Revista da Estatística UFOP, Vol III(3), 2014, ISSN 2237-8111
Edição especial: 59ª Reunião Anual da Regional Brasileira da Sociedade Internacional de Biometria - RBRAS
Trabalhos apresentados na versão poster.

Análise do crescimento vegetal por meio de modelo não linear via regressão isotônica

Adriana Matheus da Costa Sorato[1]

Thalita Kelen Leal do Prado[2]

Augusto Ramalho de Morais[2]

1 Introdução

O estudo do crescimento vegetal é extremamente importante, pois conhecer como ocorre esse crescimento pode contribuir para determinar um manejo mais adequado da cultura e detectar possíveis problemas de desenvolvimento na lavoura.

Dentre as metodologias disponíveis o estudo de curva de crescimento apresenta grande realce. Os modelos de regressão não linear são considerados adequados para descrever tais curvas, pois podem contribuir ou até mesmo facilitar a interpretação dos processos envolvidos no crescimento vegetal, já que seus parâmetros possibilitam interpretações práticas.

Para promover a estimação dos parâmetros de modelos não lineares recorre-se a processos iterativos, dentre os quais o algoritmo de Gauss-Newton apresenta destaque. Entretanto a não convergência do algoritmo é um grave problema, pois impossibilita a obtenção das estimativas dos parâmetros, e consequentemente, o ajuste da curva.

A ausência de convergência pode ser causada pela perda de observações ou pela presença de oscilações da curva esperada, no caso vegetal, pode ser caracterizada pela diminuição do peso de matéria seca, decorrente da influência de fatores ambientais ou características especificas.

Desse modo, apresentar procedimentos de estimação que considerem tal fato é importante. Assim o objetivo deste trabalho é expor uma metodologia de transformação de dados, via análise de regressão isotônica para estudo da curva de crescimento do vegetal, de maneira a apresentar a teoria de regressão isotônica e avaliar sua eficiência por meio de um estudo de simulação.

1 Departamento de Ciências Exatas, UFLA (e-mail: dri_amarelinha@yahoo.com.br)
2 Departamento de Ciências Exatas, UFLA

2 Material e Métodos

A regressão isotônica é uma técnica que se caracteriza como uma forma apropriada de transformação de dados em situações em que as curvas observadas não correspondem às esperadas.

Barlow et al. utilizam as definições abaixo:

Definição 1: Seja X um conjunto de números $\{x_1, \dots, x_k\}$. Uma função de valor real f em X é isotônica se para $, y$ ∈ X, x<y implicar em $f(x) \leq f(y)$.

Definição 2: Sejam X como na definição anterior, g uma função em X e w uma dada função positiva em X. Uma função isotônica g^* em X é uma regressão isotônica de g com pesos w, se ela minimiza na classe das funções isotônicas f em X a soma:

$$\sum_{x \in X} [g(x) - f(x)]^2 \, w(x) \qquad (1)$$

Desse modo a regressão isotônica é aquela função não decrescente, dentre todas as possíveis, que torna a soma de quadrados dos erros (equação 1) a menor possível.

A regressão isotônica faz uso de uma informação *a priori* sobre uma possível relação de ordem da variável resposta, isto é, quando a variável resposta aumenta com o aumento da variável independente, e espera-se que a eficiência do ajuste seja aumentada quando se faz uso da mesma. Nesse trabalho usar-se-á o conceito de ordenação simples que é definida a seguir.

Definição 3: Uma relação binária " $\leq$ " em X estabelece uma ordem simples em X se:

1. Ela é reflexiva: $\leq$ para todo ∈ X;
2. Ela é transitiva: x, y, z ∈ X, $\leq y, y \leq z \Rightarrow \leq z$;
3. Ela é antissimétrica: x, y ∈ X, $\leq y, y \leq \Rightarrow = y$;
4. Quaisquer dois elementos são comparáveis: x, y ∈ X ⇒ ou $\leq y$ ou $y \leq x$.

O algoritmo PAVA (pool-adjacent-violators algorithm) é amplamente utilizado para calcular a regressão isotônica para uma ordem simples (AYER et al, 1955). O objetivo do algoritmo PAVA é detectar blocos violadores e substitui-los por suas médias ponderadas, até que se obtenha um conjunto de valores isotônicos.

Ao visar os problemas de convergência citados anteriormente, o uso da regressão isotônica decorre do fato de propor um pré-ajuste dos dados, caracterizado como uma transformação da variável dependente (RODRIGUES et al, 2010).

De acordo com Robertson, Wright e Dykstra (1988) a isotonização dos dados, que é a aplicação da regressão isotônica aos mesmos, pode reduzir os erros associados ao processo de estimação, fornecendo evidencias de uma melhora na qualidade do ajuste.

Com o intuito de avaliar a eficiência da regressão isotônica para corrigir possíveis distúrbios em curvas de crescimento vegetal foi realizado um estudo de simulação de dados via Monte Carlo. Foi simulado valores de y_i fixando os valores de um modelo não linear logístico.

