Universidade de São Paulo
Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz"

Modelagem de dados contínuos censurados, inflacionados de zeros

Vanderly Janeiro

Tese apresentada para obtenção do título de Doutor em Ciências. Área de concentração: Estatística e Experimentação Agronômica

Piracicaba
2010

Vanderly Janeiro
Licenciado em Matemática

Modelagem de dados contínuos censurados, inflacionados de zeros

Orientador:
Prof. Dr. **SILVIO SANDOVAL ZOCCHI**

Tese apresentada para obtenção do título de Doutor em Ciências. Área de concentração: Estatística e Experimentação Agronômica

Piracicaba
2010

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
DIVISÃO DE BIBLIOTECA E DOCUMENTAÇÃO - ESALQ/USP

Janeiro, Vanderly
Modelagem de dados contínuos censurados, inflacionados de zeros / Vanderly Janeiro. - - Piracicaba, 2010.
174 p. : il.

Tese (Doutorado) - - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", 2010.

1. Aflatoxinas 2. Dados censurados 3. Distribuições (Probabilidade) 4. Estatística aplicada 5. Modelagem de dados 6. Verossimilhança I. Título

CDD 519.532
J33m

DEDICATÓRIA

*À **Deus***

meu oxigênio.

Aos Meus pais,

Seu Mário e Dona Nair por todo apoio,

e meus professores de vida.

À Lu

por todo amor, carinho e paciência

dedicados a mim.

Aos meus irmãos Zé e Josi

por estarem na minha vida.

AGRADECIMENTOS

Acredito que a elaboração dessa tese é fruto de um esforço coletivo, cabendo a mim a sua digitação e alguns cabelos brancos. Muitos contribuíram para que este trabalho chegasse a esse ponto e muitos ainda contribuirão para sua continuidade. Quero que todos saibam da minha gratidão, entretanto me darei o direito de citar alguns nomes.

Ao meu orientador Prof. Silvio Sandoval Zocchi por ter acreditado em meu trabalho, pelas suas críticas, pelos seus questionamentos, pelo auxílio na construção de idéias e por possibilitar a conclusão desta tese.

À Prof.ª Clarice Garcia Borges Demétrio pelas contribuições oferecidas, que foram fundamentais no decorrer do trabalho.

Aos professores e colegas de trabalho do departamento de Estatística da Universidade Estadual de Maringá - UEM pelo incentivo, e por assumirem minha carga horária, permitindo assim que eu me afastasse e realizasse meus estudos. Em particular, à Prof.ª Terezinha Aparecida Guedes que me incentivou a prosseguir meus estudos, me conduzindo ao mestrado, às Professoras Isolde Terezinha S. Previdelli e Prof.ª Rosangela Getirana Santana por terem me recomendado à esse curso.

Aos professores e funcionários do departamento de Ciências Exatas da ESALQ/USP, pela amizade, incentivo e por estarem sempre de prontidão nos momentos que tive necessidade.

Ao pesquisador Dr. Eduardo Micotti da Glória do Laboratório de Micotoxinas do Departamento de Agroindústria, Alimentos e Nutrição da ESALQ/USP, por ter compartilhado o interesse na temática do estudo que abrange essa tese.

Desejo externar os meus agradecimentos a família da Lu, Cecilio Pereira dos Santos e Fernanda Claudia Afonso dos Santos (Cecilio e Fer), que me acolheram e sempre me incentivaram.

Aos amigos de sala de estudos e de cafezinho (fundamentais para diminuição do estresse), entre eles, Elizabeth Mie Hashimoto, Fernanda Bührer Rizzato, Juliana Betini Fachini, Marina Rodrigues Maestre, Raphael Antonio Prado Dias, Renata Alcarde, Simone Daniela Sartorio, Simone Silmara Werner.

Aos amigos de turma, Ana Alice Pilon, Angela Mello Coelho, Édila Cristina de Souza, Júlio Cesar Pereira, Lúcio Borges de Araújo, Sandra Vergara, Wilson Alves de Oliveira, que me permitiram participar de suas vidas.

Ao Prof. João Maurício Mota, por toda a presteza em fornecer orientações e ter o dom de ensinar.

Aos amigos que fiz em Piracicaba, pela convivência que, com toda certeza, foi imprescindível e será inesquecível.

SUMÁRIO

RESUMO

Modelagem de dados contínuos censurados, inflacionados de zeros

Muitos equipamentos utilizados para quantificar substâncias, como toxinas em alimentos, freqüentemente apresentam deficiências para quantificar quantidades baixas. Em tais casos, geralmente indicam a ausência da substância quando esta existe, mas está abaixo de um valor pequeno (ξ) predeterminado, produzindo valores iguais a zero não necessariamente verdadeiros. Em outros casos, detectam a presença da substância, mas são incapazes de quantificá-la quando a quantidade da substância está entre ξ e um valor limiar τ, conhecidos. Por outro lado, quantidades acima desse valor limiar são quantificadas de forma contínua, dando origem a uma variável aleatória contínua X cujo domínio pode ser escrito como a união dos intervalos, $[0, \xi)$, $[\xi, \tau]$ e (τ, ∞), sendo comum o excesso de valores iguais a zero. Neste trabalho, são propostos modelos que possibilitam discriminar a probabilidade de zeros verdadeiros, como o modelo de mistura com dois componentes, sendo um degenerado em zero e outro com distribuição contínua, sendo aqui consideradas as distribuições: exponencial, de Weibull e gama. Em seguida, para cada modelo, foram observadas suas características, propostos procedimentos para estimação de seus parâmetros e avaliados seus potenciais de ajuste por meio de métodos de simulação. Finalmente, a metodologia desenvolvida foi ilustrada por meio da modelagem de medidas de contaminação com aflatoxina B1, observadas em grãos de milho, de três subamostras de um lote de milho, analisados no Laboratório de Micotoxinas do Departamento de Agroindústria, Alimentos e Nutrição da ESALQ/USP. Como conclusões, na maioria dos casos, as simulações indicaram eficiência dos métodos propostos para as estimações dos parâmetros dos modelos, principalmente para a estimativa do parâmetro δ e do valor esperado, $\mathbb{E}(Y)$. A modelagem das medidas de aflatoxina, por sua vez, mostrou que os modelos propostos são adequados aos dados reais, sendo que o modelo de mistura com distribuição de Weibull, entretanto, ajustou-se melhor aos dados.

Palavras-chave: Máxima verossimilhança; Inflação de zeros; Modelos de mistura; Distribuição exponencial; Distribuição de Weibull; Distribuição gama; Aflatoxina

ABSTRACT

Modeling censored continuous data, zero inflated

Much equipment used to quantify substances, such as toxins in foods, is unable to measure low amounts. In cases where the substance exists, but in an amount below a small fixed value (ξ), the equipment usually indicates that the substance is not present, producing values equal to zero. In cases where the quantity is between ξ and a known threshold value τ, it detects the presence of the substance but is unable to measure the amount. When the substance exists in amounts above the threshold value τ, it is measure continuously, giving rise to a continuous random variable X whose domain can be written as the union of intervals, $[0, \xi)$, $[\xi, \tau]$ e (τ, ∞). This random variable commonly has an excess of zero values. In this work we propose models that can detect the probability of true zero, such as the mixture model with two components, one being degenerate at zero and the other with continuous distribution, where we considered the distributions: exponential, Weibull and gamma. Then, for each model, its characteristics were observed, procedures for estimating its parameters were proposed and its potential for adjustment by simulation methods was evaluated. Finally, the methodology was illustrated by modeling measures of contamination with aflatoxin B1, detected in grains of corn from three sub-samples of a batch of corn analyzed at the laboratory of of Mycotoxins, Department of Agribusiness, Food and Nutrition ESALQ/USP. In conclusion, in the majority of cases the simulations indicated that the proposed methods are efficient in estimating the parameters of the models, in particular for estimating the parameter δ and the expected value, $\mathbb{E}(Y)$. The modeling of measures of aflatoxin, in turn, showed that the proposed models are appropriate for the actual data, however the mixture model with a Weibull distribution fits the data best.

Keywords: Maximum likelihood; Zeros inflation; Mixture models; Exponential distribution; Weibull distribution; Gamma distribution; Aflatoxins

1 INTRODUÇÃO

Muitos equipamentos utilizados para quantificar substâncias possuem deficiências para quantificar quantidades baixas. Em tais casos, geralmente indicam a ausência da substância quando esta existe mas está abaixo de um valor pequeno (ξ) predeterminado, produzindo valores iguais a zero não necessariamente verdadeiros. Em outros casos, detectam a presença da substância mas são incapazes de quantificá-la quando a quantidade da substância está entre ξ e um valor limiar τ, conhecidos. Por outro lado, quantidades acima desse valor limiar são quantificadas de forma contínua, dando origem a uma variável aleatória contínua X cujo domínio pode ser escrito como a união dos intervalos, $[0, \xi)$, $[\xi, \tau]$ e (τ, ∞), sendo comum o excesso de valores iguais a zero.

Uma situação para a qual surgem variáveis com essa característica ocorre quando se faz a determinação da quantidade de micotoxinas em alimentos. As micotoxinas são compostos tóxicos e/ou cancerígenos produzidos por várias espécies de fungos que podem ser encontrados em grãos, tanto em campo aberto, como armazenados, sendo que índices elevados desses compostos podem levar à contaminação dos produtos agrícolas, resultando em queda de produtividade. Além disso, a ingestão de alguns tipos de micotoxinas, por animais e humanos pode levar a um quadro clínico grave denominado micotoxicose que consiste de alteração patológica e/ou funcional no organismo. Segundo Ferreira et al. (2006), mesmo a ingestão de níveis baixos de toxinas pode resultar em um quadro de suscetibilidade exarcebada a infecções.

Os problemas causados pela aflatoxina estão diretamente relacionados com o nível de contaminação do produto, o tempo e a quantidade de ração contaminada ingerida pelo animal e seu estado nutricional. Em níveis mais altos, podem acarretar atraso no crescimento, neoplasias, imunossupressão, teratogênese e hepatopatias agudas, subagudas e crônicas, sendo portanto, de importância fundamental avaliar e classificar um lote de produto a ser consumido quanto ao nível de contaminação. Para isso, necessita-se da utilização de uma distribuição de probabilidades para a variável quantidade de micotoxinas presente no lote, sendo que as comumente adotadas não levam em conta as quantidades não quantificadas, porém identificadas, de micotoxina, ou consideram essa quantidade como zero, inflacionando de zeros o conjunto de dados a ser tratado e criando zeros não verdadeiros.

Dada a gravidade das consequências à exposição às aflatoxinas, muitos países estabeleceram limites máximos legais de aflatoxinas em alimentos como os apresentados na Tabela 1, segundo levantamento realizado por Teixeira (2008) . Além dos apresentados nessa tabela, a Organização Mundial para a Alimentação e Agricultura (FAO), em 1995, verificou que quase 100 países regulavam o nível de aflatoxina em alimentos.

Tabela 1 – Níveis máximos permitidos para aflatoxinas em alimentos, em mg/kg = ppb, para consumo humano

País	Nível Máximo	Alimento	Fonte
União Européia	2 (B1); 4 (total)	Cereais e produtos processados	(3)
Austrália	5 (total)	Todos os alimentos	
Brasil	20 (total)	Amendoim e derivados de milho	(1)
Índia	30 (total)	Todos os alimentos	
Japão	10 (total)	Todos os alimentos	
Singapura	0	Todos os alimentos	
África do Sul	5 (B1);10 (total)	Todos os alimentos	
Suécia	5 (Total)	Todos os alimentos	
Estados Unidos	20 (total)	Todos os alimentos	(2)
Alemanha	2 (B 1); 4 (Total)	Todos os alimentos	
	0,05 (Total)	Alimentos infantis	

Fonte: FONSECA (2006)

(1) Resolução RDC no 274, da ANVISA, de 15 de outubro de 2002. Portaria nº.183 de 21 de março de 1996 Ministério da Agricultura

(2) FAO: WORLDWIDE REGULATIONS FOR MYCOTOXINS 1995

(3) Directiva n.º 2005/9/CE de 28 de Janeiro de 2003.

No Brasil conforme norma interna Nº 1, de 24 de fevereiro de 2003, do Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento pela Secretaria de Defesa Agropecuária Departamento de Defesa e Inspeção Vegetal, artigo 1º parágrafo I tem-se:

> Os limites aceitáveis de aflatoxinas totais são de 20 ppb para milho em grão (inteiro, partido, amassado, moído), farinhas ou sêmolas de milho, amendoim (com casca, descascado, cru ou tostado), pasta ou manteiga de amendoim, conforme Resolução RDC/MS nº 274, de 15 de outubro de 2002 e de 30 ppb para os demais produtos, conforme Resolução CNNPA/MS nº 34/76; (Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento)[1]

Embora tenha sido dada ênfase no problema de excesso de zeros nas distribuições de aflatoxinas em alimentos, Owen e DeRouen (1980) apresentam outro caso para a qual esse tipo de situação pode ocorrer. O caso citado trata da quantidade de contaminação por substâncias tóxicas em trabalhadores de um indústria expostos ao cloro, em que técnicos da saúde são encarregados de fazer a quantificação de substâncias insalubres nos trabalhadores e comparar o valor médio encontrado com o valor máximo permitido pelas normativas do *National Institute for Occupational Safety and Health* (NIOSH). Manuais com metodologias para inferências sobre a quantidade dessas substâncias, no entanto, não tratam o problema com excesso de zeros ou não diferenciam zeros verdadeiros de zeros causados por um valor limiar do equipamento de mensuração.

Esses problemas motivam a pesquisa de métodos que modelem simultaneamente a probabilidade de zeros verdadeiros e que não despreze as informações contidas em observações censuradas. Neste trabalho são apresentados: modelos probabilísticos capazes de modelar observações sem a necessidade de transformá-las e que possam discriminar a probabilidade de zeros verdadeiros; características dos modelos; procedimentos dos modelos; avaliação do potencial de ajuste dos modelos propostos utilizando métodos de simulação, observando a acurácia e a precisão seus estimadores. Finalmente, a metodologia desenvolvida é ilustrada por meio da modelagem de medidas de contaminação com aflatoxina B1, observadas em grãos de milho, de três subamostras de um lote de milho, analisados no Laboratório de Micotoxinas do Departamento de Agroindústria, Alimentos e Nutrição da ESALQ/USP. Para obtenção dos resultados apresentados neste trabalho, foram realizados programas implementados no programa estatístico R (R DEVELOPMENT CORE TEAM, 2008), os quais encontram-se no CD que acompanha a presente Tese.

[1]BRASIL. Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento. SISLEGIS - Sistema de Legislação Agrícola Federal. http://extranet.agricultura.gov.br/sislegis-consulta/consultarLegislacao.do(30 out. 2008)

2 DESENVOLVIMENTO

2.1 Revisão de literatura

O tratamento de variáveis contínuas com inflação de zeros surge com Aitchison e Brown (1963, p. 95) que realizaram um estudo sobre a distribuição lognormal, considerando, para isso, uma variável aleatória contínua com grande quantidade de zeros, cujas observações diferentes de zero foram consideradas provenientes de uma população com distribuição lognormal. Porém, o fato de a distribuição lognormal não ser definida para valores iguais a zero torna-se um problema. Como soluções, Aitchison e Brown (1963) citam autores que propõem somar uma constante positiva a todos os valores, o que nem sempre é adequado, ou somar uma constante apenas aos valores iguais a zero, não trazendo, neste caso, grandes prejuízos se os zeros forem provenientes de censura. Os autores sugerem, no entanto, utilizar uma mistura, dicotomizando as observações em zeros e não zeros. Estimam, então, a probabilidade de as observações serem iguais a zero pela proporção de zeros na amostra e consideram que os valores não nulos provém de uma população com distribuição lognormal, e nomearam essa mistura distribuição delta (distribuição-Δ). Nesse caso, os zeros são contemplados, na função de densidade, por um valor de proporção, considerando no entanto, que todos os zeros observados são verdadeiros.

Kahn e Rubin (1989), por outro lado, em estudo do controle de poluentes em água por indústrias nos Estados Unidos, utilizaram a distribuição-Δ, porém fizeram uma modificação no parâmetro que estima a probabilidade de zero, pois, no caso de poluentes em água, os valores iguais a zero são provenientes de limites de detecção e de quantificação.

Owen e DeRouen (1980), por sua vez, depararam-se com o problema de estimar a quantidade média de cloro em trabalhadores de uma indústria. Para isso dispunham de observações provenientes de mensurações com censura à esquerda, ou seja, valores que, por imprecisão na medida, foram considerados iguais a zero. As metodologias das normativas da NIOSH entretanto, baseiam-se no fato de as observações terem distribuição lognormal, concluído a partir de experiências prévias. Como, na prática, é difícil distinguir zeros verdadeiros de zeros não verdadeiros, isto é, provenientes de valores censurados, os autores compararam dois estimadores para a média por meio de simulações. Para isso, consideraram amostras de distribuições lognormais aumentadas de: (i) somente zeros verdadeiros; (ii) somente va-

lores positivos censurados, e (*iii*) combinação dos dois casos. Nesse contexto, avaliou dois estimadores: o primeiro, baseado na distribuição delta e o segundo, baseado na distribuição lognormal censurada. Os autores concluíram, por simulações, que o estimador baseado na distribuição delta geralmente apresenta menor erro quadrático médio.

Numa outra situação, envolvendo um estudo sobre a precipitação nos Estados Unidos, Wilks (1990) observou que o valor mínimo registrado durante o período de estudo era 0,254 mm. Para a modelagem probabilística, considerou, então, uma distribuição gama com censura à esquerda com valor limiar 0,127 mm. Assim, períodos com valores registrados como iguais a zero ou traços foram considerados como tendo recebido entre 0,000 e 0,127 mm, não havendo, esse caso, informação sobre a posição do valor da observação no intervalo. O autor, faz, então, uma comparação entre as estimativas obtidas pelo método dos momentos com as estimativas obtidas pelo método de máxima verossimilhança. Concluiu, então, que o método dos momentos apresenta resultado igual ao método de máxima verossimilhança apenas quando o parâmetro de escala da distribuição gama é alto, sendo ineficiente quando há alta probabilidade de ocorrerem observações pequenas.

Em estudos de detecção de micotoxinas em lotes de grãos, pelo fato de num lote analisado poderem ocorrer inúmeras observações sem micotoxina e muito poucas com grande quantidade de micotoxina, é frequente surgirem conjuntos de observações com um grande de número de zeros. Além disso, existe o fato de o aparelho utilizado na quantificação ser limitado na aferição, não sendo possível determinar o valor exato de baixas quantidades de micotoxina. Para modelar esse tipo de observação várias distribuições de probabilidade têm sido estudadas, tais como: gama composta, binomial negativa, lognormal de três parâmetros e normal truncada. Porém, estudos feitos por Gisbrecht e Whitaker (1998) e Johansson et al. (2000), demonstraram que a distribuição gama composta, geralmente se adequa melhor a observações desse tipo.

De forma geral, as distribuições utilizadas pelos autores citados para análise de dados inflacionados de zero, consideram distribuições que podem ser classificadas como distribuições com censura à esquerda, distribuições truncadas ou mistura de distribuições, cujos detalhes serão apresentados a seguir.

2.1.1 Distribuição truncada

Uma distribuição truncada pode ser obtida a partir de qualquer distribuição de probabilidade pela operação dupla de restringir o domínio original da variável e redimensionar adequadamente a probabilidade sobre o novo domínio.

Aitchison e Brown (1963, p. 87) definem que uma variável aleatória X pode parecer ter uma distribuição conhecida exceto que parte dos valores da distribuição dos quais $X \leq \xi$ foi removido, por tais valores de X não poderem acontecer ou não serem observados. A distribuição de tal variável é dita incompleta ou, mais comumente, truncada, e ξ é dito o ponto de truncamento.

Para a definição de função de distribuição truncada apresentada por Cramér (1946, p. 247), considere X uma variável aleatória com função de distribuição acumulada F, $F(a-) = P(X < a)$ e $\alpha = F(a) < F(b) = \beta$. Então a variável aleatória truncada $X_T \equiv Y_T(a,b)$ com pontos de truncamento a e b tem sua função de distribuição acumulada dada por

$$F_{X_T}(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } x \leq a; \\ \dfrac{F_X(x) - F_X(a-)}{F_X(b) - F_X(a-)}, & \text{se } a < x \leq b; \\ 1, & \text{se } x > b. \end{cases} \tag{1}$$

Nesse caso, a esperança e variância de X_T são, respectivamente,

$$\mu_T = \mu_T(a,b) = \int_{-\infty}^{\infty} x \, dF_{X_T}(x) = \frac{\int_a^b x \, dF_X(x)}{\beta - \alpha}$$

e

$$\sigma_T^2 = \sigma_T^2(a,b) = \int_{-\infty}^{\infty} (x - \mu_T)^2 \, dF_{X_T}(x) = \frac{\int_a^b x^2 \, dF_X(x)}{\beta - \alpha} - \mu_T^2.$$

Por derivação de (1), a função de densidade de probabilidade truncada é

$$f_{X_T}(x) = \frac{d}{dx}\left[\frac{F_X(x) - F_X(a-)}{F_X(b) - F_X(a-)}\right] = \frac{f_X(x)}{F_X(b) - F_X(a)}, \tag{2}$$

para $x \in [a;b]$ e 0, caso contrário.

Essa definição refere-se a uma variável truncada bilateralmente. Truncamentos unilaterais, por sua vez, são considerados casos particulares de (2). Assim, no caso de uma função de densidade de probabilidade truncada à esquerda de a, considera-se $b \to \infty$ e $F_{X_T}(b) = 1$. Logo, tem-se que

$$F_{X_T}(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } x \leq a; \\ \dfrac{F_X(x) - F_X(a-)}{1 - F_X(a-)}, & \text{se } x > a. \end{cases}$$

Por outro lado, para uma função de densidade de probabilidade truncada à direita de b, caso em que $a \to \infty$ e $F_{X_T}(a) = 0$, tem-se que

$$F_{X_T}(x) = \begin{cases} \dfrac{F_X(x)}{F_X(b)}, & \text{se } x \leq b; \\ 1, & \text{se } x > b. \end{cases}$$

Uma distribuição truncada à esquerda frequentemente utilizada é a distribuição lognormal truncada. Para defini-la, considere uma variável essencialmente positiva X, isto é, $0 < X < \infty$ tal que $Y = \log(X)$ tem distribuição normal com média μ e variância σ^2. Diz-se, então, que X tem distribuição lognormal ou que X é Λ-variável e escreve-se

$$X \sim \Lambda(\mu, \sigma^2) \Leftrightarrow Y \sim N(\mu, \sigma^2),$$

sendo importante ressaltar que X não assume o valor zero. Considere que $F_X(x; \mu, \sigma^2) = F_X(x)$ e $F_Y(y; \mu, \sigma^2) = F_Y(y)$ para denotar as funções de distribuição acumuladas de X e Y, respectivamente, de tal forma que

$$F_X(x; \mu, \sigma^2) = P(X \leq x)$$

e

$$F_Y(y; \mu, \sigma^2) = P(Y \leq y).$$

Como $Y = \log(X)$, as funções de distribuição de X e Y são relacionadas por meio de

$$F_X(x) = F_Y(\log(x))$$

para $x > 0$, desde que $F_X(x) = 0$, para $x \leq 0$ e

$$dF_X(x) = f_X(x; \mu, \sigma^2) = \frac{1}{x\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}(\log(x) - \mu)^2\right\}$$

sendo $f_X(x; \mu, \sigma^2)$ a função densidade de probabilidade de X com parâmetros μ e σ^2.

A distribuição lognormal possui momentos de quaisquer ordens, sendo que o k-ésimo momento dado por

$$\mathbb{E}(X^k) = \int_0^\infty x^k dF_X(x) = \int_{-\infty}^\infty e^{ky} dF_Y(y) = \exp\left\{k\mu + \frac{1}{2}k^2\sigma^2\right\}.$$

Consequentemente, os momentos de primeira e segunda ordem de X em torno da média são, respectivamente,

$$\mathbb{E}(X) = \exp\left\{\mu + \frac{\sigma^2}{2}\right\} \tag{3}$$

e

$$\mathrm{Var}(X) = \mathbb{E}(X^2) - [\mathbb{E}(X)]^2 = \exp(2\mu + \sigma^2)[\exp(\sigma^2) - 1]. \tag{4}$$

Teorema 2.1 *A distribuição do k-ésimo momento da distribuição F_X com parâmetros μ e σ^2 é também uma distribuição F_X com parâmetros $\mu + k\sigma^2$ e σ^2 respectivamente, isto é,*

$$F_{X_j}(x; \mu, \sigma^2) = F_X(x; \mu + k\sigma^2, \sigma^2).$$

Prova:

De fato, considerando ξ o ponto de truncamento, a função de distribuição acumulada truncada correspondente é,

$$F_{X_T}(x) = Pr(X \leq x) = \begin{cases} 0, & \text{se } x \leq \xi; \\ \dfrac{F_X(x; \mu, \sigma^2) - F_X(\xi; \mu, \sigma^2)}{1 - F_X(\xi; \mu, \sigma^2)}, & \text{se } x > \xi; \end{cases}$$

e o k-ésimo momento é dado por,

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(X^k) &= \int_\xi^\infty \frac{x^k \, dF_X(x; \mu, \sigma^2)}{1 - F_X(\xi; \mu, \sigma^2)} = \frac{\exp\{k\mu + \frac{1}{2}k^2\sigma^2\}}{1 - F_X(\xi; \mu, \sigma^2)} \int_\xi^\infty dF_X(x; \mu + k\sigma^2, \sigma^2) \\ &= \exp\left\{j\mu + \frac{1}{2}k^2\sigma^2\right\} \frac{1 - F_X(x; \mu + k\sigma^2, \sigma^2)}{1 - F_X(\xi; \mu, \sigma^2)}. \end{aligned}$$

Finalmente, a função de distribuição do k-ésimo momento pode ser definida por

$$F_{X_k}(x; \mu, \sigma^2) = \frac{\displaystyle\int_\xi^x \frac{t^k \, dF_X(t; \mu, \sigma^2)}{1 - F_X(\xi; \mu, \sigma^2)}}{\displaystyle\int_\xi^\infty \frac{t^k \, dF_X(t; \mu, \sigma^2)}{1 - F_X(\xi; \mu, \sigma^2)}} = \frac{\displaystyle\int_\xi^x dF_X(t; \mu + k\sigma^2, \sigma^2)}{\displaystyle\int_\xi^\infty dF_X(t; \mu + k\sigma^2, \sigma^2)}$$

$$= \frac{F_X(x; \mu + k\sigma^2, \sigma^2) - F_X(\xi; \mu + k\sigma^2, \sigma^2)}{1 - F_X(\xi; \mu + k\sigma^2, \sigma^2)}$$

que é a distribuição acumulada lognormal truncada com parâmetros $\mu + k\sigma^2$ e σ^2. ∎

2.1.2 Distribuição censurada

Diz-se que uma variável é censurada se não for possível observá-la para uma parte dos indivíduos de uma população. Por extensão, diz-se censurada, uma amostra cujas observações da variável de interesse são conhecidas para alguns indivíduos e desconhecidas para os restantes.

A distinção entre distribuição truncada à esquerda e distribuição censurada à esquerda surge do fato que, na primeira, toda informação disponível está confinada ao intervalo (ξ, ∞) e no segundo, há um limite conhecido para a variável no intervalo $(0, \xi]$, permitindo a consideração do intervalo completo $(0, \infty)$. O ponto de truncamento ou de censura ξ pode ser considerado, nesse caso, como um parâmetro a ser estimado, considerado antes como conhecido.

Considere um conjunto de dados que tem n_0 observações censuradas (registradas como zero), e n_1 observações com valores conhecidos. Então, a função de verossimilhança para as $n = n_0 + n_1$ observações de uma variável aleatória X com com função densidade de probabilidade $f_X(x_i; \boldsymbol{\theta})$ é, segundo Kendall e Stuart (1977 apud WILKS, 1990) ,

$$L(\boldsymbol{\theta}) = \prod_{j=1}^{n_0} F_X(\xi; \boldsymbol{\theta}) \prod_{i=1}^{n_1} f_X(x_i; \boldsymbol{\theta}),$$

sendo

$$F_X(\xi; \boldsymbol{\theta}) = Pr(X \leq \xi) = \int_0^{\xi} f_X(x; \boldsymbol{\theta}) dx,$$

a função de distribuição acumulada da variável aleatória X.

Como caso particular, frequentemente é citada na literatura a distribuição lognormal censurada. Nesse caso, diz-se que uma variável X tem distribuição lognormal censurada com ponto de censura ξ se pertence à classe de variáveis com

$$Pr(X \leq x) = \begin{cases} F_X(\xi; \mu, \sigma^2), & \text{se } x < \xi; \\ F_X(x; \mu, \sigma^2), & \text{se } x \geq \xi, \end{cases}$$

com $F_X(x; \mu, \sigma^2)$ definida por

$$F_X(x; \mu, \sigma^2) = \int_0^x \frac{1}{t\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} \left[\log(t) - \mu \right]^2 \right\} dt$$

Momentos dessa distribuição são indefinidos desde que a distribuição não esteja definida precisamente para todo $x \leq \xi$. Por outro lado, o quantil ξ_q de ordem $q \geq F_X(\xi; \mu, \sigma^2)$

pode ser encontrado e é o mesmo que para distribuição não censurada, dado por

$$\xi_q = \exp\{\mu + \nu_q \sigma\},$$

sendo ν_q o quantil de ordem q da normal padronizada $\mathrm{N}(0,1)$.

Considere uma distribuição $\Lambda(\mu, \sigma^2)$ censurada em ξ e uma amostra de tamanho n sendo n_1 observações menores ou iguais a ξ, cujos valores exatos são desconhecidos, e n_2 observações $\{x_1, \ldots, x_{n_2}\}$ maiores do que ξ. A função de verossimilhança da amostra é, então, dada por

$$L(\xi, \mu, \sigma^2) = \binom{n}{n_1} \left[F_X(\xi; \mu, \sigma^2)\right]^{n_1} \prod_{i=1}^{n_2} \frac{1}{x_i \sigma \sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}\left[\log(x_i) - \mu\right]^2\right\}$$

e o logaritmo da função de verossimilhança pode ser escrito como

$$\ell = \ell(\xi, \mu, \sigma^2) \propto n_1 \log \Phi(\zeta) - \frac{n}{2} \log \sigma^2 - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^{n_2} (y_i - \mu)^2,$$

em que, $y_i = \log x_i$, $i = 1, \ldots, n_2$, $\zeta = (\nu - \mu)/\sigma$, $\nu = \log \xi$ e $\Phi(\cdot)$ denota a função de distribuição normal padronizada, com derivadas de primeira ordem, em relação a μ e σ^2, dadas por

$$\frac{\partial \ell}{\partial \mu} = -\frac{n_1}{\sigma} \frac{\Phi'(\zeta)}{\Phi(\zeta)} + \frac{1}{\sigma^2} \sum_{i=1}^{n_2} (y_i - \mu) \tag{5}$$

e

$$\frac{\partial \ell}{\partial \sigma^2} = -\frac{n_1 \zeta}{2\sigma^2} \frac{\Phi'(\zeta)}{\Phi(\zeta)} - \frac{n_2}{2\sigma^2} + \frac{1}{2\sigma^4} \sum_{i=1}^{n_2} (y_i - \mu)^2 \tag{6}$$

em que $\Phi'(\zeta)$ é a derivada de primeira ordem de $\Phi(\zeta)$.

Segundo Aitchison e Brown (1963, p. 90) e Owen e DeRouen (1980), os estimadores máxima da função de verossimilhança para μ e σ dados por m e s, respectivamente, podem ser obtidos, pelas seguintes equações

$$s = g(h, z) \frac{1}{n_2 s} \sum_{i=1}^{n_2} (y_i - \nu)$$

e

$$m = \nu - zs,$$

sendo $z = \dfrac{\nu - m}{s}$, $\quad h = \dfrac{n_1}{n}$ $\quad$ e $\quad g(h,z) = \left[\left(\dfrac{h}{1-h}\right)\dfrac{\Phi'(z)}{\Phi(z)} - z\right]^{-1}$.

