



WALMES MARQUES ZEVIANI

**PARAMETRIZAÇÕES INTERPRETÁVEIS
EM MODELOS NÃO LINEARES**

**LAVRAS - MG
2013**

WALMES MARQUES ZEVIANI

**PARAMETRIZAÇÕES INTERPRETÁVEIS EM MODELOS NÃO
LINEARES**

Tese apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Estatística e Experimentação Agropecuária, área de concentração em Estatística e Experimentação Agropecuária, para a obtenção do título de Doutor.

Orientador
Prof. Dr. Joel Augusto Muniz

**LAVRAS - MG
2013**

**Ficha Catalográfica Preparada pela Divisão de Processos Técnicos da
Biblioteca da UFLA**

Zeviani, Walmes Marques.

Parametrizações interpretáveis em modelos não lineares / Walmes
Marques Zeviani. – Lavras : UFLA, 2013.

56 p. : il.

Tese (doutorado) – Universidade Federal de Lavras, 2013.

Orientador: Joel Augusto Muniz.

Bibliografia.

1. Verossimilhança. 2. Método delta. 3. Medida de curvatura. 4.
Efeitos mistos. 5. van Genuchten. I. Universidade Federal de Lavras.
II. Título.

CDD-519.76

WALMES MARQUES ZEVIANI

**PARAMETRIZAÇÕES INTERPRETÁVEIS EM MODELOS NÃO
LINEARES**

Tese apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Estatística e Experimentação Agropecuária, área de concentração em Estatística e Experimentação Agropecuária, para a obtenção do título de Doutor.

APROVADA em 13 de maio de 2013.

Prof. Dr. Paulo Justiniano Ribeiro Jr	UFPR
Prof. Dr. Júlio da Motta Singer	IME-USP
Prof. Dr. Júlio Silvio de Sousa Bueno Filho	UFLA
Prof. Dr. Augusto Ramalho de Moraes	UFLA

Prof. Dr. Joel Augusto Muniz
Orientador

**LAVRAS - MG
2013**

À DEUS, autor da minha vida.

*Aos meus pais, Jaime e Marilene, por todo amor, cuidado,
apoio, respeito, confiança e paciência;*

Aos meus irmãos, Wolnei e Waires, pela admiração, respeito e amizade.

DEDICO

AGRADECIMENTOS

À meu pai, Jaime, por toda confiança e incentivo que permitiram alcançar esse objetivo e a minha mãe, Marilene, por todo carinho, apoio e infância que me proporcionou.

(omitido)

À UFPR pela oportunidade de exercer minha vocação de transmitir conhecimento e produzir pesquisa científica.

À CAPES pela bolsa de Mestrado e pela bolsa de mudança de nível para o Doutorado.

“Experiência não é o que acontece
com você, mas o que você fez com
o que lhe aconteceu.”

Aldous Huxley

“O que você sabe não tem valor, o
valor está no que você faz com o
que sabe.”

Bruce Lee

“Quem não sabe o que busca não
identifica o que acha.”

Immanuel Kant

RESUMO GERAL

Uma das vantagens dos modelos de regressão não linear é ter interpretação para os parâmetros. Em muitas situações, parâmetros de interesse, expressos como função dos parâmetros do modelo, são quantidades sujeitas à investigação. Surge então a preocupação de como fazer inferência sobre eles. Para isso, o método delta, a simulação Monte Carlo e procedimentos bootstrap são alternativas frequentes. Além disso, uma reparametrização pode ser aplicada ao modelo de forma à representar tais parâmetros de interesse. Além de melhorar a interpretação, a presença do parâmetro alvo estende as possibilidades com relação a especificação de modelos e inferência estatística. O objetivo com esse trabalho é sistematizar o procedimento de aplicar reparametrizações. Ênfase foi dada em modelos não lineares considerados em aplicações dentro das Ciências Agrárias. Uma lista com 17 modelos reparametrizados é fornecida. No primeiro estudo de caso, o nível de dano econômico da desfolha no algodoeiro foi avaliado com os seguintes objetivos: 1) propor uma parametrização de modelo que representasse o nível de dano econômico, 2) avaliar parametrizações alternativas por meio de suas propriedades, onde considerando medidas de não linearidade, 3) aplicar inferência baseada em verossimilhança, 4) selecionar um modelo para descrever a relação entre produção e desfolha do algodoeiro em função do estágio fenológico. O modelo reparametrizado apresentou melhores propriedades nos estágios fenológicos com pronunciada relação não linear. No restante, as medidas de curvatura, as correlações dos estimadores e os gráficos de perfil de verossimilhança indicaram que um sub-modelo deveria ser considerado. No segundo estudo de caso, objetiva-se verificar o efeito da posição de amostragem e profundidade do solo sobre os parâmetros I (*inflation*) e S (*slope*) da curva de retenção de água do solo. Para isso 1) considerou-se ANOVA simples e 2) ANOVA ponderada pela variância das estimativas desses parâmetros em cada unidade experimental em comparação com 3) o uso de modelos não lineares de efeitos mistos em uma parametrização desenvolvida. Nenhum dos métodos alternativos de análise foi superior ao modelo não linear de efeitos mistos na parametrização desenvolvida, que apresentou intervalos de confiança mais estreitos para os parâmetros e apontou efeito de posição e profundidade de coleta.

Palavras-chave: Verossimilhança. Método delta. Medidas de curvatura. Efeitos mistos. van Genuchten.

GENERAL ABSTRACT

One of the advantages of the nonlinear regression models is to have interpretable parameters. In many instances, the parameters of interest, expressed as a function of the model parameters, are quantities subject to investigation. Then comes the concern of how to make inferences about them. For this, the delta method, the Monte Carlo simulation and bootstrap procedures are common alternatives. In addition, a reparametrization can be applied to the model in order to represent these parameters of interest into the model. In addition to improving the interpretation of the presence of the target parameter extends the possibilities regarding the specification of models and statistical inference. The aim of this work is to systematize the procedure to apply reparametrizations. Emphasis was given on nonlinear models considered in applications within the Agricultural Sciences. A list with 17 models reparametrized is provided. In the first case study, the threshold level of defoliation on cotton was evaluated with the following objectives: 1) to propose a model parameter that represents the level of economic damage, 2) evaluate alternative parameterizations through its properties, which considering measures of nonlinearity, 3) apply inference based on likelihood, 4) select a model to describe the relationship between yield and defoliation of cotton in each phenological stage. The reparametrized model showed better properties in phenological stages with pronounced nonlinear relationship. Otherwise the measures of curvature, the correlations of the estimators and likelihood profile plots indicated that a sub-model should be considered. In the second case study, the objective is to verify the effect of sampling position and soil depth on the parameters *I* (*inflection*) and *S* (*slope*) of the soil water retention curve. For that 1) it was considered ANOVA and 2) weighted ANOVA in each experimental unit compared to 3) using nonlinear mixed effects on a parameterization developed. None of the alternative methods of analysis was superior to model nonlinear mixed effects in the parameterization developed, which had narrower confidence intervals for the parameters and pointed sampling position and depth effect.

Keywords: Likelihood. Delta method. Curvature measures. Mixed effects. van Genuchten.

