δ	88,50%	93,50%	93,50%	δ	96,50%	95,00%	97,00%
λ	69,00%	91,50%	93,0%	λ	93,50%	93,00%	91,50%
Coberturas Clássicas $\lambda = 1$				Coberturas Bayesianas $\lambda = 1$			
Parâmetros	$n = 10$	$n = 50$	$n = 100$	Parâmetros	$n = 10$	$n = 50$	$n = 100$
α	88,00%	87,00%	96,00%	α	95,00%	93,50%	95,00%
β	67,00%	80,50%	66,00%	β	96,50%	95,50%	94,00%
γ	93,00%	95,50%	94,00%	γ	90,50%	95,00%	90,00%
δ	73,00%	96,50%	83,00%	δ	95,50%	68,50%	94,50%
λ	84,50%	84,00%	72,00%	λ	94,50%	92,50%	95,50%

Coberturas Clássicas $\lambda = 2$				Coberturas Bayesianas $\lambda = 2$			
Parâmetros	$n = 10$	$n = 50$	$n = 100$	Parâmetros	$n = 10$	$n = 50$	$n = 100$
α	87,00%	92,50%	95,50%	α	85,00%	95,00%	95,00%
β	91,50%	96,50%	94,50%	β	95,00%	99,50%	100%
γ	88,00%	90,00%	87,50%	γ	96,50%	98,50%	99,00%
δ	92,50%	96,00%	95,50%	δ	97,50%	99,50%	98,50%
λ	92,00%	91,50%	95,00%	λ	97,00%	96,00%	97,50%

Capítulo 7

Uma Aplicação

Neste Capítulo realizamos uma modelagem de dados de natureza sigmoïdal utilizando as metodologias descritas nos Capítulos 2 e 3 para os modelos de Gompertz e de Richards. Os dados são medidas de pesos corporais de 13 frangos de corte fêmeas da linhagem Hubbard, alimentados com uma certa ração comercial. As aves foram identificadas por um anel de alumínio numerado colocado em suas asas direitas. Cada ave foi pesada semanalmente, durante um período de sete semanas, sendo as avaliações feitas sempre nos mesmos horários e dias da semana. Os pesos individuais das aves estão apresentados na Tabela 20, os pesos médios das aves e respectivos desvios padrões estão apresentados na Tabela 21 e os perfis individuais dos pesos estão ilustrados na Figura 21. Os dados são provenientes de uma pesquisa realizada na EMBRAPA - São Carlos.

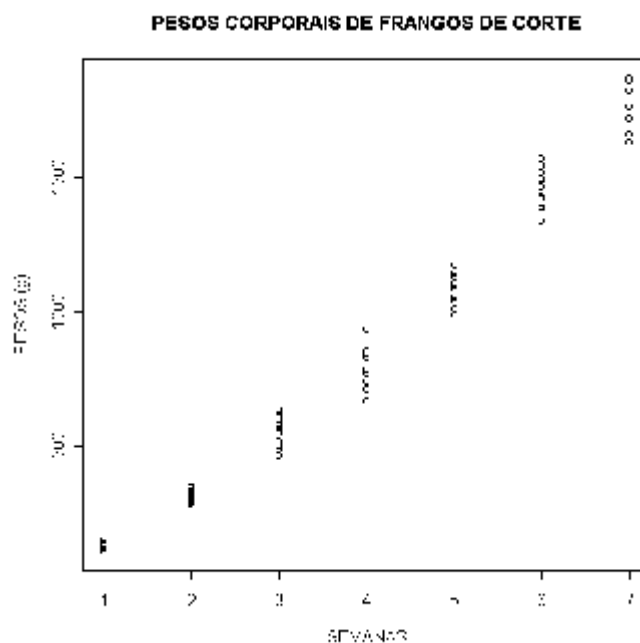
Tabela 20 - Pesos corporais, em gramas, de frangos de corte fêmeas.

	Semanas	1	2	3	4	5	6	7
Fêmeas								
1		122	291	500	712	1041	1430	1760
2		129	314	551	830	1096	1485	1820
3		133	308	563	857	1085	1422	1660
4		135	348	584	854	1109	1493	1760
5		110	286	556	782	1105	1538	1870
6		130	302	518	740	1009	1337	1630
7		133	336	630	831	1108	1514	1760
8		138	337	618	937	1144	1570	1820
9		153	352	637	830	1052	1464	1820
10		138	332	484	767	1132	1548	1870
11		137	329	576	844	1127	1391	1660
12		133	298	464	670	988	1387	1720
13		142	345	598	844	1172	1570	1860

Tabela 21 - Pesos médios corporais (em gramas) das aves e respectivos desvios padrões.

Semana	Média	Desvio Padrão
1	133,310	2,800
2	321,380	6,290
3	559,920	15,390
4	807,540	19,690
5	1089,850	14,880
6	1473,000	20,880
7	1770,000	22,950

PESOS



76.pdf

Figura 21 - Pesos corporais, em gramas, de frangos de corte fêmeas, durante as sete primeiras semanas de idade.

Verificamos, pelos resultados apresentados na Tabela 21 e pela Figura 21, que há um aumento na variabilidade dos pesos com o aumento das idades das aves e, aparentemente, a partir da sexta semana os pesos tenderão a estabilizar-se em algum lugar no tempo.

7.1 Análise Clássica

Foram obtidas as estimativas de máxima verossimilhança considerando modelos homoscedásticos e heteroscedásticos. Na obtenção de estimadores clássicos foram utilizados o software SAS, através da função NLMIXED, e valores iniciais para os parâmetros como descrito nas Seções 4.1 e 4.2. Para o modelo de Richards, considerando heteroscedasticidade, um dos parâmetros, β , não convergiu. Assim, não foi possível obter o intervalo de confiança assintótico para este parâmetro.

A Tabela 22 mostra as estimativas de máxima verossimilhança para α , que representa o crescimento máximo; para β , que corresponde ao intercepto com o eixo y, ou seja o peso inicial; para γ , que determina a taxa de crescimento da curva; para δ , presente somente no modelo de Richards, o qual permite maior flexibilidade à curva, e para σ^2 e

λ . Ambos modelos, (1) Gompertz e (2) Richards, são considerados com as suposições de (a) homoscedasticidade e de (b) heteroscedasticidade. As Figuras 23 e 24 mostram os gráficos dos ajustes dos pesos segundo os modelos (1) e (2), respectivamente.

No caso homoscedástico, verificamos que as estimativas da assíntota α e do parâmetro β são maiores no modelo (1) do que no modelo (2) porém o modelo (2) apresenta maior variabilidade do que o modelo (1). Como mostram as Figuras 22 e 23, os ajustes via modelos clássicos (1) e (2) prevêem estabilidade dos pesos além da décima terceira semana de vida das aves, porém esta estabilidade é alcançada com um peso menor no modelo (2).

No caso heteroscedástico, verificamos (com relação ao caso homoscedástico) uma diminuição na estimativa da assíntota α e as estimativas das variâncias diminuíram bastante. Nas Figuras 22 e 23 podemos verificar que a suposição de heteroscedasticidade proporciona uma estabilidade dos pesos por volta da décima terceira semana de vida das aves. Pelos resultados apresentados na Tabela 22 verificamos que a suposição de homoscedasticidade não é satisfeita no tratamento destes dados, pois as estimativas do parâmetro λ nos modelos (1) e (2) são significativamente diferentes de zero ($\lambda = 2,046$ no modelo de Gompertz e $\lambda = 1,899$ no modelo de Richards).