Uma outra forma de maximizar a função de verossimilhança é pelo método de Newton-Raphson. Para esse método, entretanto, além das derivadas de 1ª ordem (5) e (6), são necessárias as derivadas de 2ª ordem, apresentadas a seguir

$$\frac{\partial^2 \ell}{\partial \mu^2} = -\frac{n_1}{\sigma^2}\frac{\Phi'(\zeta)}{\Phi(\zeta)}\left[\zeta + \frac{\Phi'(\zeta)}{\Phi(\zeta)}\right] - \frac{n_2}{\sigma^2},$$

$$\frac{\partial^2 \ell}{\partial (\sigma^2)^2} = -\frac{n_1 \zeta}{2\sigma^4}\frac{\Phi'(\zeta)}{\Phi(\zeta)}\left\{-1 + \frac{1}{2}\left[-1 + \zeta\left(\zeta + \frac{\Phi'(\zeta)}{\Phi(\zeta)}\right)\right]\right\} + \frac{n_2}{2\sigma^4} - \frac{1}{\sigma^6}\sum_{i=1}^{n_2}(y_i - \mu)^2,$$

e

$$\frac{\partial^2 \ell}{\partial \sigma^2 \partial \mu} = -\frac{n_1}{2\sigma^3}\frac{\Phi'(\zeta)}{\Phi(\zeta)}\left[-1 + \zeta\left(\zeta + \frac{\Phi'(\zeta)}{\Phi(\zeta)}\right)\right] - \frac{1}{\sigma^4}\sum_{i=1}^{n_2}(y_i - \mu).$$

2.1.3 Mistura de distribuições

Mood, Graybill e Boes (1974, p.122) e Ross (1997, p. 501) definem distribuição mistura da seguinte forma: se $f_{X_0}(\cdot), f_{X_1}(\cdot), \ldots, f_{X_n}(\cdot), \ldots$ é uma sequência de funções densidade de probabilidade, podendo ou não depender dos parâmetros, e $p_0, p_1, \ldots, p_n, \ldots$ uma sequência de parâmetros satisfazendo $p_j \geq 0$ e $\sum_{j=1}^{\infty} p_j = 1$ então,

$$g_X(x) = \sum_{j=1}^{\infty} p_j f_{X_j}(x)$$

é uma função de densidade denominada distribuição mistura ou distribuição de contágio.

Esse tipo de distribuição pode ocorrer quando amostras de uma população são retiradas de grupos diferentes. Assim, se for considerada uma amostra de dois grupos diferentes da mesma população, sendo um grupo com função de distribuição H_{X_1} e outro com função de distribuição H_{X_2}, ter-se-á a função de distribuição de X dada por

$$H_X(x) = pH_{X_1}(x) + (1-p)H_{X_2}(x),$$

com $0 < p < 1$.

Considerando uma variável aleatória X inflacionada de zeros, a função de densidade obtida por mistura de distribuições, de acordo com McLachlan e Peel (2000, p. 159),

pode ser expressa por

$$f_X(x;p,\boldsymbol{\theta}) = pI_{\{0\}}(x) + (1-p)I_{(0,\infty)}(x)g_X(x;\boldsymbol{\theta}), \tag{7}$$

para $0 \leq x < \infty$, sendo $0 < p < 1$ e $g_X(x;\boldsymbol{\theta})$ uma função de densidade com vetor de parâmetros $\boldsymbol{\theta}$ com função de distribuição acumulada $G_X(x;\boldsymbol{\theta})$ e $I(x)$ a função indicadora. Nesse caso, $g_X(x;\boldsymbol{\theta})$ poderia ser considerada adequada às observações, caso não houvesse inflação de observações iguais a zero. Nesse contexto, p é o parâmetro que caracteriza o número de zeros que excede o número de zeros preditos por $g_X(x;\boldsymbol{\theta})$.

Considerando uma amostra aleatória de tamanho n da variável X, com n_0 observações iguais a zero e n_1 observações diferentes de zero, ou seja, $n = n_0 + n_1$, então a função de verossimilhança, com base em (7), pode ser escrita como

$$L(p,\boldsymbol{\theta}) = \Big[p + (1-p)G_X(0;\boldsymbol{\theta})\Big]^{n_0}(1-p)^{n_1}\prod_{i:x_i>0} g_X(x_i;\boldsymbol{\theta}).$$

Nesse contexto, são apresentadas a seguir, as distribuições: distribuição-Δ introduzida por Aitchison (1955); distribuição-Δ modificada proposta por Kahn e Rubin (1989) e distribuição gama composta, bem como alguns detalhes da estimação dos seus parâmetros.

Distribuição-Δ

Seja X uma variável aleatória de uma população cuja proporção de valores iguais a zero é representada por δ e a distribuição dos valores diferentes de zero é lognormal, $\Lambda(\mu,\sigma^2)$, isto é,

$$Pr(X \leq x) = \begin{cases} 0 & \text{, se } x < 0; \\ \delta & \text{, se } x = 0; \\ \delta + (1-\delta)F_X(x;\mu,\sigma^2) & \text{, se } x > 0. \end{cases}$$

A distribuição de X é denotada por $\Delta(\delta,\mu,\sigma^2)$ e tem k-ésimo momento dado por,

$$\begin{aligned}\mathbb{E}(X^k) &= \int_0^\infty x^k(1-\delta)dF_X(x) = (1-\delta)\int_0^\infty x^k dF_X(x) \\ &= (1-\delta)\int_{-\infty}^\infty e^{ky}dF_Y(y) = (1-\delta)e^{k\mu+\frac{1}{2}k^2\sigma^2}\end{aligned}$$

Logo, os momentos de primeira e segunda ordem de X em torno da média são, respectivamente,

$$\kappa = \mathbb{E}(X) = (1-\delta)\exp\left\{\mu + \frac{\sigma^2}{2}\right\};$$

e

$$\begin{aligned}\nu^2 = \mathrm{Var}(X) &= \mathbb{E}(X^2) - [\mathbb{E}(X)]^2 \\ &= (1-\delta)\big[\exp\left\{2\mu + 2\sigma^2\right\} - (1-\delta)\exp\left\{2\mu + \sigma^2\right\}\big] \\ &= (1-\delta)\exp\left\{2\mu + \sigma^2\right\}\big[\exp\left\{\sigma^2\right\} - (1-\delta)\big].\end{aligned}$$

Considerando uma amostra de n observações sendo, n_0 valores iguais a zero e $n - n_0 = n_1$ diferentes de zero, a função de verossimilhança para a distribuição Δ será,

$$\begin{aligned}L(\delta, \mu, \sigma^2) &= \binom{n}{n_0}\delta^{n_0}\left[(1-\delta)\frac{d}{dx}F_X(x;\mu,\sigma^2)\right]^{n-n_0} \\ &= \binom{n}{n_0}\delta^{n_0}\left[(1-\delta)\frac{d}{dx}F_X(x;\mu,\sigma^2)\right]^{n_1}.\end{aligned}$$

Fazendo $y = \log(x)$, tem-se que

$$\begin{aligned}L(\delta, \mu, \sigma^2) &= \binom{n}{n_0}\delta^{n_0}(1-\delta)^{n_1}\prod_{i=1}^{n_1}\frac{d}{dy_i}F_Y(y_i|\mu,\sigma^2) \\ &= \binom{n}{n_0}\delta^{n_0}(1-\delta)^{n_1}\frac{1}{(\sigma\sqrt{2\pi})^{n_1}}\exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{n_1}(y_i-\mu)^2\right\},\end{aligned}$$

Nesse caso, têm-se duas distribuições independentes, uma binomial com parâmetros n e δ e outra $N(\mu, \sigma^2)$. Logo, $\frac{n_0}{n}, \overline{y}, s^2$ são estimadores conjuntamente suficientes e não viciados de δ, μ, σ^2, respectivamente.

Distribuição-Δ modificada

A distribuição-Δ modificada ou distribuição Δ-lognormal é uma modificação por Kahn and Rubin (1989) da distribuição-Δ de modo a incorporar múltiplos limites de detecção para modelagem da concentração de poluentes em água, provenientes de descargas industriais.

Neste, o único ponto de massa localizado em zero é substituído por uma distribuição discreta composta de múltiplos pontos de massa em que cada ponto de massa é associado a um limite de detecção específico da amostra e a distribuição lognormal é usada para representar o conjunto de valores mensuráveis.

Considere que o parâmetro δ da distribuição-Δ modela, aqui, os valores não detectáveis correspondentes a k limites de detecção $(D_1, D_2, \ldots, D_i, \ldots, D_k)$ de forma que δ é a soma de probabilidades, δ_i, cada uma representando a proporção de valores não quantificáveis associados a cada intervalo $]D_{i-1}; D_i]$ de detecção.

Seja X_D uma variável aleatória representando uma medida não detectada escolhida aleatoriamante e D_i o valor do i-ésimo limite de detecção em um conjunto de observações tendo função de distribuição acumulada

$$Pr(X_D \leq c) = \frac{1}{\delta} \sum_{i:D_i \leq c} \delta_i, \tag{8}$$

sendo $c > 0$, de forma que (8) é a parte discreta da distribuição distribuição-Δ modificada. Assim, a esperança e a variância da variável discreta X_D pode ser calculada usando-se, respectivamente,

$$\mathbb{E}(X_D) = \frac{1}{\delta} \sum_{l=1}^{k} \delta_l D_l$$

$$\mathrm{Var}(X_D) = \frac{1}{\delta} \sum_{l=1}^{k} \delta_l (D_l - \mathbb{E}(X_D))^2.$$

Considere, agora, a distribuição de probabilidade acumulada da porção contínua da distribuição-Δ modificada dada por $P(X_C \leq c) = F_X(c|\mu, \sigma^2)$, sendo X_C a variável aleatória com distribuição lognormal que representa os valores mensuráveis. Com esperança e variância dadas, respectivamente, pelas expressões (3) e (4).

A variável aleatória U com distribuição-Δ modificada pode ser então expressa como a combinação de três variáveis aleatórias independentes da seguinte forma,

$$U = I_U X_D + (1 - I_U) X_C$$

sendo $I_U = I_{(0;D_k]}(u)$. Usando uma soma ponderada, a função de distribuição acumulada da porção discreta da distribuição (8), pode ser combinada com a função da porção contínua

para obter a distribuição de probabilidade acumulada global da distribuição-Δ modificada como segue,

$$Pr(U \leq c) = \sum_{i:D_i \leq c} \delta_i + (1-\delta) F_X(c; \mu, \sigma^2) I_{(0;D_k]}(u)$$

sendo D_i o valor do i-ésimo limite de detecção especificado. Logo, a esperança da variável aleatória U pode ser obtida como uma soma ponderada dos valores esperados das porções discreta e contínua, isto é,

$$\mathbb{E}(U) = \delta \mathbb{E}(X_D) + (1-\delta)\mathbb{E}(X_C). \tag{9}$$

De forma similar, o valor esperado de U^2 pode ser obtido como a soma ponderada dos valores esperados dos quadrados das porções discreta e contínua como segue

$$\mathbb{E}(U^2) = \delta \mathbb{E}(X_D^2) + (1-\delta)\mathbb{E}(X_C^2). \tag{10}$$

Logo, usando as equações (9) e (10), a variância de U pode ser obtida pela expressão

$$\begin{aligned} \mathrm{Var}(U) &= \mathbb{E}(U^2) - [\mathbb{E}(U)]^2 \\ &= \delta\big\{\mathrm{Var}(X_D) + [\mathbb{E}(X_D)]^2\big\} + (1-\delta)\big\{\mathrm{Var}(X_C) + [\mathbb{E}(X_C)]^2\big\} - [\mathbb{E}(U)]^2. \end{aligned}$$

Distribuição gama composta

Considere uma variável aleatória discreta N, denotando o número de vezes que um evento ocorre em um intervalo, com distribuição de Poisson com parâmetro λ. Assuma que o i-ésimo evento resulta em uma quantidade R_i, $i = 1, \ldots, n$, e que cada $R_i \sim \mathrm{Gama}(\alpha, \beta)$, ou seja, R_i tem distribuição gama com parâmetros α de forma e β de escala com média $\alpha\beta$ e variância $\alpha\beta^2$.

Seja $X = R_1 + R_2 + \ldots + R_n$, então no caso da quantidade total observada ser igual a zero, isto significa que nenhum evento ocorreu, ou seja, $Pr(X = 0) = e^{-\lambda}$.

Além disso, da Poisson, segue que a probabilidade de exatamente k eventos ocorrerem é

$$Pr(N = k) = \frac{\lambda^k e^{-\lambda}}{\Gamma(k+1)}.$$

Se cada termo R_i que compõe o total X é modelado pela distribuição $\mathrm{Gama}(\alpha, \beta)$, então segue, da aditividade natural da distribuição gama, que a distribuição

do total X, composto por k termos, tem distribuição Gama$(k\alpha, \beta)$. Combinando as duas partes surge a distribuição gama composta, dada por

$$f_n(x) = \begin{cases} e^{-\lambda} & \text{, se } x = 0, \\ \displaystyle\sum_{k=1}^{n} \frac{\lambda^k e^{-\lambda}}{\Gamma(k+1)} \frac{x^{k\alpha-1} e^{-\frac{x}{\beta}}}{\beta^{k\alpha}\Gamma(k\alpha)} & \text{, se } x > 0 \end{cases} \tag{11}$$

sendo α o parâmetro de forma, β o parâmetro de escala, λ o número esperado de eventos e n o número total de eventos ($n \to \infty$).

Os três primeiros momentos de X, por sua vez, são, repectivamente,

$$\mathbb{E}(X) = \lambda\alpha\beta,$$

$$\mathbb{E}(X^2) = [(\lambda^2 + \lambda)\alpha^2 + \lambda\alpha]\beta^2$$

e

$$\mathbb{E}(X^3) = [(\lambda^3 + 3\lambda^2 + \lambda)\alpha^3 + (\lambda^2 + \lambda)\alpha^2 + 2\lambda\alpha]\beta^3.$$

Seja $\{x_1, x_2, \ldots, x_n\}$ uma amostra aleatória de X de tamanho n. Logo, a função de verossimilhança da distribuição gama composta (11), pode ser escrita como

$$L(\lambda, \alpha, \beta) = \prod_{i \in A} e^{-\lambda} \prod_{i \in B} \sum_{k=1}^{n} \frac{\lambda^k e^{-\lambda} x_i^{k\alpha-1} e^{-\frac{x_i}{\beta}}}{\Gamma(k+1)\beta^{k\alpha}\Gamma(k\alpha)}$$

em que $A = \{i : x_i = 0\}$ possui n_0 elementos, $B = \{i : x_i \neq 0\}$ possui n_1 elementos, e o logaritmo da função de verossimilhança é

$$\begin{aligned} l(\lambda, \alpha, \beta) = \log L(\lambda, \alpha, \beta) &= -\sum_{i \in A} \lambda + \sum_{i \in B} \log\left\{ \sum_{k=1}^{n} \frac{\lambda^k e^{-\lambda} x_i^{k\alpha-1} e^{-\frac{x_i}{\beta}}}{\Gamma(k+1)\beta^{k\alpha}\Gamma(k\alpha)} \right\} \\ &= -n_0\lambda + \sum_{i \in B} \log\left\{ e^{-\lambda} e^{-\frac{x_i}{\beta}} \sum_{k=1}^{n} \frac{\lambda^k x_i^{k\alpha-1}}{\Gamma(k+1)\beta^{k\alpha}\Gamma(k\alpha)} \right\} \\ &= -n_0\lambda + \sum_{i \in B} \left\{ -\lambda - \frac{x_i}{\beta} + \log \sum_{k=1}^{n} \frac{\lambda^k x_i^{k\alpha-1}}{\Gamma(k+1)\beta^{k\alpha}\Gamma(k\alpha)} \right\} \\ &= -n_0\lambda - n_1\lambda - \frac{1}{\beta} \sum_{i \in B} x_i + \sum_{i \in B} \left\{ \log \sum_{k=1}^{n} \underbrace{\frac{\lambda^k x_i^{k\alpha-1}}{\Gamma(k+1)\beta^{k\alpha}\Gamma(k\alpha)}}_{I} \right\}. \end{aligned} \tag{12}$$

Para evitar problemas de cálculo envolvendo o termo I na equação (12), pode-se reescrevê-lo da seguinte forma

$$I = \exp\left\{k \log \lambda + (k\alpha - 1) \log x_i - \log \Gamma(k+1) - k\alpha \log \beta - \log \Gamma(k\alpha)\right\}.$$

Uma forma de obter os estimadores de λ, α e β pelo método de máxima verossimilhança, é fazer uma reparametrização da distribuição gama composta para a família Tweedie e estimar os três parâmetros que determinam a família. Essa idéia, apresentada em Dunn e Smyth (2002), foi implementada por Dunn (2007) no programa estatístico R (R DEVELOPMENT CORE TEAM, 2008) para obtenção das estimativas dos parâmetros.

3 MATERIAL E MÉTODO

3.1 Material

Com a finalidade de se avaliarem os estimadores propostos na metodologia serão considerados inicialmente dados gerados por meio de simulação, em seguida serão utilizados dados de medidas de contaminação com aflatoxina B1 observadas em grãos de milho obtidas no Laboratório de Micotoxinas do Departamento de Agroindústria, Alimentos e Nutrição da ESALQ/USP cuja descrição é pormenorizada a seguir.

Para obtenção dos mesmos foram retiradas 16 amostras de cada lote de milho, constituído da carga de um caminhão, tomado aleatoriamente, dentre os que abasteceram um consumidor industrial do interior de São Paulo. A coleta da amostras foi realizada segundo critérios adotados pela indústria receptora do milho, sendo que cada uma é composta por grãos de milho retirados de 11 pontos diferentes do lote, conforme o croqui apresentado na Figura 1, que tem por finalidade garantir que os diferentes pontos do lote sejam amostrados, servindo de guia para o encarregado de coletar as amostras.

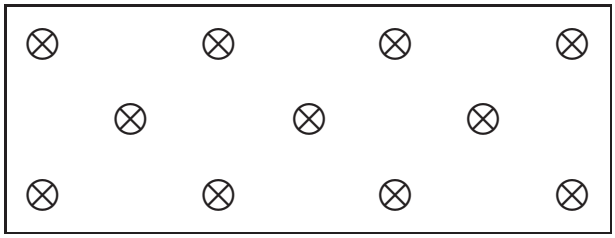


Figura 1 – Croqui para introdução da sonda na carga do caminhão em 11 pontos de onde devem ser retirados os grãos para compor a amostra

Nas Figuras 2 (a) e (b) são apresentadas a sonda para extração das amostras e o operador utilizando-a para a retirada de uma amostra, respectivamente. Convém salientar que a sonda é introduzida até atingir o fundo da carroceria do caminhão afim de que os grãos que se encontram na parte inferior da carga tenham a mesma chance de estar presentes na amostra que os grãos da superfície do lote.

a) b)

Figura 2 – Sonda para coleta da amostra (a) e operador retirando amostra (b)

Figura 3 – Escada de torre para homogeneização e partição da amostra

A cada perfuração o conteúdo de aproximadamente 1 kg de milho coletado pela sonda foi armazenado em um compartimento do equipamento, favorecendo a homogeneização da amostra. Após a coleta, o milho passou por uma escada de torre constituída por uma sequência de divisores de amostra do tipo canaletas invertidas com quilhas verticais no interior, cuja foto é apresentada na Figura 3. Este equipamento tem por função homogeneizar

a amostra e fazer uma partição da mesma, saindo, por um dos tubos de saída, aproximadamente 25% dos grãos e pelo outro, os 75% restantes. Uma vez que para cada lote foram realizados 11 introduções da saída, foram retiradas de cada caminhão aproximadamente 11 kg, separados em duas porções, uma com 2,75 kg e a restante com 8,25 kg. Este processo foi repetido 16 vezes para cada caminhão.

A cada amostragem, foi retirado 1 kg da porção menor de milho, compondo no total 16 amostras de 1 kg cada e que, posteriormente, seguiram os procedimentos apresentados nas ramificações B e C do fluxograma da Figura 4. Da porção maior, por outro lado, foram retirados 5 kg em cada amostragem, totalizando 16 amostras de 5 kg cada, que seguiram os procedimentos a ramificação A do fluxograma apresentado na mesma figura.

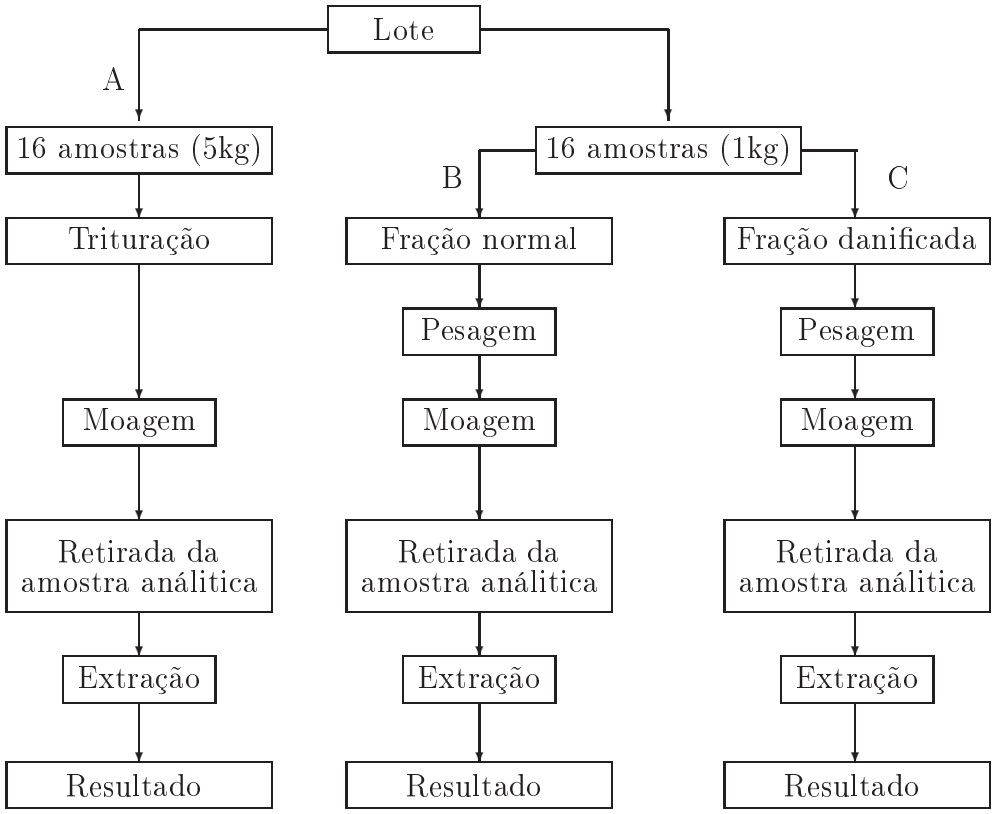


Figura 4 – Fluxograma de preparo das amostras do estudo

As 16 amostras que seguiram as etapas descritas na ramificação A, foram então trituradas e moídas no moinho subamostrador, modelo RAS MILL SUB SAMPLING, ilustrado na Figura 5 a), que ao mesmo tempo tritura e subamostra o material da amostra. Em seguida, de modo a adequar a granulometria do material ao procedimento de extração da

aflatoxina, aproximadamente 10% de cada amostra triturada de 5 kg, foi moída num moinho do tipo martelo, apresentado na Figura 5 b). Finalmente, de cada uma dessas 16 amostras foi retirada uma amostra analítica de 25 g.

a) b)

Figura 5 – Moinho amostrador modelo RAS MILL SUB SAMPLING (a) utilizado para trituração e subamostragem e moinho do tipo martelo com peneiras de crivos circulares de diâmetro 0,85 mm (b) utilizado para moagem

Para a realização dos procedimentos apresentados nas ramificações B e C do fluxograma da Figura 4, houve, inicialmente, a separação dos grãos danificados dos normais, realizada por operadoras treinadas, com base em características visuais dos mesmos, como ilustra a Figura 6. Dentre os grãos danificados, convém observar que estão incluídos os grãos ardidos, fermentados, quebrados, brotados ou atacados por insetos, conforme foto ilustrativa apresentada na Figura 7 (b).

Figura 6 – Operadoras separando os grãos danificados dos normais

a) b)

Figura 7 – Grãos normais (a) e grãos danificados (b) após a separação por operadoras treinadas

As frações foram então, separadamente, pesadas e integralmente moídas em um moinho do tipo martelo com peneiras de crivos circulares de diâmetro de 0,85 mm (Figura 5 b). De cada fração foi retirada em seguida uma amostra analítica de 25 g.

Finalmente todas as amostras analíticas passaram por um processo de extração em uma mistura de solventes composta por 135 ml de metanol e 15 ml de uma solução aquosa de cloreto de potássio a 4%, seguido de filtragem. Para detecção e quantificação das aflatoxinas foi empregada, então, a cromatografia líquida de alta eficiência, com detector de fluorescência e coluna cromatográfica de fase reversa, equipamento apresentado na Figura 8.

Figura 8 – Cromatográfo para cromatografia líquida de alta eficiência com detector de fluorescência e coluna cromatográfica de fase reversa utilizado para detectar e quantificar aflatoxinas

Após a calibração dos resultados da cromatografia por meio de curvas de regressão, as observações foram codificadas, em três classes: menores do que o limite $\xi = 0{,}11$ de detecção, codificados como ND (não detectado); entre o limite $\xi = 0{,}11$ de detecção e o limite de quantificação $\tau = 2\xi = 0{,}22$, representados por NQ (não quantificado) e maiores do que o limite $\tau = 0{,}22$, quantificados de forma contínua. Os resultados obtidos para um dos lotes, segundo os procedimentos relatados até aqui, são apresentados na Tabela 2 .

Tabela 2 – Medidas de contaminação de aflatoxina B1, em ppb, de 16 amostras extraídas de um lote de milho

	Ramificações		
Amostra	A	B	C
1	2,79	ND	ND
2	1,17	ND	ND
3	ND	ND	ND
4	ND	ND	ND
5	ND	ND	ND
6	3,70	ND	ND
7	ND	ND	ND
8	0,25	ND	2,24
9	0,47	ND	0,29
10	8,19	0,25	0,60
11	2,08	ND	ND
12	ND	ND	0,44
13	0,52	ND	ND
14	ND	0,53	ND
15	NQ	ND	0,59
16	1,22	0,55	NQ

Nota: ND: não detectados, valores menores que $\xi = 0{,}11$
NQ: não quantificados, valores pertencentes ao intervalo $[\xi, \tau] = [0{,}11, 0{,}22]$.

3.2 Método

Como apresentado na revisão de literatura, o problema com excesso de zeros já pode ser contornado. Porém, as metodologias utilizadas não fazem distinção entre observações de valores iguais a zero com valores censurados ou provenientes de um intervalo em que são identificados, mas não quantificados. Dessa forma, a proposta é desenvolver um modelo de mistura que contemple essas observações.

3.2.1 Modelo geral de mistura e estimação

Conforme o apresentado na seção 2.1.3 e considerando uma variável aleatória Y inflacionada de zeros, a função de densidade de probabilidade acumulada é expressa por

$$F_Y(y;\delta,\boldsymbol{\theta}) = \delta I_{\{0\}}(y) + (1-\delta)I_{(0,\infty)}(y)G_Y(y;\boldsymbol{\theta}), \tag{13}$$

para $0 \leq y < \infty$, sendo δ uma constante tal que $0 < \delta < 1$ e $G_Y(y;\boldsymbol{\theta})$ uma função de distribuição acumulada com vetor de parâmetros $\boldsymbol{\theta}$. Nesse caso, considerando que, caso não houvesse inflação de observações iguais a zero, $G_Y(y;\boldsymbol{\theta})$ poderia ser considerada adequada às observações. O parâmetro δ caracteriza a proporção populacional de zeros não preditos por $G_Y(y;\boldsymbol{\theta})$ e a função de densidade de probabilidade com respeito à distribuição de mistura (13) é

$$f_Y(y;\delta,\boldsymbol{\theta}) = \begin{cases} \delta, & \text{se } y = 0 \\ (1-\delta)g_Y(y;\boldsymbol{\theta}), & \text{se } y > 0 \end{cases} \tag{14}$$

em que $g_Y(y;\boldsymbol{\theta})$ é a função de densidade com respeito a $G_Y(y;\boldsymbol{\theta})$. Logo, o k-ésimo momento de Y é dado por

$$\begin{aligned} \mu'_k = \mathbb{E}(Y^k) &= \int_0^\infty y^k f_Y(y;\delta,\boldsymbol{\theta})dy \\ &= 0^k\delta + \int_0^\infty y^k(1-\delta)g_Y(y;\boldsymbol{\theta})dy \\ &= (1-\delta)\int_0^\infty y^k g_Y(y;\boldsymbol{\theta})dy = (1-\delta)\mathbb{E}_{g_Y(y;\boldsymbol{\theta})}(Y^k) \end{aligned} \tag{15}$$

e, desta forma, a esperança e variância são, respectivamente,

$$\mathbb{E}(Y) = \big(1-\delta\big)\mu_g, \tag{16}$$

e

$$\mathrm{Var}(Y) = \big(1-\delta\big)\big(\mu_g^2\delta + \sigma_g^2\big),$$

sendo $\mu_g = \mathbb{E}_{g_Y(y;\boldsymbol{\theta})}(Y)$ e $\sigma_g^2 = \mathbb{E}^2_{g_Y(y;\boldsymbol{\theta})}(Y) - \big[\mathbb{E}_{g_Y(y;\boldsymbol{\theta})}(Y)\big]^2$, respectivamente, a esperança e variância de Y segundo a função de densidade $g_Y(y;\boldsymbol{\theta})$.

Considere agora uma variável aleatória Y com função de densidade (14), porém com problemas de ser observada, isto é, o aparelho usado para obter o valor possui limites de detecção e de quantificação, ξ e τ. Nesse caso, o equipamento: acusa ausência da substância

quando esta existe mas está abaixo de ξ; apenas detecta a presença da substância para quantidades entre ξ e τ; ou de quantifica de forma contínua quantidades acima de τ. Desta forma, Y pode ser considerada uma variável com censura à esquerda de ξ e intervalar entre ξ e τ.

Considere, ainda, as observações de uma amostra aleatória de Y de tamanho n, dada por $\{y_1, y_2, \ldots, y_n\}$. Nesse caso, a função de verossimilhança é, segundo, Day *et al.* (1984 apud COX e OAKES, 2000), dada por

$$L(\delta, \boldsymbol{\theta}) = \prod_{i:y_i<\xi} F_Y(\xi; \delta, \boldsymbol{\theta}) \prod_{i:\xi\leq y_i\leq\tau} \left[F_Y(\tau; \delta, \boldsymbol{\theta}) - F_Y(\xi; \delta, \boldsymbol{\theta})\right] \prod_{i:y_i>\tau} f_Y(y_i; \delta, \boldsymbol{\theta}) \tag{17}$$

e considerando-se a expressão apresentada em (13), a expressão (17) pode ser reescrita da seguinte forma

$$\begin{aligned} L(\delta, \boldsymbol{\theta}) &= [\delta + (1-\delta)G(\xi; \boldsymbol{\theta})]^{n_0}(1-\delta)^{n_1}\left[G(\tau; \boldsymbol{\theta}) - G(\xi; \boldsymbol{\theta})\right]^{n_1}(1-\delta)^{n_2} \prod_{i:y_i>\tau} g_Y(y_i; \boldsymbol{\theta}) \\ &= [\delta + (1-\delta)G(\xi; \boldsymbol{\theta})]^{n_0}\left[G(\tau; \boldsymbol{\theta}) - G(\xi; \boldsymbol{\theta})\right]^{n_1}(1-\delta)^{n_1+n_2} \prod_{i:y_i>\tau} g_Y(y_i; \boldsymbol{\theta}) \end{aligned} \tag{18}$$

sendo n_0 o número de observações menores do que ξ, n_1 o número de observações pertencentes ao intervalo $[\xi, \tau]$ e n_2 o número de observações maiores que τ. Logo, tem-se que o logaritmo da função de verossimilhança (18) é

$$\begin{aligned} l(\delta, \boldsymbol{\theta}) =& n_0 \log[\delta + (1-\delta)G(\xi; \boldsymbol{\theta})] + n_1 \log\left[G(\tau; \boldsymbol{\theta}) - G(\xi; \boldsymbol{\theta})\right] \\ &+ (n_1 + n_2)\log(1-\delta) + \sum_{i:y_i>\tau} \log[g_Y(y_i; \boldsymbol{\theta})]. \end{aligned} \tag{19}$$

Os estimadores de máxima verossimilhança (EMV) de δ e $\boldsymbol{\theta}$ podem ser, então, obtidos por meio da solução do sistema de equações gerado igualando-se a zero as derivadas de primeira ordem da função (19) em relação a δ e $\boldsymbol{\theta}$, dadas por:

$$\frac{\partial l(\delta, \boldsymbol{\theta})}{\partial \delta} = \frac{n_0 - n_0 G(\xi; \boldsymbol{\theta})}{\delta + (1-\delta)G(\xi; \boldsymbol{\theta})} - \frac{n_1 + n_2}{1-\delta} \tag{20}$$

e

$$\frac{\partial l(\delta, \boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_j} = \frac{n_0(1-\delta)G'(\xi; \theta_j)}{\delta + (1-\delta)G(\xi; \boldsymbol{\theta})} + \frac{n_1[G'(\tau; \theta_j) - G'(\xi; \theta_j)]}{G(\tau; \boldsymbol{\theta}) - G(\xi; \boldsymbol{\theta})} + \sum_{i:y_i>\tau} \frac{g'(y_i; \theta_j)}{g_Y(y_i; \boldsymbol{\theta})}, \tag{21}$$

sendo $\dfrac{\partial G(\cdot;\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_j} = G'(\cdot;\theta_j)$ e $\dfrac{\partial g(\cdot;\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_j} = g'(\cdot;\theta_j)$, com $j = 1, 2, \ldots, p$.