SUMÁRIO

	CAPÍTULO 1 Procedimento para obter parametrizações interpretáveis em modelos não lineares	14
1	INTRODUÇÃO	16
2	REPARAMETRIZAÇÃO	18
2.1	Reparametrização 1:1 - Modelos para acúmulo com ênfase na fração do total	19
2.2	Outros modelos	19
3	ESTIMAÇÃO	23
3.1	Verossimilhança	23
3.2	Método delta	24
4	CONSIDERAÇÕES FINAIS	25
	REFERÊNCIAS	26
	CAPÍTULO 2 Modelo não linear para o nível de dano econômico da desfolha no algodoeiro	27
1	INTRODUÇÃO	29
2	MODELO	30
3	MATERIAL E MÉTODOS	31
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	33
5	CONCLUSÕES	34
	REFERÊNCIAS	35

	ANEXOS	36
	CAPÍTULO 3 Parametrização do modelo van Genuchten para inferência sobre os parâmetros S e I	41
1	INTRODUÇÃO	43
2	RETENÇÃO DE ÁGUA E TAMANHO DE POROS	44
3	MATERIAL E MÉTODOS.	45
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	47
5	CONCLUSÕES	49
	REFERÊNCIAS.	50
	ANEXOS	51

CAPÍTULO 1 PROCEDIMENTO PARA OBTER PARAMETRIZAÇÕES INTERPRETÁVEIS EM MODELOS NÃO LINEARES

RESUMO

Modelos de regressão não linear são considerados quando existe algum conhecimento preliminar sobre a relação entre variáveis. Tal conhecimento pode ser a respeito da própria natureza dos dados, uma equação diferencial e até mesmo a forma do diagrama de dispersão entre as variáveis. Em geral, seus parâmetros têm interpretação. Além disso, parâmetros de interesse, expressos como função dos parâmetros do modelo, são alvos de investigação. Para isso, o método delta, simulação Monte Carlo e procedimentos bootstrap são procedimentos adotados para fazer inferência. Além disso, uma reparametrização pode ser aplicada ao modelo de forma a representar esses parâmetros de interesse. Além de melhorar a interpretação do modelo, a presença do parâmetro alvo estende as possibilidades com relação a especificação de modelos e inferência estatística. O objetivo com esse trabalho é sistematizar o procedimento de aplicar reparametrizações. Ênfase é dada em modelos não lineares considerados em Ciências Agrárias. Uma lista com 17 modelos reparametrizados é fornecida. Breve discussão sobre os métodos de inferência é feita.

Palavras-chave: Função de parâmetros. Interpretação de parâmetros. Verossimilhança. Método delta. Curvatura.

ABSTRACT

Nonlinear regression models are considered when there is some prior knowledge of the relationship between variables. Such knowledge can be about the nature of the data, a differential equation, and even the shape of the scatter diagram between the variables. In general, the parameters have an interpretation. Furthermore, parameters of interest, expressed as a function of the model parameters, are targets of investigation. For this, the delta method, Monte Carlo simulation and bootstrap procedures are procedures used to make inferences. In addition, a reparametrization can be applied to the model to represent the parameters of interest. In addition to improving the interpretation of the model, the presence of the target parameter extends the possibilities regarding the specification of models and statistical inference. The aim of this work is to systematize the procedure to apply reparametrizações. Emphasis is on nonlinear models considered in Agricultural Sciences. A list with 17 models reparametrized is provided. Brief discussion on the methods of inference is made.

Key-words: Function of parameters. Parameter interpretation. Likelihood. Delta Method. Curvature.

1 INTRODUÇÃO

A ideia básica da regressão não linear é a mesma da regressão linear: relacionar uma resposta Y com um vetor de variáveis preditoras $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_k)^\top$. Os modelos de regressão não linear são caracterizados pelo fato de a função de predição depender não linearmente de algum dos parâmetros. Embora não necessariamente, a regressão linear é usada para especificação de modelos puramente empíricos, enquanto que os modelos de regressão não linear são considerados quando existe algum conhecimento prévio para sustentar que a relação entre resposta e preditores segue uma particular forma funcional. Tal conhecimento pode ser desde uma equação diferencial que remete à particular modelo, como é o caso de modelos de crescimento, ou simplesmente uma restrição sobre a função, como o de a função ser monótona, típico de curvas de acúmulo, para a qual pode-se ter várias funções disponíveis.

Uma das principais vantagens do modelo de regressão não linear, é que frequentemente existe interpretação para a maioria de seus parâmetros (SCHABENBERGER; PIERCE, 2002). Esses parâmetros então passam ser o foco da investigação que, na sua forma mais simples, consiste em determinar intervalos de confiança e testar hipóteses. No entanto, uma situação comum é a necessidade de fazer inferência sobre uma função dos parâmetros (BENDER, 1996). Um exemplo simples é a equação de segundo grau $f(x) = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2$, que é um modelo linear no qual o ponto crítico $x_c = -\beta_1/(2\beta_2)$ é alvo de inferência em situações de otimização de processos (BAS; BOYACI, 2007). Uma vez estimados seus parâmetros, inferência sobre x_c pode ser feita pelo método delta, por simulação Monte Carlo ou por métodos *bootstrap* (SEBER; WILD, 2003). Embora tais procedimentos permitam obter intervalos de confiança e conduzir testes de hipótese, existem

ainda outras formas vantajosas de inferir ou modelar o parâmetro que são as extensões ligadas aos modelos não lineares de efeitos mistos (PINHEIRO; BATES, 2000) e a inferência bayesiana (DENISON et al., 2002).

2 REPARAMETRIZAÇÃO

Considere um modelo não linear

$$f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) \quad (2.1)$$

em que f é uma função não linear que depende do vetor de covariáveis \mathbf{x} e $\boldsymbol{\theta}$ é seu vetor de p parâmetros. Seja $\vartheta = g(\boldsymbol{\theta})$ o parâmetro de interesse em que g é uma função monótona e diferenciável em relação a $\boldsymbol{\theta}$. O objetivo com a reparametrização é fazer com que ϑ seja um elemento do vetor de parâmetros do modelo. Isso é obtido por substituição de algum dos p elementos de $\boldsymbol{\theta}$ por ϑ . Para isso, sistematizou-se o procedimento em três etapas:

1. Expressar o parâmetro de interesse como função dos elementos de $\boldsymbol{\theta}$, ou seja, $\vartheta = g(\boldsymbol{\theta})$;
2. Escolher um dos elementos θ_i de $\boldsymbol{\theta} = (\theta_i, \boldsymbol{\theta}_{-i})$ para ser colocado em função de ϑ de tal forma a obter $\theta_i = h(\boldsymbol{\theta}_{-i}, \vartheta)$;
3. Substituir θ_i em (2.1) pela expressão obtida no passo anterior, $h(\boldsymbol{\theta}_{-i}, \vartheta)$, fazendo as simplificações convenientes. Assim o modelo (2.1) pode ser expresso como

$$f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}_{-i}, \vartheta)$$

A função h é a inversa de g em θ_i .

No passo 2 recomenda-se priorizar aquele elemento de $\boldsymbol{\theta}$ com menor

2.1 Reparametrização 1:1 - Modelos para acúmulo com ênfase na fração do total

O modelo Michaelis-Menten foi inicialmente proposto para descrever a cinética de reações químicas (MICHAELIS; MENTEN, 1913). Tal modelo envolve uma função monótona crescente côncava a partir da origem. Atualmente observa-se a aplicação desse modelo em diversos contextos; um deles é a descrição do acúmulo de potássio liberado do solo (ZEVIANI et al., 2012). Sua forma funcional é

$$f(x; \theta_a, \theta_v) = \frac{\theta_a x}{\theta_v + x}, \quad x \geq 0 \text{ (X)}, \quad (2.2)$$

em que $\theta_a \geq 0$, é a assíntota superior (Y) e representa o conteúdo total de nutriente liberado, e $\theta_v > 0$ é tempo de meia vida (X) ou tempo para fração meio.

2.2 Outros modelos

Além dos modelos considerados para exemplificar o procedimento de reparametrização, outros modelos frequentemente aplicados em Ciências Agrárias foram reparametrizados e estão apresentados nas tabelas de 1 à 3. A descrição de cada modelo, em termos de propriedades da função não linear, interpretação dos parâmetros é fornecida a seguir em uma lista numerada de acordo com as linhas das tabelas de 1 a 3.

