

UM ESTUDO SOBRE MODELOS NÃO LINEARES DE EFEITOS MISTOS

Larissa Reis dos Santos (PIBIC/CNPq/FA/UEM), Vanderly Janeiro (Orientador), e-mail: ra99821@uem.br

Universidade Estadual de Maringá / Centro de Ciências Exatas/Maringá, PR.

Matemática / Probabilidade e Estatística - Probabilidade e Estatística.

Palavras-chave: modelo de Gompertz, germinação, efeito aleatório.

Resumo

Modelos não lineares de efeitos mistos (MNLM) têm se mostrado uma metodologia de grande importância por ser flexível e eficiente para a análise de dados agrupados com comportamento não linear. Neste trabalho, ajustamos o modelo não linear de Gompertz a dados de germinação de sementes de duas variedades de hortaliças, atribuindo efeito aleatório de lote de sementes aos parâmetros do modelo usando a metodologia de MNLM. Por meio do pacote “nlme” do ambiente estatístico R. Constatou-se que uma variedade é superior a outra.

Introdução

Modelos não lineares são frequentemente mecanicistas, isto é, baseados em um modelo para o mecanismo que produz a resposta. Como consequência, os parâmetros do modelo geralmente têm uma interpretação natural. Mesmo quando derivados empiricamente, os modelos não lineares geralmente possuem características teóricas conhecidas, como assíntotas e monotonicidade. O MNLM permite a inclusão de covariáveis podendo envolver efeitos fixos e aleatórios nos parâmetros do modelo (PINHEIRO e BATES, 2000). Neste trabalho, o objetivo é ajustar um MNLM à porcentagem de germinação de hortaliças que foram avaliadas durante 14 dias.

Materiais e métodos

Para ilustrar a teoria apresentada neste trabalho, será considerado parte de um conjunto de dados proveniente de um estudo de germinação de sementes. Utilizamos os resultados de duas variedades de hortaliças, aqui nomeadas de V1 e V2. O estudo foi conduzido com oito repetições/amostras de 50 sementes cada, para cada variedade. As amostras, por variedades, foram dispostas de forma aleatória em caixas plásticas do tipo gerbox. As amostras foram alocadas para germinar sob o mesmo tipo de substrato, forma de irrigação, intensidade de luz, temperatura, etc. Cada amostra foi composta por sementes adquiridas no comércio local, de forma que uma amostra difere da outra em relação ao lote de sementes. A contagem das sementes germinadas foi realizada a cada 2 dias a partir do segundo dia da implementação do experimento, até o décimo quarto dia, totalizando 7

contagens. O número de sementes germinadas ao longo do tempo foi dividido por 50 e multiplicado por 100, obtendo assim a variável resposta porcentagem de sementes germinadas.

Considerando a distribuição dos dados, adotamos o modelo de Gompertz (YUAN et. al. 2019) para porcentagem de germinação. A parametrização adotada para o modelo foi:

$$Y = f(t) = a * \exp(-b * \exp(-k * (t - t_c))) + \varepsilon$$

em que a é porcentagem de germinação máxima (assíntota) da variedade; k e b são taxas (velocidade) de crescimento e controlam a inclinação da curva; t_c o ponto de inflexão da curva. Como o modelo de Gompertz é uma função crescente monotônica, à medida que t tende a infinitos negativos, Y se aproxima de zero e, à medida que t se torna positivamente infinito, Y se aproxima de a . O tempo necessário para que Y tenha uma porcentagem \hat{C} da germinação total, é dada por (YUAN et. al. 2019):

$$m = f^{-1}(\hat{C}) = t_c - (1/k) * \{\log[\log(a/C)] - \log(b)\}.$$

A estrutura de amostragem induz uma correlação entre as observações tiradas do mesmo lote. Diante desse tipo de problema, outros autores têm proposto a modelagem de efeitos mistos (XU et al., 2014; PINHEIRO e BATES, 2000). Assim consideramos o enfoque de modelo não linear misto, em que o lote de semente tem um efeito aleatório sobre as estimativas dos parâmetros. Para ajustar o modelo e analisar os dados, foram utilizados os recursos disponíveis no pacote **nlme** (*Linear and Nonlinear Mixed Effects Models* - Pinheiro, Bates, DebRoy, Sarkar e R Core Team, 2021) do ambiente estatístico R (R Equipe central, 2021).