Assim, resolvendo-se a equação obtida igualando-se (20) a zero obtém-se o estimador de máxima verossilhança (EMV) de δ dado $\boldsymbol{\theta}$,

$$\widehat{\delta}(\boldsymbol{\theta}) = \frac{n_0 - nG(\xi;\boldsymbol{\theta})}{n[1 - G(\xi;\boldsymbol{\theta})]}. \tag{22}$$

Substituindo-se δ por $\widehat{\delta}$ em (21) e igualando-a a zero, obtém-se o sistema de equações

$$\begin{cases} \dfrac{(n-n_0)G'(\xi;\theta_1)}{1-G(\xi;\boldsymbol{\theta})} + \dfrac{n_1[G'(\tau;\theta_1) - G'(\xi;\theta_1)]}{G(\tau;\boldsymbol{\theta}) - G(\xi;\boldsymbol{\theta})} + \displaystyle\sum_{i:y_i>\tau} \dfrac{g'(y_i;\theta_1)}{g_Y(y_i;\boldsymbol{\theta})} = 0. \\ \dfrac{(n-n_0)G'(\xi;\theta_2)}{1-G(\xi;\boldsymbol{\theta})} + \dfrac{n_1[G'(\tau;\theta_2) - G'(\xi;\theta_2)]}{G(\tau;\boldsymbol{\theta}) - G(\xi;\boldsymbol{\theta})} + \displaystyle\sum_{i:y_i>\tau} \dfrac{g'(y_i;\theta_2)}{g_Y(y_i;\boldsymbol{\theta})} = 0. \\ \qquad\qquad\qquad \vdots \\ \dfrac{(n-n_0)G'(\xi;\theta_p)}{1-G(\xi;\boldsymbol{\theta})} + \dfrac{n_1[G'(\tau;\theta_p) - G'(\xi;\theta_p)]}{G(\tau;\boldsymbol{\theta}) - G(\xi;\boldsymbol{\theta})} + \displaystyle\sum_{i:y_i>\tau} \dfrac{g'(y_i;\theta_p)}{g_Y(y_i;\boldsymbol{\theta})} = 0. \end{cases} \tag{23}$$

O vetor solução $\widehat{\boldsymbol{\theta}}$, do sistema de equações não lineares (23), será, então, o vetor de estimadores de máxima verossimilhança de $\boldsymbol{\theta}$ e pelo princípio de invariância, fazendo $\boldsymbol{\theta} = \widehat{\boldsymbol{\theta}}$, em (22) obtém-se, o estimador de máxima verossimilhança $\widehat{\delta}$ de δ dado por:

$$\widehat{\delta}(\widehat{\boldsymbol{\theta}}) = \frac{n_0 - nG(\xi;\widehat{\boldsymbol{\theta}})}{n[1 - G(\xi;\widehat{\boldsymbol{\theta}})]}. \tag{24}$$

Convém observar que o sistema de equações (23) não possui solução analítica, sendo necessário recorrer a métodos numéricos como de Newton-Raphson para solucioná-lo. Seguindo esse método, parte-se de valores iniciais $\delta^{(0)}$ e $\boldsymbol{\theta}^{(0)}$ para δ e $\boldsymbol{\theta}$ e os novos valores, $\delta^{(1)}$ e $\boldsymbol{\theta}^{(1)}$, serão:

$$\begin{bmatrix} \delta^{(1)} \\ \theta_1^{(1)} \\ \vdots \\ \theta_p^{(1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \delta^{(0)} \\ \theta_1^{(0)} \\ \vdots \\ \theta_p^{(0)} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 l(\delta,\boldsymbol{\theta})}{\partial \delta^2} & \frac{\partial^2 l(\delta,\boldsymbol{\theta})}{\partial \delta \partial \theta_1} & \cdots & \frac{\partial^2 l(\delta,\boldsymbol{\theta})}{\partial \delta \partial \theta_p} \\ \frac{\partial^2 l(\delta,\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_1 \partial \delta} & \frac{\partial^2 l(\delta,\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_1^2} & \cdots & \frac{\partial^2 l(\delta,\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_1 \partial \theta_p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 l(\delta,\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_p \partial \delta} & \frac{\partial^2 l(\delta,\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_p \partial \theta_1} & \cdots & \frac{\partial^2 l(\delta,\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_p^2} \end{bmatrix}^{-1}_{\substack{\delta = \delta^{(0)} \\ \boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta}^{(0)}}} \begin{bmatrix} \frac{\partial l(\delta,\boldsymbol{\theta})}{\partial \delta} \\ \frac{\partial l(\delta,\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial l(\delta,\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_p} \end{bmatrix}_{\substack{\delta = \delta^{(0)} \\ \boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta}^{(0)}}} \tag{25}$$

sendo:

$$\frac{\partial^2 l(\delta,\boldsymbol{\theta})}{\partial\delta^2} = -\frac{n_0(1-G(\xi;\boldsymbol{\theta}))^2}{[\delta+(1-\delta)G(\xi;\boldsymbol{\theta})]^2} - \frac{n+n_0}{(1-\delta)^2},$$

$$\frac{\partial^2 l(\delta,\boldsymbol{\theta})}{\partial\delta\partial\theta_j} = -\frac{n_0 G'(\xi;\theta_j)}{[\delta+(1-\delta)G(\xi;\boldsymbol{\theta})]^2},$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 l(\delta,\boldsymbol{\theta})}{\partial\theta_j^2} =& \frac{n_0(1-\delta)\{G''(\xi;\theta_j)[\delta+(1-\delta)G(\xi;\boldsymbol{\theta})]+(1-\delta)G'(\xi;\theta_j)^2\}}{[\delta+(1-\delta)G(\xi;\boldsymbol{\theta})]^2}\\ &+ n_1\left\{\frac{[G''(\tau;\theta_j)-G''(\xi;\theta_j)][G(\tau;\boldsymbol{\theta})-G(\xi;\boldsymbol{\theta})]-[G'(\tau;\theta_j)-G'(\xi;\theta_j)]^2}{[G(\tau;\boldsymbol{\theta})-G(\xi;\boldsymbol{\theta})]^2}\right\}\\ &+ \sum_{i:y_i>\tau}\frac{g''(y_i;\theta_j)g_Y(y_i;\boldsymbol{\theta})-g'(y_i;\theta_j)^2}{g_Y(y_i;\boldsymbol{\theta})^2},\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 l(\delta,\boldsymbol{\theta})}{\partial\theta_j\partial\theta_k} =& \frac{n_0(1-\delta)\{G''(\xi;\theta_j,\theta_k)[\delta+(1-\delta)G(\xi;\boldsymbol{\theta})]+(1-\delta)G'(\xi;\theta_j)G'(\xi;\theta_k)\}}{[\delta+(1-\delta)G(\xi;\boldsymbol{\theta})]^2}\\ &+ n_1\left\{\frac{[G''(\tau;\theta_j,\theta_k)-G''(\xi;\theta_j,\theta_k)][G(\tau;\boldsymbol{\theta})-G(\xi;\boldsymbol{\theta})]}{[G(\tau;\boldsymbol{\theta})-G(\xi;\boldsymbol{\theta})]^2}\right\}-\\ &- \left\{\frac{[G'(\tau;\theta_j)-G'(\xi;\theta_j)][G'(\tau;\theta_k)-G'(\xi;\theta_k)]}{[G(\tau;\boldsymbol{\theta})-G(\xi;\boldsymbol{\theta})]^2}\right\}\\ &\sum_{i:y_i>\tau}\frac{g''(y_i;\theta_j,\theta_k)g_Y(y_i;\boldsymbol{\theta})-g'(y_i;\theta_j)g'(y_i;\theta_k)}{g_Y(y_i;\boldsymbol{\theta})^2},\end{aligned}$$

com $j = 1,2,\ldots,p$ e $k = 1,2,\ldots,p$. Em seguida, considera-se $\delta^{(0)} = \delta^{(1)}$ e $\boldsymbol{\theta}^{(0)} = \boldsymbol{\theta}^{(1)}$ em (25) obtendo-se novos valores para $\delta^{(1)}$ e $\boldsymbol{\theta}^{(1)}$. Repete-se o procedimento até que $\delta^{(1)} \cong \delta^{(0)}$ e $\boldsymbol{\theta}^{(1)} \cong \boldsymbol{\theta}^{(0)}$ ressaltando que os parâmetros a serem estimados pela solução da equação (23), referem-se à distribuição adotada para modelar a parte contínua da mistura.

Por outro lado, considerando $\delta = \widehat{\delta}(\boldsymbol{\theta})$, em (19) o logaritmo da função de

verossimilhança é

$$
\begin{aligned}
l^*(\boldsymbol{\theta}) &= l(\widehat{\delta}(\boldsymbol{\theta}), \boldsymbol{\theta}) \\
&= n_0 \log\left(\frac{n_0}{n}\right) + n_1 \log\left[G(\tau;\boldsymbol{\theta}) - G(\xi;\boldsymbol{\theta})\right] \\
&\quad + (n_1+n_2)\log\left(\frac{n-n_0}{n[1-G(\xi;\boldsymbol{\theta})]}\right) + \sum_{i\in Q}\log[g_Y(y_i;\boldsymbol{\theta})] \\
&= n_0 \log\left(\frac{n_0}{n}\right) + n_1 \log\left[G(\tau;\boldsymbol{\theta}) - G(\xi;\boldsymbol{\theta})\right] \\
&\quad + (n_1+n_2)\log\left(\frac{n_1+n_2}{n[1-G(\xi;\boldsymbol{\theta})]}\right) + \sum_{i:y_i>\tau}\log[g_Y(y_i;\boldsymbol{\theta})], \qquad (26)
\end{aligned}
$$

ou ainda,

$$
l^*(\boldsymbol{\theta}) \propto n_1 \log\left[G(\tau;\boldsymbol{\theta}) - G(\xi;\boldsymbol{\theta})\right] - (n_1+n_2)\log\left[1-G(\xi;\boldsymbol{\theta})\right] + \sum_{i:y_i>\tau}\log[g_Y(y_i;\boldsymbol{\theta})]. \qquad (27)
$$

Segundo Cordeiro (1999, p. 116), os máximos de $l^*(\boldsymbol{\theta})$ e $l(\delta,\boldsymbol{\theta})$ coincidem e as estimativas de máxima verossimilhança perfiladas $\widehat{\delta}(\boldsymbol{\theta})$ e $\boldsymbol{\theta}$ são iguais às estimativas usuais de EMV. Assim, derivando-se (26) em relação aos parâmetros em $\boldsymbol{\theta}$, obtém-se o sistema de equações não lineares (23), cujo vetor solução $\boldsymbol{\theta}$ pode ser obtido pelo método de Newton-Raphson com sistema de equações recursivas dadas por

$$
\begin{bmatrix} \theta_1^{(1)} \\ \vdots \\ \theta_p^{(1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \theta_1^{(0)} \\ \vdots \\ \theta_p^{(0)} \end{bmatrix} - \left[J(\boldsymbol{\theta}^{(0)})\right]^{-1} \begin{bmatrix} \frac{\partial l(\delta,\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial l(\delta,\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_p} \end{bmatrix}_{\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}^{(0)}} \qquad (28)
$$

sendo

$$
J(\boldsymbol{\theta}^{(0)}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 l(\delta,\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_1^2} & \cdots & \frac{\partial^2 l(\delta,\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_1 \partial \theta_p} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 l(\delta,\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_p \partial \theta_1} & \cdots & \frac{\partial^2 l(\delta,\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_p^2} \end{bmatrix}_{\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}^{(0)}}
$$

a matriz de informação de Fisher observada.

Como pode ser notado a partir do estimador de δ, equação (22), vetores de realizações de Y podem levar a $n_0 < nG(\xi;\boldsymbol{\theta})$ obtendo-se, dessa forma, estimativas negativas para δ e portanto, fora do espaço paramétrico. Problema como este também foi encontrado e discutido por Taylor et al. (2001) que sugeriram, para solucioná-lo, uma maximização com restrição ao espaço paramétrico.

3.2.2 Teste do modelo de mistura

Quando $\delta = 0$, inferências feitas com estimativas obtidas por meio de máxima verossimilhança de um modelo de mistura podem ser menos eficientes que as estimativas obtidas pela maximização de um modelo que envolve somente censura. No caso, tem-se que $\widehat{\delta}$ é limitado superiormente por $\dfrac{n_0}{n}$, mas é estimado menor do que zero nos casos em que $n_0 < nG(\xi; \boldsymbol{\theta})$, sugerindo que o modelo de mistura talvez não seja é apropriado para os dados.

Uma forma de evitar estimativas negativas é impor o espaço paramétrico $[0, 1]$ para δ, como restrição durante as estimações, o que, no entanto, pode levar a estimativas nulas para δ em alguns casos. Seguindo as idéias apresentadas, num estudo com mistura de uma distribuição degenerada em zero com uma distribuição log-normal, Taylor et al. (2001), concluíram que as estimativas obtidas para os parâmetros da distribuição log Normal permanecem as mesmas, independente de se considerar o modelo de mistura com restrição ou o modelo censurado sem mistura. Demonstraram, ainda, que não há alteração no logaritmo da função de verossimilhança, porém destacaram alterações na matriz de variâncias e covariâncias observada.

Uma alternativa consiste em testar a hipótese $H_0 :\ \delta = 0$ contra a hipótese $H_a :$ $\delta > 0$ antes de decidir entre um dos modelos. No entanto, conforme relatado por Molenberghs e Verbeke (2007), há situações, em que o valor máximo da função de verossimilhança ocorre na fronteira do espaço paramétrico e nestes casos, a distribuição nula da estatística da razão de verossimilhança não converge, necessariamente, para uma distribuição Qui-quadrado com 1 grau de liberdade (χ^2_1). Assim, seja: $l(\delta)$ o logaritmo da função de verossimilhança, suprimindo a dependência dos outros parâmetros; $\widehat{\delta_r}$ o estimador de δ sob restrição no espaço paramétrico $[0, 1]$ e $\widehat{\delta_s}$ o estimador de δ sem restrição. Relatam, então duas situações distintas, $\widehat{\delta_r} = \widehat{\delta_s}$ ou $\widehat{\delta_s} < \widehat{\delta_r} = 0$, que correspondem respectivamente, aos casos A e B ilustrados na Figura 9. Supondo que H_0 seja verdadeira, os casos A e B ocorrem, segundo Self e Liang (1987), com probabilidade 0,5 cada e o caso C com probabilidade nula.

No caso A, a evidência em favor de H_1 pode ser então medida pela estatística clássica da razão de verossimilhança, dada por

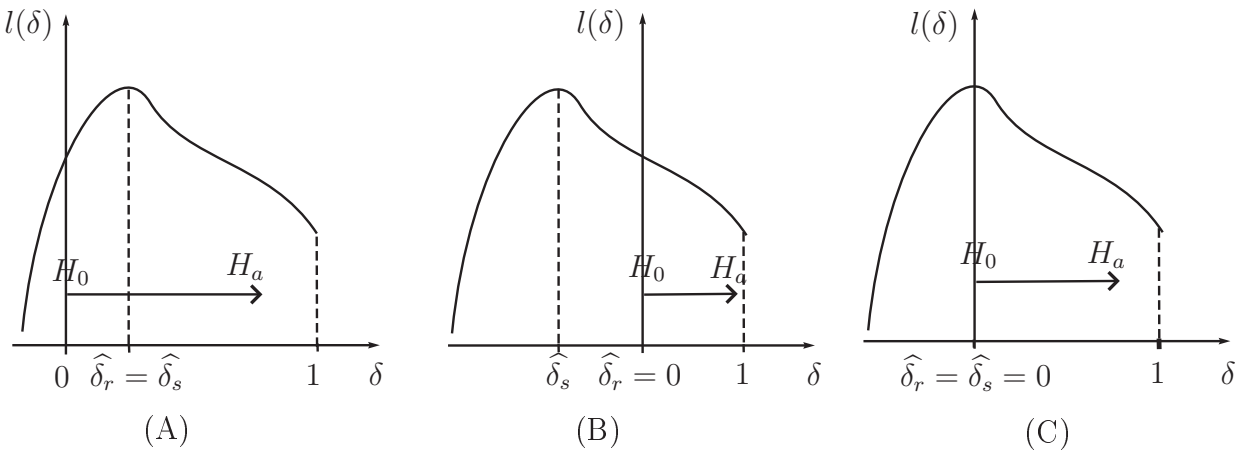


Figura 9 – Representação de três diferentes situações no teste da hipótese $H_0: \ \delta = 0$ contra $H_a: \ \delta > 0$, em que $l(\delta)$ representa o logaritmo da função de verossimilhança sem restrição

$$T_{RV} = -2\left\{ \max_{H_0} l(\delta) - \max_{H_a} l(\delta) \right\} = -2\left[l(0) - l(\widehat{\delta}_s) \right],$$

com distribuição nula assintótica χ^2_1, de acordo com Mood, Graybill e Boes (1974).

No caso B, entretanto, observa-se que $\widehat{\delta}_r$ não fornece evidências contra H_0 em favor de H_a, pois, a função de verossimilhança é maximizada em δ, localizado na vizinhança de zero, respeitando o espaço paramétrico, fornecendo $T_{RV} = 0$. Assumindo-se que, sob $H_0: \ \delta = 0$, os dois casos ocorrem com probabilidades iguais a 0,5 e a distribuição nula assintótica de $T_{RV}(\delta)$ pode ser obtida de

$$\begin{aligned} P\big(T_{RV} > c|H_0\big) &= P\big(\widehat{\delta} < 0|H_0\big)P\big(T_{RV} > c|H_0, \widehat{\delta} < 0\big) + P\big(\widehat{\delta} \geq 0|H_0\big)P\big(T_{RV} > c|H_0, \widehat{\delta} \geq 0\big) \\ &= \frac{1}{2}P\big(\chi^2_0 > c\big) + \frac{1}{2}P\big(\chi^2_1 > c\big). \end{aligned} \tag{29}$$

sendo χ^2_0 uma variável aleatória com distribuição qui-quadrado degenerada com ponto de massa 1 próximo de zero, como apresentado em McLachlan e Peel (2000) e nomeada de "chi-bar-squared" (qui-quadrado-barra) por Lindsay (1995). Logo, T_{RV} é assintoticamente distribuída com distribuição de mistura $0{,}5\chi^2_0 + 0{,}5\chi^2_1$, resultado demonstrado formalmente, por Self e Liang (1987) e Maller et al. (1998) com aplicações dadas por Maller e Zhou (1995) e Taylor et al. (2001).

Seguindo as idéias de Maller e Zhou (1995), será apresentado, a seguir, o procedimento para testar a hipótese nula $H_0: \ \delta = 0$ contra a hipótese $H_a: \ \delta > 0$ para o modelo em questão.

Considere $\widehat{\boldsymbol{\omega}} = (\widehat{\delta}, \widehat{\boldsymbol{\theta}})$, o vetor de estimadores de máxima verossimilhança (EMV) obtidos ajustando o modelo (14), assumindo $\widehat{\delta} = 0$, se a função de verossimilhança é maximizada na fronteira, e $\widehat{\boldsymbol{\omega}}_{H_0} = (0, \widehat{\boldsymbol{\theta}})$, o correspondente EMV sob H_0. Seja $l(\boldsymbol{\omega})$ o logaritmo da função de verossimilhança e

$$T_{RV} = -2\Big[l(\widehat{\boldsymbol{\omega}}_{H_0}) - l(\widehat{\boldsymbol{\omega}})\Big]$$

a estatística usada para testar a hipótese H_0. Então, de (29) tem-se que T_{RV} é assintoticamente distribuído com uma mistura 50% qui-quadrado com 1 grau liberdade e 50% uma massa próxima de zero, ou seja,

$$P\big(T_{RV} \leq x\big) \to \frac{1}{2} + \frac{1}{2}P\big(\chi_1^2 \leq x\big) \tag{30}$$

com $n \to \infty$, para $x \geq 0$. Logo, para um teste com nível de significância 5% tem-se que

$$P\big(T_{RV} \leq c_{0,95}\big) \to \frac{1}{2} + \frac{1}{2}P\big(\chi_1^2 \leq c_{0,95}\big)$$

sendo $c_{0,95}$ o 95º percentil desta distribuição, calculado da seguinte forma:

$$\frac{1}{2} + \frac{1}{2}P\big(\chi_1^2 \leq c_{0,95}\big) = 0,95 \Rightarrow P\big(\chi_1^2 \leq c_{0,95}\big) = 0,90.$$

Portanto $c_{0,95} = 2,71$ e nesse caso, como critério de decisão, rejeita-se H_0 se $T_{RV} > 2,71$ e considera-se uma forte evidência de que o modelo de mistura seja adequado. Alternativamente, compara-se o nível de significância com o valor p, dado por

$$p = P\big(T_{RV} > T_{RV\,cal}\big) = \frac{1}{2}\Big[1 + P\big(\chi_1^2 \leq T_{RV\,cal}\big)\Big],$$

sendo $T_{RV\,cal}$ a estatística T_{RV} considerando $\boldsymbol{\omega} = \widehat{\boldsymbol{\omega}}$.

3.2.3 Identificabilidade do modelo de mistura

Questiona-se frequentemente a identificabilidade de um modelo proposto e principalmente se é um modelo de mistura. O questionamento se dá pelo fato de que, para um modelo cujos parâmetros são não identificáveis, pode haver um grande número de combinações que levam ao mesmo ajuste das observações, tornando impraticável a estimação dos parâmetros.

Seja $\mathcal{F}$ o conjunto de todas as misturas de dois componentes definidas por (13), então,

$$\mathcal{F} = \Big\{ F_Y(y;\boldsymbol{\Psi}) : F_Y(y;\boldsymbol{\Psi}) = \delta_1 I_{\{0\}}(y) + \delta_2 I_{(0,\infty)}(y) g_Y(y;\boldsymbol{\theta}), \delta_j \geq 0, \delta_1 + \delta_2 = 1, \\ g_Y(y;\boldsymbol{\theta}) \in \mathcal{G}, j = 1,2 \Big\}$$

sendo

$$\mathcal{G} = \Big\{ g_Y(y;\boldsymbol{\theta}), \boldsymbol{\theta} \in \Omega, y \in [0,\infty) \Big\},$$

uma família de funções de distribuição acumulada. Com base em Titterington, Makov e Smith (1985, p. 36), McLachlan e Peel (2000, p. 26), Yakowitz e Spragins (1968) e Li, Taylor e Sy (2001), a definição de identificabilidade para modelos derivados de (13) é

Definição 3.1 *(Identificabilidade) Seja*

$$F_Y(y;\boldsymbol{\Psi}) = \delta_1 I_{\{0\}}(y) + \delta_2 I_{(0,\infty)}(y) g_Y(y;\boldsymbol{\theta}) \quad e \quad F_Y^*(y;\boldsymbol{\Psi}^*) = \delta_1^* I_{\{0\}}(y) + \delta_2^* I_{(0,\infty)}(y) g_Y(y;\boldsymbol{\theta}^*)$$

tal que $F_y(\cdot), F_y^*(\cdot) \in \mathcal{F}$. *Esta classe de misturas finitas é dita ser identificável para todo* $\boldsymbol{\Psi} \in \Omega$ *quando*

$$F_Y(y;\boldsymbol{\Psi}) \equiv F_Y^*(y;\boldsymbol{\Psi}^*)$$

se e somente se, $\delta_j = \delta_j^*$, $(j = 1,2)$, $\boldsymbol{\Psi} = \boldsymbol{\Psi}^*$ *para todo* $y \in [0,\infty)$.

Pela definição 3.1, o modelo de mistura será identificável se existir um único vetor de estimativas dos parâmetros que defina a distribuição dos dados observados.

3.2.4 Adequação do modelo ajustado

Medidas de discrepância entre os modelos propostos $F_Y(Y)$ e a distribuição acumulada empírica $F_n(Y)$ das observações serão utilizadas para avaliar a qualidade do ajuste de cada modelo.

Dado um conjunto $\{y_1, \ldots, y_n\}$ de observações de uma variável aleatória Y, a função de distribuição empírica de Y é definida como

$$F_n(y) = \frac{1}{n} \sum_{t=1}^{n} I(y_t \leq y)$$

ou seja, é o número de observações menores ou iguais a y dividido por n.

Uma medida simples, é o viés relativo absoluto entre $F_Y(y_i)$ e $F_n(y_i)$, dado por

$$Dif = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left|\frac{F_Y(y_i) - F_n(y_i)}{F_n(y_i)}\right|.$$

Dessa forma, quanto menor o valor de Dif, mais indicado será o modelo ajustado aos dados.

A seguir serão apresentados métodos mais formais para verificação do ajuste do modelo baseados na distância entre $F_Y(y)$ e $F_n(y)$, que serão chamados de estatísticas de função de distribuição empírica.

Suponha Y uma variável aleatória com função de distribuição $F_Y(y)$, e $Y_1, Y_2, \ldots, Y_n$ uma amostra aleatória de Y, sendo os valores $Y_{(1)}, Y_{(2)}, \ldots, Y_{(n)}$ obtidos das observações, quando rearranjadas em ordem crescente. Deseja-se testar as hipóteses

$$H_0: \; F_Y(y) = F_0(y) \quad \text{contra} \quad H_1: \; F_Y(y) \neq F_0(y), \tag{31}$$

considerando $F_0(y)$ uma função de distribuição conhecida. Nesse caso, de acordo com Zhang (2002), as estatísticas Z_y para testar as hipóteses são baseadas em distâncias verticais entre $F_Y(y)$ e $F_n(y)$ e são divididas em dois tipos, definidas por,

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} Z_y \, dw(y) \tag{32}$$

e

$$Z_{\max} = \sup_{y \in (-\infty, \infty)} Z_y w(y), \tag{33}$$

sendo $w(y)$ uma função peso.

Uma estatística candidata para Z_y é a estatística χ^2_y de Pearson, segundo Zhang (2002), escrita na forma

$$\chi^2_y = \frac{n[F_n(y) - F_0(y)]^2}{F_0(y)[1 - F_0(y)]}.$$

Com a escolha de χ^2_y para Z_y e diferentes funções peso obtém-se as tradicionais estatísticas de Kolmogorov-Smirnov, Cramér-von Mises e Anderson-Darling, apresentadas, respectivamente, a seguir:

i) Estatística de Kolmogorov-Smirnov.

Considerando-se $w(y) = \{F_0(y)[1 - F_0(y)]\}/n$ em (33), tem-se que

$$KS^2 = \left\{\sup_{y \in (-\infty, \infty)} |F_n(y) - F_0(y)|\right\}^2 = \left\{\max_{1 \leq i \leq n}\left[\max\left(\frac{i}{n} - F_0(y_{(i)}), F_0(y_{(i)}) - \frac{i-1}{n}\right)\right]\right\}^2$$

e portanto,

$$KS = \left| \max_{1 \leq i \leq n} \left[\max \left(\frac{i}{n} - F_0(y_{(i)}), F_0(y_{(i)}) - \frac{i-1}{n} \right) \right] \right|$$

conhecida por estatística de Kolmogorov-Smirnov, que é a maior distância vertical entre $F_n(y_i)$ e $F_Y(y_i)$. Intuitivamente, essa estatística é capaz de detectar discrepâncias próximas ao centro da distribuição mas tem dificuldade em detectar discrepâncias sutis nas caudas da distribuição.

ii) Estatística de Cramér-von Mises.

Considerando-se $dw(y) = F_0(y)[1-F_0(y)]\, dF_0(y)$ em (32), tem-se a estatística de Cramér-von Mises, dada por

$$W^2 = n \int_{-\infty}^{\infty} \left(F_n(y) - F_0(y) \right)^2 dF_0(y) = \frac{1}{12n} + \sum_{i=1}^{n} \left(F_0(y_{(i)}) - \frac{i-0,5}{n} \right)^2$$

que é considerada mais poderosa que a estatística KS, mas não é a melhor para detectar discrepâncias nas caudas.

iii) Estatística de Anderson-Darling.

Considerando-se $w(y) = F_0(y)$ em (32), tem-se a estatística de Anderson-Darling dada por:

$$\begin{aligned} A^2 &= n \int_{-\infty}^{\infty} \frac{[F_n(y) - F_0(y)]^2}{F_0(y)[1 - F_0(y)]}\, dF_0(y) \\ &= -n - \frac{2}{n} \sum_{i=1}^{n} \left[\left(i - \frac{1}{2} \right) \log[F_0(y_{(i)})] + \left(n - i + \frac{1}{2} \right) \log[1 - F_0(y_{(i)})] \right. \end{aligned}$$

que é, intuitivamente, mais eficiente que KS^2 e W^2 para a detecção de discrepâncias nas caudas da distribuição.

Zhang (2002) apresenta, ainda, alternativas para KS^2, W^2 e A^2 que podem ser mais eficientes que as estatísticas tradicionais. Para isso o autor utiliza, como candidata a Z_y, a estatística da razão de verossimilhanças G_y^2, dada por,

$$G_y^2 = 2n \left[F_n(y) \log \left(\frac{F_n(y)}{F_0(y)} \right) + \left(1 - F_n(y) \right) \log \left(\frac{1 - F_n(y)}{1 - F_0(y)} \right) \right].$$

Considerando então $Z_y = G_y^2$, com funções peso apropriadas tem-se as novas estatísticas:

i) considerando-se $w(y) = 1$ em (33),

$$Z_k = \max_{1 \leq i \leq n} \left[\big(i - 0,5\big) \log\left(\frac{i - 0,5}{nF_0(y_{(i)})} \right) + \big(n - i + 0,5\big) \log\left(\frac{n - i + 0,5}{n\big(1 - F_0(y_{(i)})\big)} \right) \right]$$

ii) considerando-se $dw(y) = \Big\{ F_0(y)[1 - F_0(y)] \Big\}^{-1} dF_0(y)$ em (32), tem-se uma estatística alternativa à de Cramér-von Mises, dada por

$$Z_W = \sum_{i=1}^{n} \left\{ \log\left[\frac{F_0(y_{(i)})^{-1} - 1}{\frac{n-0,5}{i-0,75} - 1} \right] \right\}^2$$

iii) considerando-se $dw(y) = \Big\{ F_n(y)[1 - F_n(y)] \Big\}^{-1} dF_n(y)$ em (32), tem-se a estatística

$$Z_A = -\sum_{i=1}^{n} \left[\frac{\log\big(F_0(y_{(i)})\big)}{n - i + 0,5} + \frac{\log\big(1 - F_0(y_{(i)})\big)}{i - 0,5} \right].$$

Apesar da similaridade entre as estatísticas Z_K, Z_W e Z_A com as tradicionais estatísticas, KS^2, W^2 e A^2 respectivamente, Zhang (2002), por meio de estudos de simulações conclui que as novas estatísticas são mais poderosas.