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

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

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

id	Modelo original	$\vartheta = g(\theta)$	$\theta_i = g^{-1}(\vartheta, \theta_{-i})$	Modelo reparametrizado
9	$\begin{cases} \theta_0 + \theta_1 x & , x \leq \theta_b \\ \theta_0 + \theta_1 \theta_b & , x > \theta_b \end{cases}$	$\vartheta_b = \theta_0 + \theta_1 \theta_b$	$\theta_0 = \vartheta_b - \theta_1 \theta_b$	$\begin{cases} \vartheta_b + \theta_1(x - \theta_b) & , x \leq \theta_b \\ \vartheta_b & , x > \theta_b \end{cases}$
10	$\begin{cases} \theta_0 + \theta_1 x & , x \leq \theta_b \\ \theta_0 + \theta_1 \theta_b + \theta_2(x - \theta_b) & , x > \theta_b \end{cases}$	$\vartheta_b = \theta_0 + \theta_1 \theta_b$	$\theta_0 = \vartheta_b - \theta_1 \theta_b$	$\begin{cases} \vartheta_b + \theta_1(x - \theta_b) & , x \leq \theta_b \\ \vartheta_b + \theta_2(x - \theta_b) & , x > \theta_b \end{cases}$
11	$\theta_0 + \theta_1 x + \theta_2 x^2$	$\vartheta_x = -\frac{\theta_1}{2\theta_2}$	$\theta_1 = 2\theta_2 \vartheta_x$	$\vartheta_y + \theta_2(x - \vartheta_x)^2$
12	$\begin{cases} \theta_0 + \theta_1 x + \theta_2 x^2, & x \leq -\theta_1/(2\theta_2) \\ \theta_0 + \theta_1 \left(\frac{-\theta_1}{2\theta_2}\right) + \theta_2 \left(\frac{-\theta_1}{2\theta_2}\right)^2, & x > -\theta_1/(2\theta_2) \end{cases}$	$\vartheta_y = \theta_0 + \theta_1 \vartheta_x + \theta_2 \vartheta_x^2$ $\vartheta_x = -\frac{\theta_1}{2\theta_2}$	$\theta_0 = \vartheta_y - \theta_1 \vartheta_x - \theta_2 \vartheta_x^2$ $\theta_1 = 2\theta_2 \vartheta_x$	$\begin{cases} \vartheta_y + \theta_2(x - \vartheta_x)^2 & , x \leq \vartheta_x \\ \vartheta_y & , x > \vartheta_x \end{cases}$
13	$x(\theta_0 + \theta_1 x)^{-1/\theta_2}$	$\vartheta_x = \frac{\theta_0}{\theta_1} \left(\frac{\theta_2}{1 - \theta_2} \right)^{1/\theta_2}$ $\vartheta_y = \vartheta_x \left(\frac{1 - \theta_2}{\theta_0} \right)^{1/\theta_2}$ $\vartheta_x = \theta_1 / \theta_2$	$\theta_1 = \frac{\theta_0}{\vartheta_x} \left(\frac{\theta_2}{-1\theta_2} \right)^{-\theta_2}$ $\theta_0 = (1 - \theta_2) \left(\frac{\vartheta_y}{\vartheta_x} \right)^{-\theta_2}$ $\theta_1 = \theta_2 \vartheta_x$	$\vartheta_y \frac{x}{\vartheta_x} \left(1 - \theta_2 \left(1 - \frac{x}{\vartheta_x} \right) \right)^{-1/\theta_2}$ $\vartheta_y \left(\frac{x}{\vartheta_x} \right)^{\theta_1} \exp\{\theta_1(1 - x/\vartheta_x)\}$
14	$\theta_0 x^{\theta_1} \exp\{-\theta_2 x\}$	$\vartheta_y = \theta_0(\theta_1/\theta_2) \exp\{-\theta_1\}$ $\vartheta_p = \theta_2^{(\theta_1+1)}$	$\theta_0 = \vartheta_y \left(\frac{1}{\vartheta_x} \right)^{\theta_1} \exp(\theta_1)$ $\theta_2 = \vartheta_p^{-1/(\theta_1+1)}$	$\vartheta_1 : \vartheta_1 - \vartheta_x \vartheta_p^{-1/(\theta_1+1)}$

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

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

3 ESTIMAÇÃO

Nessa seção será feita uma discussão sobre inferência sobre parâmetros em modelos de regressão não linear. A inferência baseada em verossimilhança será discutida, bem como inferência baseada na sua aproximação quadrática. Por fim, uma revisão do método delta será apresentada.

3.1 Verossimilhança

Seja $f(x, \theta)$ um modelo de regressão não linear considerado para descrever a média de uma variável aleatória Y . Considere que Y tenha distribuição normal com variância constante σ^2 . Resumidamente, podemos escrever esse modelo como

$$Y \sim \text{Normal}(\mu(x), \sigma^2)$$

$$\mu(x) = f(x, \theta).$$

A função de verossimilhança do modelo é dada por

$$L(\theta, \sigma^2) = \prod_{i=1}^n \phi(y_i, f(x_i, \theta), \sigma^2), \quad (3.1)$$

em que ϕ representa a função densidade da distribuição Normal. O estimador de máxima verossimilhança são os valores $(\hat{\theta}, \hat{\sigma}^2)$ que tornam máximo o valor de L . Para estimação, é conveniente trabalhar com o logaritmo da função de verossimilhança

$$\ell(\theta, \sigma^2) = \log L(\theta, \sigma^2). \quad (3.2)$$

3.2 Método delta

O método delta é usado para aproximar a média e a variância de funções não lineares de variáveis aleatórias. Dentre suas aplicações, uma das mais comuns é relacionada à inferência sobre funções de parâmetros em modelos de regressão, como a razão entre parâmetros, transformação de um parâmetro, ou valor predito pelo modelo. Exemplos de funções de parâmetros estão na terceira coluna das tabelas 1 à 3.

4 CONSIDERAÇÕES FINAIS

A conclusão que se antecipa é que, uma vez que é possível reparametrizar o modelo para o parâmetro de interesse, inferência baseada na verossimilhança deve ser considerada, em segundo, sua aproximação quadrática, visto a capacidade de modelagem permitida por tais abordagens. Além do mais, as parametrizações devem ser avaliadas, seja por meio de medidas de curvatura, gráficos de perfil ou simulação, e deve ser escolhida àquela que tenha melhor compromisso entre propriedades estatísticas e de interpretação.

REFERÊNCIAS

- BAS, D.; BOYACI, I. H. Modeling and optimization I: Usability of response surface methodology. **Journal of Food Engineering**, v. 78, n. 3, p. 836–845, fev. 2007.
- BENDER, R. Calculating confidence intervals for summary measures of individual curves via nonlinear regression models. **International Journal of Bio-Medical Computing**, v. 41, n. 1, p. 13–18, mar. 1996.
- DENISON, D. G. T. et al. **Bayesian Methods for Nonlinear Classification and Regression**. 1. ed. [S.l.]: Wiley, 2002. 296 p.
- MICHAELIS, L.; MENTEN, M. Die kinetik der invertinwirkung. **Biochemische zeitung**, v. 49, p. 333–369, fev. 1913.
- PINHEIRO, J.; BATES, D. **Mixed-effects models in S and S-plus**. 1. ed. New York: Springer, 2000. 548 p.
- SCHABENBERGER, O.; PIERCE, F. J. **Contemporary statistical models for the plant and soil Sciences**. 1. ed. Boca Raton: CRC Press, 2002. 738 p.
- SEBER, G. A. F.; WILD, C. J. **Nonlinear Regression**. Hoboken: Wiley, 2003. 752 p.
- ZEVIANI, W. M. et al. Modelos não lineares para a liberação de potássio de esterco animal em latossolos. **Ciência Rural**, v. 42, n. 10, p. 1789–1796, out. 2012.