Resultados e Discussão

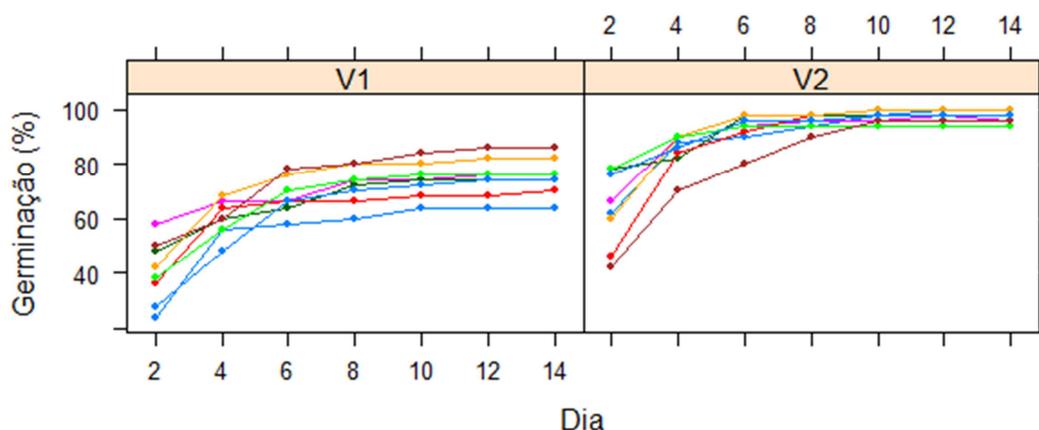


Figura 1 - Distribuição da porcentagem de sementes germinadas por variedade.

Como observado na Figura 1, o percentual de germinação tem um crescimento exponencial no início do período de observação e a partir de um certo momento estabiliza, indicando a existência de assíntota (porcentagem máxima de germinação), de forma que o modelo proposto é plausível.

Ao procedermos um ajuste para cada curva, detectamos certa dificuldade da função `nlsList` em ajustar o modelo a todas as curvas. Com o estudo verificamos que a dificuldade se dava para estimativas do parâmetro t_c , e quando voltamos aos perfis

(Figura 1) observamos que não há indícios de ponto de inflexão. Dessa forma decidimos fixar o valor em zero, isto é, $t_c = 0$

Tabela 1 – Média, desvio padrão e coeficiente de variação das estimativas dos parâmetros do modelo ajustados a cada uma das amostras.

Variedade	Estatística	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>k</i>
V1	Média	75.667	2.7933	0.5653
	DP	7.877	2.4979	0.3420
	CV%	10.409	89.4228	60.4966
V2	Média	97.959	1.5877	0.5978
	DP	1.933	0.9209	0.1910
	CV%	1.974	58.0060	31.9526

Observamos na Tabela 1, uma grande variabilidade nas estimativas dos parâmetros quando comparados entre os lotes de uma mesma variedade. Esse fato justifica a suposição da necessidade de inclusão de efeitos aleatórios, devido a lote, nos parâmetros. Dessa forma, continuamos a análise dos dados incluindo efeitos aleatórios aos parâmetros do modelo devido a lote de semente por meio da função nlme. Para valores iniciais das estimativas dos parâmetros, usamos as médias das estimativas dos ajustes individuais.

Tabela 2 – Estimativas dos parâmetros do modelo de Gompertz ajustado com a metodologia de modelos mistos.