Na formulação das hipóteses (31) foi considerado que $F_0(Y)$ era uma função de distribuição conhecida. Entretanto, segundo D'Agostino e Stephens (1986) e Zhang (2002), se os parâmetros da distribuição $F_0(Y)$ não são conhecidos, eles devem ser substituídos por suas estimativas. Porém, nesse caso estará se realizando um teste de ajuste para uma família de distribuições ao invés de uma distribuição específica e como resultado, as distribuições amostrais das estatísticas serão diferentes.

Por serem estatísticas baseadas na distância entre $F_n(Y)$ e $F_Y(Y)$, a hipótese H_0 deve ser rejeitada para grandes valores das mesmas, isto é, grandes distâncias. Entretanto, há dificuldades em rejeitar ou não H_0 com certo grau de confiança, pois as distribuições exatas das estatísticas de teste são difíceis de serem tratadas e definidas, haja visto que diferem para diferentes distribuições colocadas como hipótese nula e para diferentes tamanhos de amostra. Alguns autores como D'Agostino e Stephens (1986), fornecem tabelas para as estatísticas tradicionais e distribuições comumente utilizadas.

Uma outra forma de obter a probabilidade de significância, para decidir pela rejeição ou não de H_0, é a utilização do método de Monte Carlo, conforme Ross (2006, p.

227). Para esse propósito considere T a estatística teste utilizada, que pode ser KS^2, W^2, A^2, Z_K, Z_W ou Z_A, e T_0 o valor observado de T. Então uma estimativa do valor p pelo método Monte Carlo baseado em M valores de T simulados independentemente sob H_0 é dado por

$$p_{MC} = P(T \geq T_0|H_0) = \frac{\text{número de valores de } T \geq T_0}{M},$$

cuja estimativa pode ser obtida por meio algoritmo:

1 - Ajusta-se a distribuição nula $F_0(y)$ aos valores observados $y_1, \ldots, y_n$ e obtém-se a estatística T_0 do teste;

2 - Gera-se uma amostra aleatória independente $y_1^*, \ldots, y_n^*$ da distribuição nula ajustada $\widehat{F_0(y)}$ e calcula-se a estatística do teste T_0^*;

3 - O passo anterior é repetido M vezes e então calcula-se

$$p_{MC} = P(T \geq T_0|H_0) = \frac{\text{número de valores de } T_0^* \geq T_0}{M}.$$

Tem-se, então, em p_{MC} uma estimativa do valor p, rejeitando-se a hipótese H_0 para p_{MC} menor que um nível de significância α fixado.

3.2.5 Comparação de métodos de estimação por meio de simulação

Para comparar diferentes métodos de estimação frequentemente se recorre a simulações. Uma idéia consiste em se retirar um número m de amostras de tamanho n de uma população e aplicar os métodos de interesse para cada amostra, obtendo-se, assim, m estimativas para cada parâmetro do modelo considerado. Para se escolher o melhor método de estimação pode-se considerar tanto a dispersão das estimativas, quanto a distância das estimativas ao valor nominal usado para a geração das amostras. De forma geral, um método será preferido à outro se este tiver acurácia e precisão. A acurácia e a precisão podem ser avaliadas por meio do viés relativo médio percentual e por meio do erro quadrático médio, sendo o erro quadrático médio uma combinação de acurácia e precisão. Essas medidas são discutidas em Casella e Berger (2002, p. 330) e em Mood, Graybill e Boes (1974, p. 293).

O viés relativo médio percentual é definido por

$$VR\% = 100\frac{\mathbb{E}(\widehat{\theta}) - \theta}{\theta}$$

que pode ser estimado por

$$\text{VR\%} = \left[\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\frac{\widehat{\theta}_i}{\theta} - 1\right]100, \tag{34}$$

sendo $\widehat{\theta}_i$ a estimativa do parâmetro θ para a i-ésima amostra, $(i = 1, \ldots, m)$.

O EQM, por sua vez, é o valor esperado do erro médio quadrático, isto é, para um estimador $\widehat{\theta}$ de um parâmetro θ o EQM é dado por

$$EQM(\widehat{\theta}) = \mathbb{E}[(\widehat{\theta} - \theta)^2],$$

que pode ser decomposto, em dois componentes que são o viés e a variância das estimativas do estimador, como segue

$$\begin{aligned} EQM(\widehat{\theta}) &= \mathbb{E}[(\widehat{\theta} - \theta)^2] = \mathbb{E}\big[\widehat{\theta}^2 - 2\widehat{\theta}\theta + \theta^2\big] = \mathbb{E}\big(\widehat{\theta}^2\big) - 2\theta\mathbb{E}\big(\widehat{\theta}\big) + \theta^2 \\ &= \mathbb{E}\big(\widehat{\theta}^2\big) - \big[\mathbb{E}\big(\widehat{\theta}\big)\big]^2 + \big[\mathbb{E}\big(\widehat{\theta}\big)\big]^2 - 2\theta\mathbb{E}\big(\widehat{\theta}\big) + \theta^2 = \mathbb{E}\big(\widehat{\theta}^2\big) - \big[\mathbb{E}\big(\widehat{\theta}\big)\big]^2 + \big[\mathbb{E}\big(\widehat{\theta}\big) - \theta\big]^2 \\ &= \text{Var}\big(\widehat{\theta}\big) + \big[\text{Viés}\big(\widehat{\theta}\big)\big]^2. \end{aligned}$$

O viés de um estimador $\widehat{\theta}$ de θ é a diferença entre o valor esperado de $\widehat{\theta}$ e θ, e considerando-se m estimativas do parâmetro θ tem-se

$$\widehat{\text{Viés}\big(\widehat{\theta}\big)} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\widehat{\theta}_i - \theta.$$

Logo, uma estimativa do erro quadrático médio é dada por

$$EQM = EQM(\widehat{\theta}) = \frac{1}{m-1}\sum_{i=1}^{m}\big(\widehat{\theta}_i - \overline{\theta}^*\big)^2 + \left[\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\widehat{\theta}_i - \theta\right]^2, \tag{35}$$

sendo $\overline{\theta}^*$ a média aritmética das m estimativas de θ.

3.2.6 Mistura com distribuição exponencial

Como primeiro modelo que pode ser utilizado para análise de dados provenientes da quantificação da contaminação com aflatoxina em alimentos, considerou-se o caso particular do modelo geral de mistura (14) em que Y tem distribuição exponencial com parâmetro θ, denominado modelo de mistura exponencial (ME).

Para isso, considere a função de densidade exponencial de Y, com parâmetro θ, dada por

$$g_Y(y, \theta) = \frac{1}{\theta}\exp\left\{-\frac{y}{\theta}\right\}, \tag{36}$$

sendo $y \geq 0$, e $\theta > 0$, a função de geradora de momentos de Y,

$$M_{g_Y(y,\theta)}(t) = (1 - \theta t)^{-1}$$

e o k-ésimo momento de Y, dado por

$$\mathbb{E}_{g_Y(y,\theta)}(Y^k) = \left.\frac{d^k M_{g_Y(y,\theta)}(t)}{dt^k}\right|_{t=0} = \Gamma(k+1)\theta^k. \tag{37}$$

Assim, os dois primeiros momentos em torno da origem para a distribuição exponencial são:

$$\mu_g = \mathbb{E}_{g_Y(y,\theta)}(Y^1) = \theta \tag{38}$$

e

$$\mathbb{E}_{g_Y(y,\theta)}(Y^2) = 2\theta^2. \tag{39}$$

Consequentemente,

$$\sigma_g^2 = \mathrm{Var}_{g_Y(y,\theta)}(Y) = 2\theta^2 - \theta^2 = \theta. \tag{40}$$

Substituindo a função de densidade exponencial (36) em (14), tem-se a densidade do modelo ME dada por

$$f_Y(y;\delta,\theta) = \begin{cases} \delta & \text{, se } y = 0 \\ (1-\delta)\dfrac{1}{\theta}\exp\left\{-\dfrac{y}{\theta}\right\} & \text{, se } y > 0 \end{cases} \tag{41}$$

cujo k-ésimo momento da variável aleatória inflacionada de zeros, obtido substituindo-se (37) em (15) é

$$\mu_k = \mathbb{E}(Y^j) = (1-\delta)\Gamma(k+1)\theta^k, \tag{42}$$

em que $k > 0$. Logo, os dois primeiros momentos de Y são dados por

$$\mathbb{E}(Y) = (1-\delta)\theta \tag{43}$$

e

$$\mathbb{E}(Y^2) = (1-\delta)2\theta^2 \tag{44}$$

e a variância de Y será

$$\mathrm{Var}(Y) = (1-\delta)2\theta^2 - \big[(1-\delta)\theta\big]^2 = (1-\delta^2)\theta^2 \tag{45}$$

que, alternativamente, pode ser obtido por meio da substituição de (38) e (40) em (16). A variância de $\mathbb{E}(Y)$ pode ser aproximada por meio da equação (78), apresentado no Anexo C.

A seguir será verificada a identificabilidade do modelo ME.

Teorema 3.1 (Identificabilidade de ME) *$F_Y(y;\boldsymbol{\Psi}) = \delta_1 I_{\{0\}}(y) + \delta_2 I_{(0,\infty)}(y) G_Y(y;\boldsymbol{\theta})$, $y \in [0,\infty)$ e $G_Y(\cdot)$ é uma função de distribuição exponencial de parâmetro θ, e $\boldsymbol{\Psi} = (\delta_1, \delta_2, \theta)$. Então, $F_Y(y;\boldsymbol{\Psi})$ é identificável em $y \in [0,\infty)$.*

Prova:

($\Leftarrow$) Se $\delta_j = \delta_j^*$ e $\boldsymbol{\Psi} = \boldsymbol{\Psi}^*$, $F_Y(y;\boldsymbol{\Psi}) \equiv F_Y^*(y;\boldsymbol{\Psi}^*)$, para todo $y \in [0,\infty)$.

($\Rightarrow$)

(i) Para o "se e somente se", supondo $F_Y(y;\boldsymbol{\Psi}) = F_Y^*(y;\boldsymbol{\Psi}^*)$, então $\delta_1 + \delta_2(y) G_Y(y;\boldsymbol{\theta}) = \delta_1^* + \delta_2^* G_Y(y;\boldsymbol{\theta}^*)$. Como $\delta_1 + \delta_2 = 1 \Leftrightarrow \delta_1 = 1 - \delta_2$, fazendo $\delta_2 = \delta$, tem-se que

$$\begin{aligned} -\delta + \delta G_Y(y;\boldsymbol{\theta}) &= -\delta^* + \delta^* G_Y(y;\boldsymbol{\theta}^*) \\ \delta\Big[1 - G_Y(y;\boldsymbol{\theta})\Big] &= \delta^*\Big[1 - G_Y(y;\boldsymbol{\theta}^*)\Big] \\ \frac{\delta}{\delta^*} &= \frac{1 - G_Y(y;\boldsymbol{\theta}^*)}{1 - G_Y(y;\boldsymbol{\theta})} \end{aligned}$$

Mas $G_Y(\cdot)$ é uma distribuição exponencial de parâmetro θ, isto é,

$$G_Y(y;\theta) = 1 - \exp\left\{-\frac{y}{\theta}\right\},$$

logo

$$\frac{\delta}{\delta^*} = \exp\left\{-y\left[\frac{1}{\theta} - \frac{1}{\theta^*}\right]\right\}.$$

Os dois lados da igualdade anterior são constantes positivas independente do valor de y no intervalo $(0,\infty)$. Com $\theta = \theta^*$, o lado direito da igualdade será 1 e para a igualdade ser verdadeira é necessário que $\delta = \delta^*$. E sendo $\delta = \delta^*$, a igualdade só será verdadeira quando $\theta = \theta^*$.

(ii) Se $y = 0 \Rightarrow F_Y(y;\boldsymbol{\Psi}) = F_Y^*(y;\boldsymbol{\Psi}^*) \Rightarrow \delta = \delta^*$.

Logo, com (i) e (ii) conclui-se que $F_Y(y;\boldsymbol{\Psi}) = F_Y^*(y;\boldsymbol{\Psi}^*)$ se $\delta = \delta^*$ e $\theta = \theta^*$. Portando, a distribuição de mistura (13) será identificável quando $G_Y(\cdot)$ for uma distribuição exponencial.

■

Para avaliar o desempenho da modelagem considerando o modelo de mistura com distribuição exponencial, pode-se recorrer a estudos de simulação.

O procedimento de simulação proposto neste trabalho consiste dos seguintes passos:

1 - Fixar $(\xi, \tau) = (0{,}11; 1{,}22)$ ou $(\xi, \tau) = (0{,}50; 1{,}00)$;

2 - Considerar todos os trios $(\delta, n, \mathbb{E}(Y))$ baseados nos vetores $\delta = (0{,}10; 0{,}15; 0{,}20; 0{,}25; 0{,}30; 0{,}35; 0{,}40; 0{,}45)$; $n = (15; 30; 50; 100)$ e $\mathbb{E}(Y) = (2; 3; 4; \ldots; 40)$;

3 - Para cada trio do passo (2), extrair uma amostra aleatória de tamanho n, $\{u_1, u_2, \ldots, u_n\}$, da distribuição uniforme $U[0, 1]$ e uma amostra aleatória de tamanho n, $\{w_1, w_2, \ldots, w_n\}$, de $W \sim \text{Exp}(\theta)$, isto é, de uma distribuição exponencial com parâmetro θ;

4 - Fazer $y_i =$"ND" (não detectado) se $u_i < \xi$, $y_i =$"NQ" (não quantificado) se $\xi \leq w_i \leq \tau$ e $y_i = w_i$ se $w_i > \tau$.

Para cada trio obtido no passo (2), repetir os passos (1) a (4) 4000 vezes. Como sugestão, para implementação, para a maximização da função de verossimilhança (19) pode-se utilizar o algoritmo quasi-Newton `BFGS`, através da função `optim`, que está implementado no pacote `stats` do programa estatístico R (R DEVELOPMENT CORE TEAM, 2008).

O algoritmo BFGS, de acordo com Haupt e Haupt (2004), recebeu esse nome devido a quatro autores que o desenvolveram independentemente entre 1960 e 1970: Broyden, Fletcher, Goldfarb e Shanno. Este algoritmo é uma variação do método de Newton para otimização não-linear e é considerado quasi-Newton por prescrever o próximo melhor ponto para ser usado na iteração de forma equivalente ao método de Newton, contudo sem utilizar uma aproximação da matriz Hessiana. Apresenta, segundo Haupt e Haupt (2004), a vantagem de convergir rápido, porém eventualmente para pontos próximos do ponto inicial.

Convém observar que a escolha dos valores utilizados paras simulações, foi realizada com base nas informações fornecidas pelo pesquisador do Laboratório de Micotoxinas do Departamento de Agroindústria, Alimentos e Nutrição - ESALQ/USP, bem como em artigos científicos sobre aflatoxinas em grãos. Além disso, buscou-se estudar o comportamento do

modelo para populações cujo valor esperado encontra-se em torno de 20 ppb, que é o limite máximo de aflatoxina B1 em grãos de milho permitido no Brasil.[2]

Para a estimação dos parâmetros δ e θ no entanto, é necessário utilizar métodos iterativos, que requerem valores iniciais de δ e θ. Como valores iniciais de δ e θ podem-se utilizar as estimativas obtidas pelo método dos momentos, dados, respectivamente, por

$$\delta^{(0)} = \frac{n_0}{n}$$

e

$$\theta^{(0)} = \frac{1}{n_2} \sum_{i:y_i>\tau} y_i.$$

sendo n_0 o número de observações menores que ξ, o limite de detecção, e n_2 o número de observações maiores que τ, o limite de quantificação.

3.2.7 Mistura com distribuição de Weibull

Como segundo modelo, propõe-se considerar que as observações, exceto os zeros estruturais, seguem a distribuição de Weibull com parâmetros de forma e de escala dados, respectivamente, por α e β (Notação: $\mathrm{W}(\alpha, \beta)$), cuja função de densidade de probabilidade é

$$g_Y(y; \alpha, \beta) = \frac{\alpha}{\beta}\left(\frac{y}{\beta}\right)^{\alpha-1} \exp\left\{-\left(\frac{y}{\beta}\right)^{\alpha}\right\}, \tag{46}$$

sendo $0 \leq y < \infty$, e $\alpha, \beta > 0$. Note que, para α fixado, esta é uma distribuição da família locação escala em que $\sigma = \beta^{1/\alpha}$. A função de distribuição acumulada correspondente, por sua vez, é dada por

$$G_Y(y; \alpha, \beta) = 1 - \exp\left\{-\left(\frac{y}{\beta}\right)^{\alpha}\right\},$$

para $0 \leq y < \infty$, e $\alpha, \beta > 0$ e o k-ésimo momento de Y,

$$\mathbb{E}_{g_Y(y;\boldsymbol{\theta})}(Y^k) = \beta^k \Gamma\left(1 + \frac{k}{\alpha}\right), \tag{47}$$

em que $k > -\alpha$ e $\boldsymbol{\theta} = (\alpha, \beta)$.

Assim, os momentos de primeira e segunda ordem de $Y \sim \mathrm{W}(\alpha, \beta)$ em torno da média são

[2]BRASIL. Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento. SISLEGIS - Sistema de Legislação Agrícola Federal. http://extranet.agricultura.gov.br/sislegis-consulta/consultarLegislacao.do(30 out. 2008)

$$\mu_g = \mathbb{E}_{g_Y(y;\boldsymbol{\theta})}(Y) = \beta\Gamma\left(1+\frac{1}{\alpha}\right)$$

e

$$\sigma_g^2 = \mathrm{Var}_{g_Y(y;\boldsymbol{\theta})}(Y) = \beta^2\left[\Gamma\left(1+\frac{2}{\alpha}\right) - \Gamma\left(1+\frac{1}{\alpha}\right)^2\right]. \tag{48}$$

A Figura 10 ilustra a função de densidade e a função de distribuição acumulada para diferentes valores do parâmetro de forma (α) e parâmetro de escala $\beta = 8$ sendo importante salientar que a distribuição exponencial é um caso particular da distribuição de Weibull quando $\alpha = 1$. Note, ainda, que para $\alpha < 1$, a distribuição é sempre decrescente e que à medida em que α se aproxima de β, a distribuição assume forma cada vez mais simétrica e leptocúrtica.

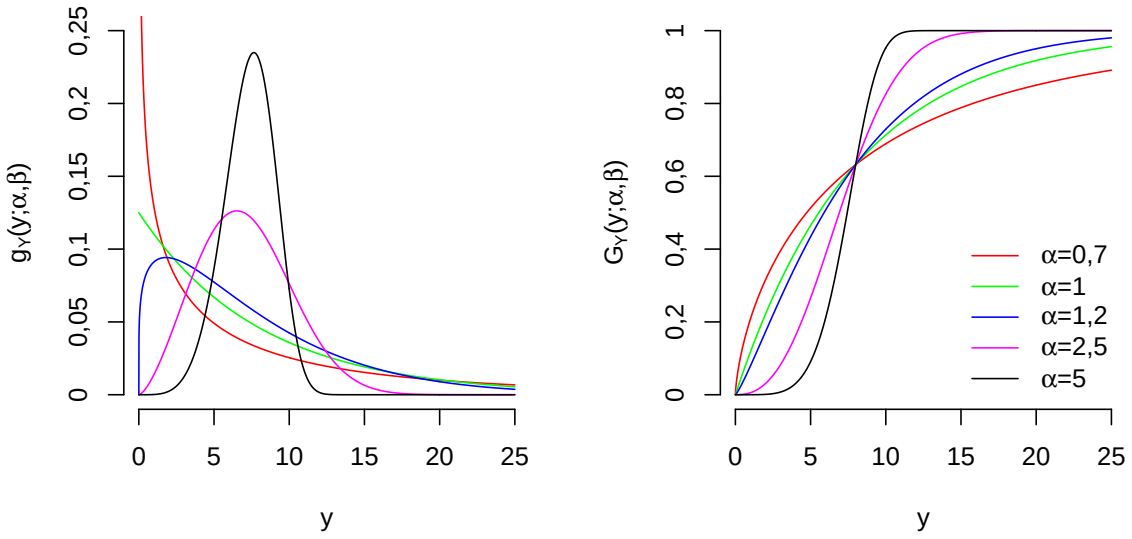


Figura 10 – Gráficos das funções de densidade (à esquerda) e distribuição acumulada de Weibull (à direita) para $\beta = 8$ e diferentes valores para α

Na literatura, são apresentadas diferentes formas de parametrização da distribuição. Em seu trabalho, Hallinan (1993) apresentou algumas dessas parametrizações e as atribui ao próprio Waloddi Weibull, quem as desenvolveu, sendo, por isso, denominada distribuição de Weibull, cuja primeira publicação é datada de 1938. Um fato interessante é que uma das parametrizações é atribuída a um erro tipográfico quando da sua publicação em seu artigo publicado em 1951, nos Estados Unidos. Rinne (2008), por sua vez, também apresenta

algumas parametrizações para distribuição Weibull, sendo que os motivos que levaram às diferentes formulações foram facilitar a escrita e apresentação, assim como facilitar a manipulação matemática para obtenção de estimadores e testes e diminuir o trabalho computacional de estimação.

Com o objetivo de verificar as diferenças de estimação causadas pelas parametrizações, três formulações foram consideradas:

P1: Função de densidade dada por (46), parametrização utilizada para implementação no pacote `stats` do programa estatístico R (R DEVELOPMENT CORE TEAM, 2008)

P2: Considerando-se $b_1 = \beta^\alpha \Leftrightarrow \beta = b_1^{\frac{1}{\alpha}}$ em (46), tem-se que

$$g_Y(y;\alpha,b_1) = \frac{\alpha}{b_1} y^{\alpha-1} \exp\left\{ -\frac{y^\alpha}{b_1} \right\}, \tag{49}$$

em que $0 \leq y < \infty$ e $\alpha, b_1 > 0$.

P3: Considerando-se $b_2 = \dfrac{1}{\beta} \Leftrightarrow \beta = \dfrac{1}{b_2}$ em (46), tem-se que

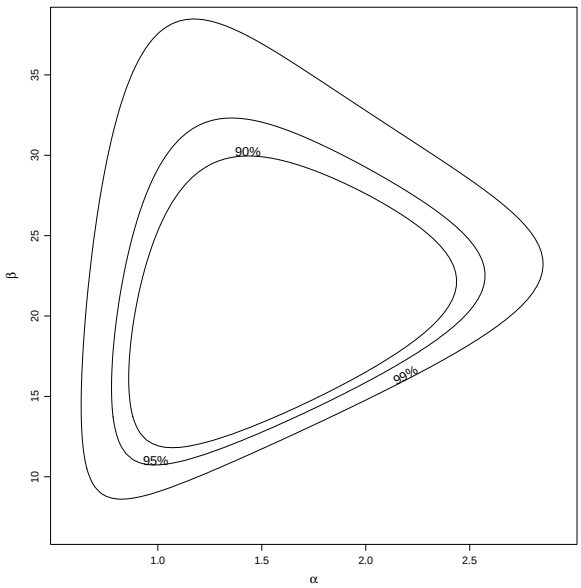
$$g_Y(y;\alpha,b_2) = \frac{\alpha}{b_2} \big(b_2 y\big)^{\alpha-1} \exp\left\{ -\big(b_2 y\big)^\alpha \right\}, \tag{50}$$

em que $0 \leq y < \infty$ e $\alpha, b_2 > 0$.

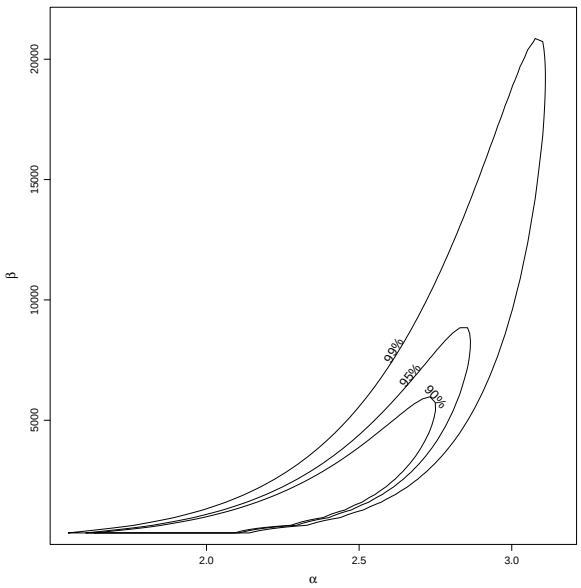
Segundo Rinne (2008), essa parametrização é utilizada por alguns autores a fim de obter facilidades computacionais.

Para ilustrar o efeito das diferentes parametrizações sobre a relação entre seus parâmetros, gerou-se uma amostra de tamanho $n = 15$ com vetor de parâmetros $(\delta, \alpha, \beta, \xi, \tau) = (0{,}10; 1{,}5; 18{,}46; 0{,}5; 1)$, ou seja, uma amostra de uma população com $\mathbb{E}(Y) = 15$. Para essa amostra foram então construídas as regiões de 90, 95 e 99% confiança considerando as três reparametrizações P1, P2 e P3 apresentadas na Figura 11. Nesta, pode-se observar que, mesmo para o modelo de mistura, os efeitos das reparametrizações ficam evidentes, sendo P2 a que apresenta maior correlação entre os parâmetros α e β, como esperado.

Parametrização P1



Parametrização P2



Parametrização P3

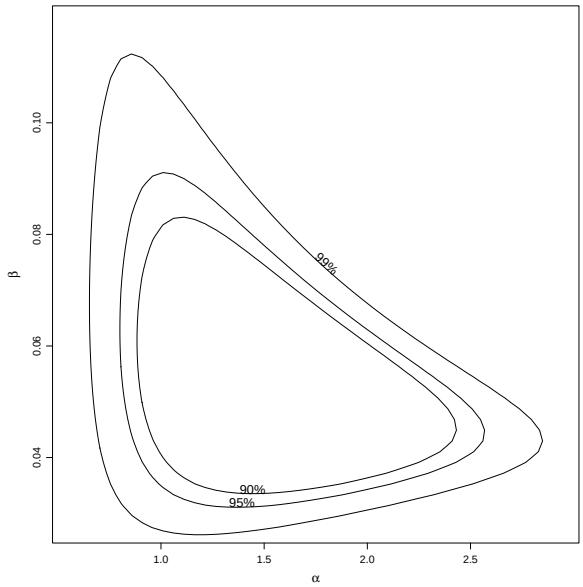


Figura 11 – Regiões de 90, 95 e 99% confiança para uma amostra aleatória de tamanho $n = 15$ da distribuição de Weibull com vetores de parâmetros $(\delta, \alpha, \beta) = (0{,}10; 1{,}5; 18{,}46220)$ e $(\xi, \tau) = (0{,}5; 1)$, considerando-se as parametrizações P1, P2 e P3

Considerando uma variável aleatória Y inflacionada de zeros com distribuição de Weibull (46), então sua função de densidade de probabilidade será

$$f_Y(y;\delta,\boldsymbol{\theta}) = \begin{cases} \delta & \text{, se } y = 0 \\ (1-\delta)\dfrac{\alpha}{\beta}\left(\dfrac{y}{\beta}\right)^{\alpha-1}\exp\left\{-\left(\dfrac{y}{\beta}\right)^{\alpha}\right\} & \text{, se } y > 0 \end{cases} \tag{51}$$

sendo (51) denominado modelo de mistura de Weibull (MW), em que $\alpha, \beta > 0$. De (15) e (47), o k-ésimo momento da variável aleatória Y inflacionada de zeros é dado por

$$\mathbb{E}(Y^k) = (1-\delta)\beta^k\Gamma\left(1+\frac{k}{\alpha}\right),$$

para $k > -\alpha$. Assim, o primeiro e segundo momentos em torno de zero são

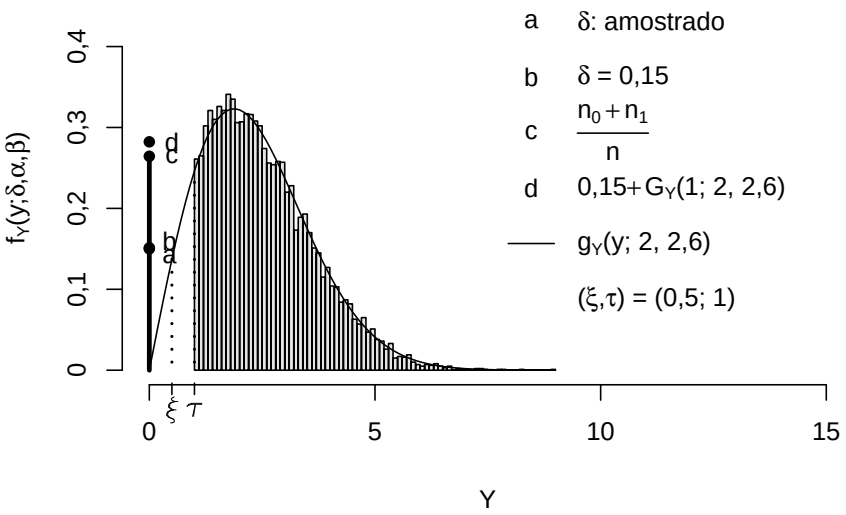
$$\mathbb{E}(Y) = (1-\delta)\beta\Gamma\left(1+\frac{1}{\alpha}\right) \tag{52}$$

e

$$\mathrm{Var}(Y) = (1-\delta)\beta^2\left[\Gamma\left(1+\frac{2}{\alpha}\right) - (1-\delta)\Gamma\left(1+\frac{1}{\alpha}\right)^2\right]. \tag{53}$$

Nas Figuras 12 (a) e (b), são apresentados os histogramas de duas amostras de 10000 pontos simulados de duas diferentes populações segundo a função de densidade (51). A Figura 12 (a) é representativa de uma variável aleatória Y com $\mathbb{E}(Y) = 2$, contendo 15% de zeros reais e os valores observados seguindo uma distribuição de Weibull com parâmetro de forma $\alpha = 2$ e parâmetro de escala $\beta = 2{,}6$. Para a Figura 12 (b), por sua vez, consideraram-se os parâmetros $\delta = 0{,}15$, $\alpha = 1{,}5$ e $\beta = 6{,}51$, obtendo-se assim uma variável aleatória Y com $\mathbb{E}(Y) = 5$. Nesta, pode ser observado que a amplitude entre os pontos "a" e "c" na Figura 12 (a) é muito maior que na (b), fato causado devido à esperança da distribuição estar muito próxima do ponto de censura e os parâmetros da distribuição Weibull terem valores próximos entre si. Assim, as observações possuem pouca variabilidade com muitas observações pertencentes aos intervalos de censura. Convém notar que este fato pode prejudicar as estimativas de parâmetros para amostras com esta mesma característica, pois os valores pertencentes aos intervalos de censura perdem informação no sentido que não se tem o valor exato da observação.

a)



b)

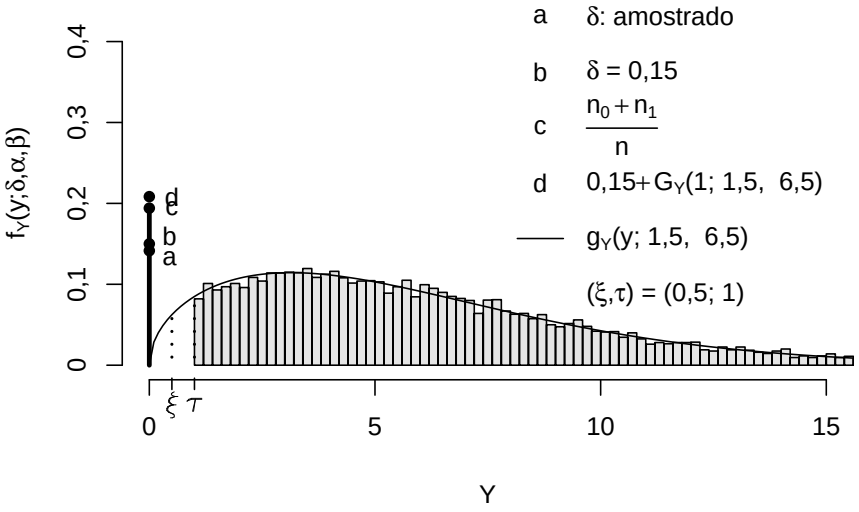


Figura 12 – Histogramas para amostras simuladas de tamanhos 1000 considerando duas populações com densidade (51) considerando $(\delta, \alpha, \beta, \xi, \tau, \mathbb{E}(Y))$=(0,15, 2,00, 2,66, 0,50, 1,00) (a) e $(\delta, \alpha, \beta, \xi, \tau, \mathbb{E}(Y))$=(0,15, 1,50, 6,52, 0,50, 1,00) (b)

A seguir será demonstrada a identificabilidade do modelo de mistura (51), denominado aqui, modelo MW.