CAPÍTULO 2 MODELO NÃO LINEAR PARA O NÍVEL DE DANO ECONÔMICO DA DESFOLHA NO ALGODOEIRO

RESUMO

O efeito da desfolha sobre a qualidade e produtividade das culturas é informação fundamental para definir estratégias de manejo, como intensidade e frequência de pastejo e colheita até o estabelecimento de níveis de dano econômico de forma a auxiliar decisões sobre o controle de pragas desfolhadoras. Para a cultura do algodão, assim como para outras tantas, a redução da produção pela desfolha pode ser representada por uma função não linear monótona não crescente. Diversos modelos podem satisfazer essa restrição, no entanto, existe a preocupação de inferir sobre o nível de dano econômico, ϑ_q , pelo ajuste de um modelo. Dados de produção-desfolha do algodoeiro em função do estágio fenológico são considerados para inferir sobre o nível de dano econômico com os seguintes objetivos: 1) propor uma parametrização de modelo que representasse o parâmetro, 2) avaliar parametrizações alternativas por meio de medidas de não linearidade, 3) aplicar inferência baseada em verossimilhança, 4) selecionar um modelo para descrever a relação entre produção e desfolha do algodoeiro em função do estágio fenológico. O modelo reparametrizado apresentou menores medidas de não linearidade nos estágios fenológicos com pronunciada relação não linear. Nos restantes, as medidas de curvatura, as correlações dos estimadores e os gráficos de perfil de verossimilhança indicaram que um sub-modelo deveria ser considerado.

Palavras-chave: Interpretação de parâmetros. Verossimilhança. Método delta. Curvatura. *Gossypium hirsutum*.

ABSTRACT

The effect of defoliation on the quality and productivity of crops is essential information to define management strategies, such as intensity and frequency of grazing and harvesting and the establishment of economic threshold in order to aid decisions about controlling defoliating pests. For the cotton, as well as many others crops, reduction of production by defoliation can be represented by a nonincreasing monotone function. Several models can satisfy this restriction, however, there is concern about inferring the economic damage level, ϑ_q , by adjusting a model. Yield-defoliation data of cotton due to the phenological stage are considered to infer about the economic damage level with the following objectives: 1) to propose a model that represents the parameter ϑ_q , 2) evaluate alternative parameterizations through measures of nonlinearity, 3) apply inference based on likelihood, 4) select a model to describe the relationship between yield and defoliation of cotton in each phenological stage. The reparametrized model had lower measures of nonlinearity in phenological stages with pronounced nonlinear relationship. In the others, the measures of curvature, the correlations of the estimators and likelihood profile plots indicated that a sub-model should be considered.

Key-words: Parameter interpretation. Likelihood. Delta method. Curvature. *Gossypium hirsutum*.

1 INTRODUÇÃO

Em condições de campo, as culturas estão sujeitas à perdas de área foliar por diferentes causas, dentre elas o pastejo e a colheita periódica das folhas, o ataque de insetos desfolhadores e de doenças que causam sua queda ou necrose, as chuvas de granizo e a própria senescência natural são as mais frequentes. Uma desfolha significativa reduz o potencial fotossintético e, dependendo da intensidade e fase de crescimento da planta, ocasiona prejuízos à produção (PAINTER; DETLING, 1981; KLUBERTANZ et al., 1996). Algumas doenças e pragas, fitotoxicidade de pesticidas ou adubos, granizo e certas injúrias mecânicas são eventos comuns que causam desfolha em áreas de cultivo de algodão e que podem prejudicar a produção e qualidade do produto dessa cultura (SILVA et al., 2012).

2 MODELO

A relação monótona não crescente entre produção e desfolha é a informação preliminar considerada para elaborar um modelo. Dentre as funções matemáticas que atendem à essa imposição, tem-se o modelo potência, chamado de modelo Herschel-Bulkley por Cheng et al. (1992), como opção,

$$f(x) = \theta_0 - \theta_1 x^{\theta_2}, \quad x \geq 0. \quad (2.1)$$

A desfolha, x (adimensional), assume valores entre 0 e 1. A produção normal, com unidade de medida representada por Y , prevista sem haver desfolha é representada pelo parâmetro θ_0 (Y), ou seja, $f(0) = \theta_0$. A redução na produção normal ao ocorrer uma desfolha total é $\theta_1 \geq 0$, ou seja, $f(0) - f(1) = \theta_1$. O parâmetro adimensional $\theta_2 > 0$ é um parâmetro de forma dessa relação, que é côncava se $\theta_2 > 1$, convexa se $0 < \theta_2 < 1$ e linear se $\theta_2 = 1$. É conveniente reescrever o modelo considerando a transformação $\theta_2 = \exp\{\theta_c\}$ uma vez que a função exponencial é positiva e que isso não compromete a interpretação do modelo em θ_2 que é apenas um parâmetro de forma. Dessa forma,

$$f(x) = \theta_0 - \theta_1 x^{\exp\{\theta_c\}}, \quad x \geq 0, \quad (2.2)$$

é uma função côncava para $\theta_c > 0$, convexa para $\theta_c < 0$ e linear quando $\theta_c = 0$ (Figura ??).

3 MATERIAL E MÉTODOS

Os dados considerados para ajuste do modelo são de um experimento, em casa de vegetação, com a cultura do algodão (*Gossypium hirsutum*). As unidades experimentais foram 2 plantas por vaso para registro da produção total de pluma com caroço (g). Os fatores estudados foram o nível de desfolha artificial (0, 25, 50, 75 e 100%), feita com tesoura em cada uma das folhas da planta conforme tais níveis, combinados com o estágio fenológico no qual a desfolha foi realizada (vegetativo, presença de botão floral, florescimento, presença de maçã e presença de capulho). O delineamento completamente ao acaso foi utilizado com cinco repetições, perfazendo $5 \times 5 \times 5 = 125$ unidades experimentais. O experimento foi realizado nas dependências da Universidade Federal de Grande Dourados no ano agrícola de 2007. Mais informações disponíveis em Silva et al. (2012). Na Figura 1 tem-se o diagrama de dispersão dos valores observados de peso de capulhos

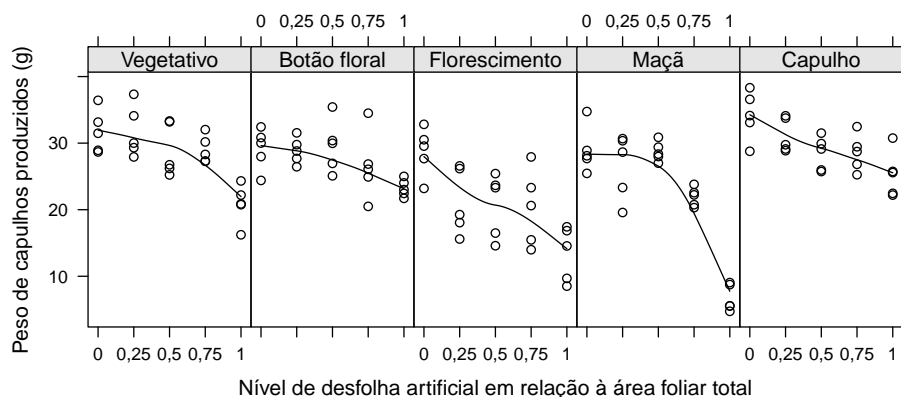


Figura 1 Peso de capulhos produzidos (g) em cada estágio fenológico como função dos níveis de desfolha artificial. Curvas suaves entre os pontos representam as tendências centrais

produzidos (g) em cada estágio fenológico como função dos níveis de desfolha.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os ajustes dos modelos aos dados convergiram para os cinco estágios fenológicos, considerando o máximo de 50 interações. Valores iniciais baseados na inspeção do diagrama de dispersão foram considerados (Figura 1). As estimativas dos parâmetros comuns, θ_0 e θ_1 , foram idênticas, em termos pontuais e intervalares, nas duas parametrizações, como de fato devem ser pois ambas parametrizações descrevem o mesmo modelo (Tabela ??). Percebeu-se um resultado alarmante para o estágio de florescimento, no qual os intervalos de confiança para θ_0 e θ_1 foram demasiado amplos, superando inclusive a amplitude média de variação dos dados, de aproximadamente 5 g para cima e para baixo, ao redor da curva de tendência.