Tabela 22 - Estimativas de máxima verossimilhança.

Suposição	Modelo	Parâmetro	Estimativa	Erro Padrão	IC(95%)
(a)	(1)	α	3664,880	322,820	[3023,640; 4306,130]
		β	1,389	0,018	[1,352; 1,425]
		γ	0,244	0,017	[0,210; 0,279]
		σ^2	60,107	4,455	[51,258; 65,958]
		(2)	α	3058,620	510,040
		β	1,242	0,989	[1,149; 1,950]
		γ	0,319	0,097	[0,316; 0,512]
		δ	0,185	0,284	[0,179; 0,750]
		σ^2	60,824	4,618	[51,649; 69,997]
	(b)	(1)	α	2956,880	206,650
β			1,408	0,011	[1,387; 1,429]
γ			0,292	0,015	[0,261; 0,323]
σ^2			14,478	3,196	[8,125; 20,826]
λ			2,046	0,342	[1,367; 2,724]
(2)			α	2629,760	168,970
		β	10^{-8}		
		γ	0,365	0,018	[0,328; 0,401]
		δ	0,181	0,002	[0,177; 0,185]
		σ^2	16,511	3,932	[8,699; 24,322]
		λ	1,899	0,372	[1,161; 2,638]

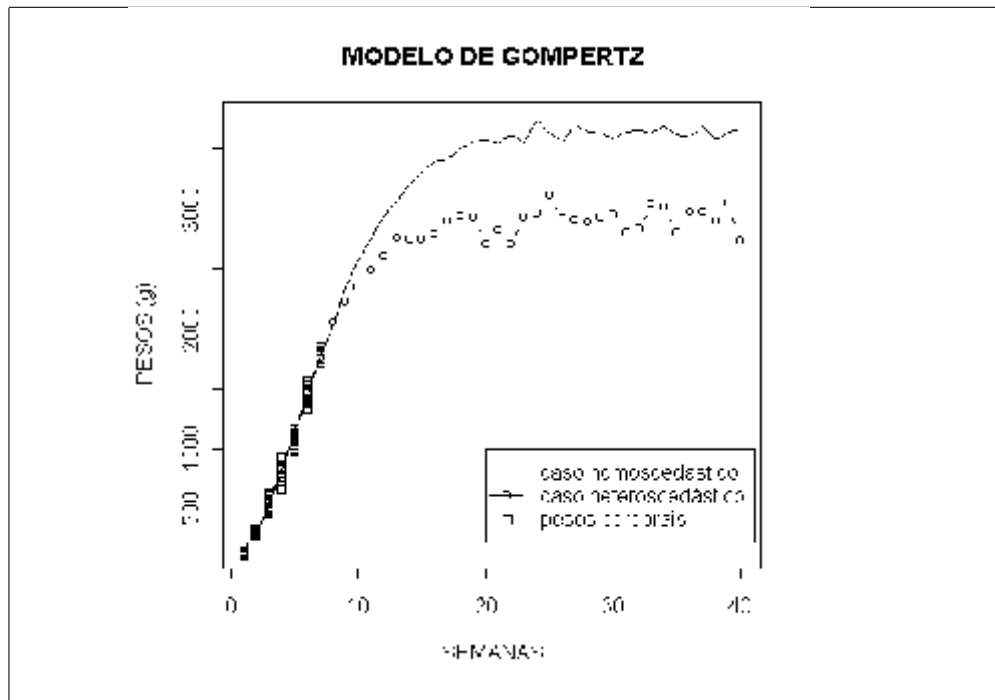


Figura 22 - Ajuste dos pesos segundo os modelo clássico de Gompertz.

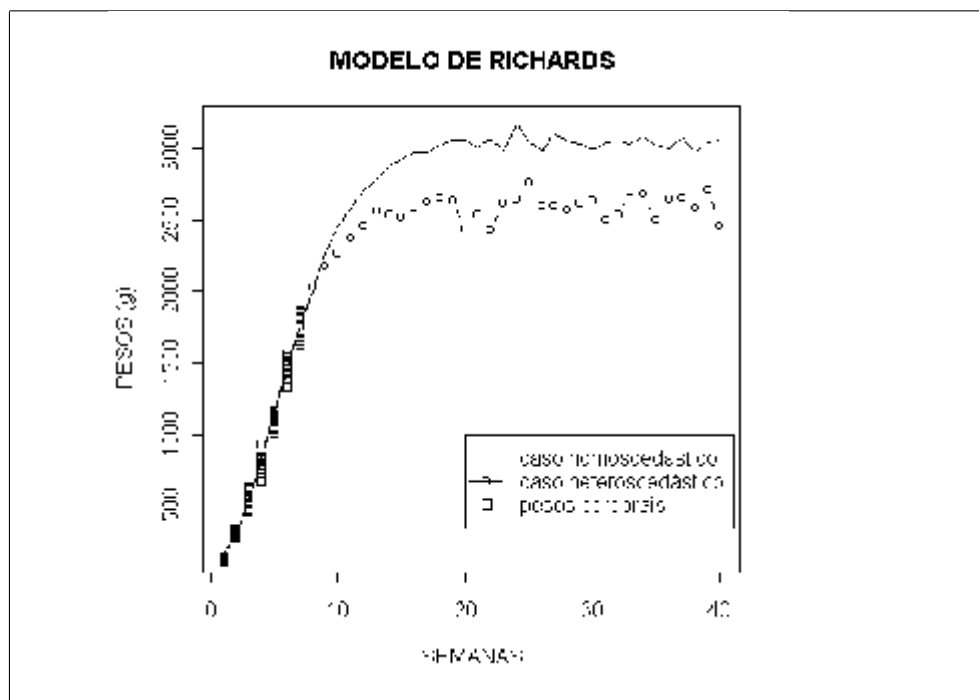


Figura 23 - Ajuste dos pesos segundo os modelo clássico de Richards.

7.2 Análise Bayesiana

Na obtenção de estimadores Bayesianos foram atribuídas *priori* não informativa de Jeffreys para os parâmetros dos modelos. A verificação de convergência do algoritmo Metropolis ocorreu via critério de Gelman & Rubin.

Foram obtidos os resumos Bayesianos *a posteriori* considerando as duas suposições distintas: homoscedasticidade e heteroscedasticidade nos erros. A implementação da metodologia Bayesiana ocorreu via algoritmo de Metropolis-Hastings no software R.

A Tabela 23 mostra os resumos Bayesianos *a posteriori* para os modelos (1) e (2), considerando homoscedasticidade e heteroscedasticidade nos dados em estudo.

No caso homoscedástico, verificamos que, (como na metodologia clássica), as médias *a posteriori* da assíntota α são maiores no modelo (1) do que no modelo (2) enquanto que as médias *a posteriori* de β e γ são maiores no modelo (2). Como mostram as Figuras 24 e 25, os ajustes via modelos bayesianos (1) e (2) prevêm estabilidade dos pesos muito além da décima terceira semana de vida das aves, porém esta estabilidade é alcançada com um peso menor no modelo (2). Em comparação com as Figuras 22 e 23 (modelos clássicos) esta estabilidade é alcançada para valores menores em ambos os modelos.