Teorema 3.2 (Identificabilidade de MW) $F_Y(y; \mathbf{\Psi}) = \delta_1 I_{\{0\}}(y) + \delta_2 I_{(0,\infty)}(y) G_Y(y; \alpha, \beta)$ *$y \in [0, \infty)$ e $G_Y(\cdot)$ é uma função de distribuição Weibull de parâmetros α e β, parâmetros de forma e de escala respectivamente, isto é, $\mathbf{\Psi} = (\delta_1, \delta_2, \alpha, \beta)$. Então, $F_Y(y; \mathbf{\Psi})$ é identificável em $y \in [0, \infty)$.*

Pela Definição 3.1, deve-se mostrar que $F_Y(y;\boldsymbol{\Psi}) \equiv F_Y^*(y;\boldsymbol{\Psi}^*)$, para todo $\boldsymbol{\Psi} \in \Omega$, se e somente se, $\delta_j = \delta_j^*$, $(j = 1, 2)$, $\boldsymbol{\Psi} = \boldsymbol{\Psi}^*$ para todo $y \in [0, \infty)$.

Prova:

(i) $(\Leftarrow)$ Se $\delta_j = \delta_j^*$ e $\boldsymbol{\Psi} = \boldsymbol{\Psi}^*$ então $F_Y(y;\boldsymbol{\Psi}) \equiv F_Y^*(y;\boldsymbol{\Psi}^*)$, para todo $y \in [0, \infty)$.

(ii) $(\Rightarrow)$ Supondo que existe um vetor $\boldsymbol{\Psi}^* = (\delta_1^*, \delta_2^*, \alpha^*, \beta^*)$ tal que $F_Y(y;\boldsymbol{\Psi}) = F_Y^*(y;\boldsymbol{\Psi}^*)$, então $\delta_1 + \delta_2(y)G_Y(y;\boldsymbol{\theta}) = \delta_1^* + \delta_2^* G_Y(y;\boldsymbol{\theta}^*)$, com $\boldsymbol{\theta}^* = (\alpha^*, \beta^*)$. Mas $\delta_1 + \delta_2 = 1 \Leftrightarrow \delta_1 = 1 - \delta_2$. Logo, fazendo-se $\delta_2 = \delta$, tem-se que

$$\begin{aligned} -\delta + \delta G_Y(y;\boldsymbol{\theta}) &= -\delta^* + \delta^* G_Y(y;\boldsymbol{\theta}^*) \\ \delta\Big[1 - G_Y(y;\boldsymbol{\theta})\Big] &= \delta^*\Big[1 - G_Y(y;\boldsymbol{\theta}^*)\Big] \\ \frac{\delta}{\delta^*} &= \frac{1 - G_Y(y;\boldsymbol{\theta}^*)}{1 - G_Y(y;\boldsymbol{\theta})} \end{aligned}$$

em que $G_Y(y;\alpha,\beta) = 1 - \exp\left\{-\left(\frac{y}{\beta}\right)^{\alpha}\right\}$. Logo,

$$\frac{\delta}{\delta^*} = \exp\left\{\left(\frac{y}{\beta}\right)^{\alpha} - \left(\frac{y}{\beta^*}\right)^{\alpha^*}\right\}. \tag{54}$$

Os dois lados da equação (54) são constantes positivas independente do valor de y no intervalo $[0, \infty)$. Sendo $\delta = \delta^*$, tem-se que

$$\begin{aligned} 1 = \exp\left\{\left(\frac{y}{\beta}\right)^{\alpha} - \left(\frac{y}{\beta^*}\right)^{\alpha^*}\right\} \Leftrightarrow 0 = \left(\frac{y}{\beta}\right)^{\alpha} - \left(\frac{y}{\beta^*}\right)^{\alpha^*} \Leftrightarrow \\ \Leftrightarrow \left(\frac{y}{\beta^*}\right)^{\alpha^*} = \left(\frac{y}{\beta}\right)^{\alpha} \Leftrightarrow \alpha^* \log\left(\frac{y}{\beta^*}\right) = \alpha \log\left(\frac{y}{\beta}\right). \end{aligned}$$

Dessa última igualdade, tem-se que se $\beta^* = \beta$, então $\alpha^* = \alpha$ implicando em $(\alpha^*, \beta^*) = (\alpha, \beta)$.

Logo, de de (i) e (ii) conclui-se que o modelo MW é identificável.

■

Embora não tenha problemas de identificabilidade, o modelo (51) leva a dificuldades para a obtenção de parâmetros que maximizem sua verossimilhança, podendo em algumas situações produzir estimativas de coordenadas distintas das coordenadas que maximizam a verossimilhança. Por esse motivo, são sugeridos quatro procedimentos para obtenção

das estimativas de máxima verossimilhança dados pelas combinações de estimativas por meio do algoritmo quasi-Newton `BFGS`, através da função `optim`, que está implementado no pacote `stats` do programa estatístico R (R DEVELOPMENT CORE TEAM, 2008). Esses procedimentos são detalhados a seguir:

Procedimento M1

i - Considerar $\delta_k = \frac{k-1}{K-1}$, $(k = 1, 2, \ldots, K)$, $K = 300$, e obter $\{(\delta_1, \alpha_1, \beta_1), (\delta_2, \alpha_2, \beta_2), \ldots, (\delta_K, \alpha_K, \beta_K)\}$ tal que $l(\delta_k, \alpha_k, \beta_k) = \max_{\alpha,\beta} l(\delta_k, \alpha, \beta)$, fazer $(\alpha^{(0)}, \beta^{(0)}) = (\alpha_i, \beta_i)$ de forma que $l(\delta_i, \alpha_i, \beta_i) = \max\{l(\delta_1, \alpha_1, \beta_1), l(\delta_2, \alpha_2, \beta_2), \ldots, l(\delta_K, \alpha_K, \beta_K)\}$;

ii - Obter $\delta^{(0)}$ tal que $l(\delta^{(0)}, \alpha^{(0)}, \beta^{(0)}) = \max_{\delta} l(\delta, \alpha^{(0)}, \beta^{(0)})$;

iii - Utilizar $(\delta^{(0)}, \alpha^{(0)}, \beta^{(0)})$ como valores iniciais para obter $(\widehat{\delta}, \widehat{\alpha}, \widehat{\beta})$ tal que $l(\widehat{\delta}, \widehat{\alpha}, \widehat{\beta}) = \max_{\delta,\alpha,\beta} l(\delta, \alpha, \beta)$.

Procedimento M2

i - Considerar (27) e obter $(\alpha^{(0)}, \beta^{(0)})$ tal que $l^*(\alpha^{(0)}, \beta^{(0)}) = \max_{\alpha,\beta} l^*(\alpha, \beta)$;

ii - Obter $\delta^{(0)} = \widehat{\delta}(\alpha^{(0)}, \beta^{(0)})$ em que $\widehat{\delta}(\cdot)$ é dada pela equação (24), considerando-se $\widehat{\boldsymbol{\theta}} = (\alpha^{(0)}, \beta^{(0)})$, obtido no passo (i);

iii - Utilizar $(\delta^{(0)}, \alpha^{(0)}, \beta^{(0)})$ como valores iniciais para obter $(\widehat{\delta}, \widehat{\alpha}, \widehat{\beta})$ tal que $l(\widehat{\delta}, \widehat{\alpha}, \widehat{\beta}) = \max_{\delta,\alpha,\beta} l(\delta, \alpha, \beta)$.

Procedimento M3

i - Considerar (27) e obter $(\alpha^{(0)}, \beta^{(0)})$ tal que $l^*(\alpha^{(0)}, \beta^{(0)}) = \max_{\alpha,\beta} l^*(\alpha, \beta)$;

ii - Obter $\delta^* = \widehat{\delta}(\alpha^{(0)}, \beta^{(0)})$ em que $\widehat{\delta}(\cdot)$ é dada pela equação (24), considerando-se $\widehat{\boldsymbol{\theta}} = (\alpha^{(0)}, \beta^{(0)})$, obtido no passo (i);

iii - Considerar δ^*, como valor inicial, e obter $\delta^{(0)}$ tal que $l(\delta^{(0)}, \alpha^{(0)}, \beta^{(0)}) = \max_{\delta} l(\delta, \alpha^{(0)}, \beta^{(0)})$;

iv - Utilizar $(\delta^{(0)}, \alpha^{(0)}, \beta^{(0)})$ como valores iniciais para obter $(\widehat{\delta}, \widehat{\alpha}, \widehat{\beta})$ tal que $l(\widehat{\delta}, \widehat{\alpha}, \widehat{\beta}) = \max_{\delta,\alpha,\beta} l(\delta, \alpha, \beta)$.

Procedimento M4

i - Considerar $\delta^{(0)} = \dfrac{n_0}{n}$, sendo n_0 o número de observações menores que ξ presentes na amostra e n o tamanho da amostra;

ii - Obter $(\alpha^{(0)}, \beta^{(0)})$ por meio do método da regressão das ordens de Y para a distribuição acumulada de Weibull;

iii - Utilizar $(\delta^{(0)}, \alpha^{(0)}, \beta^{(0)})$ como valores iniciais para obter $(\widehat{\delta}, \widehat{\alpha}, \widehat{\beta})$ tal que $l(\widehat{\delta}, \widehat{\alpha}, \widehat{\beta}) = \max\limits_{\delta,\alpha,\beta} l(\delta, \alpha, \beta)$.

Em todos os métodos o último passo é a estimação conjunta dos três parâmetros, de modo a obter, além das estimativas finais dos parâmetros, a matriz de informação observada para os três parâmetros.

Para obtenção dos valores iniciais das iterações, nos procedimentos M1, M2, M3 e M4, propõem-se adaptar o método da regressão das ordens de Y para a distribuição Weibull, apresentado em Rinne (2008). Para a aplicação do método, considerar o conjunto de observações Y, acrescido por n_1 repetições do ponto médio entre ξ e τ dado por $\frac{\tau+\xi}{2}$, isto é, o novo conjunto de $n_1 + n_2 = n - n_0$ elementos, denominado Y, será $Y = Y_1 \bigcup Y_2$ em que $Y_1 = \{\frac{\tau+\xi}{2}, \ldots, \frac{\tau+\xi}{2}\}$ é o conjunto de n_1 elementos iguais a $\frac{\tau+\xi}{2}$ e $Y_2 = \{y_i : y_i > \tau\}$ é o conjunto de n_2 elementos maiores que τ.

Considere a transformação da função densidade de probabilidade acumulada de Weibull para a forma linear $z_i = ax_i + b$, como segue:

$$
\begin{aligned}
G_Y(y_i; \alpha, \beta) &= 1 - \exp\left\{ -\left(\frac{y_i}{\beta}\right)^{\alpha} \right\} \\
1 - G_Y(y_i; \alpha, \beta) &= \exp\left\{ -\left(\frac{y_i}{\beta}\right)^{\alpha} \right\} \\
\log(1 - G_Y(y_i; \alpha, \beta)) &= -\left(\frac{y_i}{\beta}\right)^{\alpha} \\
\log\big[-\log(1 - G_Y(y_i; \alpha, \beta)) \big] &= \alpha \log\left(\frac{y_i}{\beta}\right) \\
\underbrace{\log\big[-\log(1 - G_Y(y_i; \alpha, \beta)) \big]}_{z_i} &= \underbrace{\alpha}_{a_i} \underbrace{\log(y_i)}_{x_i} \underbrace{-\alpha \log(\beta)}_{b},
\end{aligned}
$$

sendo que, da última igualdade, tem-se que:

i) $z_i = \log\big[-\log(1 - G_Y(y_i;\alpha,\beta))\big]$;

ii) $x_i = \log(y_i)$;

iii) $b = -\alpha\log(\beta)$;

iv) $a = \alpha$.

Assim de (iii) e (iv), resulta que $\alpha = a$ e $\beta = \exp\{-b/a\}$.

Os valores $G_Y(y_i;\alpha,\beta)$ são estimados por meio das ordens medianas cuja expressão para obtê-las considerando Y ordenado de forma crescente e $y_{(i)}$ o $i-$ésimo valor na ordem dos $(n - n_0)$ valores, é

$$\widehat{G}_Y(y_{(i)};\alpha,\beta) = \frac{i}{i + (n - n_0 + 1 - i)F_{(2(n-n_0+1-i);\,2i;\,0{,}50)}} \tag{55}$$

para $i = 1, 2, \ldots, (n - n_0)$, em que $F_{(2(n-n_0+1-i);\,2i;\,0{,}50)}$ é o a mediana da distribuição F de Fisher-Snedecor com $2(n - n_0 + 1 - i)$ e $2i$ graus de liberdade.

Uma aproximação para (55), apresentada por Bernard e Bos-Levenbach (1953), é

$$\widehat{G}_Y(y_{(i)};\alpha,\beta) = \frac{i - 0{,}3}{(n - n_0) + 0{,}4},$$

para $i = 1, \ldots, (n - n_0)$, que embora seja muito empregada, neste trabalho será utilizada a expressão (55).

Sejam $\widehat{a}$ e $\widehat{b}$ as estimativas de mínimos quadrados do modelo de regressão linear simples $z_i = ax_i + b + e_i$. Os valores iniciais $\alpha^{(0)}$ e $\beta^{(0)}$ serão dados, então, por $\alpha^{(0)} = \widehat{a}$ e $\beta^{(0)} = \exp\{-\widehat{b}/\widehat{a}\}$.

Para avaliar o desempenho da modelagem considerando o modelo MW em diferentes cenários, pode-se recorrer a estudos de simulação. O estudo de simulação está dividido em duas partes, sendo que a primeira visa a avaliação dos quatro métodos de estimação com as três parametrizações da função de distribuição de Weibull (46), (49) e (50). A segunda, visa avaliar o comportamento das estimativas dos parâmetros do modelo MW com a parametrização escolhida na primeira parte do estudo, considerando uma sequência de valores esperados da variável de interesse com variações dos parâmetros da função de distribuição Weibull, do parâmetro δ de mistura e dos limites de detecção e quantificação, ξ e τ, respectivamente.

I- **Procedimento de simulação para a avaliação dos diferentes métodos**

Neste estudo foram considerados 40 cenários, de acordo com o processo de simulação a seguir :

1 - Fixar $n = 15$ (tamanho da amostra) e $(\xi, \tau) = (0{,}11; 0{,}22)$ ou $(\xi, \tau) = (0{,}5; 1)$;

2 - Considerar todos os quartetos $(\xi, \delta, \alpha, \mathbb{E}(Y))$, resultantes das 40 combinações das coordenadas dos vetores $\delta = (0{,}10; 0{,}30)$, $\alpha = (1{,}5; 2)$ e $\mathbb{E}(Y) = (2; 4; 6; 8; 10)$,

3 - Para cada quarteto do passo (2), extrair uma amostra aleatória de tamanho n, $\{u_1, u_2, \ldots, u_n\}$, de distribuição uniforme $U[0, 1]$ e uma amostra aleatória de tamanho n, $\{w_1, w_2, \ldots, w_n\}$, de $W \sim \mathrm{W}(\alpha, \beta)$;

4 - Fazer $y_i =$"ND" (não detectado) se $u_i < \xi$, $y_i =$"NQ" (não quantificado) se $\xi \leq w_i \leq \tau$ e $y_i = w_i$ se $w_i > \tau$.

Para cada quarteto obtido no passo (2), repetir os passos (3) e (4) 10000 vezes. Convém notar que, para cada cenário o parâmetro de escala (β) da distribuição Weibull está relacionado aos outros parâmetros pela equação,

$$\beta = \frac{\mathbb{E}(Y)}{(1-\delta)\Gamma\left(1 + \frac{1}{\alpha}\right)}. \tag{56}$$

Os valores de n, ξ, τ e α são escolhidos com base em pesquisas laboratoriais de quantificação de aflatoxina B1. Para δ e $\mathbb{E}(Y)$, são considerados valores que, podem ocorrer na situação prática em questão e/ou que podem levar a dificuldades de estimação.

De modo a avaliar os métodos, para cada conjunto de 10000 estimativas calcular a média, a variância, o viés relativo percentual (VR%) e o erro quadrático médio (EQM), para cada um dos parâmetros assim como para a esperança estimada da distribuição.

II- **Procedimento de simulação para avaliação para sequência de $\mathbb{E}(Y)$**

Para esse estudo de simulação foram considerados 4480 cenários, de acordo com o processo de simulação a seguir:

1 - Obter todos os quintetos $(\xi, n, \delta, \alpha, \mathbb{E}(Y))$ resultantes das combinações das coordenadas dos vetores $n = (15; 30; 50; 100)$, $\delta =$

$(0,10; 0,15; 0,20; 0,25; 0,30; 0,35; 0,40; 0,45)$, $\alpha = (1,5; 2,0)$ e $\mathbb{E}(Y) = (1; 2; 3; \ldots; 35)$, observando que se $\xi = 0{,}11$ então $\tau = 0,22$, ou que se $\xi = 0{,}50$ então $\tau = 1$;

2 - Para cada quinteto do passo (2), extrair uma amostra aleatória de tamanho n, $\{u_1, u_2, \ldots, u_n\}$, de $U \sim U[0,1]$ e uma amostra aleatória de tamanho n, $\{w_1, w_2, \ldots, w_n\}$, de $W \sim \mathrm{W}(\alpha, \beta)$;

3 - Fazer $y_i =$"ND" (não detectado) se $u_i < \xi$, $y_i =$"NQ" (não quantificado) se $\xi \leq w_i \leq \tau$ e $y_i = w_i$ se $w_i > \tau$.

Para cada quinteto obtido no passo (1), repetir os passos (2) e (4) 4000 vezes, em que o parâmetro de escala (β) é obtido pela equação (56). Para cada conjundo de 4000 estimativas dos parâmetros do modelo MW, calcular a estimativa da esperança do modelo e utilizar as medidas resumo apresentadoas na seção 3.2.5.

3.2.8 Mistura com distribuição gama

Como terceiro modelo, propõe-se considerar, na equação (14), a função de densidade gama com parâmetros α e β, parâmetros de forma e escala, respectivamente, dada por:

$$g_Y(y; \alpha, \beta) = \frac{1}{\beta^\alpha \Gamma(\alpha)} y^{\alpha-1} \exp\left\{-\frac{y}{\beta}\right\}, \tag{57}$$

sendo $0 \leq y < \infty$, e $\alpha, \beta > 0$. Este, assim como o proposto no item anterior, apresenta grande flexibilidade, podensdo assumir diversas formas, dependendo dos valores de α e β.

A densidade gama, entretanto, não tem função de densidade acumulada direta, sendo dada por

$$G_Y(c; \alpha, \beta) = Pr(Y \leq c) = \int_0^c g_Y(y; \alpha, \beta) dy.$$

O j-ésimo momento de Y por sua vez é dado por

$$\mathbb{E}_{g_Y(y, \boldsymbol{\theta})}(Y^j) = \frac{\beta^j \Gamma(j+\alpha)}{\Gamma(\alpha)}, \tag{58}$$

para $j > -\alpha, \boldsymbol{\theta} = (\alpha, \beta)$.

Logo, os momentos de primeira e segunda ordem de Y em torno da média são

$$\mu_g = \mathbb{E}_{g_Y(y; \boldsymbol{\theta})}(Y) = \alpha\beta \tag{59}$$

e

$$\sigma_g^2 = \mathrm{Var}_{g_Y(y;\boldsymbol{\theta})}(Y) = \alpha\beta^2, \tag{60}$$

respectivamente.

A função de densidade gama além de ser não negativa, como suposto para os dados observados, tem também assimetria positiva e variância proporcional ao quadrado da média levando a um coeficiente de variação constante iqual a $1/\sqrt{\alpha}$.

Para fins de ilustração, a Figura 13 apresenta gráficos de diferentes funções de densidade gama e respectivas funções de distribuição considerando-se o parâmetro de escala $\beta = 2{,}5$ fixo e parâmetros de forma 0,7; 1; 1,2; 2,5 e 5. Nesta, pode ser observada, como característica da distribuição gama, a assimetria positiva e, se comparada à Figura 10, não há intersecção entre as curvas da função de distribuição acumulada, como no caso da distribuição de Weibull. Esse fato decorre devido ao fato de que na distribuição gama, os parâmetros têm maior correlação entre si de que os parâmetros na distribuição de Weibull, escrita na forma (46).

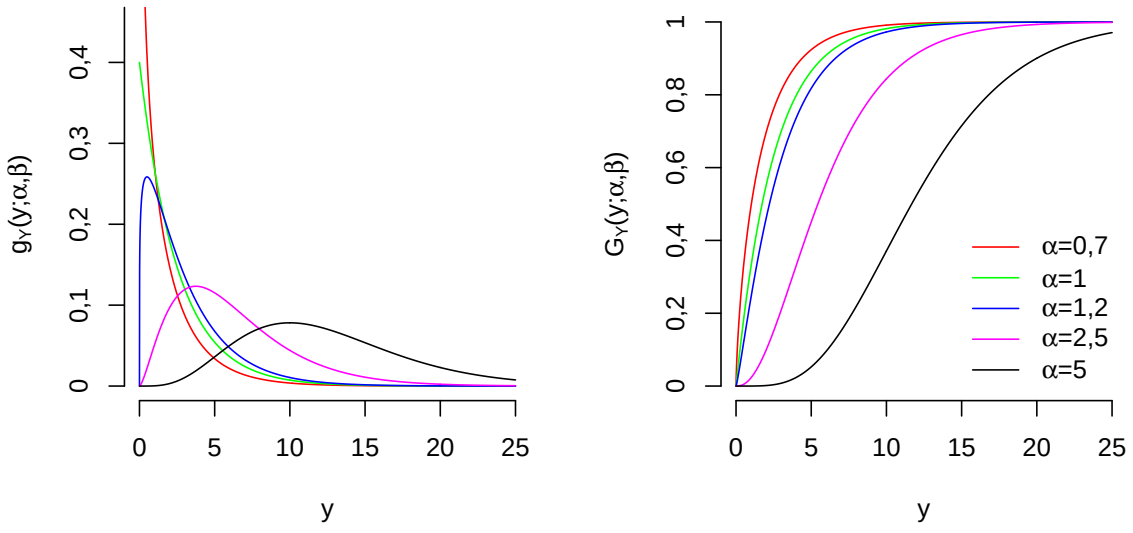


Figura 13 – Gráficos das funções de densidade e distribuição acumulada gama para $\beta = 2,5$ e diferentes valores para α

Substituindo a função densidade gama (57) em (14), tem-se a densidade de

mistura gama (MG) dada por

$$f_Y(y,\delta,\boldsymbol{\theta}) = \begin{cases} \delta, & \text{se } y = 0 \\ (1-\delta)\dfrac{1}{\beta^\alpha\Gamma(\alpha)}y^{\alpha-1}\exp\left\{-\dfrac{y}{\beta}\right\}, & \text{se } y > 0 \end{cases} \tag{61}$$

cujo j-ésimo momento da variável aleatória inflacionada de zeros pode ser obtida, substituindo (58) em (15), ou seja

$$\mathbb{E}(Y^j) = (1-\delta)\frac{\beta^j\Gamma(j+\alpha)}{\Gamma(\alpha)}, \tag{62}$$

para $j > -\alpha$.

Substituindo-se (59) e (60) em (16) obtém-se a esperança e variância de Y dadas, respectivamente, por

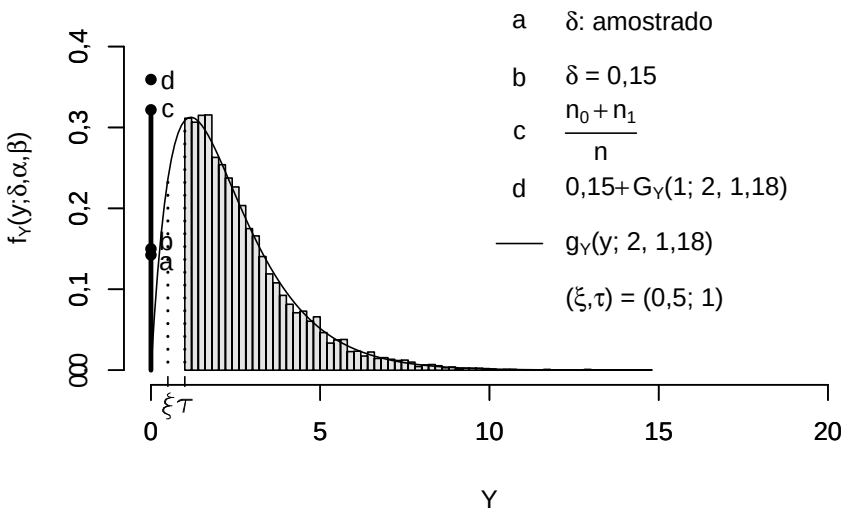
$$\mathbb{E}(Y) = (1-\delta)\alpha\beta \tag{63}$$

e

$$\mathrm{Var}(Y) = (1-\delta)\alpha\beta^2\big(\alpha\delta+1\big). \tag{64}$$

Nas Figuras 14 (a) e (b), são apresentados os histogramas de duas amostras de 10000 pontos simulados de duas diferentes populações segundo a função de densidade (14). A Figura 14 (a) é representativa de uma variável Y com $\mathbb{E}(Y) = 2$, com $Pr(Y = 0) = 0{,}15$ e os valores observados seguindo uma distribuição gama com parâmetro de forma $\alpha = 2$ e parâmetro de escala $\beta = 1{,}176471$. Para a Figura 14 (b), consideraram-se os parâmetros $\delta = 0{,}15$, $\alpha = 1{,}5$ e $\beta = 3{,}921569$, obtendo-se assim uma variável aleatória com esperança 5. Pode ser observado que a amplitude entre os pontos "a" e "c" na Figura 14 (a) é muito maior que na (b), o que é causado devido ao fato de a esperança da distribuição estar muito próxima do ponto de censura e os parâmetros da distribuição gama terem valores próximos entre si, fazendo com que as observações tenham pouca variabilidade e muitas observações dentro dos intervalos de censura. Este fato pode prejudicar as estimativas de parâmetros em amostras com esta mesma característica, pois os valores que estão nos intervalos de censura são desconhecidos, sabendo-se apenas quantas das observações estão nestes intervalos.

a)



b)

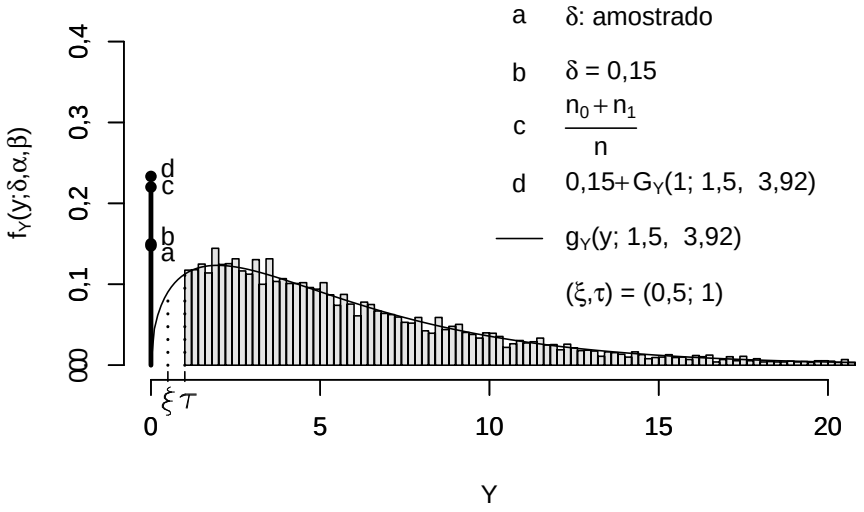


Figura 14 – Histogramas para amostras simuladas de tamanhos 1000 considerando duas populações com densidade (61) considerando $(\delta, \alpha, \beta, \xi, \tau, \mathbb{E}(Y))$=(0,15, 2,00, 1,18, 0,50, 1,00, 2,00) (a) e $(\delta, \alpha, \beta, \xi, \tau, \mathbb{E}(Y))$=(0,15, 1,50, 3,92, 0,50, 1,00, 5,00) (b)

A seguir, será demonstrada a identificabilidade do modelo MG (61), sendo que para isso será utilizado o resultado do Teorema do Valor Médio para Integrais, dado pelo teorema a seguir.

Teorema 3.3 *Se f é uma função contínua em $[a, b]$, então existe $z \in (a, b)$ tal que*

$$\int_a^b f(x)\, dx = f(z)(b - a),$$

ou seja, existe $z \in (a, b)$ tal que

$$f(z) = \frac{1}{(b-a)} \int_a^b f(x)\, dx.$$

Interpretando o Teorema 3.3 geometricamente, se $f(x) \geq 0, \forall x \in [a, b]$, então a área sob o gráfico de f é igual à área do retângulo de base $(b - a)$ e altura $f(z)$.

Teorema 3.4 (Identificabilidade de MG) *$F_Y(y, \mathbf{\Psi}) = \delta_1 I_{\{0\}}(y) + \delta_2 I_{(0,\infty)}(y) G_Y(y, \alpha, \beta)$ $y \in [0, \infty)$ e $G_Y(\cdot)$ é uma função de distribuição gama de parâmetros α e β, parâmetros de forma e escala respectivamente, isto é, $\mathbf{\Psi} = (\delta_1, \delta_2, \alpha, \beta)$. Então, $F_Y(y, \mathbf{\Psi})$ é identificável em $y \in [0, \infty)$.*

Para verificar essa propriedade, pela Definição 3.1, deve-se mostrar que para todo $\mathbf{\Psi} \in \Omega$

$$F_Y(y, \mathbf{\Psi}) \equiv F_Y^*(y, \mathbf{\Psi}^*)$$

se e somente se, $\delta_j = \delta_j^*$, $(j = 1, 2)$, $\mathbf{\Psi} = \mathbf{\Psi}^*$ para todo $y \in [0, \infty)$.

Prova:

(i) $(\Leftarrow)$ Se $\delta_j = \delta_j^*$ e $\mathbf{\Psi} = \mathbf{\Psi}^*$, então $F_Y(y, \mathbf{\Psi}) \equiv F_Y^*(y, \mathbf{\Psi}^*)$, para todo $y \in [0, \infty)$.

(ii) $(\Rightarrow)$ Supondo que existe um vetor $\mathbf{\Psi}^* = (\delta_1^*, \delta_2^*, \alpha^*, \beta^*)$ tal que $F_Y(y, \mathbf{\Psi}) = F_Y^*(y, \mathbf{\Psi}^*)$, então $\delta_1 + \delta_2(y) G_Y(y, \boldsymbol{\theta}) = \delta_1^* + \delta_2^* G_Y(y, \boldsymbol{\theta}^*)$. Mas como $\delta_1 + \delta_2 = 1 \Leftrightarrow \delta_1 = 1 - \delta_2$, fazendo-se $\delta_2 = \delta$, tem-se que

$$\begin{aligned} -\delta + \delta G_Y(y, \boldsymbol{\theta}) &= -\delta^* + \delta^* G_Y(y, \boldsymbol{\theta}^*) \\ \delta \Big[1 - G_Y(y, \boldsymbol{\theta})\Big] &= \delta^* \Big[1 - G_Y(y, \boldsymbol{\theta}^*)\Big] \\ \frac{\delta}{\delta^*} &= \frac{1 - G_Y(y, \boldsymbol{\theta}^*)}{1 - G_Y(y, \boldsymbol{\theta})} \end{aligned} \tag{65}$$

é uma constante $\forall y \in [0, \infty)$.