5 CONCLUSÕES

O propósito da reparametrização foi representar o nível de dano econômico no modelo. As parametrizações foram comparadas com relação aos métodos disponíveis para fazer inferência sobre o nível de dano econômico. A inferência baseada em verossimilhança foi mais adequada no sentido de auxiliar a seleção de modelos. Além do mais, verificou-se que as medidas de curvatura e inspeção da matriz de covariâncias das estimativas também são úteis no processo de seleção de modelos. Nos estágios com pronunciada relação linear para produção-desfolha, o modelo reparametrizado apresentou melhores propriedades inferenciais. O algodoeiro responde de forma diferenciada à desfolha em cada estágio fenológico.

REFERÊNCIAS

- CHENG, R.; EVANS, B.; ILES, T. Embedded models in non-linear regression. **Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Methodological)**, v. 54, n. 3, p. 877–888, ago. 1992.
- KLUBERTANZ, T. H.; PEDIGO, L. P.; CARLSON, R. E. Soybean physiology, regrowth, and senescence in response to defoliation. **Agronomy Journal**, American Society of Agronomy, v. 88, n. 4, p. 577, jul. 1996.
- PAINTER, E. L.; DETLING, J. K. Effects of defoliation on net photosynthesis and regrowth of western wheatgrass. **Journal of Range Management**, v. 34, n. 1, p. 68–71, jan. 1981.
- SILVA, A. M. et al. Impacto de diferentes níveis de desfolha artificial nos estádios fenológicos do algodoeiro. **Revista de Ciências Agrárias**, v. 35, n. 1, p. 163–172, jun. 2012.

ANEXOS

ANEXO A Código R reproduzível correspondente ao ajuste do modelo potência reparametrizado para inferência sobre o nível de dano econômico da desfolha no algodoeiro. Disponível online em: <http://www.leg.ufpr.br/~walmes/TESE/anexoDESF.R>

```
##=====
## Uma parametrização de um modelo não linear para inferência
## sobre o nível de dano econômico da desfolha no algodoeiro
##
##                               Walmes Marques Zeviani
##                               walmes@ufpr.br
##
##=====

##-----
## Definições da sessão.

require(lattice)
require(car)
require(bbmle)
require(plyr)
require(reshape)

##-----
## Carrega os dados.

url <- "http://www.leg.ufpr.br/~walmes/data/ZevianiTeseDESF.txt"
da <- read.table(url, header=TRUE, sep="\t")
da$estágio <- factor(da$estágio,
                    levels=c("Vegetativo", "Botão floral",
                             "Florescimento", "Maça", "Capulho"))

str(da)

##-----
## Visualiza os dados.

xyplot(peso~desfolha|estágio, data=da)

##-----
## Define funções que retornam F e H para obter medidas de
## curvatura.

## modelo potência original
m.0 <- deriv3(~theta0-theta1*x^exp(thetac),
              c("theta0", "theta1", "thetac"),
              function(x, theta0, theta1, thetac){ NULL })
```

```

## modelo potência reparametrizado para dano econômico
## valor de q=5, mudar se for o caso dentro da fórmula
m.DE <- deriv3(~theta0-theta1*x^((log(5)-log(theta1))/log(varthetaq)),
               c("theta0","theta1","varthetaq"),
               function(x, theta0, theta1, varthetaq){ NULL })

##-----
## Ajusta as parametrizações separado por estágio fenológico.

da.e <- split(da, f=da$estágio)
str(da.e)

a0 <- lapply(da.e, nls,
             formula=peso~m.0(desfolha+0.02,
                               theta0, theta1, thetac),
             start=list(theta0=30, theta1=8, thetac=1))
lapply(a0, summary)

aDE <- lapply(da.e, nls,
             formula=peso~m.DE(desfolha+0.02,
                                theta0, theta1, varthetaq),
             start=list(theta0=30, theta1=8, varthetaq=0.7))
lapply(aDE, summary)

##-----
## Medidas de curvatura.

lapply(a0, MASS::rms.curv)
lapply(aDE, MASS::rms.curv)

##-----
## Matriz de correlação entre estimativas

lapply(a0, function(m) cov2cor(vcov(m)))
lapply(aDE, function(m) cov2cor(vcov(m)))

##-----
## Inferência sobre o dano econômico pelo método delta.

B <- coef(a0[[1]])
W <- vcov(a0[[1]])
g <- "(5/theta1)^exp(-thetac)"

deltaMethod(object=B, g=g, vcov=W)

dm <- function(nlsobj){
  B <- coef(nlsobj); W <- vcov(nlsobj)
  dm <- unlist(deltaMethod(object=B, g=g, vcov=W))
  dm <- c(dm, lwr=dm[1]-1.96*dm[2], upr=dm[1]+1.96*dm[2])
  names(dm) <- gsub("\\.\\.", "", names(dm))
  return(dm)
}

```

```

}

varthetaq <- lapply(a0, dm)
varthetaq <- ldply(varthetaq)
varthetaq

##-----
## Funções de verossimilhança.

ll0 <- function(theta0, theta1, thetac, desfolha, peso){
  x <- desfolha+0.02; y <- peso
  ex <- theta0-theta1*x^exp(thetac)
  sd <- sqrt(crossprod(y-ex)/(length(ex)))
  ll <- sum(dnorm(y, mean=ex, sd=sd, log=TRUE))
  -ll
}

llDE <- function(theta0, theta1, varthetaq, desfolha, peso){
  x <- desfolha+0.02; y <- peso
  ex <- theta0-theta1*x^((log(5)-log(theta1))/log(varthetaq))
  sd <- sqrt(crossprod(y-ex)/(length(ex)))
  ll <- sum(dnorm(y, mean=ex, sd=sd, log=TRUE))
  -ll
}

##-----
## Ajuste dos modelos.

al0 <- alDE <- da.e
for(i in names(al0)){
  al0[[i]] <- mle2(minuslogl=ll0,
    start=as.list(coef(a0[[i]])),
    data=c(as.list(subset(da, estágio==i))),
    method="BFGS")
  alDE[[i]] <- mle2(minuslogl=llDE,
    start=as.list(coef(alDE[[i]])),
    data=c(as.list(subset(da, estágio==i))),
    method="BFGS")
}

##-----
## Estimativas e medidas de ajuste.

cbind(t(sapply(al0, coef)), t(sapply(alDE, coef)))
cbind(sapply(al0, logLik), sapply(alDE, logLik))

##-----

par(mfrow=c(5,3), mar=c(2.2,2.2,1,1))
lapply(al0, function(m) plot(profile(m, maxsteps=20)))
layout(1)

```



```
par(mfrow=c(5,3), mar=c(2.2,2.2,1,1))  
lapply(alDE, function(m) plot(profile(m, maxsteps=20)))  
layout(1)
```

```
##-----
```

ANEXO B Peso de capulhos produzido (g) ao final do ciclo a cada duas plantas de algodão em função do nível de desfolha artificial e estágio fenológico.