No caso heteroscedástico, verificamos que (com relação ao caso homoscedástico) houve pequena diminuição das médias *a posteriori* da assíntota α nos modelos (1) e (2). As estimativas do parâmetro λ são menores no modelo (2) do que no modelo (1). Nos modelos (1) e (2) as médias *a posteriori* de α são bem menores do que as estimativas de máxima verossimilhança do mesmo parâmetro. Nas Figuras 24 e 25 podemos verificar que a suposição de heteroscedasticidade proporciona uma estabilidade dos pesos por volta da décima terceira semana de vida das aves. A suposição de homoscedasticidade não é satisfeita no tratamento destes dados, pois as estimativas do parâmetro λ nos modelos (1) e (2) são maiores que zero. A estabilidade do parâmetro α é alcançada para valores menores em comparação com os valores das Figuras 22 e 23 (modelos clássicos)

Tabela 23 - Resumos Bayesianos *a posteriori*

Suposição	Modelo	Parâmetro	Média	Erro Padrão	Int. Cred. (95%)
(a)	(1)	α	2584, 852	60, 248	[1968, 000; 2605, 000]
		β	1, 809	0, 051	[1, 707; 1, 913]
		γ	0, 409	0, 009	[0, 391; 0, 427]
(2)	(2)	α	1841, 725	38, 578	[1767, 000; 1919, 000]
		β	8, 915	0, 140	[8, 650; 9, 199]
		γ	1, 518	0, 028	[1, 463; 1, 575]
		δ	3, 558	0, 159	[3, 251; 3, 870]
(b)	(1)	α	2256, 562	149, 932	[1951, 000; 2548, 000]
		β	1, 566	0, 011	[1, 544; 1, 589]
		γ	0, 449	0, 001	[0, 448; 0, 451]
		λ	2, 776	0, 600	[1, 689; 3, 994]
(2)	(2)	α	1584, 968	117, 128	[1362, 000; 1823, 000]
		β	7, 551	0, 265	[7, 027; 10, 092]
		γ	1, 462	0, 112	[1, 247; 1, 698]
		δ	3, 121	0, 105	[2, 925; 3, 336]
		λ	2, 156	0, 611	[1, 563; 3, 954]

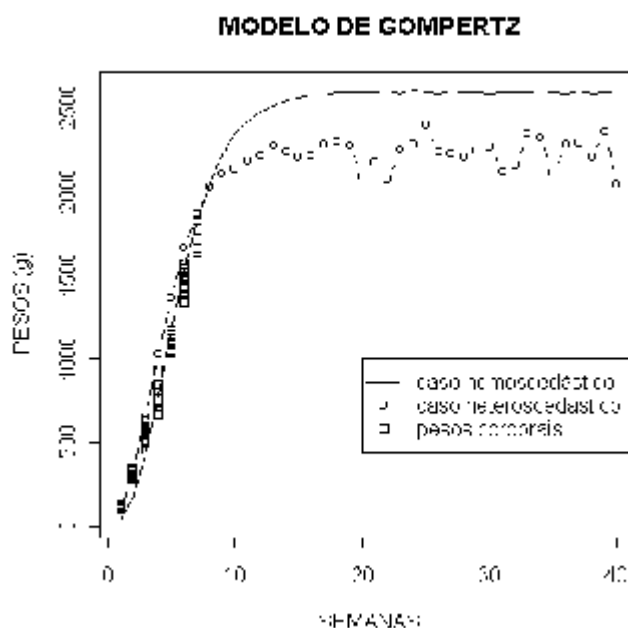


Figura 24 - Ajuste dos pesos segundo os modelo bayesiano de Gompertz

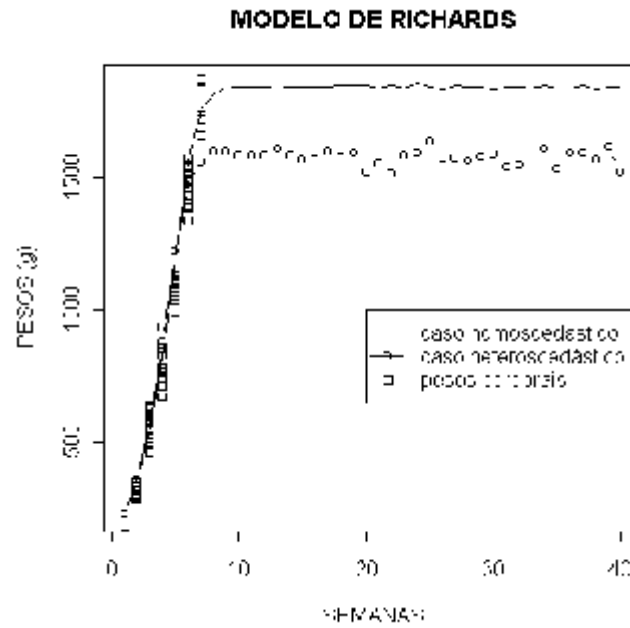
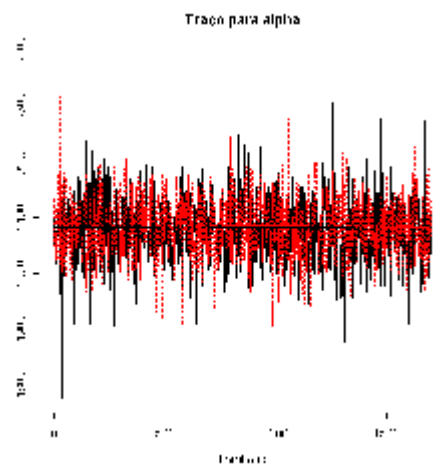
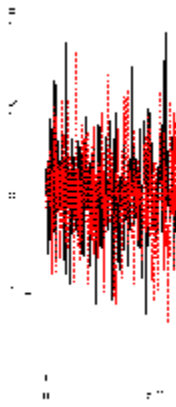


Figura 25 - Ajuste dos pesos segundo os modelo bayesiano de Richards.

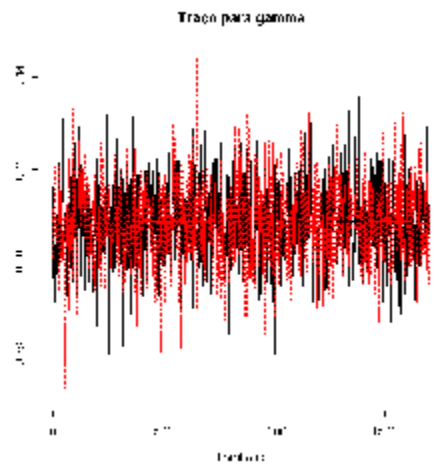
A Figura 26 (a) mostra os traços *a posteriori* de α , β e γ para o modelo de Gompertz (1) e a Figura 26 (b) mostra os traços *a posteriori* de α , β , γ e δ para o modelo de Richards (2), ambos considerando homoscedasticidade.

