

Catálogo Web Interativo de Modelos de Regressão Não Linear

Bruna Davies Wundervald Walmes Marques Zeviani

Universidade Federal do Paraná

Outubro de 2016

Sumário

[Introdução](#)

[Objetivos](#)

[Materiais e Métodos](#)

[O Catálogo](#)

[Resultados](#)

[Próximos Passos](#)

[Agradecimentos](#)

Introdução

- ▶ Modelos de regressão não linear são utilizados quando há um conhecimento prévio sobre a relação entre as variáveis de interesse.
- ▶ Eles associam uma variável dependente com uma ou mais variáveis explicativas.
- ▶ A relação funcional entre y e x ocorre através de uma função não linear nos parâmetros.
- ▶ Modelos não lineares nos parâmetros podem ter uma interpretação não trivial (difícil visualização).
- ▶ Difícil reconhecer a forma da função e como os parâmetros a influenciam.

Objetivos

- ▶ **Apresentar um catálogo web interativo de modelos não lineares.**
- ▶ Possibilitar ao usuário escolher qual modelo melhor se aplica aos seus dados.
- ▶ Apresentar recursos de manipulação de modelos (gráficos), com a alteração interativa de seus parâmetros.
- ▶ Introdução a materiais úteis, como a documentação histórica, propriedades e exemplos de aplicação dos modelos.

Materiais e Métodos

- ▶ Desenvolvido com o Software de Computação Estatística R (R Core Team, 2016).
- ▶ Shiny, ferramenta que permite a construção de aplicações para Web baseadas em JavaScript
- ▶ Disponível para acesso no servidor Shiny do LEG-UFPR.

O Catálogo

Catálogo de Modelos de Regressão Não Linear

Introdução

Modelos

Documentação

Referências



Source Code

Lista de Modelos

- Michaelis-Menten
- Michaelis-Menten Reparametrizado
- Extensão do Michaelis-Menten
- Modificação do Modelo Anterior
- Outra Extensão do Michaelis-Menten
- Exponencial Assintótico
- Exponencial Assintótico Reparametrizado
- Mitscherlich
- Mitscherlich Reparametrizado
- Herschel-Bulkley
- Herschel-Bulkley Reparametrizado
- Ratkowsky
- Parametrização alternativa do Ratkowsky
- Linear-Platô
- Linear-Platô Reparametrizado
- Bi-linear segmentado
- Bi-linear segmentado Reparametrizado
- Polinômio de segundo grau
- Polinômio de segundo grau Reparametrizado
- Quadrático-Platô
- Quadrático-Platô Reparametrizado
- Bleasdale-Nelder
- Bleasdale-Nelder Reparametrizado
- Gama Incompleto
- Gama Incompleto Reparametrizado
- Logístico
- Logístico Reparametrizado
- Gompertz
- Gompertz Reparametrizado
- Van Genuthen
- Van Genuthen Reparametrizado

Autores:

[Bruna Wundervald](#), PET- Estatística UFPR[Walmes Zeviani](#), Professor Doutor do Departamento de Estatística da UFPR

Descrição do projeto

Este projeto tem como objetivo apresentar um catálogo interativo de modelos não lineares. A ideia principal do catálogo é possibilitar ao usuário escolher qual modelo melhor se aplica aos seus dados. Isso se dá facilmente pois ele apresenta formas de manipulação e visualização destes modelos (gráficos), com a possibilidade de alteração interativa de seus parâmetros. Foram utilizados o software R, e o Shiny. Todo o conteúdo é disponibilizado online.

O projeto está sendo desenvolvido no [GitLab](#) do [C3SL](#) (Centro de Computação Científica e Software Livre), da Universidade Federal do Paraná. Sugestões de implementação, comentários e contribuições são bem vindas.