Estágio	Desfolha	Peso de capulhos produzido (g)				
Vegetativo	0,00	33,160	28,675	31,485	28,925	36,430
Vegetativo	0,25	34,105	30,010	37,338	27,930	29,320
Vegetativo	0,50	25,228	26,205	33,327	26,750	33,200
Vegetativo	0,75	30,180	27,306	27,277	28,305	32,030
Vegetativo	1,00	24,323	20,875	20,755	16,235	22,200
Botão floral	0,00	24,400	30,015	27,980	32,437	30,845
Botão floral	0,25	28,815	31,547	26,453	29,775	27,700
Botão floral	0,50	30,389	26,957	29,975	35,430	25,093
Botão floral	0,75	34,501	26,860	20,500	26,071	24,929
Botão floral	1,00	23,015	25,007	21,706	22,449	24,024
Florescimento	0,00	27,681	30,510	29,555	32,825	23,200
Florescimento	0,25	26,580	15,600	19,260	26,174	18,060
Florescimento	0,50	23,666	16,491	23,310	14,590	25,425
Florescimento	0,75	27,928	15,475	23,314	20,620	13,990
Florescimento	1,00	16,851	8,522	9,686	14,556	17,435
Maça	0,00	28,103	28,900	25,460	27,690	34,750
Maça	0,25	30,678	30,360	23,330	19,581	28,655
Maça	0,50	27,991	26,994	30,878	28,358	29,390
Maça	0,75	20,312	22,560	23,810	20,754	22,230
Maça	1,00	8,750	4,735	5,560	9,055	5,535
Capulho	0,00	34,140	28,777	36,580	38,320	33,100
Capulho	0,25	29,128	34,105	28,870	29,760	33,763
Capulho	0,50	29,122	25,970	25,735	29,930	31,510
Capulho	0,75	29,460	25,255	32,480	26,820	28,740
Capulho	1,00	22,460	25,750	30,760	22,200	25,575

CAPÍTULO 3 PARAMETRIZAÇÃO DO MODELO VAN GENUCHTEN PARA INFERÊNCIA SOBRE OS PARÂMETROS S E I

RESUMO

A água é indispensável para produção das culturas pois está envolvida no transporte de nutrientes, reações químicas, processos físicos e manutenção da vida do solo. O conhecimento sobre a curva de retenção de água (CRA) do solo é fundamental para estabelecer estratégias de manejo. A qualidade física do solo é dependente da CRA e os parâmetros I , tensão do ponto de inflexão da CRA, e S , taxa de variação no ponto de inflexão, considerados como indicadores da qualidade física, são parâmetros relacionados a medidas descritivas da distribuição do tamanho de poros do solo. Com este trabalho, objetiva-se verificar o efeito da posição de amostragem e profundidade do solo sobre os parâmetros I e S da CRA. Para isso 1) considerou-se ANOVA simples e 2) ANOVA ponderada pela variância das estimativas desses parâmetros em cada unidade experimental em comparação com 3) o uso de modelos não lineares de efeito misto em uma parametrização desenvolvida para I e S . Nenhum dos métodos alternativos de análise foi superior ao modelo não linear de efeitos mistos na parametrização desenvolvida, que apresentou intervalos mais estreitos para estimativas dos parâmetros e apontou efeito de posição e profundidade de coleta nos parâmetros I e S .

Palavras-chave: Reparametrização. Função de parâmetros. Método delta. Curva de retenção de água.

ABSTRACT

Water is essential for crop production because it is involved in the transport of nutrients, chemical reactions and physical processes maintaining the soil life. The knowledge about the water retention curve (WRC) of the soil is important to establish management strategies. The physical quality of the soil is dependent on the WRC and the parameters I , the inflection point of the WRC, and S , the rate of change at the inflection point, considered as indicators of quality physical parameters are related to descriptive measures the pore size distribution of the soil. In this work, we aim to investigate the effect of sampling position and soil depth on the parameters I and S of the WRC. For that 1) it was considered ANOVA and 2) weighted ANOVA based on the variance of these estimates in each experimental unit compared to 3) using nonlinear mixed-effects in a parameterization developed for I and S . None of the alternative methods of analysis was superior to the nonlinear mixed effects model in the parameterization developed, which showed narrower intervals for parameter estimates and pointed sampling position and depth effect on parameters I and S .

Key-words: Reparametrization. Function of parameters. Delta method. Water retention curve.

1 INTRODUÇÃO

Água é indiscutivelmente o fator isolado mais importante, com possível exceção para luz solar e o ar que não têm disponibilidade limitada, para o desenvolvimento das plantas (CHESWORTH, 2007). A água presente no solo desempenha inúmeras funções de ordem química, física e biológica como, por exemplo, dissolver e transportar nutrientes para as plantas além de também ser considerada um nutriente (BRADY; WEIL, 2009). O excesso de água no solo pode diminuir ou impedir o desenvolvimento das plantas devido a uma reduzida aeração, enquanto deficiências podem causar estresse hídrico e, se severa o suficiente, o murchamento e morte da planta. Para uma produção eficiente, um fornecimento constante de água é necessário durante o ciclo da planta para atender as necessidades hídricas e promover a dissolução, transporte e absorção de nutrientes. O conteúdo de água também influencia a qualidade de operações de manejo do solo e colheita.

2 RETENÇÃO DE ÁGUA E TAMANHO DE POROS

Dada a relação que existe entre tamanho de poros e tensão matricial é possível chegar à distribuição de frequência de tamanho de poros quando o modelo Genuchten (1980) é usado para representar a CRA (REYNOLDS et al., 2002). Essa relação não pode ser considerada isoladamente pois fatores que alteram as propriedades da água de um solo para o outro a modificam, como a concentração de íons e a temperatura. Por outro lado, fixadas as demais variáveis, essa relação permite explorar a conexão existente entre a retenção de água e distribuição de tamanho de poros. Além do mais, a partir dessa relação, é possível verificar que o parâmetro S proposto por Dexter (2004) é o parâmetro de escala que representa o grau de dispersão de valores ao redor do tamanho modal de poros.

3 MATERIAL E MÉTODOS

Os dados considerados são medidas de conteúdo de água do solo ($\text{m}^3 \text{m}^{-3}$) em função do potencial matricial (kPa) coletados em campo sob cultura do café no qual se utilizam métodos conservacionistas e de manejo intensivo do solo (SERAFIM et al., 2011). Amostras de solo indeformadas foram coletadas de um solo classificado como Latossolo Vermelho distroférico (LVd) em uma lavoura com 3,5 anos de implantação.

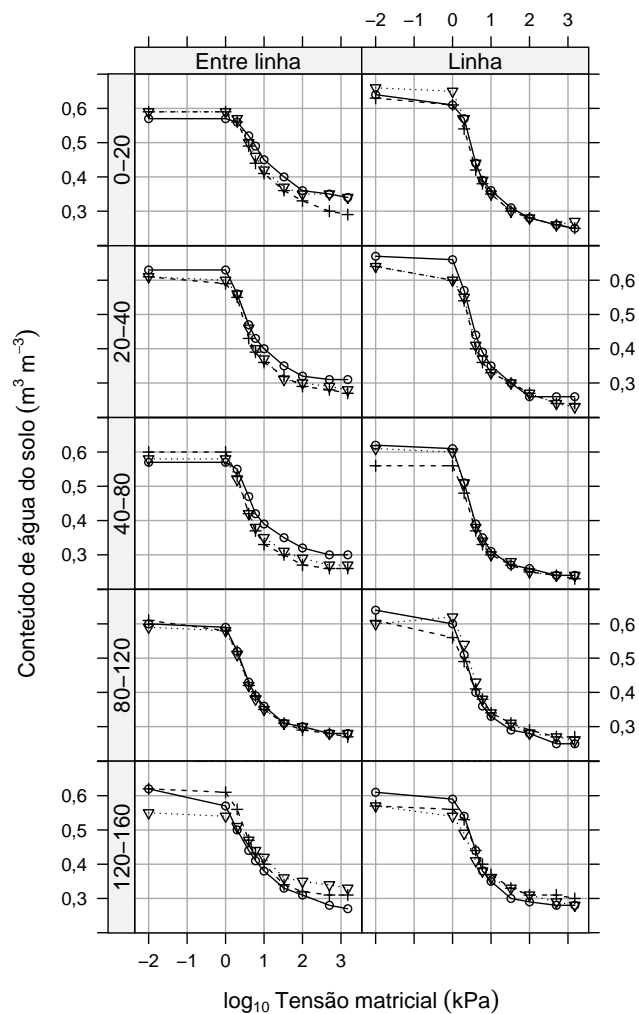


Figura 1 Conteúdo de água do solo ($\text{m}^3 \text{m}^{-3}$) em função do \log_{10} da tensão matricial (kPa) organizado pelas combinações entre posição (nas colunas) e profundidade de coleta (nas linhas). As três unidades experimentais em cada combinação foram identificadas pelos tipos de pontos e linhas

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Estimativas dos parâmetros foram obtidas para as 30 unidades experimentais sob as duas parametrizações do modelo van Genuchten. Os valores de R^2 apontaram boa medida de ajuste pois ficaram entre 98,96% e 99,88%. Pelas estimativas intervalares, considerando os seis parâmetros definidos pelas duas parametrizações, U_s , U_r , a , n , S e I , observamos variação entre unidades experimentais dentro de uma mesma cela experimental (combinação de posição e profundidade), entre níveis de profundidade e entre posições de amostragem (Figura 2). Verifica-se que os parâmetros U_r e n , por serem comuns as duas parametrizações, tiveram mesmas estimativas intervalares independentemente da parametrização.