gompaplihomalpha

s1.pdf

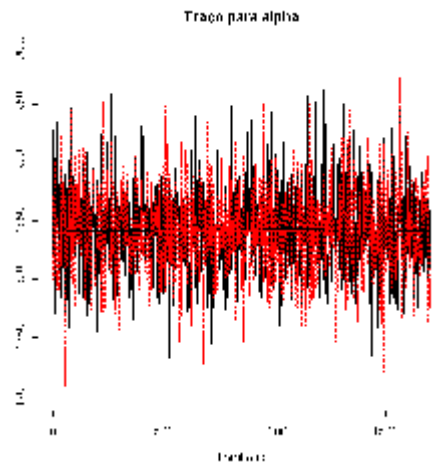
gompaplihomobeta

s2.pdf

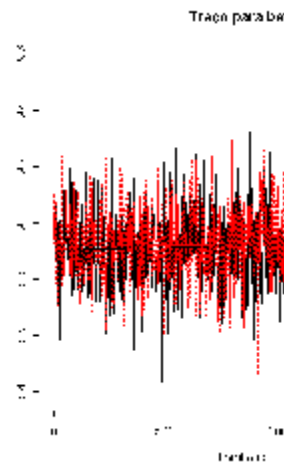
gompaplihomogamma

s3.pdf

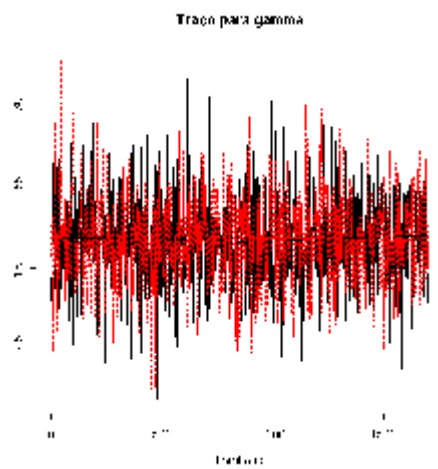
Figura 26-(a) Gráficos dos Traços *a posteriori* para os parâmetros α , β e γ do modelo de Gompertz.

richomaplialpha

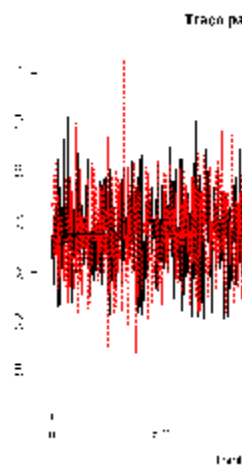
s4.pdf

ricaplihombeta

s5.pdf

ricaplihomgamma

s6.pdf

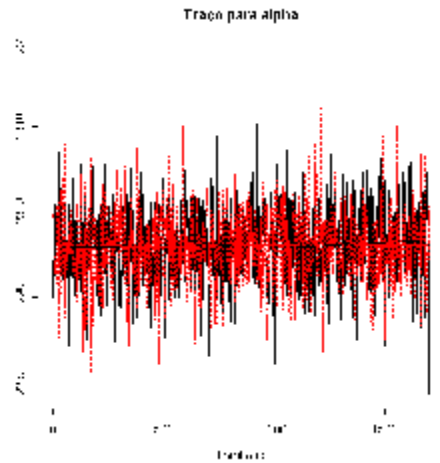
richomaplidelta

s7.pdf

(b) Gráficos dos Traços *a posteriori* para os parâmetros α , β , γ e δ do modelo de Richards.

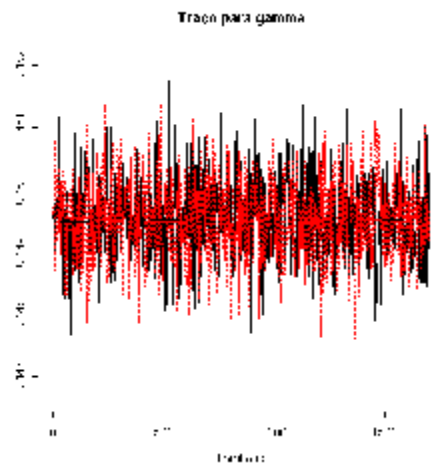
A Figura 27 (a) mostra os traços *a posteriori* de α , β , γ e λ para o modelo de Gompertz (1) e a Figura 27 (b) mostra os traços *a posteriori* de α , β , γ , δ e λ para o modelo de Richards (2), ambos considerando heteroscedasticidade.

gompaplihetalpha



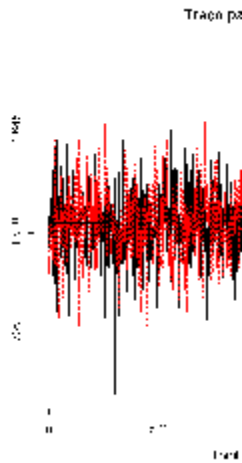
88.pdf

gompaplihetgamma



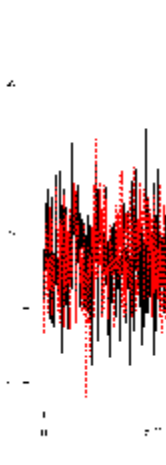
90.pdf

gompaplihetbeta



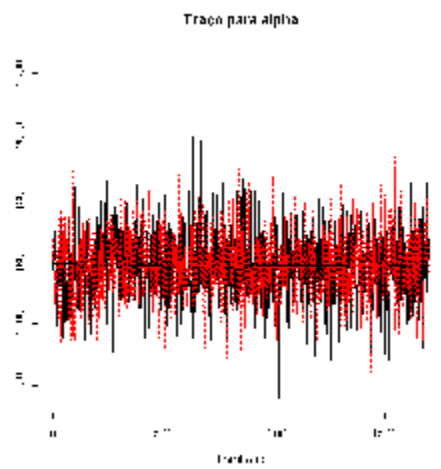
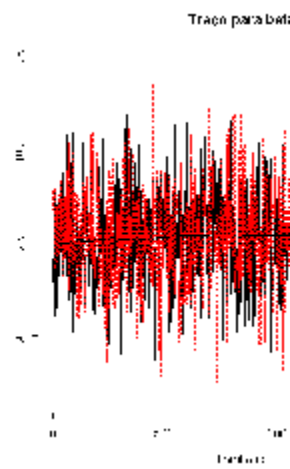
89.pdf

gompaplihetlambda

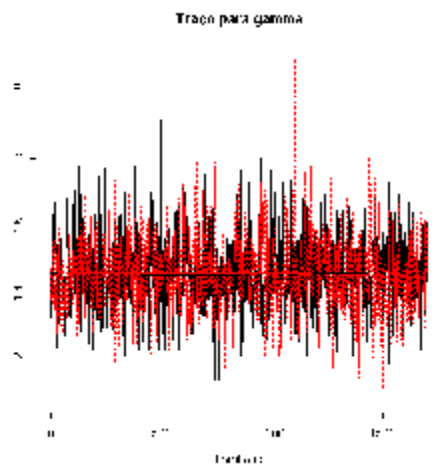


91.pdf

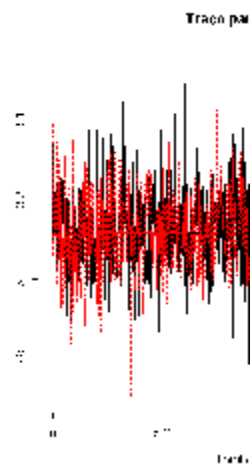
Figura 27-(a) Gráficos dos Traços *a posteriori* para os parâmetros α , β , γ e λ do modelo de Gompertz.

aplicrichetalpha*betaricaplichet*

92.pdf

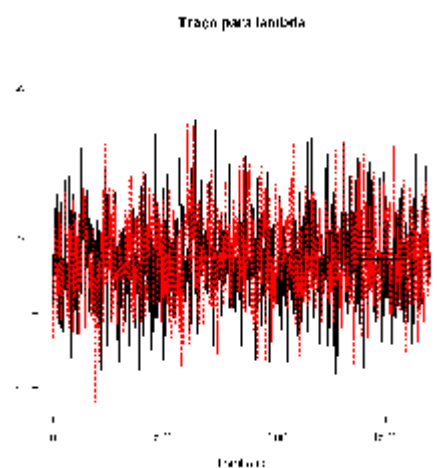
gammaricaplichet

93.pdf

deltaricaplichet

94.pdf

95.pdf

gompaplihetlambda

96.pdf

(b) Gráficos dos Traços *a posteriori* para os parâmetros α , β , γ , δ e λ do modelo de Richards.