Catálogo de Modelos de Regressão Não Linear

Introdução

Modelos ▾

Documentação ▾

Referências



</> Source Code

Autores:

[Bruna Wundervald](#), PET- Estatística UFPR[Walmes Zeviani](#), Professor Doutor do Departamento de Estatística da UFPR

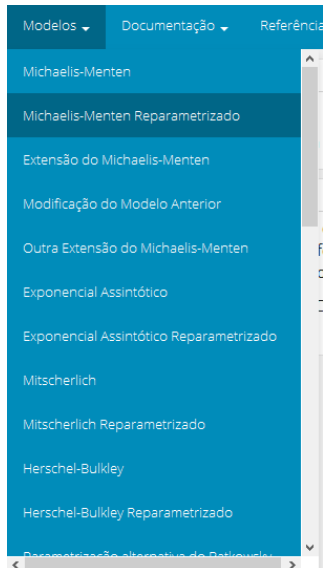
Descrição do projeto

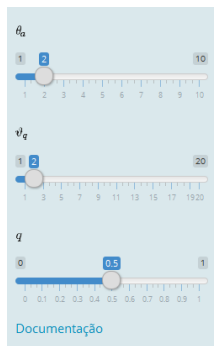
Este projeto tem como objetivo apresentar um catálogo interativo de modelos não lineares. A ideia principal do catálogo é possibilitar ao usuário escolher qual modelo melhor se aplica aos seus dados. Isso se dá facilmente pois ele apresenta formas de manipulação e visualização destes modelos (gráficos), com a possibilidade de alteração interativa de seus parâmetros. Foram utilizados o software R, e o Shiny. Todo o conteúdo é disponibilizado *online*.

O projeto está sendo desenvolvido no [GitLab do C3SL](#) (Centro de Computação Científica e Software Livre), da Universidade Federal do Paraná. Sugestões de implementação, comentários e contribuições são bem vindas.

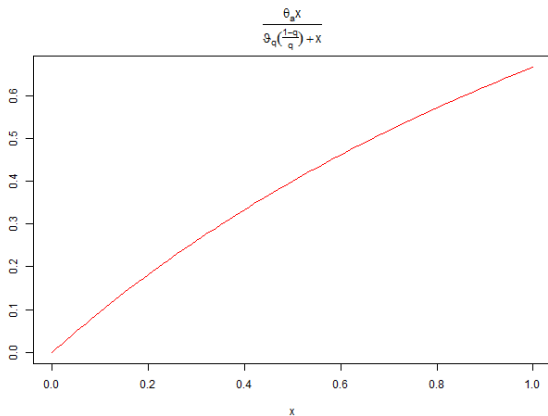
Lista de Modelos

- Michaelis-Menten
- Michaelis-Menten Reparametrizado
- Extensão do Michaelis-Menten
- Modificação do Modelo Anterior
- Outra Extensão do Michaelis-Menten
- Exponencial Assintótico
- Exponencial Assintótico Reparametrizado
- Mitscherlich
- Mitscherlich Reparametrizado
- Herschel-Bulkley
- Herschel-Bulkley Reparametrizado
- Ratkowsky
- Parametrização alternativa do Ratkowsky
- Linear-Platô
- Linear-Platô Reparametrizado
- Bi-linear segmentado
- Bi-linear segmentado Reparametrizado
- Polinômio de segundo grau
- Polinômio de segundo grau Reparametrizado
- Quadrático-Platô
- Quadrático-Platô Reparametrizado
- Bleasdale-Nelder
- Bleasdale-Nelder Reparametrizado
- Gama Incompleto
- Gama Incompleto Reparametrizado
- Logístico
- Logístico Reparametrizado
- Gompertz
- Gompertz Reparametrizado
- Van Genuchten
- Van Genuchten Reparametrizado





Gráfico



Descrição

O Michaelis-Menten é o modelo mais conhecido de cinética enzimática. Seu nome faz referência aos autores, o bioquímico Leonor Michaelis e o físico Maud Menten. É uma função não negativa, monótona e côncava, com o seguinte formato:

$$f(x) = \frac{\theta_a x}{\theta_v + x}$$

em que

- $x > 0$,
- $\theta_a \geq 0 (V)$ é a assíntota ($\lim_{x \rightarrow \infty} f(x) = \theta_a$),
- e $\theta_v > 0 (X)$ é o tempo de meia vida, correspondendo à abscissa para qual o valor da função vale $\frac{\theta_a}{2}$.