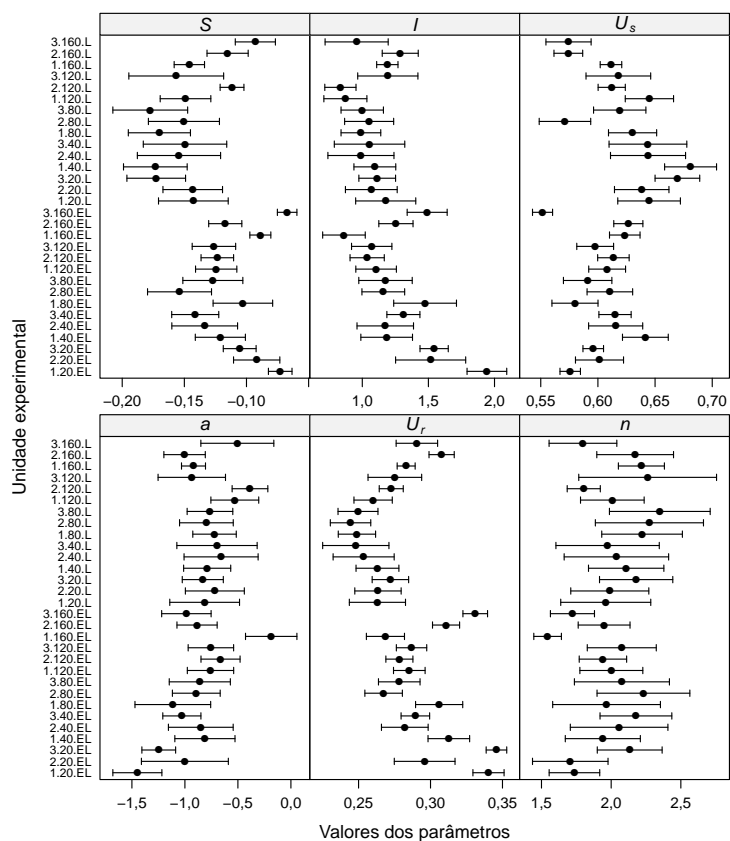


Figura 2 Estimativas intervalares (95%) pelo método de Wald para os parâmetros da CRA considerando as duas parametrizações do modelo van Genuchten. Os rótulos no eixo das coordenadas representam o índice da repetição, o nível de profundidade e o nível de posição, separados por ponto

5 CONCLUSÕES

Conclui-se que o modelo não linear de efeitos mistos é um método de análise mais adequado para representar os dados uma vez que toda informação está contida em um único modelo que permite acomodar os efeitos de termos fixos e aleatórios, comparar modelos e fazer previsões para a CRA.

REFERÊNCIAS

BRADY, N. C.; WEIL, R. R. **Elements of the nature and properties of soils**. 3 ed. ed. [S.l.]: Prentice Hall, 2009. 624 p.

CHESWORTH, W. (Ed.). **Encyclopedia of Soil Science (Encyclopedia of Earth Sciences Series)**. [S.l.]: Springer, 2007. 902 p.

DEXTER, A. Soil physical quality: Part I. Theory, effects of soil texture, density, and organic matter, and effects on root growth. **Geoderma**, v. 120, n. 3-4, p. 201–214, jun. 2004.

GENUCHTEN, M. T. van. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. **Soil Science Society of America Journal**, Soil Science Society of America, v. 44, n. 5, p. 892–898, maio 1980.

REYNOLDS, W. et al. Indicators of good soil physical quality: density and storage parameters. **Geoderma**, v. 110, n. 1-2, p. 131–146, nov. 2002.

SERAFIM, M. et al. Sistema conservacionista e de manejo intensivo do solo no cultivo de cafeeiros na região do alto São Francisco, MG: um estudo de caso. **Bioscience Journal**, v. 27, n. 6, p. 964–977, nov. 2011.

ANEXOS

ANEXO A Código R reproduzível correspondente ao ajuste do modelo van Genuchten reparametrizado. Disponível online em: <http://www.leg.ufpr.br/~walmes/TESE/anexoCRA.R>

```
##=====
## Uma parametrização do modelo van Genuchten para inferência
## sobre os parâmetros I e S.
##
##                                     Walmes Marques Zeviani
##                                     walmes@ufpr.br
##=====

##-----
## Definições da sessão.

require(lattice)
require(latticeExtra)
require(nlme)
require(car)
require(plyr)
require(reshape)

##-----
## Carrega os dados.

url <- "http://www.leg.ufpr.br/~walmes/data/ZevianiTeseCRA.txt"
cra <- read.table(url, header=TRUE, sep="\t")
cra$ltens <- log(cra$tens)
cra$ue <- with(cra, interaction(rep, PF, PS))
str(cra)

##-----
## Visualiza os dados.

xyplot(umid~ltens|PF*PS, groups=rep, data=cra)

##-----
## Define funções que retornam F e H para obter medidas de
## curvatura.

## modelo van Genuchten original, parametrização de Omuto 2007
vg.0 <- deriv3(~Ur+(Us-Ur)/(1+(exp(a)*exp(psi))^n)^(1-1/n),
               c("Ur","Us","a","n"),
               function(psi, Ur, Us, a, n){ NULL })
```

```

## modelo van Genuchten reparametrizado para S e I
vg.SI <- deriv3(~Ur-S*(1+1/(1-1/n))^(1-1/n)+1)/
  (n*(1+exp(n*(psi-I)))/(1-1/n))^(1-1/n)),
  c("Ur","S","I","n"),
  function(psi, Ur, S, I, n){ NULL })

##-----
## Ajusta as parametrizações por unidade experimental.

cra.ue <- split(cra, f=cra$ue)
str(cra.ue)

a0 <- lapply(cra.ue, nls,
  formula=umid~vg.0(ltens, Ur, Us, a, n),
  start=list(Ur=0.3, Us=0.6, a=0, n=1.5))
lapply(a0, summary)

aSI <- lapply(cra.ue, nls,
  formula=umid~vg.SI(ltens, Ur, S, I, n),
  start=list(Ur=0.3, S=-0.12, I=1.14, n=1.5))
lapply(aSI, summary)

##-----
## Medidas de curvatura.

lapply(a0, MASS::rms.curv)
lapply(aSI, MASS::rms.curv)

##-----
## Inferência sobre S e I pelo método delta.

B <- coef(a0[[1]])
W <- vcov(a0[[1]])
gS <- "-(Us-Ur)*n*(1+1/(1-1/n))^(1-1/n)-1"
gI <- "-a-log(1-1/n)/n"
deltaMethod(object=B, g=gS, vcov=W)
deltaMethod(object=B, g=gI, vcov=W)

dmSI <- function(nlsobj){
  B <- coef(nlsobj); W <- vcov(nlsobj)
  dmS <- unlist(deltaMethod(object=B, g=gS, vcov=W))
  dmI <- unlist(deltaMethod(object=B, g=gI, vcov=W))
  dmS <- c(dmS, lwr=dmS[1]-1.96*dmS[2], upr=dmS[1]+1.96*dmS[2])
  dmI <- c(dmI, lwr=dmI[1]-1.96*dmI[2], upr=dmI[1]+1.96*dmI[2])
  names(dmS) <- names(dmI) <- gsub("\\.*", "", names(dmS))
  return(data.frame(par=c("S","I"), rbind(dmS, dmI)))
}

vartheta <- lapply(a0, dmSI)
vartheta <- ldply(vartheta)
str(vartheta)