Observamos que existe uniformidade nos traços *a posteriori* para os modelos (1) e (2) tanto no caso homoscedástico como no caso heteroscedástico.

A Figura 28 (a) mostra as densidades *a posteriori* de α , β e γ para o modelo de Gompertz (1) e a Figura 28 (b) mostra as densidades *a posteriori* de α , β , γ e δ para o modelo de Richards (2), ambos considerando homoscedasticidade.

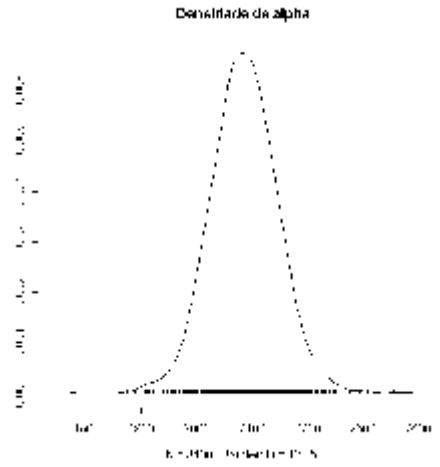
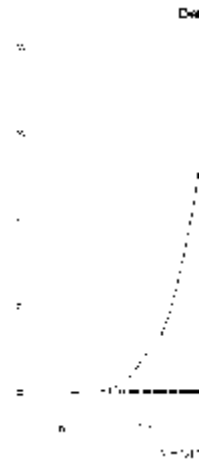
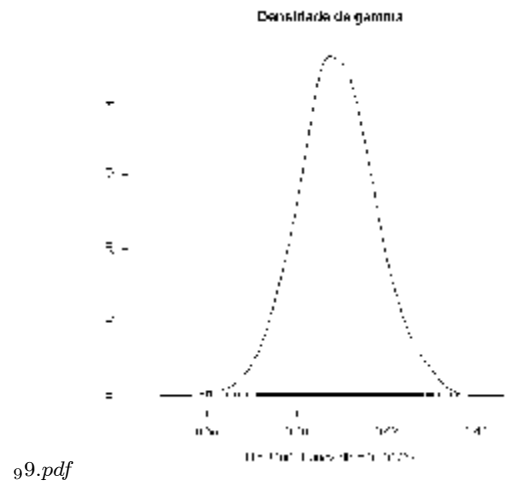
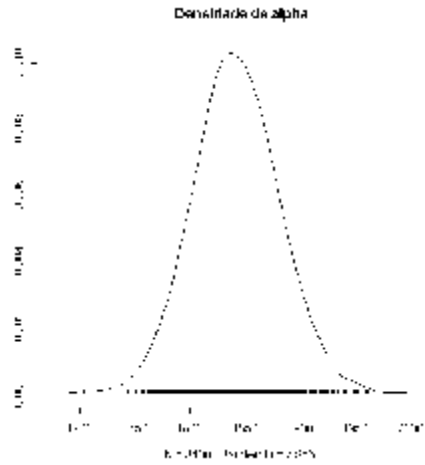
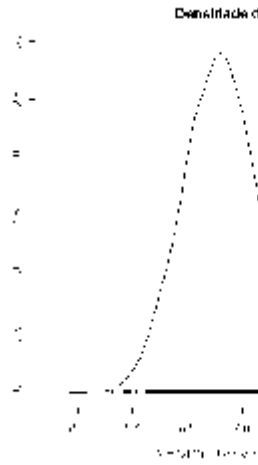
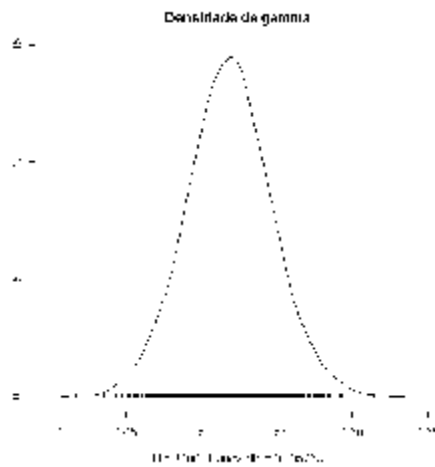
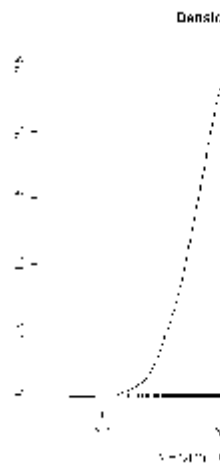
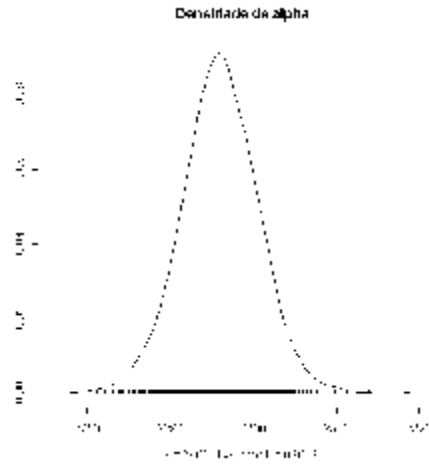
gompaplihomalpha*gomphomoaplibeta**gompaplihomogamma*

Figura 28-(a) Gráficos das densidades *a posteriori* para os parâmetros α , β e γ do modelo de Gompertz.

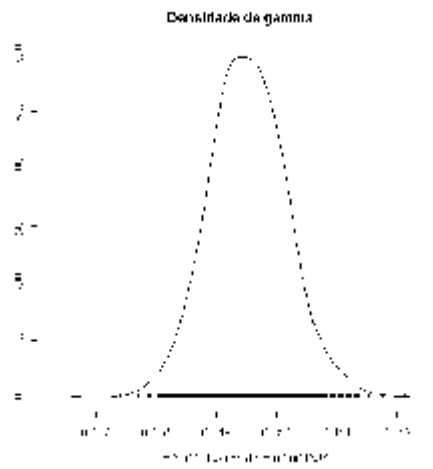
ricaplihomalpha*richomaplbeta**ricaplihomgamma**ricaplihomdelta*

(b) Gráficos das densidades *a posteriori* para os parâmetros α , β , γ e δ do modelo de Richards.