Seja $G_Y(\cdot)$ a função de distribuição gama $G_Y(y, \alpha, \beta) = \displaystyle\int_0^y g(t, \alpha, \beta)\, dt$. Pelo Teorema 3.3 existe um $z \in (0, y)$ tal que $G_Y(y, \alpha, \beta) = g_Y(z, \alpha, \beta) y$ reescrevendo (65),

$$\frac{\delta}{\delta^*} = \frac{1 - g_Y(z, \boldsymbol{\theta}^*) y}{1 - g_Y(z, \boldsymbol{\theta}) y}.$$

(a) Se $\delta = \delta^*$ então,

$$\begin{aligned} 1 - g_Y(z, \boldsymbol{\theta}^*)y &= 1 - g_Y(z, \boldsymbol{\theta})y \\ g_Y(z, \boldsymbol{\theta}^*) &= g_Y(z, \boldsymbol{\theta}) \end{aligned}$$

como $g_Y(\cdot)$ é a função de densidade gama a última igualdade só será verdadeira se $\boldsymbol{\theta}^* = \boldsymbol{\theta}$. Logo, $\boldsymbol{\Psi}^* = \boldsymbol{\Psi}$.

(b) Por outro lado, se $\boldsymbol{\theta}^* = \boldsymbol{\theta}$ então, $\dfrac{\delta}{\delta^*} = 1$ e $\delta^* = \delta$. Logo, $\boldsymbol{\Psi}^* = \boldsymbol{\Psi}$.

Portanto, de (i) e (ii) tem-se que $F_Y(y, \boldsymbol{\Psi}) \equiv F_Y^*(y, \boldsymbol{\Psi}^*)$ se e somente se, $\boldsymbol{\Psi} = \boldsymbol{\Psi}^*$. Logo, o modelo MG é identificável.

■

A seguir, são apresentados procedimentos de estimação do modelo MG. No entanto, como este pode apresentar dificuldades, diferente procedimentos de estimação foram propostos e em seguida comparados. Esses procedimentos são os mesmos utilizados para o caso do modelo MW, apresentado na seção 3.2.7, página 62. Entretanto, diferentes procedimentos para a obtenção dos valores iniciais são propostos e avaliados por meio de simulações e resumos dados pelas medidas VR% e EQM. Estes são, então, utilizados na comparação dos métodos M1, M2, M3 e M4.

Seja $\{Y_1, Y_2, \ldots, Y_n\}$ uma amostra aleatória de tamanho n de Y e $\{y_1, y_2, \ldots, y_n\}$ uma realização de $\{Y_1, Y_2, \ldots, Y_n\}$, $\overline{y} = \sum_{i=1}^n \frac{y_i}{n}$ e $s_Y^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^n (y_i - \overline{y})^2$. Os procedimentos para a obtenção do valores iniciais $\delta^{(0)}$, $\alpha^{(0)}$ e $\beta^{(0)}$ de δ, α e β, respectivamente, são apresentados a seguir:

Procedimento MM

Neste, $\alpha^{(0)}$ e $\beta^{(0)}$ são obtidos por meio do método dos momentos da distribuição gama, ou seja,

$$\alpha^{(0)} = \frac{\overline{y}^2}{s_Y^2}$$

e

$$\beta^{(0)} = \frac{s_Y^2}{\overline{y}}$$

Fazendo-se $\alpha = \alpha^{(0)}$ e $\beta = \beta^{(0)}$ na equação (22), obtém-se uma estimativa inicial $\delta^{(0)} = \widehat{\delta}(\alpha^{(0)}, \beta^{(0)})$.

Procedimento NM

Este é baseado nos estimadores de momentos para os parâmetros propostos por Hwang e Huang (2002), que propuseram uma correção nos estimadores de momentos apresentados em MM. Com essa proposta, os estimadores são escritos da seguinte forma:

$$\alpha^{(0)} = \frac{1}{V_n^2} - \frac{1}{n}$$

e

$$\beta^{(0)} = \frac{nV_n^2\overline{y}}{n - V_n^2}$$

em que $V_n^2 = s_Y^2/\overline{y}^2$, e faz-se $\delta^{(0)} = \widehat{\delta}(\alpha^{(0)}, \beta^{(0)})$, dada pela equação (22).

Procedimento EMV

Neste, os valores iniciais $\alpha^{(0)}$ e $\beta^{(0)}$, são as estimativas de máxima verossimilhança para os parâmetros da distribuição gama, cujo método foi apresentado por Choi e Wette (1969). A proposta dos autores é baseada no método de Newton-Raphson, sendo as equações recursivas dadas por,

$$\alpha^{(i)} = \alpha^{(0)} - \frac{\log(\alpha^{(0)}) - \Psi(\alpha^{(0)}) - M}{\frac{1}{\alpha^{(0)}} - \Psi'(\alpha^{(0)})}$$

em que

$$\Psi(\alpha^{(0)}) = \frac{d \ln \Gamma(\alpha^{(0)})}{d\alpha^{(0)}} = \frac{\Gamma'(\alpha^{(0)})}{\Gamma(\alpha^{(0)})}$$

conhecida como função digama

$$\Psi'(\alpha^{(0)}) = \frac{d\Psi(\alpha^{(0)})}{d\alpha^{(0)}}$$

conhecida como função trigama e

$$\alpha^{(0)} \approx \frac{3 - M + \sqrt{(M-3)^2 + 24M}}{12M}$$

em que

$$M = \log\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i\right) - \log\left(\prod_{i=1}^{n} y_i\right)^{\frac{1}{n}} = \log\overline{y} - \overline{\log y}.$$

Assim, a estimativa inicial $\alpha^{(0)}$ para α será o i-ésimo valor obtido da equação recursiva e para o parâmetro β a estimativa $\beta^{(0)} = \overline{y}/\alpha^{(0)}$, observando que para o estudo de simulação será adotado como critério de parada, a décima iteração, isto é, $i = 1, 2, \ldots, 10$.

Como em MM e NM, $\delta^{(0)}$ será o resultado da equação (22) avaliada em $(\alpha^{(0)}, \beta^{(0)})$.

Procedimento MIS

Neste caso, a sugestão é obter estimativas pelo método dos momentos a partir da função densidade (61). Para isso, de (62), temos o seguinte sistema de equações

$$\begin{cases} \mu_1 &= (1-\delta)\beta\alpha \\ \mu_2 &= (1-\delta)\beta^2\alpha(1+\alpha) \\ \mu_3 &= (1-\delta)\beta^3\alpha(1+\alpha)(2+\alpha) \end{cases}$$

cuja solução, em termos de δ, α e β, é

$$\begin{aligned} \delta &= \frac{\mu_1^2\mu_2 - 2\mu_2^2 + \mu_1\mu_3}{\mu_1\mu_3 - 2\mu_2^2}, \\ \alpha &= \frac{-\mu_1\mu_3 + 2\mu_2^2}{\mu_1\mu_3 - \mu_2^2}, \\ \beta &= \frac{\mu_1\mu_3 - \mu_2^2}{\mu_1\mu_2}. \end{aligned} \tag{66}$$

Considerando-se $\mu_j = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i^j$ em (66), tem-se então, os valores iniciais $\delta^{(0)}$, $\alpha^{(0)}$ e $\beta^{(0)}$ de δ, α e β, respectivamente.

Seja, assim, Y_T um conjunto composto por $n = (n_0 + n_1 + n_2)$ observações sendo n_0 pertencentes ao intervalo $(0, \xi)$, representadas pelo ponto médio do intervalo, $\frac{\xi}{2}$; n_1 pertencentes ao intervalo $[\xi, \tau]$, representadas pelo valor $\frac{\tau+\xi}{2}$ e n_2 maiores que τ, formando, respectivamente, os subconjuntos Y_0, Y_1 e Y_2, sendo

$$\begin{cases} Y_0 = \{\frac{\xi}{2}, \ldots, \frac{\xi}{2}\}, & \text{o conjunto de } n_0 \text{ elementos}, \\ Y_1 = \{\frac{\tau+\xi}{2}, \ldots, \frac{\tau+\xi}{2}\}, & \text{o conjunto de } n_1 \text{ elementos}, \\ Y_2 = \{y_i : y_i \geq \tau\}, & \text{o conjunto de } n_2 \text{ elementos}, \end{cases} \tag{67}$$

e $Y_T = Y_0 \bigcup Y_1 \bigcup Y_2$.

Foram considerados três diferentes formas de apresentação do conjunto de observações, que são: Y_T, $Y_I = Y_1 \bigcup Y_2$ e Y_2.

No estudo de simulação usado para comparar os procedimentos MM, NM, EMV e MIS combinados com Y_T, Y_I e Y_2 foram considerados 40 cenários, de acordo com o procedimento de simulação para a avaliação dos diferentes métodos apresentados na seção 3.2.7, página 64.

Note que, neste caso, tem-se, para o passo (3), que $W \sim \mathrm{G}(\alpha, \beta)$ e que o parâmetro de escala (β) da distribuição gama se relaciona aos demais parâmetros por meio equação,

$$\beta = \frac{\mathbb{E}(Y)}{(1-\delta)\alpha}. \tag{68}$$

Após a avaliação e escolha da melhor forma de obtenção dos valores iniciais, procedeu-se a avaliação dos métodos M1, M2, M3 e M4, descritos na seção 3.2.7, página 62. Para isso foi utilizada a mesma estrutura de simulação usada para a avaliação dos valores iniciais.

Com o método de estimação e de obtenção de valores iniciais já definidos, o passo seguinte foi avaliar o comportamento das estimativas assumindo os valores $(1, 2, \ldots, 35)$ para $\mathbb{E}(Y)$. Para isso, como no caso da distribuição Weibull, um estudo de simulação com 4480 cenários, foi considerado. Sendo os mesmos obtidos de acordo com o processo de simulação descrito na seção 3.2.7, página 65 em que os valores de β, dados δ, α e $\mathbb{E}(Y)$, são obtidos por meio da equação (68).

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 Simulação para mistura com distribuição exponencial

Nesta seção são apresentados os resultado de simulação para o modelo ME, descrito na seção 3.2.6. Observe que, neste caso, não foi imposta a restrição $\delta \geq 0$ no processo de estimação, sendo que após cada estimação, no caso de estimativas negativas de δ, optou-se por fazer $\widehat{\delta} = 0$, como sugerido por Taylor et al. (2001).

Na Tabela 3, são apresentadas as médias dos resultados da equação (34), médias dos VR% ($\overline{\text{VR\%}}$), para diferentes vetores de parâmetros (δ, θ, ξ, n) e $\mathbb{E}(Y) = \{2, 3, \ldots, 40\}$, isto é,

$$\overline{\text{VR\%}} = \frac{1}{39} \sum_{t=1}^{39} \left\{ \frac{1}{4000} \sum_{i=1}^{4000} \left(\frac{\widehat{\lambda_{ti}}}{\lambda_t} - 1 \right) 100 \right\} \tag{69}$$

sendo λ o parâmetro ou estatística de interesse, t o índice do valor de $\mathbb{E}(Y)$ considerado.

Dos resultados apresentados para δ, na Tabela 3, observa-se que a medida em que δ aumenta, $\overline{\text{VR\%}}$ diminui em valor absoluto, independente dos valores de ξ e n considerados. Nota-se, ainda, que a mudança de $\xi = 0{,}11$ $\xi = 0{,}50$ acarretou também uma diminuição, em valor absoluto, do $\overline{\text{VR\%}}$. Além disso, com o aumento do tamanho amostral n, o $\overline{\text{VR\%}}$ também diminuiu, como era de se esperar. Convém ressaltar que, na pior situação, em que $n = 15$ e $\delta = 0{,}10$ o viés relativo médio foi 0,23618. Obteve-se, também, $\overline{\text{VR\%}}$ negativo em 42 casos, mostrando que o parâmetro é geralmente subestimado. Note que as observações feitas para δ também são cabíveis para $\mathbb{E}(Y)$. Porém, essas observações não são constatadas para as estimativas do parâmetro θ. No caso do parâmetro δ é observado que o aumento de n reduz a $\overline{\text{VR\%}}$, enquanto o aumento do valor de ξ leva ao aumento da $\overline{\text{VR\%}}$.

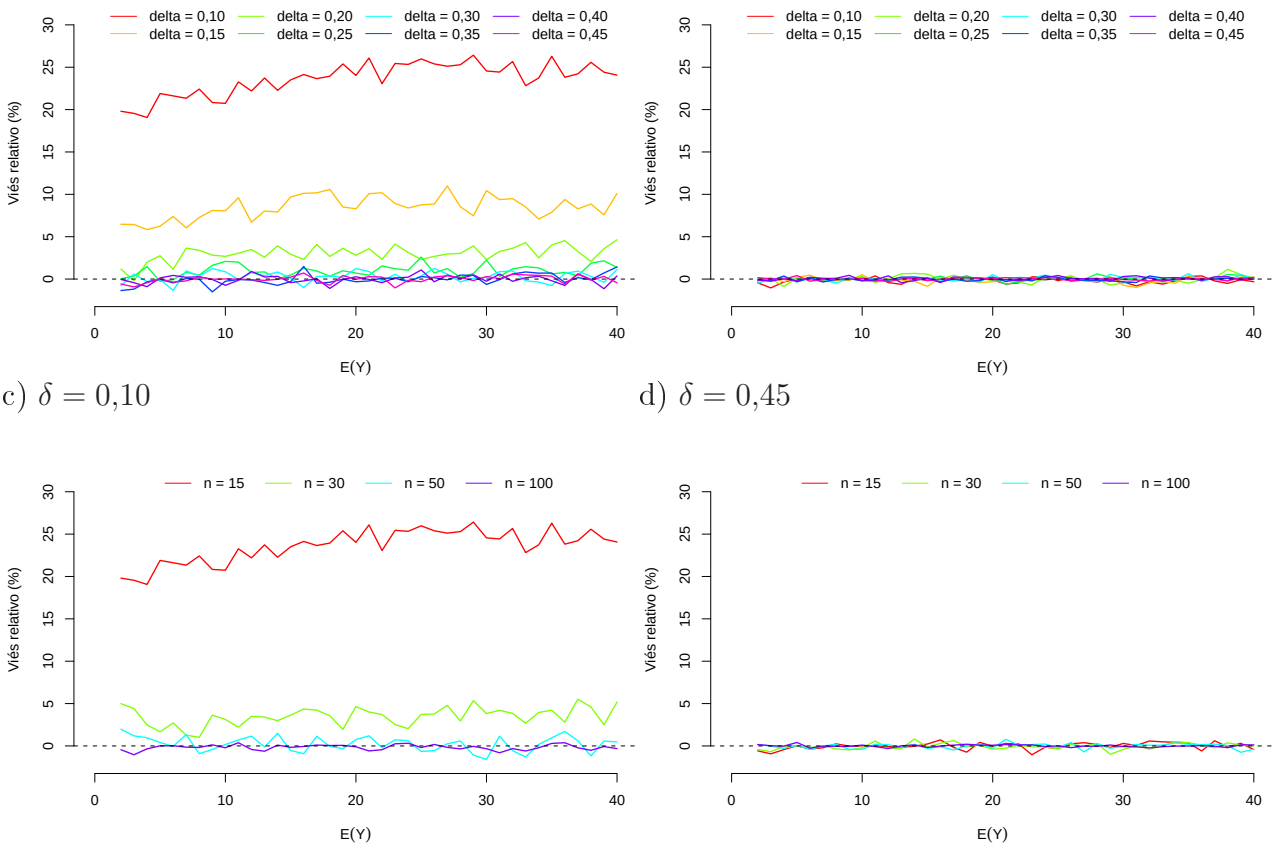
Tabela 3 – Médias ($\overline{\text{VR\%}}$) dos viéses relativos médios percentuais de δ, θ e $\mathbb{E}(Y)$ em função de n, ξ e δ, considerando-se 4000 amostras de tamanho n, $\tau = 2\xi$ e $\mathbb{E}(Y) = \{2, 3, \ldots, 40\}$ para o modelo ME

			δ							
Parâmetro	ξ	n	0,1	0,15	0,2	0,25	0,3	0,35	0,4	0,45
δ	0,11	15	23,618	8,477	3,000	0,980	0,280	-0,040	-0,007	-0,012
		30	3,485	0,548	0,036	-0,055	-0,032	-0,095	-0,032	-0,048
		50	0,252	-0,047	-0,081	-0,089	-0,048	0,082	-0,048	-0,018
		100	-0,170	-0,102	-0,007	0,037	0,038	-0,041	0,035	0,001
	0,50	15	22,890	8,139	2,835	0,591	-0,167	-0,233	-0,484	-0,682
		30	5,357	0,781	-0,383	-0,367	-0,429	-0,264	-0,215	-0,138
		50	1,445	-0,106	-0,362	-0,255	-0,291	-0,152	-0,082	-0,109
		100	-0,027	-0,192	-0,175	-0,204	-0,179	-0,082	-0,062	0,003
θ	0,11	15	0,134	0,120	0,041	0,025	0,086	0,173	0,099	0,072
		30	0,025	0,065	-0,002	0,150	0,047	-0,019	0,056	0,164
		50	-0,038	-0,060	0,117	-0,030	-0,001	0,103	0,122	0,121
		100	-0,010	0,041	-0,030	0,019	0,007	-0,052	0,073	0,004
	0,50	15	0,768	0,586	0,232	0,143	0,066	-0,064	0,052	0,089
		30	0,420	0,229	0,109	0,125	0,127	0,179	0,061	0,056
		50	0,153	0,081	0,093	-0,003	-0,012	0,038	0,110	0,021
		100	0,018	-0,027	0,004	-0,001	0,050	0,044	0,067	0,093
$\mathbb{E}(Y)$	0,11	15	-2,556	-1,452	-0,775	-0,376	-0,108	0,123	0,009	0,026
		30	-0,392	-0,069	-0,047	0,141	0,034	-0,011	0,046	0,186
		50	-0,085	-0,068	0,115	-0,024	0,006	0,035	0,129	0,113
		100	-0,003	0,050	-0,037	-0,002	-0,016	-0,040	0,033	-0,010
	0,50	15	-2,011	-1,118	-0,750	-0,358	-0,161	-0,290	0,005	0,305
		30	-0,292	-0,042	0,052	0,092	0,155	0,159	0,025	-0,004
		50	-0,083	0,016	0,099	-0,009	0,022	0,026	0,071	0,017
		100	-0,022	-0,039	0,000	0,022	0,080	0,042	0,066	0,045

A Figura 15 apresenta gráficos de viéses relativos médios percentuais de $\widehat{\delta}$ em

função de $\mathbb{E}(Y)$ para situações envolvendo diferentes valores de n e δ. Na Figura 15 (a), observa-se que, para $n = 15$, o aumento de $\mathbb{E}(Y)$ acarreta um pequeno aumento no VR% de $\widehat{\delta}$, especialmente para $\delta = 0{,}10$ e $\delta = 0{,}15$. Observa-se, ainda, que com o aumento de δ, o VR% de $\widehat{\delta}$ diminui. Na Figura 15 (b), nota-se que os viéses relativos de $\widehat{\delta}$ são sempre muito próximos a 0%, independentemente dos valores de δ e de $\mathbb{E}(Y)$, fato observado em virtude do tamanho amostral ser "grande".

a) $n = 15$ b) $n = 100$



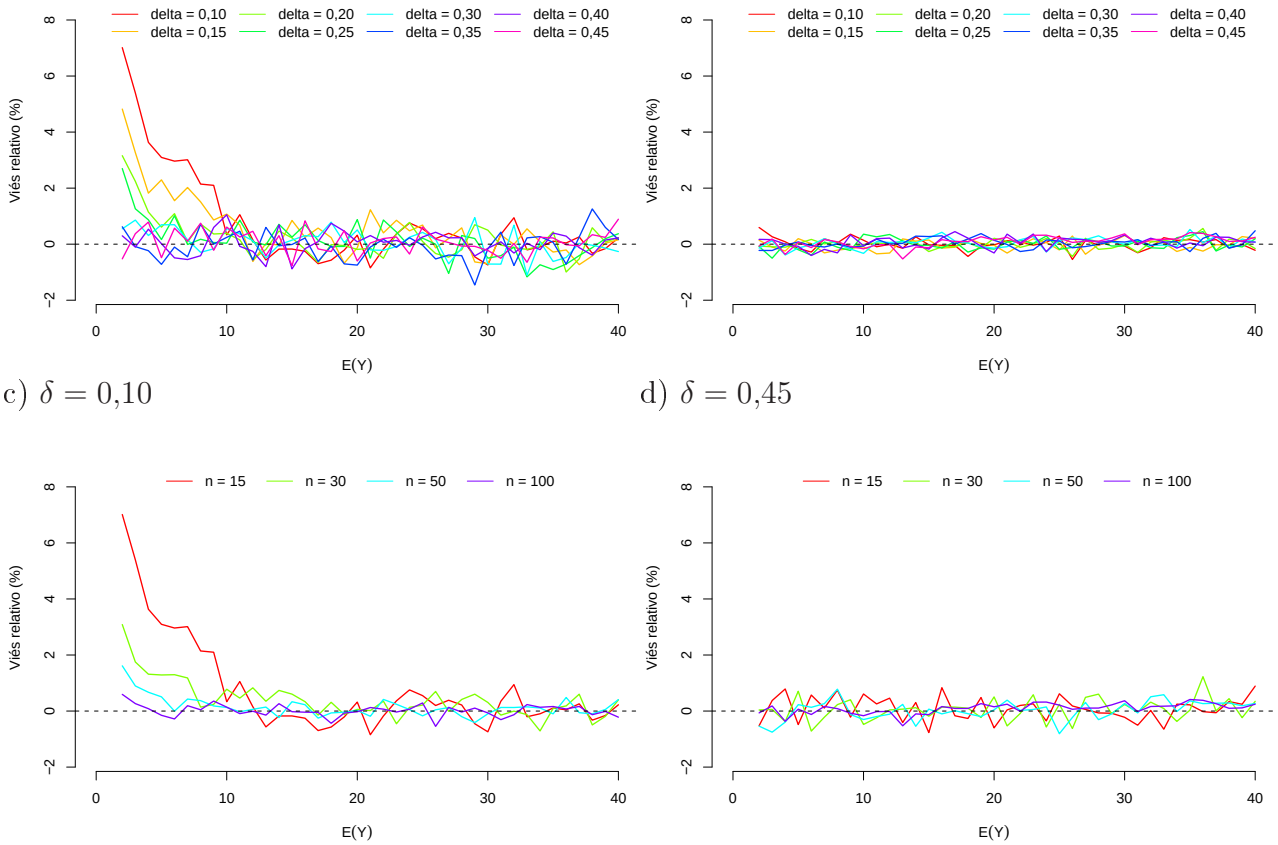
c) $\delta = 0{,}10$ d) $\delta = 0{,}45$

Figura 15 – Viés relativo percentual de $\widehat{\delta}$ em função da $\mathbb{E}(Y)$, dado $\xi = 0{,}11$ para diferentes valores de δ e tamanho amostral $n = 15$ (a) ou $n = 100$ (b), ou para diferentes tamanhos amostrais n e $\delta = 0{,}10$ (c) ou $\delta = 0{,}45$ (d)

A Figura 15 (c), por sua vez, revela que, para $\delta = 0{,}10$ e $n = 50$ ou 100, o VR% pouco se altera com o aumento de $\mathbb{E}(Y)$, oscilando ao redor do valor 0% para $n = 50$ e $n = 100$. A Figura 15 (d), entretanto, evidencia que para $\delta = 0{,}45$, ou seja, na situação em que há muitos zeros verdadeiros, independente do tamanho amostral considerado, o VR% está sempre próximo a zero.

Nas Figuras 16 (a) e (c), observa-se que para $\mathbb{E}(Y) < 10$ ocorre aumento no VR% tornando-se maior à medida que a esperança se aproxima de 2. Esse efeito ocorre principalmente para amostras pequenas e baixas quantidades de zeros verdadeiros, entretanto ocorrendo apenas para $\xi = 0{,}50$. Na Figura 16 (b), para $n = 100$ e diferentes valores de δ, nota-se que os viéses relativos de $\widehat{\theta}$ são sempre em torno a 0%, para todos valores de δ e de $\mathbb{E}(Y)$ considerados. Observa-se, ainda, por meio da Figura 16 (d), que para $\delta = 0{,}45$ o VR% de $\widehat{\theta}$ também está sempre próximo de 0%.

a) $n = 15$ b) $n = 100$



c) $\delta = 0{,}10$ d) $\delta = 0{,}45$

Figura 16 – Viés relativo percentual de $\widehat{\theta}$ em função da $\mathbb{E}(Y)$, dado $\xi = 0{,}50$ para diferentes valores de δ e tamanho amostral $n = 15$ (a) ou $n = 100$ (b), ou para diferentes tamanhos amostrais n e $\delta = 0{,}10$ (c) ou $\delta = 0{,}45$ (d)

Os efeitos da combinação amostra pequena e baixa quantidade de zeros verdadeiros, fica evidenciado nas Figuras 17 (a) e (c). Nota-se nas Figuras 17 (c) e (d), que para tamanhos amostrais n superiores ou iguais a 30 o VR% tem um comportamento desejado, mantendo próximo de 0% para toda $\mathbb{E}(Y)$ considerada. Esse mesmo efeito foi observado

no caso de $\xi = 0{,}11$, entretanto o VR% foi praticamente constante, não ocorrendo um decrescimento como se pode observar nas Figuras 17 (a) e (c). Por outro lado, aumentado-se o tamanho da amostra e a quantidade de zeros verdadeiros, as Figuras 17 (b) e (d) revelou que os VR% passam a ter comportamento e intensidades semelhantes.

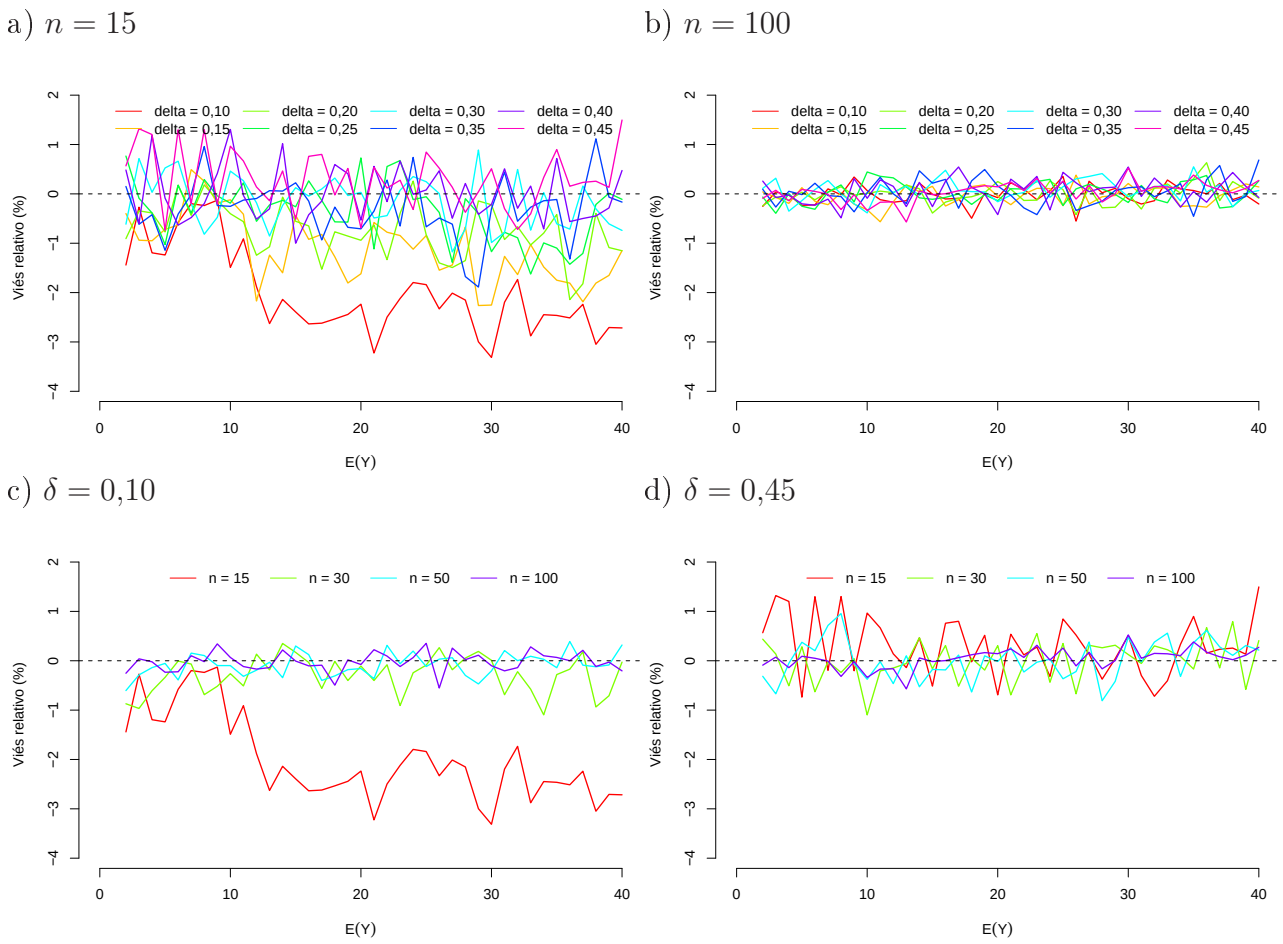


Figura 17 – Viés relativo percentual de $\widehat{\mathbb{E}(Y)}$ em função da $\mathbb{E}(Y)$, dado $\xi = 0{,}50$ para diferentes valores de δ e tamanho amostral $n = 15$ (a) ou $n = 100$ (b), ou para diferentes tamanhos amostrais n e $\delta = 0{,}10$ (c) ou $\delta = 0{,}45$ (d)

Na Tabela 4 encontram-se médias dos erros quadráticos médios obtidos por meio da equação (35), médias dos EQM ($\overline{\text{EQM}}$), de δ, θ e $\mathbb{E}(Y)$ em função de n, ξ e δ, considerando-se 4000 amostras de tamanho n e $\mathbb{E}(Y) = \{2, 3, \ldots, 40\}$, calculadas sob a equação

$$\overline{\text{EQM}} = \frac{1}{39}\sum_{t=1}^{39}\frac{1}{4000}\sum_{i=1}^{4000}\left[\left(\widehat{\lambda_{ti}} - \lambda_t\right)^2 + \text{Var}(\widehat{\lambda}_t)\right]. \tag{70}$$

sendo λ o parâmetro ou estatística de interesse, t o índice do valor de $\mathbb{E}(Y)$ considerado.. Vê-se que as $\overline{\text{EQM}}$ para $\widehat{\delta}$, $\widehat{\theta}$ e $\widehat{\mathbb{E}(Y)}$ seguem o mesmo padrão. De forma geral, na Tabela 4, observa-se que, com aumento no valor de δ a $\overline{\text{EQM}}$ também aumenta. Além disso, comparando-se as $\overline{\text{EQM}}$ para $\xi = 0{,}11$ com a para $\xi = 0{,}50$, nota-se menores valores para $\xi = 0{,}11$ na maioria dos casos. Entretanto, o aumento do tamanho amostral n sempre leva a uma diminuição das $\overline{\text{EQM}}$.

A Tabela 5, contém as médias das variâncias das estimativas de δ, θ e $\mathbb{E}(Y)$ em função de n, ξ e δ, considerando-se 4000 amostras de tamanho n e $\mathbb{E}(Y) = \{2, 3, \ldots, 40\}$. Comparando-se, esta, com a Tabela 4 constata-se a proximidade das $\overline{\text{EQM}}$, indicando um pequeno viés e uma boa eficiência no processo de estimação.