```

```

##-----
## Cria objeto de dados agrupados/longitudinais.

crag <- groupedData(umid~ltens|ue, data=cra)

##-----
## Ajuste do modelo não linear de efeitos mistos.
## van Genuchten original.

## Valores iniciais
start <- c(c(0.3, rep(0,9)), # Ur
           c(0.6, rep(0,9)), # Us
           c(0, rep(0,9)),   # a
           c(1.8, rep(0,9))) # n

## Completo
nlme0.0 <- nlme(umid~Ur+(Us-Ur)/(1+exp(a+ltens)^n)^(1-1/n),
               data=crag,
               fixed=Ur+Us+a+n~PF*PS,
               random=Ur+Us~1,
               start=start)

## Efeitos aleatórios independentes
nlme0.1 <- update(nlme0.0, random=pdDiag(Ur+Us~1))

## Efeito aditivo para o parâmetro n
nlme0.2 <- update(nlme0.0, fixed=list(Ur+Us+a~PF*PS, n~PF+PS),
                 start=start[1:36])

anova(nlme0.0, nlme0.1) # testa correlação nula
anova(nlme0.0, nlme0.2) # testa interação nula em n

anova(nlme0.0, type="marginal") # teste de Wald no ef fixos
VarCorr(nlme0.0)                # estimativas das variâncias

##-----
## Ajuste do modelo não linear de efeitos mistos.
## van Genuchten reparametrizado para S e I.

## Valores iniciais
start <- c(c(0.3, rep(0,9)), # Ur
           c(-0.1, rep(0,9)), # S
           c(1.6, rep(0,9)), # I
           c(1.8, rep(0,9))) # n

## Completo
nlmeSI.0 <- nlme(umid~Ur-S*(1+1/(1-1/n))^((1-1/n)+1)/
                (n*(1+exp(n*(ltens-I))/(1-1/n))^(1-1/n)),
                data=crag,
                fixed=Ur+S+I+n~PF*PS,
                random=Ur+S~1,
                start=start)

```

```

## Efeitos aleatórios independentes
nlmeSI.1 <- update(nlmeSI.0, random=pdDiag(Ur+S~1))

## Efeito aditivo para o parâmetro n
nlmeSI.2 <- update(nlmeSI.0, fixed=list(Ur+S+I~PF*PS, n~PF+PS),
                  start=start[1:36])

anova(nlmeSI.0, nlmeSI.1) # testa correlação nula
anova(nlmeSI.0, nlmeSI.2) # testa interação nula em n

anova(nlmeSI.0, type="marginal") # teste de Wald no ef fixos
VarCorr(nlmeSI.0)                # estimativas das variâncias

##-----
## Compara as verossimilhanças.

logLik(nlme0.0)
logLik(nlmeSI.0)

##-----
## Gráfico dos valores preditos.

plot(augPred(nlme0.0, level=0:1))
plot(augPred(nlmeSI.0, level=0:1))
plot(comparePred(nlme0.0, nlmeSI.0))

##-----
## sessionInfo()

## R version 2.15.3 (2013-03-01)
## Platform: i686-pc-linux-gnu (32-bit)

## [1] reshape_0.8.4      plyr_1.7.1          car_2.0-15
## [4] nnet_7.3-6          MASS_7.3-23         nlme_3.1-108
## [7] latticeExtra_0.6-24 RColorBrewer_1.0-5  lattice_0.20-13

##-----

```

ANEXO B Conteúdo de água do solo ($\text{m}^3 \text{ m}^{-3}$) em função da tensão matricial (kPa), da profundidade (cm) e da unidade experimental (UE) para amostras coletadas na entre linha.

Prof. (cm)	UE	Tensão matricial (kPa)									
		0,01	1	2	4	6	10	33	100	500	1500
0-20	1	0,57	0,57	0,56	0,52	0,49	0,45	0,40	0,36	0,35	0,34
0-20	2	0,59	0,59	0,56	0,49	0,44	0,41	0,36	0,33	0,30	0,29
0-20	3	0,59	0,59	0,57	0,50	0,46	0,42	0,37	0,35	0,35	0,34
20-40	1	0,63	0,63	0,56	0,47	0,43	0,40	0,35	0,32	0,31	0,31
20-40	2	0,61	0,59	0,55	0,43	0,39	0,36	0,32	0,29	0,28	0,27
20-40	3	0,61	0,60	0,56	0,46	0,40	0,37	0,31	0,30	0,29	0,28
40-80	1	0,57	0,57	0,55	0,47	0,42	0,39	0,35	0,32	0,30	0,30
40-80	2	0,60	0,60	0,53	0,42	0,37	0,33	0,30	0,27	0,26	0,26
40-80	3	0,58	0,58	0,52	0,42	0,38	0,35	0,31	0,29	0,27	0,27
80-120	1	0,60	0,59	0,52	0,43	0,39	0,36	0,31	0,30	0,28	0,28
80-120	2	0,61	0,58	0,52	0,42	0,39	0,35	0,31	0,29	0,28	0,27
80-120	3	0,59	0,58	0,51	0,42	0,38	0,35	0,31	0,30	0,28	0,28
120-160	1	0,62	0,57	0,50	0,44	0,41	0,38	0,33	0,31	0,28	0,27
120-160	2	0,62	0,61	0,56	0,47	0,43	0,40	0,34	0,32	0,31	0,31
120-160	3	0,55	0,54	0,51	0,47	0,44	0,42	0,36	0,35	0,34	0,33

Disponível online em <http://www.leg.ufpr.br/~walmes/data/ZevianiTeseCRA.txt>.

ANEXO C Conteúdo de água do solo ($\text{m}^3 \text{ m}^{-3}$) em função da tensão matricial (kPa), da profundidade (cm) e da unidade experimental (UE) para amostras coletadas na linha.

Prof. (cm)	UE	Tensão matricial (kPa)									
		0,01	1	2	4	6	10	33	100	500	1500
0-20	1	0,64	0,61	0,57	0,44	0,39	0,36	0,31	0,28	0,26	0,25
0-20	2	0,63	0,61	0,54	0,42	0,38	0,35	0,30	0,28	0,26	0,25
0-20	3	0,66	0,65	0,57	0,44	0,39	0,35	0,30	0,28	0,26	0,27
20-40	1	0,67	0,66	0,57	0,44	0,39	0,35	0,30	0,26	0,26	0,26
20-40	2	0,64	0,60	0,54	0,40	0,36	0,33	0,30	0,27	0,24	0,24
20-40	3	0,64	0,60	0,55	0,41	0,37	0,33	0,30	0,27	0,24	0,23
40-80	1	0,62	0,61	0,51	0,39	0,35	0,31	0,27	0,26	0,24	0,24
40-80	2	0,56	0,56	0,48	0,37	0,33	0,30	0,27	0,25	0,24	0,23
40-80	3	0,61	0,60	0,51	0,38	0,34	0,30	0,28	0,25	0,24	0,24
80-120	1	0,64	0,60	0,51	0,40	0,36	0,33	0,29	0,28	0,25	0,25
80-120	2	0,61	0,56	0,49	0,41	0,38	0,34	0,31	0,29	0,27	0,27
80-120	3	0,60	0,62	0,54	0,43	0,38	0,34	0,31	0,28	0,27	0,26
120-160	1	0,61	0,59	0,54	0,44	0,38	0,35	0,30	0,29	0,28	0,28
120-160	2	0,57	0,56	0,53	0,44	0,40	0,37	0,33	0,31	0,31	0,30
120-160	3	0,57	0,54	0,49	0,41	0,38	0,36	0,33	0,31	0,29	0,28

Disponível online em <http://www.leg.ufpr.br/~walmes/data/ZevianiTeseCRA.txt>.