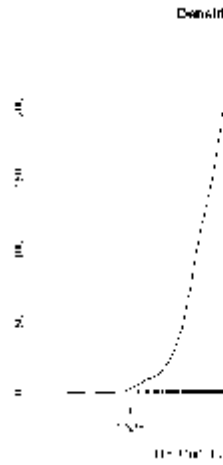
A Figura 29 (a) mostra as densidades *a posteriori* de α , β , γ e λ para o modelo de Gompertz (1) e a Figura 29 (b) mostra as densidades *a posteriori* de α , β , γ , δ e λ para o modelo de Richards (2), ambos considerando heteroscedasticidade.

gompaplihetalpha

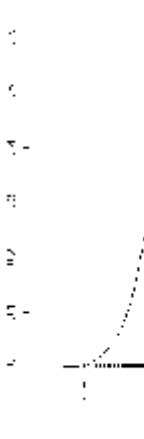
104.pdf

gompaplihetgamma

106.pdf

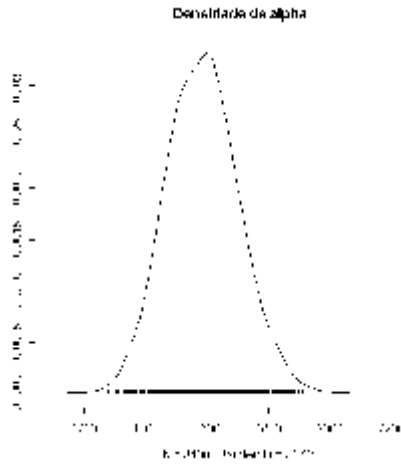
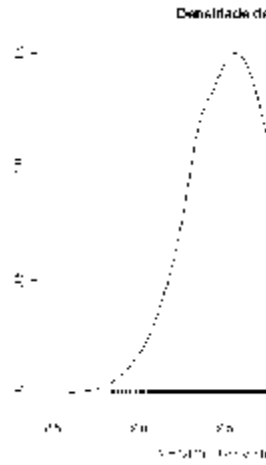
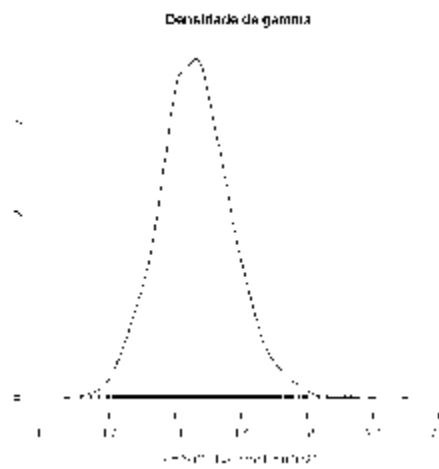
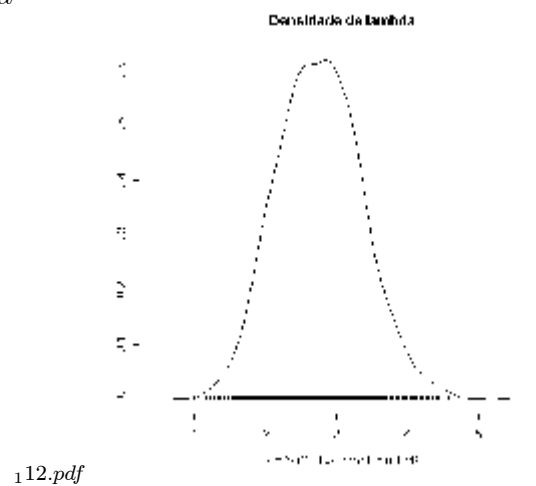
gomphetaplibeta

105.pdf

gomphetaplilambda

107.pdf

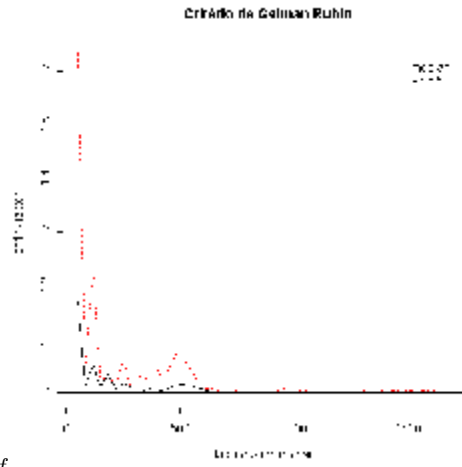
Figura 29-(a) Gráficos das densidades *a posteriori* para os parâmetros α , β , γ e λ do modelo de Gompertz.

aplicrichetalpha*betarichetaplic**gammaricaplichet**ricaplicdeltahet**gomphetaplilambda*

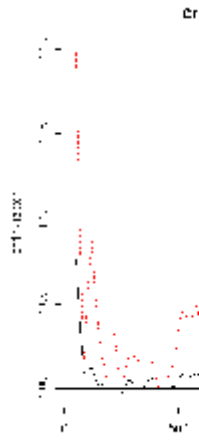
(b) Gráficos das densidades *a posteriori* para os parâmetros α , β , γ , δ e λ do modelo de Richards.

Observamos que há simetria das densidades *a posteriori* em torno das médias *a posteriori*.

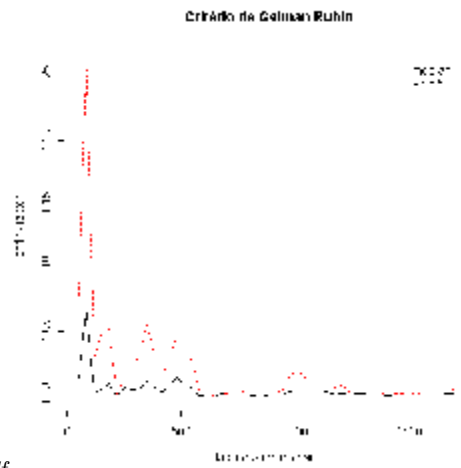
A Figura 30 (a) mostra os gráficos de Gelman & Rubin de α , β e γ para o modelo de Gompertz (1) e a Figura 30 (b) mostra os gráficos de Gelman & Rubin de α , β , γ e δ para o modelo de Richards (2), ambos considerando homoscedasticidade.