Parâmetros	V1		V2	
	Estimativa	IC95%	Estimativa	IC95%
<i>a</i>	70,7787	(75,97; 81,16)	97,03	(98,20; 99,37)
<i>b</i>	1,1167	(2,32; 3,52)	0,79	(1,36; 1,93)
<i>k</i>	0,3194	(0,52; 0,72)	0,42	(0,53; 0,64)

De acordo com as estimativas dos parâmetros, Tabela 2, a variedade V2 tem poder de germinação máximo superior a variedade V1, 97,0347% contra 70,7787% respectivamente. Entretanto a velocidade com que as sementes germinam é menor na variedade V2. As estimativas de *b* mostram que V1 começa a germinação mais tardiamente, enquanto a estimativa de *k* indica que a curva de V2 é um pouco mais íngreme. Na Figura 2, podemos observar as curvas ajustadas para as variedades V1 e V2 corroborando com as observações anteriores.

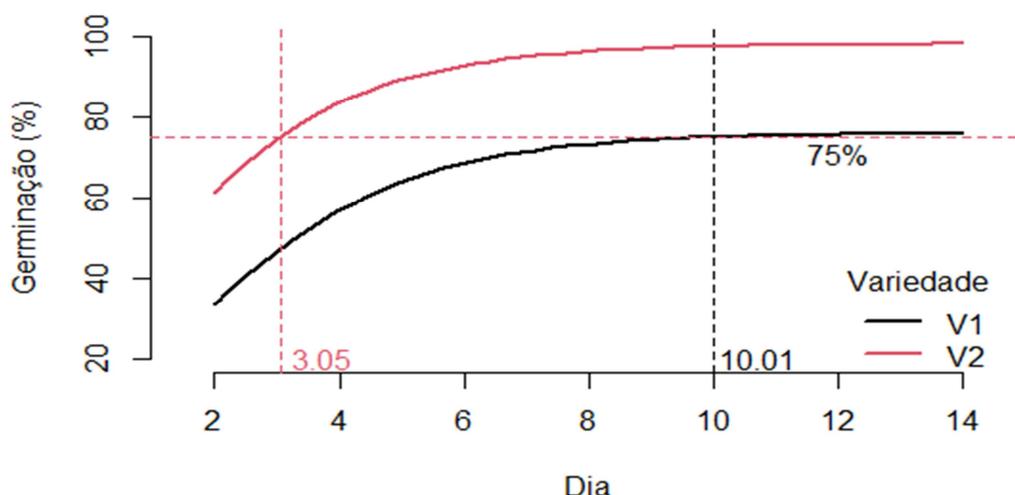


Figura 2 – Modelo de Gompertz ajustado para a germinação de sementes das variedades V1 e V2, e predição do tempo necessário para germinação de 75% das sementes (linhas tracejadas).

Conclusões

Conclui-se que, na presença de dados com comportamento não linear e com efeito aleatório, a aplicação de modelos não lineares sobre o enfoque de modelos mistos se mostra útil nas análises, produzindo resultados com maior precisão. No caso em questão, a metodologia permitiu a inserção de efeitos aleatórios, devido aos diferentes lotes de semente, aos parâmetros do modelo.

Agradecimentos

Ao professor Vanderly Janeiro pelo apoio, dedicação e grande incentivo. Agradecemos à Fundação Araucária pelo apoio financeiro.

Referências

Pinheiro, J. C., BATES, D. M., **Mixed-Effects Models in S and S-Plus**. New York: Springer-Verlag New York, Inc, 2000. 528 p.

R Core Team, **R: A Language and Environment for Statistical Computing**, R Foundation for Statistical Computing, 2021. Disponível em: <<https://www.R-project.org/>>. Acesso em: 30 de ago. de 2021.

Xu, H., Sun, Y., Wang, X., Fu, Y., Dong, Y. & Li, Y., ‘**nlme** diameter growth models for individual china-fir No (*cunninghamia lanceolata*) trees in southeast china., 2014. PloS one 9, e104012.

Yuan, Rui, Yang, Bo, Liu, Yingfei and Huang, Lingyu. “**Modified Gompertz sigmoidal model removing fine-ending of grain-size distribution:**” Open Geosciences, vol. 11, no. 1, 2019, pp.29-36. Disponível em: <<https://doi.org/10.1515/geo-2019-0003>>