Tabela 4 – Médias ($\overline{\text{EQM}}$) dos EQM de δ, θ e $\mathbb{E}(Y)$ em função de n, ξ e δ, considerando-se 4000 amostras de tamanho n e $\mathbb{E}(Y) = \{2, 3, \ldots, 40\}$ para o modelo ME

			δ							
ξ	par.	n	0,1	0,15	0,2	0,25	0,3	0,35	0,4	0,45
0,11	δ	15	0,005	0,008	0,010	0,012	0,014	0,015	0,016	0,017
		30	0,003	0,004	0,006	0,006	0,007	0,008	0,008	0,008
		50	0,002	0,003	0,003	0,004	0,004	0,005	0,005	0,005
		100	0,001	0,001	0,002	0,002	0,002	0,002	0,002	0,003
0,50		15	0,007	0,009	0,011	0,013	0,015	0,016	0,017	0,017
		30	0,004	0,005	0,006	0,007	0,008	0,008	0,009	0,009
		50	0,002	0,003	0,004	0,004	0,005	0,005	0,005	0,005
		100	0,001	0,002	0,002	0,002	0,002	0,003	0,003	0,003
0,11	θ	15	54,439	63,689	76,487	92,823	116,020	145,041	185,618	243,703
		30	26,387	31,492	37,692	46,098	56,027	70,582	90,281	116,828
		50	15,649	18,748	22,576	27,259	33,614	42,155	53,385	70,125
		100	7,859	9,353	11,156	13,510	16,682	20,897	26,504	34,481
0,50		15	54,501	64,745	77,218	94,588	115,338	146,999	190,497	246,287
		30	26,813	31,993	37,753	46,232	56,923	71,816	91,603	119,413
		50	15,949	18,720	22,697	27,412	34,234	42,650	54,524	70,498
		100	7,981	9,345	11,224	13,741	16,830	21,095	27,080	34,954
0,11	$\mathbb{E}(Y)$	15	44,631	49,391	55,816	62,273	70,092	78,502	88,580	99,558
		30	22,939	25,620	28,514	31,939	35,184	39,373	44,224	50,304
		50	13,846	15,454	17,191	18,891	21,240	23,695	26,524	30,026
		100	6,939	7,728	8,502	9,457	10,563	11,819	13,078	14,991
0,50		15	44,480	49,700	55,711	62,542	70,115	78,617	88,480	100,022
		30	23,051	25,865	28,201	31,646	35,258	39,656	44,345	50,287
		50	13,941	15,296	17,169	18,905	21,273	23,685	26,657	29,998
		100	6,988	7,646	8,482	9,457	10,561	11,785	13,403	15,026

Tabela 5 – Médias das variâncias de δ, θ e $\mathbb{E}(Y)$ em função de n, ξ e δ, considerando-se 4000 amostras de tamanho n e $\mathbb{E}(Y) = \{2, 3, \ldots, 40\}$ para o modelo ME

			δ							
ξ	par.	n	0,1	0,15	0,2	0,25	0,3	0,35	0,4	0,45
0,11	δ	15	0,005	0,007	0,010	0,012	0,014	0,015	0,016	0,017
		30	0,003	0,004	0,005	0,006	0,007	0,008	0,008	0,008
		50	0,002	0,003	0,003	0,004	0,004	0,005	0,005	0,005
		100	0,001	0,001	0,002	0,002	0,002	0,002	0,002	0,003
0,50		15	0,006	0,009	0,011	0,013	0,015	0,016	0,017	0,017
		30	0,004	0,005	0,006	0,007	0,008	0,008	0,009	0,009
		50	0,002	0,003	0,004	0,004	0,005	0,005	0,005	0,005
		100	0,001	0,002	0,002	0,002	0,002	0,002	0,003	0,003
0,11	θ	15	54,427	63,672	76,468	92,798	115,969	145,016	185,580	243,676
		30	26,382	31,484	37,683	46,084	56,017	70,559	90,253	116,799
		50	15,645	18,743	22,569	27,254	33,608	42,145	53,373	70,101
		100	7,856	9,351	11,152	13,507	16,679	20,893	26,498	34,472
0,50		15	54,481	64,725	77,200	94,556	115,309	146,953	190,482	246,257
		30	26,802	31,986	37,741	46,219	56,912	71,796	91,576	119,377
		50	15,945	18,715	22,690	27,403	34,225	42,642	54,510	70,479
		100	7,979	9,343	11,220	13,737	16,825	21,089	27,074	34,944
0,11	$\mathbb{E}(Y)$	15	44,229	49,246	55,772	62,252	70,071	78,485	88,560	99,543
		30	22,924	25,612	28,509	31,929	35,177	39,357	44,212	50,289
		50	13,843	15,451	17,188	18,889	21,235	23,691	26,517	30,015
		100	6,937	7,726	8,498	9,455	10,561	11,817	13,076	14,989
0,50		15	44,125	49,565	55,644	62,501	70,095	78,585	88,467	100,002
		30	23,037	25,861	28,192	31,636	35,250	39,647	44,334	50,276
		50	13,938	15,289	17,163	18,900	21,269	23,679	26,649	29,990
		100	6,986	7,644	8,478	9,454	10,558	11,779	13,399	15,024

4.1.1 Análise de quatro conjuntos obtidos por simulação utilizando o modelo ME

De modo a ilustrar a teoria apresentada na seção 3.2.2, foram selecionadas quatro amostras S1, S2, S3 e S4 obtidas por meio de simulação dentre as obtidas no item anterior, apresentadas nas Tabelas 6, 7, 8 e 9. Convém ressaltar que para a escolha destas amostras foi levado em consideração o ponto de máximo da função de verossimilhança com relação ao parâmetro δ. A primeira, S1, é um caso em que o ponto de máximo ocorre quando $\widehat{\delta}$ é negativo e afastado de zero. Nas seguintes, S2 e S3, $\widehat{\delta}$ está próximo de zero pela esquerda e direita, respectivamente, e na última, S4, $\widehat{\delta} > 0$.

Tabela 6 – Conjunto S1 de dados obtidos por meio de simulação considerando-se o modelo ME, com tamanho $n = 30$, $\delta = 0{,}2$, $\mathbb{E}(Y) = 2$, $\theta = 2{,}5$, $\xi = 0{,}50$ e $\tau = 1$

7,44	ND	1,80	ND	1,22	NQ	2,27	1,48	1,11	2,43
ND	NQ	NQ	5,70	NQ	ND	NQ	3,33	3,47	2,92
5,97	10,97	24,27	31,85	6,00	6,75	14,86	23,98	8,10	11,60

Nota: ND: não detectados, valores menores que ξ
NQ: não quantificados, valores pertencentes ao intervalo $[\xi, \tau)$.

Tabela 7 – Conjunto S2 de dados obtidos por meio de simulação considerando-se o modelo ME, com tamanho $n = 30$, $\delta = 0{,}2$, $\mathbb{E}(Y) = 13$, $\theta = 16{,}25$, $\xi = 0{,}50$ e $\tau = 1$

26,74	4,15	ND	2,55	21,09	6,33	8,78	3,73	33,20	7,16
5,35	31,80	26,05	18,03	42,19	12,07	5,61	3,72	2,87	25,15
13,59	9,60	7,23	1,58	12,52	ND	45,92	94,09	43,45	31,53

Nota: ND: não detectados, valores menores que ξ
NQ: não quantificados, valores pertencentes ao intervalo $[\xi, \tau)$.

Tabela 8 – Conjunto S3 de dados obtidos por meio de simulação considerando-se o modelo ME, com tamanho $n = 30$, $\delta = 0{,}1$, $\mathbb{E}(Y) = 37$, $\theta = 41{,}111$, $\xi = 0{,}50$ e $\tau = 1$

106,45	69,20	25,18	50,64	37,39	40,24	9,98	51,32	27,03	12,89
5,16	115,60	23,54	18,03	262,10	59,51	58,94	3,46	3,25	32,68
1,64	5,97	13,78	3,63	8,30	ND	NQ	7,21	ND	ND

Nota: ND: não detectados, valores menores que ξ
NQ: não quantificados, valores pertencentes ao intervalo $[\xi, \tau)$.

Tabela 9 – Conjunto S4 de dados obtidos por meio de simulação considerando-se o modelo ME, com tamanho $n = 100$, $\delta = 0{,}2$, $\mathbb{E}(Y) = 4$, $\theta = 2{,}5$, $\xi = 0{,}50$ e $\tau = 1$

5,25	NQ	ND	2,28	3,55	1,20	4,29	2,01	9,95	1,26
2,62	1,99	NQ	ND	ND	1,54	ND	1,61	ND	ND
ND	2,24	6,93	3,06	5,62	ND	NQ	8,70	10,98	2,21
2,66	13,00	3,32	2,75	13,62	2,44	2,78	5,30	ND	2,91
ND	ND	ND	6,09	ND	7,46	2,84	3,49	ND	ND
ND	1,80	NQ	NQ	7,32	6,27	NQ	12,78	6,19	5,84
7,34	4,17	10,64	2,00	1,58	7,88	11,88	2,23	ND	8,47
1,53	10,92	8,60	5,73	12,36	6,50	ND	2,95	NQ	3,78
8,49	6,08	NQ	ND	ND	1,08	2,61	4,81	2,59	18,47
ND	ND	ND	ND	ND	ND	ND	ND	ND	ND

Nota: ND: não detectados, valores menores que ξ
NQ: não quantificados, valores pertencentes ao intervalo $[\xi, \tau)$.

Nas amostras S1, S2, S3 e S4 foram ajustados o modelo ME de duas formas, sem impor restrição do espaço paramétrico para δ e impondo a restrição $\delta \geq 0$, e o modelo (36) considerando censura. As estimativas dos parâmetros, matriz de informação de Fisher observada, o máximo da função de verossimilhança, bem como algumas características das amostras são apresentadas na Tabela 10.

Como esperado, observa-se que, na Tabela 10, as estimativas de θ não apresentaram grandes variações para o modelo ME considerando-se a restrição $\delta \geq 0$ (Mistura-r) ou não (Mistura), sendo exatamente iguais quando $\widehat{\delta} > 0$, o que ocorre para amostras S3 e S4. Porém, quando se impõe a restrição $\delta \geq 0$ no método de estimação, a convergência fica bastante sensível ao valor inicial utilizado no processo de maximização. Taylor et al. (2001), em estudo similar, entretanto considerando apenas censura à esquerda e uma única amostra, observou que as variâncias dos parâmetros por eles obtidas foram muito menores quando estimadas sob restrição do espaço paramétrico. No caso presente, entretanto, ocorre que, sob restrição, as variâncias são ligeiramente maiores, para a amostra S1. As verossimilhanças, por outro lado, não apresentaram grandes variações entre estimação com e sem restrição, sendo que nos casos S3 e S4 são exatamente iguais, como era de se esperar pois $\widehat{\delta} > 0$ e a função de verossimilhança é a mesma.

Tabela 10 – Estimativas de máxima verossimilhança (EMV) dos parâmetros do modelo ME (41), considerando-se a restrição $\delta \geq 0$ (Mistura-r) ou não (Mistura) ou modelo exponencial (36) com censura (Censurado), considerando-se as amostras S1 a S4 apresentadas nas Tabelas 6 a 9

Modelo	EMV		I^{-1}		FV	Amostra e suas características
	$\widehat{\delta}$	$\widehat{\theta}$	$\widehat{\delta}$	$\widehat{\theta}$		
Mistura	-0,04127	1,6332	0,01543	0,0227 0,1162	$1{,}647\times10^{-24}$	S1 $n = 30$,
Mistura-r	0,00000	1,6967	0,01566	0,0211 0,1253	$1{,}559\times10^{-24}$	$n_0 = 7$, $n_1 = 6$, $n_2 = 17$,
Censurado	–	1,6351	–	– 0,1168	$1{,}972\times10^{-17}$	$n_{00} = 5$, $n_c = 2$
Mistura	-0,00092	14,3584	0,00119	0,0172 7,1083	$8{,}802\times10^{-49}$	S2 $n = 30$,
Mistura-r	0,00000	14,3604	0,00125	0,0172 7,0988	$8{,}799\times10^{-49}$	$n_0 = 1$, $n_1 = 0$, $n_2 = 29$,
Censurado	–	14,3597	–	– 7,1109	$7{,}058\times10^{-47}$	$n_{00} = 0$, $n_c = 1$
Mistura	0,02213	43,4005	0,00110	0,0169 65,0594	$1{,}058\times10^{-62}$	S3 $n = 30$,
Mistura-r	0,02213	43,4005	0,00110	0,0169 65,0591	$1{,}058\times10^{-62}$	$n_0 = 1$, $n_1 = 0$, $n_2 = 29$
Censurado	–	43,4109	–	– 65,1215	$8{,}482\times10^{-61}$	$n_{00} = 1$, $n_c = 0$
Mistura	0,13981	4,5139	0,00233	0,0056 0,2646	$1{,}064\times10^{-110}$	S4 $n = 100$,
Mistura-r	0,13981	4,5139	0,00233	0,0056 0,2646	$1{,}064\times10^{-110}$	$n_0 = 23$, $n_1 = 9$, $n_2 = 68$
Censurado	–	4,9186	–	– 0,3761	$2{,}127\times10^{-87}$	$n_{00} = 14$, $n_c = 9$

Nota:
I^{-1}: inversa da matriz Hessiana
FV: máximo da função de verossimilhança
n_2: número de observações maiores que τ
n_{00}: número de zeros verdadeiros
n_c: número de zeros oriundos da censura
n_1: número de valores "NI"

As Figuras 18 e 19, apresentam os gráficos de contornos e superfícies da função de verossimilhança para as amostras S1 e S2 apresentadas nas Tabelas 6 e 7 e para as amostras S3 e S4 apresentadas nas Tabelas 8 e 9, respectivamente, cujos resultados dos ajustes dos modelos estão na Tabela 10.

Observa-se, nas Figuras 18 (a) e (b), que o ponto de máximo da função de verossimilhança encontra-se fora do espaço paramétrico de δ. No entanto, com a maximização sob restrição, o ponto de máximo obtido fica na fronteira do espaço seguindo a direção do máximo absoluto. Por outro lado, nas Figuras 18 (c) e (d), observa-se o máximo absoluto da

função de verossimilhança está na fronteira, havendo concordância entre as duas estimações.

A Figura 19, ilustra os casos em que o ponto de máximo da função de verossimilhança encontra-se dentro do espaço paramétrico e pode-se observar, que utilizando maximização com e sem restrição tem-se as mesmas estimativas.

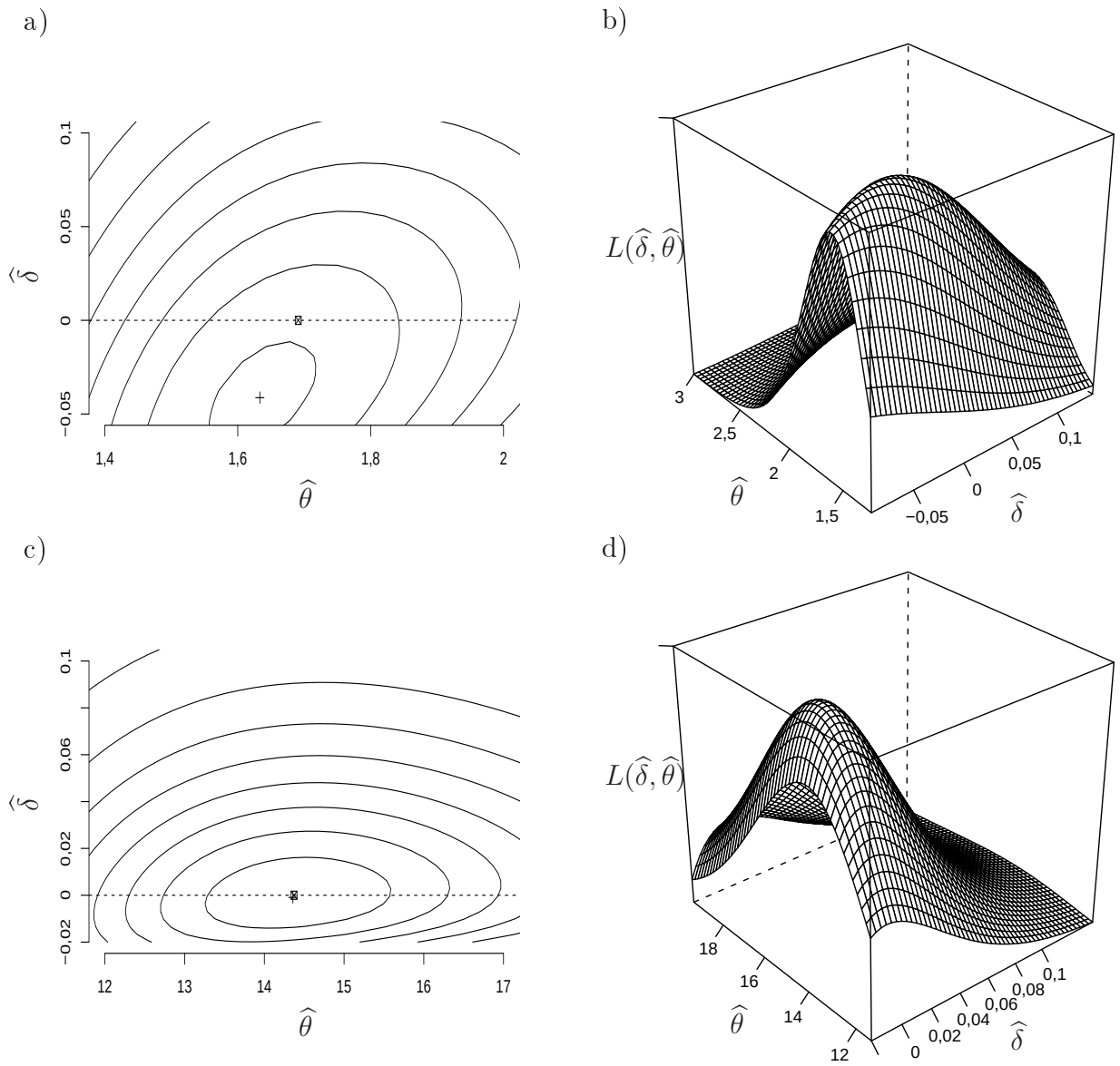


Figura 18 – Gráfico de contornos e superfície da função de verossimilhança para as amostras S1 em (a)-(b) e S2 em (c)-(d), com respectivas estimativas de máxima verossimilhança com a restrição $\delta \geq 0$ ($\boxtimes$) ou (+) sem restrição

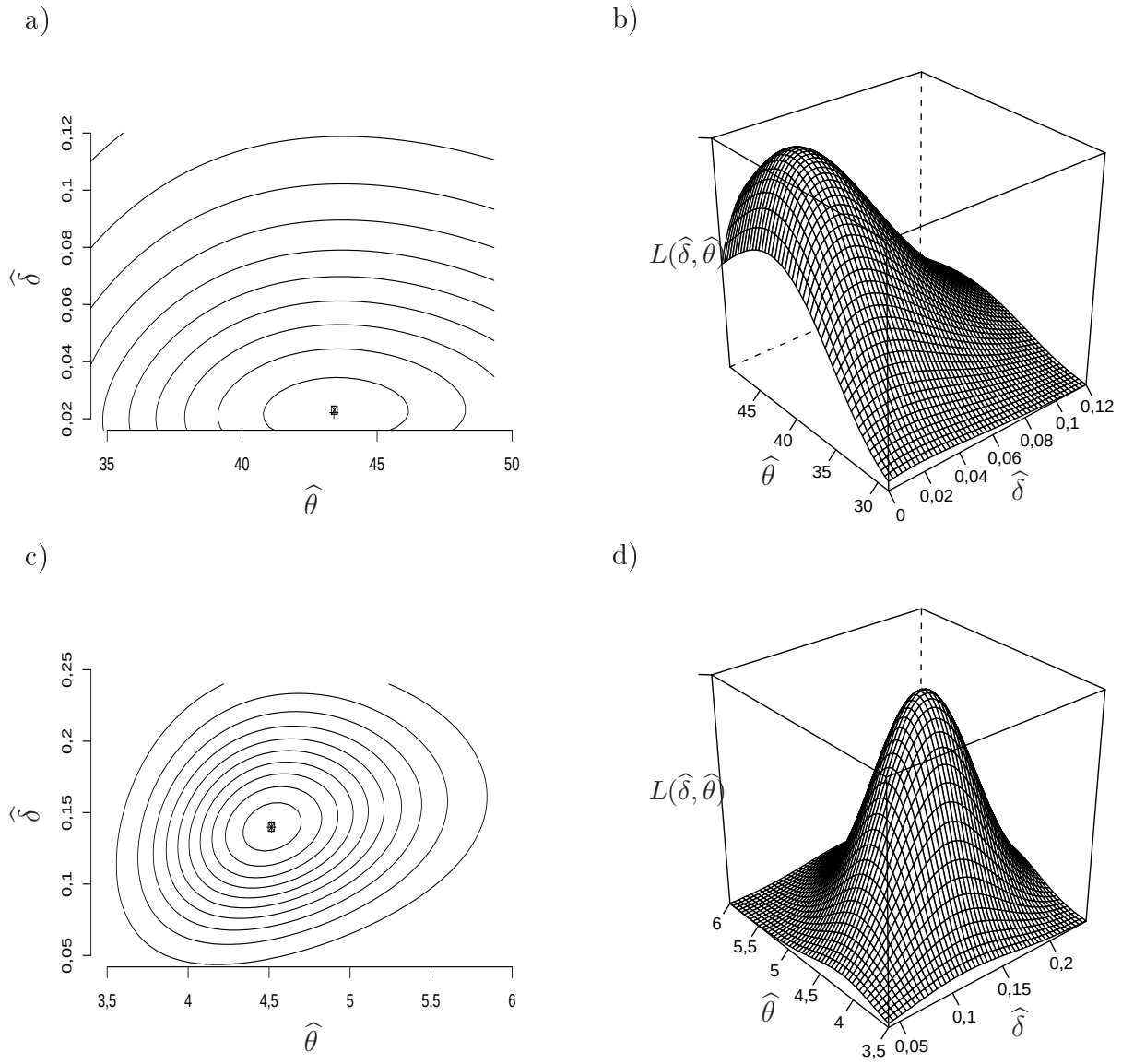


Figura 19 – Gráfico de contornos e superfície da função de verossimilhança para as amostras S3 em (a)-(b) e S4 em (c)-(d) com respectivas estimativas de máxima verossimilhança com a restrição $\delta \geq 0$ ($\boxtimes$) ou (+) sem restrição

Para testar formalmente se o modelo de mistura deve ser considerado, isto é, testar a hipótese $H_0: \ \delta = 0$ contra a hipótese $H_a: \ \delta > 0$, utilizou-se a metodologia apresentada na seção 3.2.2, cujos resultados para as amostras S1 a S4 são apresentados na Tabela 11. Desses resultados, pode-se concluir que não há evidências para rejeitar H_0 considerando-se as amostras S1, S2 e S3 e o nível de significância de 5%. Nesses casos, portanto, a opção pelo modelo de mistura (14), em que $g(y;\theta)$ é uma função de densidade exponencial, pode não ser o mais adequado, sendo mais indicado estimar $g(y;\theta)$ sob censura. Isso fica evidente, nesses

casos, pela proximidade muito grande entre as estimativas de θ obtidas considerando-se os modelos com ou sem mistura. Por outro lado, há forte evidência para rejeitar H_0, sugerindo que o modelo de mistura seja utilizado.

Tabela 11 – Estatísticas (T_{RV}) do teste da razão de verossimilhança e respectivos valores p para as amostras S1 a S4 apresentados nas Tabelas 6 a 9, respectivamente

Amostra	T_{RV}	valor p
S1	0,110	0,3700
S2	0,001	0,4895
S3	0,822	0,1820
S4	11,022	0 ,0005

4.1.2 Conclusões

Os parâmetros do modelo mostraram se de fácil estimação, porém quando se restringe o espaço paramétrico os valores utilizados para iniciar o processo iterativo podem ser determinantes no valor para o qual as estimativas convergem. Uma sugestão é utilizar os estimadores de momentos confrontados com gráficos de contorno.

Para o parâmetro δ, que determina a probabilidade de zeros verdadeiros na população ou seja, de não haver aflatoxina, as estimativas apresentaram-se melhores para valores mais altos de δ ou amostras maiores.

As estimativas de $\mathbb{E}(Y)$, tiveram VR% mais elevados nos cenários em que os parâmetros envolvidos no estimador também tiveram VR% altos.

Os limites dos intervalos de censura tiveram influência nas estimativas de δ e θ, apenas para valores baixos de δ, ver Tabelas 3 e 4 .

Segundo a literatura, quando um lote apresenta uma alta quantidade de aflatoxina raramente se tem uma grande quantidade de zeros. Portando, o δ será pequeno e para esses casos a distribuição não apresentou problemas.

Com isso, conclui-se que se as observações mensuradas têm um comportamento que permite o ajuste da distribuição exponencial, e que o modelo de mistura com censura apresentado pode ser indicado para modelagem de dados inflacionados de zeros.

4.2 Simulação para mistura com distribuição de Weibull

4.2.1 Avaliação dos quatro métodos e das diferentes parametrizações para distribuição de Weibull

Na Tabela 12, são apresentadas as médias dos VR% e dos EQM dos 40 cenários, discutidos na seção 3.2.7, divididos em dois grupos de 20 cenários cada, sendo um para os pares $(\xi;\, \tau) = (0,11;\, 0,22)$ e o outro para $(\xi;\, \tau) = (0,5;\, 1)$, considerando as três parametrizações da distribuição de Weibull e os quatro procedimentos de estimação dos parâmetros. Pode ser observado, na Tabela 12, que a parametrização P2, de forma geral, teve melhor performance que a parametrização P1 e P3 independente do procedimento de estimação, fornecendo menores VR% e menores EQM, exceto para o viés relativo de $\widehat{\beta}$ e $\widehat{\mathbb{E}(Y)}$. Entretanto, para os VR% do parâmetro δ com $\xi = 0{,}11$ não há grandes diferenças. Verifica-se, também, que a forma de parametrização da distribuição de Weibull e o procedimento de estimação não afetam o EQM das estimativas de δ. Este resultado é muito importante para escolha da parametrização a ser utilizada visto que o EQM é uma ponderação entre viés e variância das estimativas. Isso leva a optar pela parametrização P2, já que de forma geral apresentou melhores resultados.

Nas Tabelas 31 e 32, no Anexo D, são apresentados os resultados da Tabela 12 segundo o valor de $\mathbb{E}(Y)$, a partir das quais constata-se que as conclusões anteriores sobre P2 são válidas independentemente de $\mathbb{E}(Y)$.

A Tabela 12 indica que a parametrização P2 traz melhores resultados sugerindo, ainda, que o procedimento M4 deve ser preferido aos outros. Afim de auxiliar na decisão pelo melhor método, contou-se o número de vezes que cada método produziu o menor VR% e menor EQM que os demais, cujos resultados são mostrados na Tabela 13. Estes, corroboram para validar as conclusões já obtidas a partir da Tabela 12 e contribuem para a conclusão de que o método 4, aliado a parametrização P2, deve ser empregado nas estimações dos parâmetros.

Tabela 12 – Médias dos VR% e dos EQM para estimativas de α, β, δ e $\mathbb{E}(Y)$ considerando $n = 15$, $\delta = 0{,}10$ ou $0{,}30$ e $\alpha = 1{,}5$ ou 2 em função de ξ e $\mathbb{E}(Y)$, baseado em 10000 repetições, segundo descrito na Seção 3.2.7

		VR% médio				EQM médio			
$(\xi;\tau)$	Método	$\widehat{\alpha}$	$\widehat{\beta}$	$\widehat{\delta}$	$\widehat{\mathbb{E}(Y)}$	$\widehat{\alpha}$	$\widehat{\beta}$	$\widehat{\delta}$	$\widehat{\mathbb{E}(Y)}$
(0,11; 0,22)									
	M1 e P1	14,522	-0,319	-0,214	0,091	0,396	3,069	0,010	2,149
	M2 e P1	14,452	-0,357	-0,221	0,063	0,397	3,071	0,010	2,148
	M3 e P1	14,452	-0,357	-0,221	0,063	0,397	3,071	0,010	2,148
	M4 e P1	13,117	-0,074	-0,222	0,549	0,392	3,089	0,010	2,248
	M1 e P2	9,561	-1,399	-0,213	-0,957	0,262	2,906	0,010	2,087
	M2 e P2	9,507	-1,427	-0,221	-0,974	0,262	2,908	0,010	2,087
	M3 e P2	9,506	-1,427	-0,221	-0,975	0,262	2,908	0,010	2,087
	M4 e P2	8,043	-1,255	-0,214	-0,571	0,261	2,937	0,010	2,200
	M1 e P3	14,518	-0,320	-0,216	0,090	0,396	3,068	0,010	2,149
	M2 e P3	14,442	-0,362	-0,222	0,059	0,397	3,071	0,010	2,148
	M3 e P3	14,448	-0,372	-0,222	0,047	0,397	3,071	0,010	2,148
	M4 e P3	13,121	-0,209	-0,222	0,384	0,392	3,079	0,010	2,191
(0,5; 1)									
	M1 e P1	15,667	-0,525	0,334	-0,156	0,452	3,233	0,011	2,155
	M2 e P1	15,363	-0,681	0,331	-0,291	0,452	3,242	0,011	2,149
	M3 e P1	15,363	-0,681	0,331	-0,291	0,452	3,242	0,011	2,149
	M4 e P1	14,686	-0,387	0,331	0,067	0,445	3,247	0,011	2,209
	M1 e P2	10,550	-1,601	0,194	-1,168	0,309	3,066	0,011	2,099
	M2 e P2	10,210	-1,731	0,191	-1,262	0,309	3,073	0,011	2,097
	M3 e P2	10,208	-1,731	0,192	-1,263	0,309	3,073	0,011	2,097
	M4 e P2	9,392	-1,546	0,166	-0,981	0,304	3,086	0,011	2,167
	M1 e P3	15,664	-0,510	0,331	-0,138	0,452	3,235	0,011	2,162
	M2 e P3	15,348	-0,694	0,330	-0,306	0,452	3,242	0,011	2,148
	M3 e P3	15,366	-0,626	0,330	-0,231	0,452	3,236	0,011	2,156
	M4 e P3	14,682	-0,723	0,331	-0,318	0,445	3,245	0,011	2,136

Tabela 13 – Número de vezes que o método e a parametrização forneceram menores VR% ou menor EQM para estimativas de α, β, δ e $\mathbb{E}(Y)$ considerando $n = 15$, $\delta = 0{,}10$ ou $0{,}30$ e $\alpha = 1{,}5$ ou 2 em função de ξ e $\mathbb{E}(Y)$, baseado em 10000 repetições

	VR%										EQM									
	$\xi = 0,11$					$\xi = 0,5$					$\xi = 0{,}11$					$\xi = 0,5$				
$\mathbb{E}(Y)$	2	4	6	8	10	2	4	6	8	10	2	4	6	8	10	2	4	6	8	10
Método																				
M1 e P1	2	3	1	-	1	1	4	3	2	3	-	1	-	-	-	-	-	-	-	-
M2 e P1	-	-	1	1	1	-	-	-	1	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-
M3 e P1	-	-	-	-	-	1	-	-	-	1	-	1	-	-	-	2	-	-	-	-
M4 e P1	8	3	2	3	4	7	4	4	6	6	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
M1 e P2	2	1	-	1	-	1	-	-	1	-	6	7	9	9	5	3	5	5	8	10
M2 e P2	-	-	1	-	-	1	-	-	-	-	2	2	2	3	4	1	1	3	1	2
M3 e P2	2	2	-	-	-	2	-	-	1	-	1	1	4	2	5	1	3	3	3	1
M4 e P2	5	7	7	7	7	6	10	9	6	6	6	6	3	4	4	9	9	7	6	5
M1 e P3	-	-	1	2	1	-	-	3	1	1	4	2	2	1		1	-	-	-	-
M2 e P3	-	-	1	2	3	-	1	-	-	1	-	-	-	-	-	1	-	-	-	-
M3 e P3	-	2	2	-	-	1	-	-	1	1	1	-	-	1	2	-	-	-	-	-
M4 e P3	1	2	4	4	3	-	1	1	1	1	-	-	-	-	-	2	2	1	2	2
Total	20	20	20	20	20	20	20	20	20	20	20	20	20	20	20	20	20	20	20	20

Nas Tabelas 14 e 15, são apresentadas as proporções de regiões de 90, 95 e 99% confiança contendo as estimativas do vetor de parâmetros (δ, α, β) resultantes de 10000 amostras aleatórias simuladas de tamanho 15 para cada um dos quartetos $(\xi, \delta, \alpha, \mathbb{E}(Y))$ baseados nas combinações das coordenadas dos vetores $\delta = (0,10; 0,30)$, $\alpha = (1,5; 2,0)$, $\mathbb{E}(Y) = (2; 4; 6; 8; 10)$ e $\xi = (0{,}11; 0{,}50)$. As probabilidades de coberturas empíricas que não rejeitam a hipótese de serem iguais aos valores de coberturas nominais estão acompanhadas de um asterisco (*) nas Tabelas 14 e 15, conforme resultados apresentados no Anexo B, página 142. Por meio dessas tabelas, pode-se também, avaliar o efeito da utilização das três parametrizações da distribuição de Weibull, P1, P2 e P3. Observa-se que todas as parametrizações foram eficientes para regiões de 99% de confiança e $\delta = 0{,}10$, principal-

mente com $\xi = 0{,}11$. Considera-se eficiência no sentido de que nas situações consideradas a probabilidade de cobertura empírica atingiu o valor de cobertura nominal.