gompaplihomalpha

113.pdf

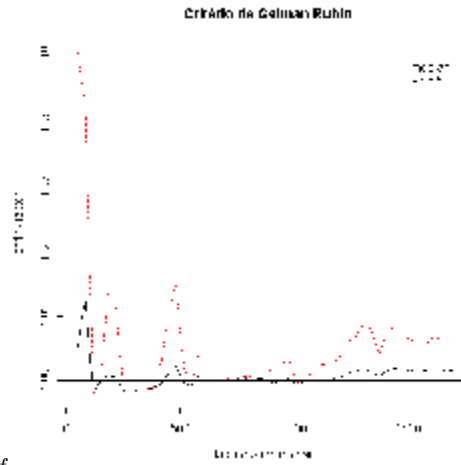
gompaplihombeta

114.pdf

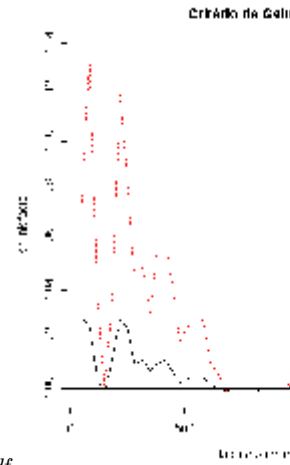
gompaplihomogamma

115.pdf

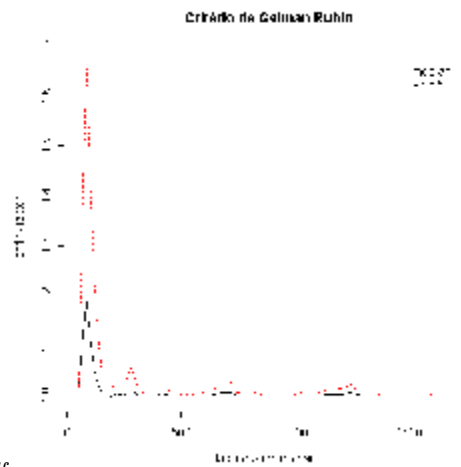
Figura 30-(a) Gráficos de G & R de α , β e γ no modelo de Gompertz.

ricaplihomalpha

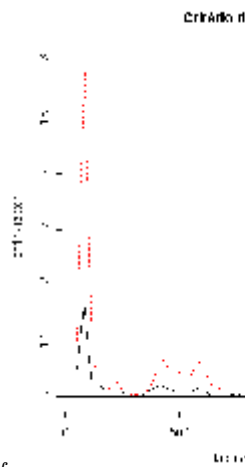
116.pdf

richomaplibeta

117.pdf

ricaplihomgamma

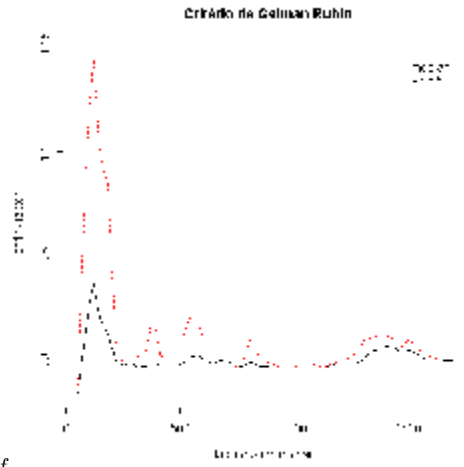
118.pdf

ricaplihomdelta

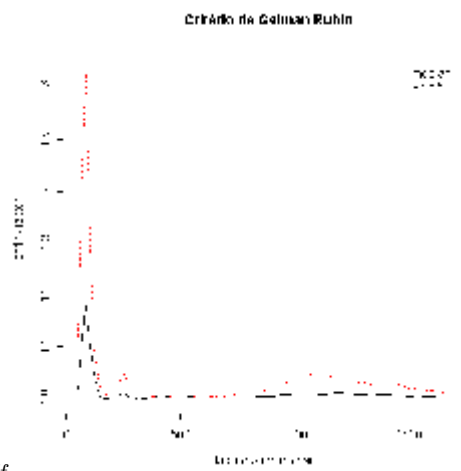
119.pdf

(b) Gráficos de G & R de α , β , γ e δ no modelo de Richards.

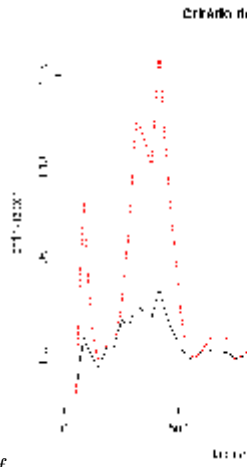
A Figura 31 (a) mostra os gráficos de Gelman & Rubin de α , β , γ e λ para o modelo de Gompertz (1) e a Figura 31 (b) mostra os gráficos de Gelman & Rubin de α , β , γ , δ e λ para o modelo de Richards (2), ambos considerando heteroscedasticidade.

gompalihatalpha

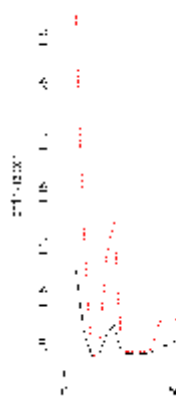
120.pdf

gompalihatgamma

122.pdf

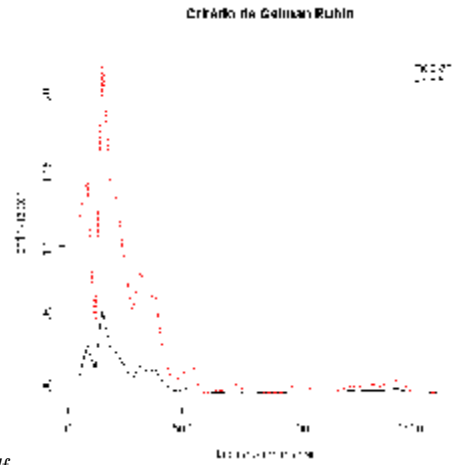
gomphetaplibeta

121.pdf

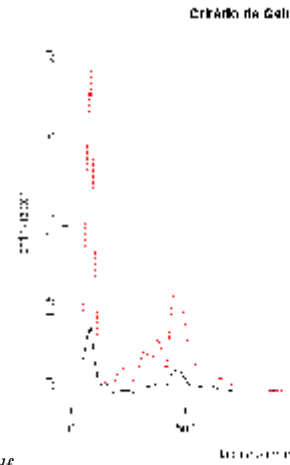
gomphetaplilambda

123.pdf

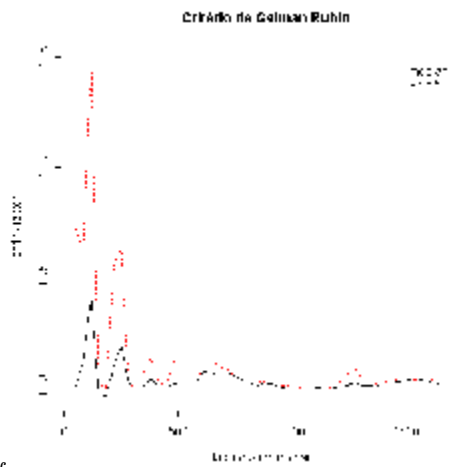
Figura 31-(a) Gráficos de G & R de α , β , γ e λ no modelo de Gompertz.

ricaplihetalpha

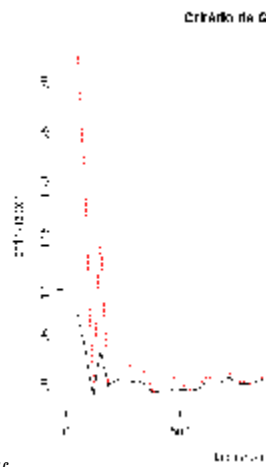
124.pdf

ricaplichetalpha

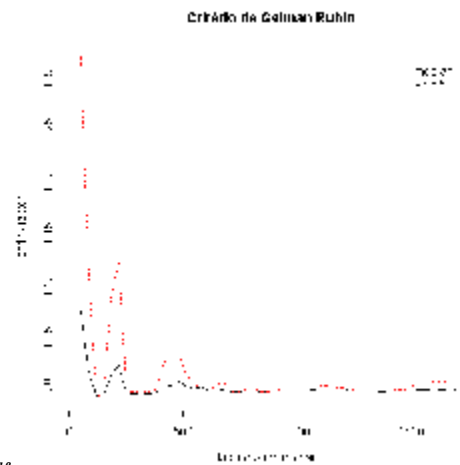
125.pdf

gammaaplicrichet

126.pdf

deltaricaplihet

127.pdf

gomphetaplilambda

128.pdf

(b) Gráficos de G & R de α , β , γ , δ e λ no modelo de Richards.