Foram geradas quinze observações longitudinais, sendo x_i=7, 14,..., 105, já que na prática diversas culturas apresentam ciclo de vida em torno de três meses. Foram simuladas 1000 curvas diferentes, segundo o modelo logístico, e foi inserida uma função distúrbio (equação 2) no ponto de inflexão.

$$f(\mu, \alpha, \beta, x) = -\beta . exp\left(\frac{-(x-\mu)^2}{\alpha}\right) \qquad (2)$$

Três situações foram consideradas na simulação: os dados originais com distúrbios, dados corrigidos via regressão isotônica com pesos iguais e dados corrigidos via regressão isotônica com pesos diferentes. A eficiência da regressão isotônica foi verificada pelo cálculo do erro quadrático médio (EQM) de cada parâmetro.

Para a isotonização dos dados e ajuste do modelo Logístico, bem como o cálculo do EQM para cada paramento, foram utilizadas rotinas desenvolvidas no software R (R Development Core Team, 2011).

Resultados e Discussões

A proposta de isotonização dos dados foi avaliada por meio da simulação Monte Carlo. As três situações consideradas nessa simulação são apresentadas na Figura 1.

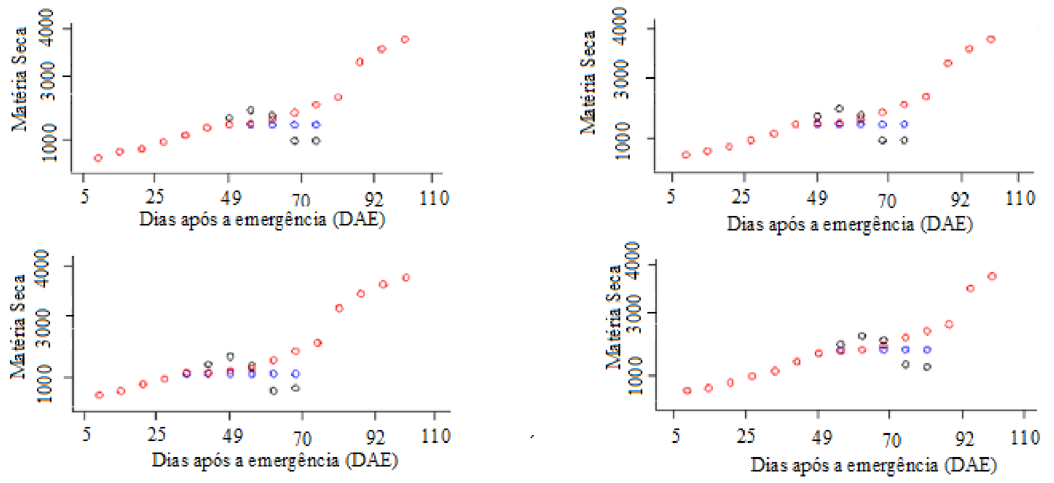

Figura 1: Curvas de crescimento de quatro experimentos gerados via modelo logístico, em que ○ representa os dados originais; ○ representa a regressão isotônica com pesos iguais e ○ representa a regressão isotônica com pesos diferentes

Veja que a figura 1 retrata a ideia da regressão isotônica, que transforma os dados e permite que esses dados transformados recuperem a trajetória esperada da curva de crescimento.

O erro quadrático médio (EQM) para todos os parâmetros do modelo logístico é apresentada na Tabela 1.

Situação	**EQM**		
	a	b	k
Dados originais	39493,5	6037,2	$6{,}1e^{-5}$
Reg. Isotônica com pesos iguais	18925,1	2340,1	$3{,}7\ e^{-5}$
Reg. Isotônica com pesos diferentes	38993,4	302,7	$3{,}9\ e^{-5}$

Note que ao considerar os dados transformados via regressão isotônica, o EQM é menor com relação a todos os parâmetros do modelo logístico se comparados aos dados originais.

Desse modo, é possível observar que, ao se utilizar a transformação de dados via regressão isotônica, há maior precisão quanto à estimação dos parâmetros, como já foi verificado por Araújo (2005).

Conclusão

A transformação de dados via regressão isotônica possibilita o aumento da qualidade do ajuste do modelo de regressão não linear logístico a dados simulados de crescimento vegetal que apresentam distúrbios.

Referências

[1] AYER, M. et al. **An empirical distribution function for sampling with incomplete information**. The Annals of Mathematical Statistical, Beachwood, v.26, n.4, p. 641-647, 1955. Disponível em: <http://www.jstor.org/discover/10.2307/2236377?uid=2129&uid=2&uid=70&uid=4&sid=21103433228171> . Acesso em: 21 de fev. de 2014.

[2] ARAUJO, L.B. **Métodos de correção de autovalores e regressão isotônica nos modelos AMMI.** 2005. 75p. Dissertação (Mestrado em Agronomia). Escola Superior de Agricultura Luiz de Queiroz, Piracicaba, 2005.

[3] BARLOW, T. **Statistical inference under order restrictions: the theory and application of isotonic regression.** London: J. Wiley, 1972, 388p.

[4] R DEVELOPMENT CORE TEAM (2011). **R: A language and environment for statistical computing**, Disponível em <http://www.R-project.org>. Acesso em: 05 fev. 2014.

[5] ROBERTSON, T.; WRIGHT, F.T.; DYKSTRA, R.L. Order restricted statistical inference. New York: J. Wiley, 1988.

[6] RODRIGO, A. et al. **Utilização da regressão isotônica em estudos de curva de crescimento**. Revista Brasileira de Biometria. V. 28, n 4, p. 85-101, 2010. Disponível em <http://jaguar.fcav.unesp.br/RME/fasciculos/v28/v28_n4/A6_Adriano.pdf>. Acesso em: 04 fev. 2014.