Aplicações

O modelo assume a forma de uma equação que descreve a taxa de reações enzimáticas, como a da Pepsina, Quimotripsina, Ribonuclease, etc. Também são encontradas na literatura aplicações em outros ramos da bioquímica, como o estudo da riqueza de espécies, medição de álcool no sangue, infecções por bacteriófagos, a relação entre fotossíntese e irradiância, etc.

Em reações enzimáticas, temos que x é a concentração do substrato, θ_a é a taxa máxima atingida pelo sistema na saturação máxima de x , e a constante θ_v é o valor de x em que a taxa de reação é metade de θ_a .

Primeira Reparametrização

A primeira parametrização alternativa (ZEVIANI et al., 2012) deste modelo apresentada no catálogo tem o formato:

$$f(x) = \frac{\theta_a x}{\vartheta_q \left(\frac{1-q}{q} \right) + x}$$

agora tendo

- $\vartheta_q \left(\frac{1-q}{q} \right) > 0(X)$ como o tempo de meia vida, correspondendo à abscissa para qual o valor da função vale $\frac{\theta_a}{2}$.

Nesta reparametrização, temos que $0 < q < 1$ é uma constante, representando uma fração de θ_a , para a qual $\vartheta_q > 0(X)$ é o valor correspondente na abscissa. Ou seja, ϑ_q é o tempo para uma certa fração q de vida.

Zeviani et al. (2012) consideraram este modelo em estudos sobre a liberação de potássio no solo a partir de fontes orgânicas incubadas em latossolos.

Segunda Reparametrização

Como uma segunda opção para o modelo Michaelis-Menten, Zeviani et al (2012) sugerem o seguinte:

$$f(x) = \frac{\theta_a x}{1 + \frac{1-q}{q} \left(\frac{\vartheta_q}{x} \right)^{\theta_c}}$$

e com isso

- $\theta_c > 0$ é incluído, sendo o parâmetro que controla a forma da função.

Se $0 < \theta_c < 1$, a função é côncava; se $\theta_c > 1$, ela tem formato sigmoidal, ou seja, apresenta ponto de inflexão; e se $\theta_c = 1$, retorna-se ao modelo Michaelis-Menten anterior.

Esta reparametrização pode ser aplicada na representação da produção de gases em ruminantes (Groot et al.(1996)) e no estudo do crescimento de bactérias em relação ao tempo (Becker et al. (2007)).

```
91 Michaelis-Menten {data-navmenu="Modelos"}
92 =====
93
94
95 Michaelis-Menten Reparametrizado {data-navmenu="Modelos"}
96 =====
97 Column {.sidebar}
98 -----
99 ```{r}
100     sliderInput("thA_1",
101                 HTML("$$ \\theta_a $$"),
102                 min = 1,
103                 max = 10,
104                 value = 2)
105     sliderInput("vthQ_1",
106                 HTML("$$ \\vartheta_q $$"),
107                 min = 1,
108                 max = 20,
109                 value = 2)
110     sliderInput("q_1",
111                 HTML("$$ q $$"),
112                 min = 0,
113                 max = 1,
114                 value = 0.5)
115     ...
116
117 [Documentação] (#Doc.-Michaelis-Menten)
```


Resultados

- ▶ Melhoria geral na visualização dos modelos.
- ▶ Disponibilização de uma coleção de visualização rápida de modelos, que ainda não existe sequer para as distribuições estatísticas mais comuns.
- ▶ A interatividade permite maior compreensão e acertividade ao escolher um modelo.
- ▶ Facilitação da compreensão de como eles funcionam.
- ▶ Aprimoramento também da habilidade de visualizar equações que não estarão presentes no catálogo.

Próximos Passos

- ▶ Apresentar o Catálogo em conferências científicas de Estatística.
- ▶ Construir aplicativos no mesmo formato com outros assuntos. Exemplo: *Catálogo de Distribuições de Probabilidade*.
- ▶ Gerar um módulo que permita o uso do catálogo de forma *offline*.

Agradecimentos

- ▶ C3SL - Centro de Computação Científica de Software Livre, da UFPR, pela disponibilização do GitLab.
- ▶ LEG - Laboratório de Estatística e Geoinformação, pela disponibilização do servidor Shiny.

Obrigada pela atenção!



PET-Estatística
UFPR