Observamos que houve convergência do algoritmo para todos os parâmetros, pois os diagnósticos se estabilizam em valores próximos de 1.

Capítulo 8

Conclusão

Nesta dissertação desenvolvemos uma análise Clássica e Bayesiana dos modelos de Gompertz e de Richards envolvendo heteroscedasticidade. A motivação do estudo surgiu pelo fato que os modelos de crescimento existentes na literatura não levam em consideração a presença de variância não constante para os erros. Atualmente, os ajustes dos modelos são elaborados considerando apenas modelos homoscedásticos.

Na inferência clássica para os modelos de Gompertz e de Richards homoscedásticos e heteroscedásticos utilizamos as estimativas de máxima verossimilhança dos parâmetros e seus respectivos intervalos de confiança, sendo que na aplicação de dados simulados os resultados apresentaram-se satisfatórios.

Apresentamos uma análise Bayesiana dos modelos de crescimento de Gompertz e de Richards homoscedásticos e heteroscedásticos, considerando densidades *a priori* não informativas de Jeffreys. Nos dois modelos utilizamos o método Metropolis-Hastings para a obtenção de amostras das marginais *a posteriori*. A aplicação desta metodologia em dados simulados mostrou resultados similares ou, as vezes, mais satisfatórios que os resultados encontrados na análise clássica.

Na comparação das análises Clássica e Bayesiana para os dois modelos, a análise Bayesiana, em geral, mostrou vantagens em relação, principalmente, aos erros quadráticos e às taxas de cobertura.

O grau de heteroscedasticidade forte, em alguns casos, influenciou os erros quadráticos médios clássicos nos dois modelos considerados, e também, as médias clássicas e Bayesianas no modelo de Richards.

No tratamento de dados reais, verificamos que, em geral, as médias *a posteriori* não estão tão próximas das estimativas de máxima verossimilhança dos parâmetros de interesse. Quando consideramos a presença de heteroscedasticidade, há uma diminuição das médias *a posteriori* do parâmetro α em ambos os modelos, ou seja, as estimativas para o peso máximo atingido pelas aves é menor quando consideramos heteroscedasticidade. O que reforça a idéia de que devemos sempre verificar a possibilidade de usarmos modelos heteroscedásticos.

Para dar continuidade ao trabalho pretendemos determinar a magnitude do erro de estimação ao usarmos um modelo homoscedástico em dados heteroscedásticos e a parte de discriminação de modelos.

Referências Bibliográficas

- [1] Achcar, J. A. ; Mazucheli, J. (1997). Modelos de Regressão Não Lineares:Algumas Considerações Importantes, Notas Didáticas do ICMC-USP.
- [2] Achcar, J.A. ; Mazucheli, J. (1997). Análise Bayesiana para Modelos Não Lineares de Crescimento, Revista Brasileira de Estatística, v. 58, n. 210, 77-94.
- [3] Bassanezi, R. C. (2002). Ensino-Aprendizagem com Modelagem Matemática - Uma Nova Estratégia, Contexto, São Paulo.
- [4] Bates, D. M., Watts, D. G. (1981). Parameter Transformations for Improved Approximate Confidence Regions in Nonlinear Least Squares. Ann. Stat. Assoc., 9, 1152-1167.
- [5] Bertolino, F.; Racugno, W. (2000). Bayesian Model Selection Approach to Analysis of Variance Under Heterocedasticity, The Statistician.
- [6] Bickel, P. J.; Doksum, K. A. (1977). Mathematical Statistics, Holden-Day, INnc.
- [7] Box, G. E. P.; Cox, D. R. (1964). An Analysis of Transformation, Journal of the Royal Statistical Society, Series B, bf 26, 211,252.
- [8] Box, G. E. P.; Tiao, G. C. (1973). Bayesian Inference in Statistical Analysis. Addison-Wesley, Massachussetts.
- [9] Cahales, L. B., Ciria, H. C., Peña, O. G., Jarque, M.V., Rodrigues, R. R. (2001). Efecto Antitumoral de la Corriente Etéctrica Directa: Estudio em Tumores de Ehrlich y Fibrosarcoma SA-37. Revista Cubana Oncol 17(3), 176-179.

- [10] Chib, S.; Greenberg, E. (1995). Understanding the Metropolis-Hastings Algorithm., *American Statistician*, 49,327-335.
- [11] Draper, N. R.; Smith, H. (1981). *Applied Regression Analysis*, 2ª Ed. Wiley: New York.
- [12] Fitzhugh Jr., H. A. (1974). Analysis of Growth Curves and Strategies for Altering their Shapes., *Journal of animal Science*, 42, 4, pp. 1036-1051.
- [13] Fraser, D. A. S. (1968). *The Structure of Inference*. Wiley, New York.
- [14] Gelman, A. ; Carlin, J. B. ; Stern, H. S. ; Rubin, D. B. (2000) *Bayesian Data Analysis*, Chapman and Hal, London.
- [15] Gilks, W. R.; Richardson, S.; Spiegelhalter, D. J. (1996). *Markov Chain Monte Carlo in Praticce*, Chapman-Hill.
- [16] Kalbfleisch, J. G. (1985). *Probability and Statistical Inference*, 2ª Ed. Springer Texts in Statistics.
- [17] Kroll, L. B., Tornero, M. T. T. (1994). Modelo de Gompertz com Sazonalidade e Autocorrelação nos Erros para Ajuste do Crescimento Ponderal em Vaca leiteira. *Revista Pesquisa Agropecuária Brasileira*, 29(5).
- [18] Lawless, J.F.(1981). *Statistical Models and Methods for Lifetime Data*. University of Waterloo.
- [19] Loibel, S. M. C. (2004). *Inferência e Indicadores de Viabilidade para Modelos Estocásticos de Crescimento de Populações*, Tese de Doutorado da Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação da Universidade Estadual de Campinas.
- [20] Mazucheli, J., Achcar, J.A.; (1994). *Análise Bayesiana e Discriminação de Modelos não Lineares*, Mini-dissertação do ICMC-USP
- [21] Mood, A. M.; Graybill, F. A.; Boes, D. C. (1974). *Introduction to the Theory of Statistics*, McGraw-Hill.

- [22] Ratkowsky, D. A. (1983). *Nonlinear Regression Modeling*, Marcel Dekker, Inc., New York.
- [23] Richards, J. F. (1959). a Flexibe Growth Function for Empirical Use., *J. Exp. Bot.* 10:290.
- [24] Rodrigues, S. A. (2003) *Modelos de Regressão Heteroscedásticos - Abordagem Clássica e Bayesiana*, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de São Carlos.
- [25] Seber, G. A. F. ; Wild, C. J. (1989) *Nonlinear Regresion*, Wiley, New York.
- [26] Wright, S. (1926). Book Review. *J. Am. Stat. Assoc.*, 21, 493-497.