Tabela 14 – Proporção de regiões de confiança contendo as estimativas do vetor de parâmetros (δ, α, β) resultantes de 10000 amostras aleatórias simuladas de tamanho $n = 15$ e $\xi = 0{,}11$ em função de $\mathbb{E}(Y)$, δ e α

			99%			95%			90%		
$\mathbb{E}(Y)$	δ	α	P1	P2	P3	P1	P2	P3	P1	P2	P3
2	0,10	1,5	98,8*	98,8*	98,8*	94,2	94,2	94,2	88,5	88,5	88,5
		2	99,0*	99,0*	99,0*	94,6*	94,6*	94,6*	89,0	89,0	89,0
	0,30	1,5	98,4	98,4	98,4	93,0	93,0	93,0	87,3	87,3	87,3
		2	98,3	98,3	98,2	93,3	93,4	93,3	87,3	87,5	87,3
4	0,10	1,5	98,8*	98,9*	98,8*	95,0*	95,0*	95,0*	89,7*	89,7*	89,7*
		2	98,9*	99,0*	98,9*	94,8*	95,0*	94,8*	89,2	89,5*	89,2
	0,30	1,5	98,6	98,7	98,6	92,9	93,3	92,9	86,8	87,2	86,8
		2	98,3	98,5	98,3	93,4	94,1	93,4	87,6	88,7	87,6
6	0,10	1,5	98,8*	98,9*	98,8*	94,6*	94,8*	94,6*	89,2	89,5*	89,1
		2	98,9*	99,0*	98,9*	94,4	94,8*	94,4	89,2	89,9*	89,2
	0,30	1,5	98,3	98,6	98,3	93,4	94,0	93,4	87,4	88,3	87,4
		2	98,5	98,7	98,5	93,3	94,1	93,3	87,5	89,0	87,5
8	0,10	1,5	98,8*	98,8*	98,8*	94,5	94,9*	94,5	89,0	89,6*	89,0
		2	98,9*	99,0*	98,9*	94,6*	95,1*	94,6*	89,1	90,1*	89,1
	0,30	1,5	98,2	98,5	98,2	93,6	94,2	93,6	87,7	88,9	87,7
		2	98,5	98,7	98,5	93,4	94,4	93,4	87,3	89,0	87,3
10	0,10	1,5	98,9*	99,0*	98,9*	94,7*	95,0*	94,7*	89,2	89,7*	89,1
		2	98,8*	99,0*	98,8*	94,5	95,0*	94,4	89,0	89,9*	89,0
	0,30	1,5	98,3	98,5	98,3	93,4	94,2	93,4	87,6	88,9	87,5
		2	98,5	98,8*	98,5	93,1	94,2	93,1	87,7	89,3	87,7

Nota: Erro padrão aproximado igual a 0,001, 0,002 e 0,003 para 99%, 95% e 90%, respectivamente.
(*): probabilidade de cobertura dentro da região de aceitação.

Comparando os valores apresentados na Tabela 14 com valores da Tabela 15, constata-se que intervalos de censura maiores trazem estimativas mais pobres. Tanto para $\xi = 0{,}11$ quanto para $\xi = 0{,}50$ as regiões 99% são mais fidedignas que 95% e por sua vez as de 95% são mais fidedignas que 90%.

Tabela 15 – Proporção de regiões de confiança contendo as estimativas do vetor de parâmetros (δ, α, β) resultantes de 10000 amostras aleatórias simuladas de tamanho $n = 15$ e $\xi = 0{,}50$ em função de $\mathbb{E}(Y)$, δ e α

			99%			95%			90%		
$\mathbb{E}(Y)$	δ	α	P1	P2	P3	P1	P2	P3	P1	P2	P3
2	0,10	1,5	98,7	98,7	98,7	93,7	93,7	93,7	87,3	87,5	87,4
		2	98,9*	98,9*	98,9*	93,8	93,9	93,8	87,8	87,8	87,8
	0,30	1,5	98,4	98,5	98,4	93,3	93,4	93,3	87,4	87,5	87,4
		2	98,2	98,3	98,2	93,4	93,5	93,4	87,1	87,4	87,1
4	0,10	1,5	99,0*	99,0*	98,9*	94,3	94,5	94,2	88,2	88,3	88,1
		2	98,7	98,8*	98,7	94,3	94,6*	94,3	88,6	88,9	88,5
	0,30	1,5	98,4	98,5	98,4	93,4	93,8	93,4	87,6	88,1	87,6
		2	98,4	98,7	98,4	93,7	94,3	93,7	88,2	89,0	88,2
6	0,10	1,5	98,8*	98,9*	98,8*	94,2	94,5	94,2	88,4	88,8	88,2
		2	98,8*	98,9*	98,8*	94,5	95,0*	94,5	89,0	89,8*	88,9
	0,30	1,5	98,2	98,3	98,2	92,9	93,4	92,9	86,9	87,8	86,9
		2	98,1	98,4	98,1	93,1	93,7	93,1	87,2	88,6	87,2
8	0,10	1,5	98,8*	98,9*	98,8*	94,3	94,5	94,3	88,8	89,2	88,6
		2	99,0*	99,1*	99,0*	94,3	94,8*	94,3	89,1	89,9*	89,0
	0,30	1,5	98,4	98,6	98,4	93,7	94,4	93,7	87,7	88,9*	87,7
		2	98,2	98,5	98,2	93,3	94,1	93,3	87,5	89,2	87,5
10	0,10	1,5	99,0*	99,1*	99,0*	95,0*	95,2*	95,0*	89,2	89,8*	89,1
		2	98,9*	99,0*	98,9*	94,6*	95,1*	94,6*	89,7*	90,5*	89,6*
	0,30	1,5	98,7	98,9*	98,7	93,3	94,0	93,3	87,4	88,7	87,4
		2	98,4	98,7	98,4	93,5	94,5	93,5	87,7	89,6*	87,7

Nota: Erro padrão aproximado igual a 0,001, 0,002 e 0,003 para 99%, 95% e 90%, respectivamente.
(*): probabilidade de cobertura dentro da região de aceitação.

Com resultados dessa simulações observa-se que geralmente os valores nominais esperados para as regiões de confiança foram subestimado independente da parametrização utilizada para distribuição de Weibull. Porém, em todos os casos, a parametrização P2 mostrou-se mais eficiente trazendo valores mais próximos dos esperados.

Nas Figuras 20 e 21, são apresentados gráficos das regiões de 90, 95 e 99% confiança para uma amostra de tamanho 15 considerando os parâmetros $\delta = 0{,}30$, $\alpha = 1{,}5$ e

$\beta = 15{,}82475$ com $\xi = 0{,}50$ e $\tau = 1$.

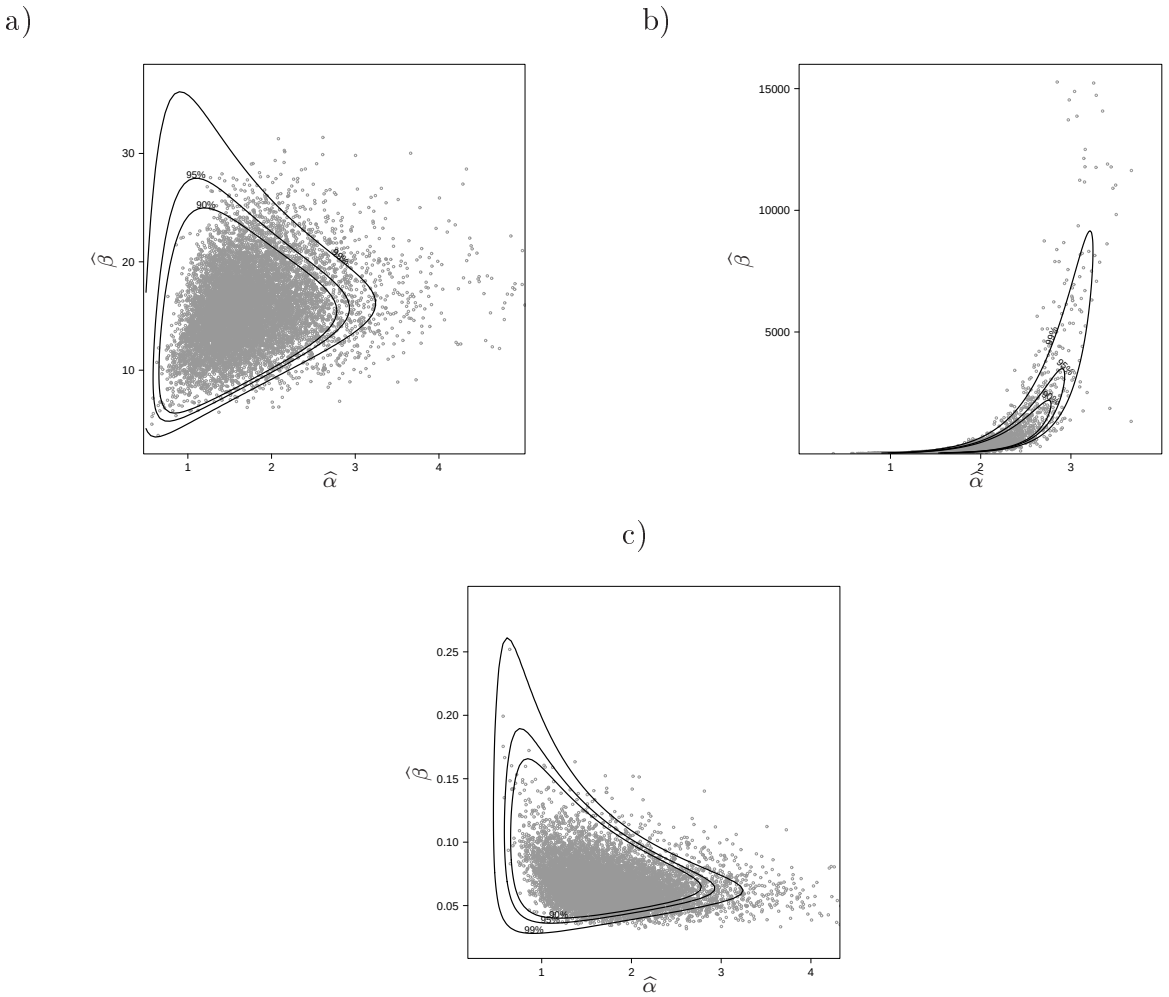


Figura 20 – Regiões de 90, 95 e 99% confiança para uma amostras de tamanho 15 considerando os parâmetros $\delta = 0{,}30$, $\alpha = 1{,}5$ e $\beta = 15{,}82475$ com $\xi = 0{,}50$ e $\tau = 1$ e parametrizações P1, P2 e P3 em (a), (b) e (c), respectivamante, e 10000 estimativas de (α, β) provenientes de simulações

As Figuras 20 (a), (b) e (c) são referentes às parametrizações P1, P2 e P3, respectivamente. Sob as mesmas são apresentadas as 10000 estimativas obtidas pelo método M4 para cada uma das três parametrizações da distribuição de Weibull. Os contornos das regiões de confiança apresentados nas Figuras 21 (a) e (b) foram construídos considerando a parametrização P1 e sob estes são apresentadas as 10000 estimativas reparametrizadas que foram obtidas com o uso das parametrizações P2 e P3. Nesse caso, pode ser observado que a parametrização P2 proporcionou melhores estimativas para os parâmetros α e β, como discutido anteriormente.

a) b)

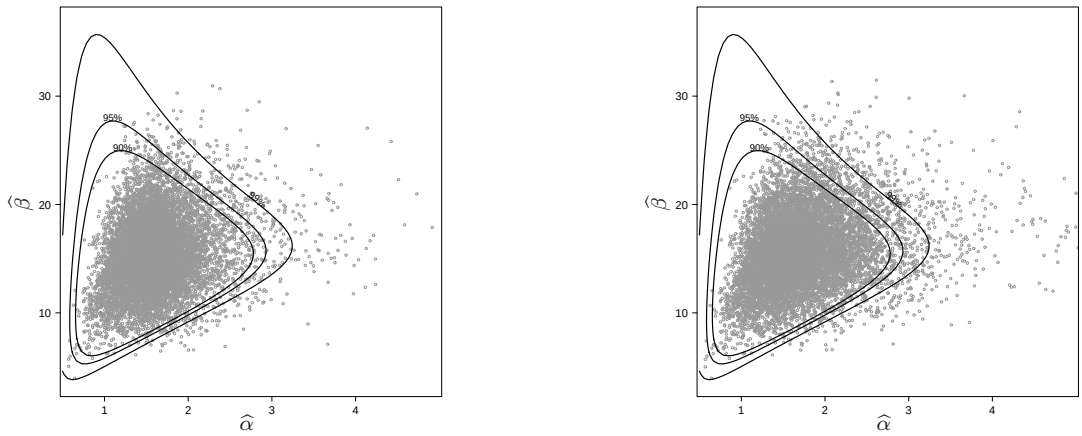


Figura 21 – Regiões de 90, 95 e 99% confiança para uma amostra de tamanho 15 considerando os parâmetros $\delta = 0{,}30$, $\alpha = 1{,}5$ e $\beta = 15{,}82475$ com $\xi = 0{,}50$ e $\tau = 1$ com a parametrização P1, e 10000 pontos $(\widehat{\alpha}, \widehat{\beta})$ provenientes de simulações segundo as parametrizações P2 e P3, em (a) e (b), respectivamente

4.2.2 Avaliação das estimativas dos parâmetros e $\mathbb{E}(Y)$ considerando diferentes valores esperados

Nesta seção são apresentados os resultados do estudo de simulação de Monte Carlo, realizado para investigar o comportamento das estimativas dos parâmetros δ, α e β, e também para o valor médio $\mathbb{E}(Y)$, baseados em 4000 de cada um dos possíveis quintetos $(\xi, n, \delta, \alpha, \mathbb{E}(Y))$, sendo $\xi = (0{,}11; 0{,}50)$, $n = (15; 30; 50; 100)$, $\delta = (0{,}10; 0{,}15; 0{,}20; 0{,}25; 0{,}30; 0{,}35; 0{,}40; 0{,}45)$, $\alpha = (1{,}5; 2{,}0)$ e $\mathbb{E}(Y) = (1; 3; 4; \ldots; 35)$. As estimativas foram obtidas considerando o método de estimação M4 com a parametrização P2, tida como de melhor performance na seção 4.2.1.

Cada resultado apresentado nas Tabelas 16, 17, 18, 19, representa a média dos VR% e EQM das estimativas dos parâmetros δ, α e β e do valor médio $\mathbb{E}(Y)$, respectivamente, resultantes de 280 cenários baseados nas combinações dos valores assumidos para δ e $\mathbb{E}(Y)$, cada cenário amostrado 4000 vezes, em função de n, α e ξ. Os dados a partir dos quais foram construídas tais tabelas, para diferentes valores de δ, são apresentados nas Tabelas 33 a 36, que se encontram no Anexo D. Nestas, cada resultado representa a média dos VR% absolutos $(\overline{\text{VR\%}})$ para determinado vetor (δ, α, ξ, n) e $\mathbb{E}(Y)$ variando de 1 até 35, isto é,

$$\overline{VR\%} = \frac{1}{35} \sum_{t=1}^{35} \left\{ \frac{1}{4000} \sum_{i=1}^{4000} \frac{\widehat{\theta}_{ti}}{\theta} - 1 \right\} \tag{71}$$

sendo θ o parâmetro de interesse. De forma análoga, as Tabelas 37 a 40 apresentam as médias dos valores de EQM ($\overline{\text{EQM}}$), ou seja,

$$\overline{EQM} = \frac{1}{35}\sum_{t=1}^{35}\frac{1}{4000}\sum_{i=1}^{4000}\left[\left(\widehat{\theta_{ti}} - \theta\right)^2 - \text{Var}(\widehat{\theta_{ti}})\right]. \tag{72}$$

Observa-se nos resultados apresentados na Tabela 16, em todos os cenários, que aumentando-se o tamanho da amostra n obtém-se uma redução no valor médio do VR%, em valor absoluto, e do EQM. Além disso, tanto o VR% quanto o EQM mostram melhores resultados quando $\xi = 0{,}11$ do que quando $\xi = 0{,}50$. Comparando os valores médios dos VR% e dos EQM com relação ao parâmetro de forma da distribuição de Weibull, verifica-se que a metodologia apresentou melhores resultados nos casos em que $\alpha = 0{,}2$ do que para $\alpha = 0{,}15$. O valor médio do viés relativo percentual foi negativo em todos os cenários apresentados na Tabela 16, revelando que o parâmetro δ foi, de forma geral, subestimado.

Pode-se notar das Tabelas 33 e 37, no Anexo D, que aumentando a proporção de zeros verdadeiros (δ) de 0,10 para 0,45 o viés relativo diminui em módulo e enquato a o EQM aumenta.

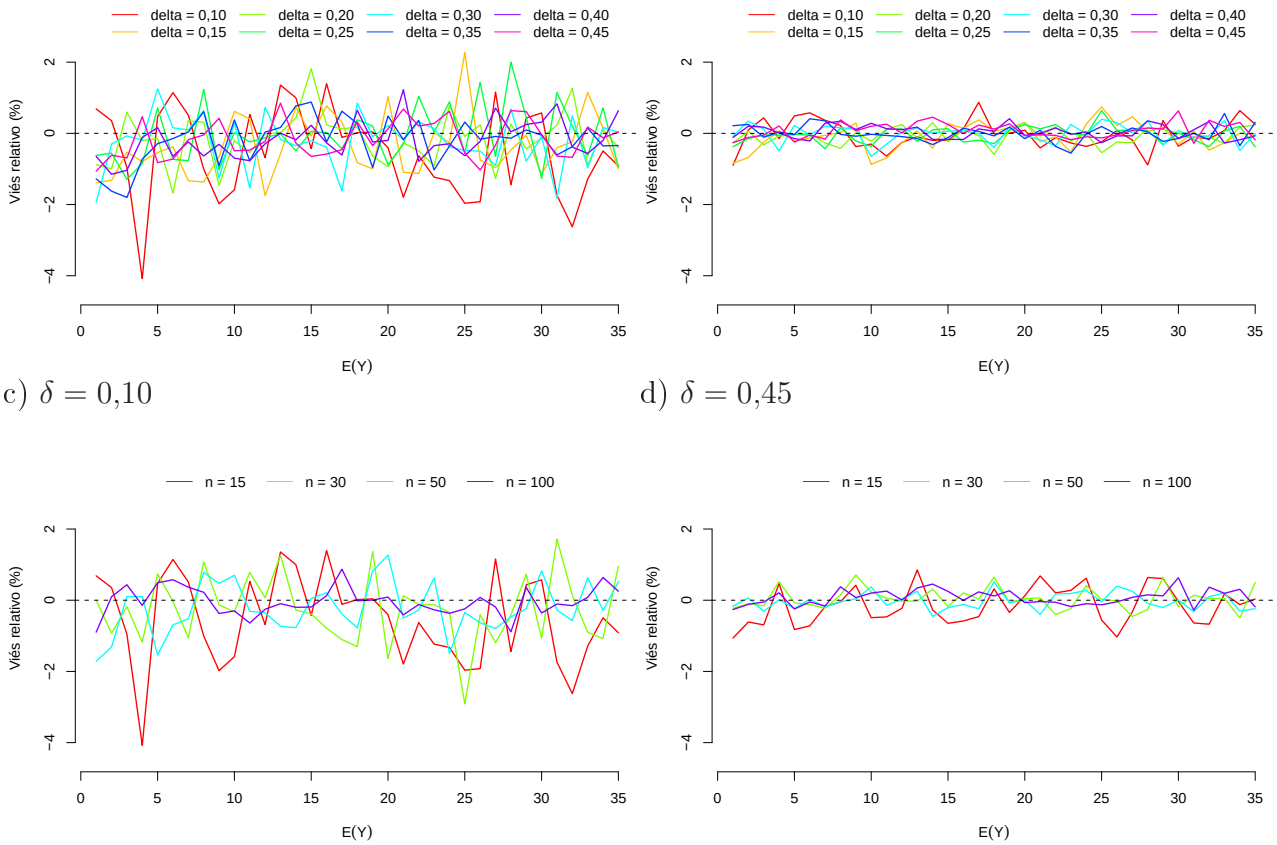
Tabela 16 – Médias dos valores de viés relativo (VR%) e de erros quadrados médios (EQM) de $\widehat{\delta}$ em função de α, ξ e n, considerando-se 280 situações dadas pelas combinações dos 8 valores de δ e dos 35 valores de $\mathbb{E}(Y)$ amostradas 4000 vezes

		VR%			EQM		
n	α	$\xi = 0{,}11$	$\xi = 0{,}50$	Média	$\xi = 0{,}11$	$\xi = 0{,}50$	Média
15	1,5	-0,2372	-0,3350	-0,2861	0,0125	0,0134	0,0129
	2,0	-0,0596	-0,2809	-0,1702	0,0124	0,0128	0,0126
Média		-0,1484	-0,3079	-0,2282	0,0124	0,0131	0,0128
30	1,5	-0,1484	-0,3011	-0,2247	0,0063	0,0069	0,0066
	2,0	0,0025	-0,1644	-0,0810	0,0062	0,0065	0,0063
Média		-0,0730	-0,2327	-0,1528	0,0062	0,0067	0,0064
50	1,5	-0,0615	-0,2586	-0,1600	0,0037	0,0042	0,0039
	2,0	-0,0193	-0,1550	-0,0871	0,0037	0,0039	0,0038
Média		-0,0404	-0,2068	-0,1236	0,0037	0,0040	0,0039
100	1,5	-0,0145	-0,1009	-0,0577	0,0019	0,0021	0,0020
	2,0	-0,0139	-0,0715	-0,0427	0,0019	0,0019	0,0019
Média		-0,0142	-0,0862	-0,0502	0,0019	0,0020	0,0019

Na Figura 22, são apresentados gráficos de viéses relativos médios percentuais de $\widehat{\delta}$ em função de $\mathbb{E}(Y)$ para situações envolvendo diferentes valores de n e δ. Na Figura 22 (a) e (b) é apresentado o comportamento do VR% para os oito valores de δ, n igual a 15 e 100 respectivamente, e $\xi = 0{,}11$, observando-se que os VR% oscilam em torno de 0%. Dentre os valores usados para δ nas simulações, tem-se que $\delta = 0{,}10$ apresentou maiores valores do viés relativo percentual, em valor absoluto. De forma geral, não há vício aparente nas estimativas causado pela variação da esperança, $\mathbb{E}(Y)$ da variável aleatória estudada, mas em gráficos similares para $\xi = 0{,}50$, pode-se observar que ocorreu aumento do VR% quando $\mathbb{E}(Y)$ é menor que 3.

Os gráficos apresentados na Figura 22 (c) e (d), para $\delta = 0{,}10$ e $\delta = 0{,}45$, respectivamente, evidenciam que independente do valor de δ e $\mathbb{E}(Y)$, amostras de tamanho $n = 15$ produzem estimativas menos acuradas.

a) $n = 15$ b) $n = 100$



c) $\delta = 0{,}10$ d) $\delta = 0{,}45$

Figura 22 – Viés relativo percentual de $\widehat{\delta}$ em função da $\mathbb{E}(Y)$, dado $\alpha = 1{,}5$ e $\xi = 0{,}11$ para diferentes valores de δ e tamanho amostral $n = 15$ (a) ou $n = 100$ (b), ou para diferentes tamanhos amostrais n e $\delta = 0{,}10$ (c) ou $\delta = 0{,}45$ (d)

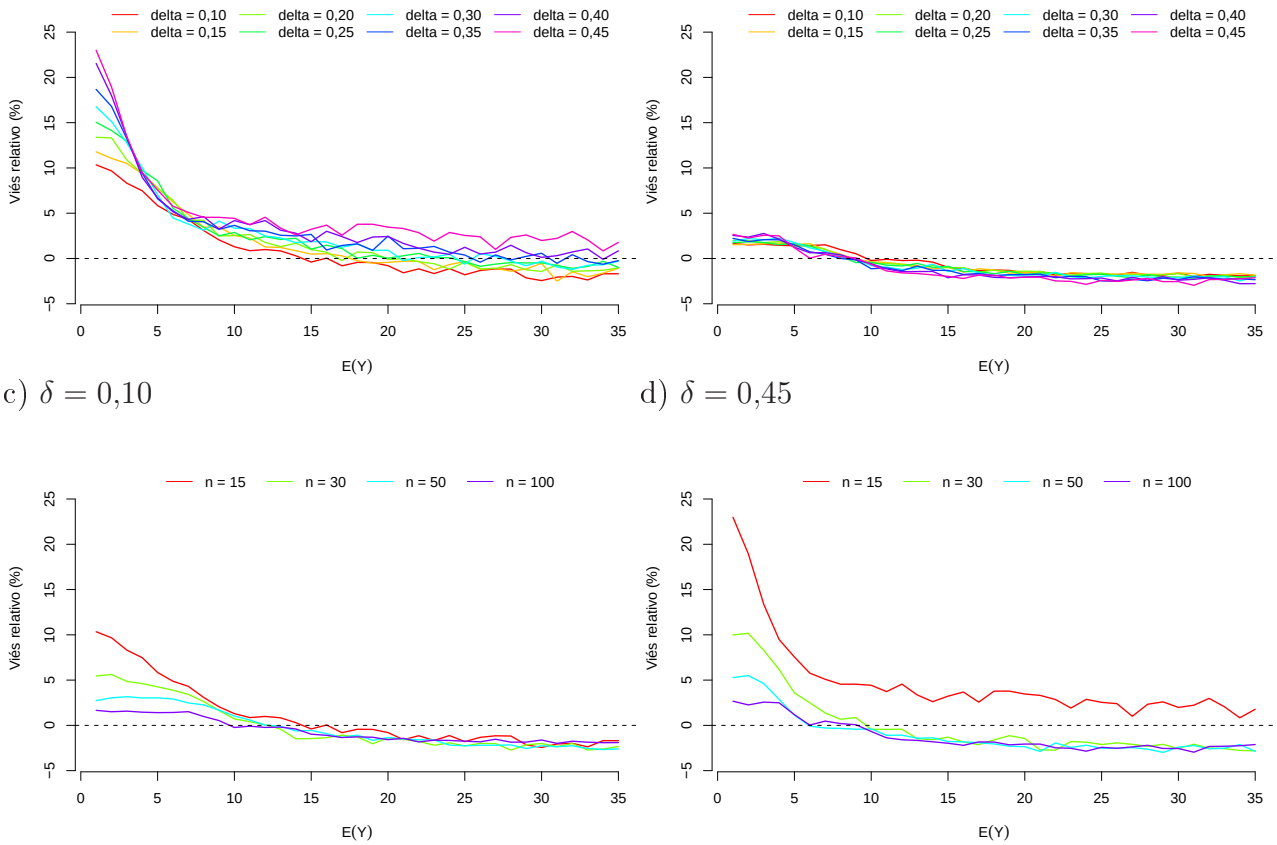
Na Tabela 17 é apresentado as médias dos VR% e dos EQM para o parâmetro α. Nota-se em todos os cenários, como esperado, que tanto o VR% quanto o EQM diminui com o aumento de n. Foi observado que as médias dos VR% para $\xi = 0{,}11$ são, na maioria das situações, menores do que para $\xi = 0{,}50$, o mesmo ocorrendo para o EQM. Entretanto, considerando as variações no valor usado para o parâmetro α, observou-se que o VR% e o EQM não tiveram os mesmos comportamentos, sendo o VR% melhor nos casos de $\alpha = 2$ e o EQM melhor nos casos em que $\alpha = 1{,}50$. Em 5 das 16 situações apresentadas na Tabela 17, α foi subestimado, em todos os casos quando o valor usado na simulação foi $\alpha = 2$.

Tabela 17 – Médias dos valores de viés relativo (VR%) e de erros quadrados médios (EQM) de $\widehat{\alpha}$ em função de α, ξ e n, considerando-se 280 situações dadas pelas combinações dos 8 valores de δ e dos 35 valores de $\mathbb{E}(Y)$ amostradas 4000 vezes

		VR%			EQM		
n	α	$\xi = 0{,}11$	$\xi = 0{,}50$	Média	$\xi = 0{,}11$	$\xi = 0{,}50$	Média
15	1,5	6,3325	7,2040	6,7683	0,2210	0,2824	0,2517
	2,0	2,6686	3,0235	2,8460	0,3923	0,4107	0,4015
Média		4,5005	5,1138	4,8071	0,3067	0,3465	0,3266
30	1,5	2,7826	3,2701	3,0263	0,0783	0,0924	0,0854
	2,0	-0,1783	0,0883	-0,0450	0,1525	0,1581	0,1553
Média		1,3021	1,6792	1,4907	0,1154	0,1253	0,1203
50	1,5	1,8484	2,1477	1,9981	0,0442	0,0518	0,0480
	2,0	-0,5740	-0,4774	-0,5257	0,0864	0,0913	0,0889
Média		0,6372	0,8352	0,7362	0,0653	0,0716	0,0684
100	1,5	0,6212	1,1568	0,8890	0,0220	0,0255	0,0237
	2,0	-0,9321	-0,6736	-0,8029	0,0466	0,0475	0,0471
Média		-0,1555	0,2416	0,0431	0,0343	0,0365	0,0354

Na Figura 23 , são apresentados gráficos de viéses relativos percentuais de $\widehat{\alpha}$ em função da $\mathbb{E}(Y)$, dado $\alpha = 2$ e $\xi = 0{,}11$ considerando diferentes valores de δ e tamanho amostral $n = 15$ ou $n = 100$, ou para diferentes tamanhos amostrais e $\delta = 0{,}10$ ou $\delta = 0{,}45$. Como pode ser observado o valor do VR% de $\widehat{\alpha}$ é alto para $\mathbb{E}(Y) = 1$ diminuindo rapidamente até $\mathbb{E}(Y) = 5$, havendo uma mudança nessa velocidade entre $\mathbb{E}(Y) = 5$ e $\mathbb{E}(Y) = 15$, estabilizando para $\mathbb{E}(Y) > 15$, com tendência a ter VR% negativo em alguns casos e positivo em outros. Este comportamento é observado tanto para ξ igual a 0,11 ou 0,5, quanto $\alpha = 1{,}5$ ou 2.

a) $n = 15$ b) $n = 100$



c) $\delta = 0{,}10$ d) $\delta = 0{,}45$

Figura 23 – Viés relativo percentual de $\widehat{\alpha}$ em função da $\mathbb{E}(Y)$, dado $\alpha = 2$ e $\xi = 0{,}11$ para diferentes valores de δ e tamanho amostral $n = 15$ (a) ou $n = 100$ (b), ou para diferentes tamanhos amostrais n e $\delta = 0{,}10$ (c) ou $\delta = 0{,}45$ (d)

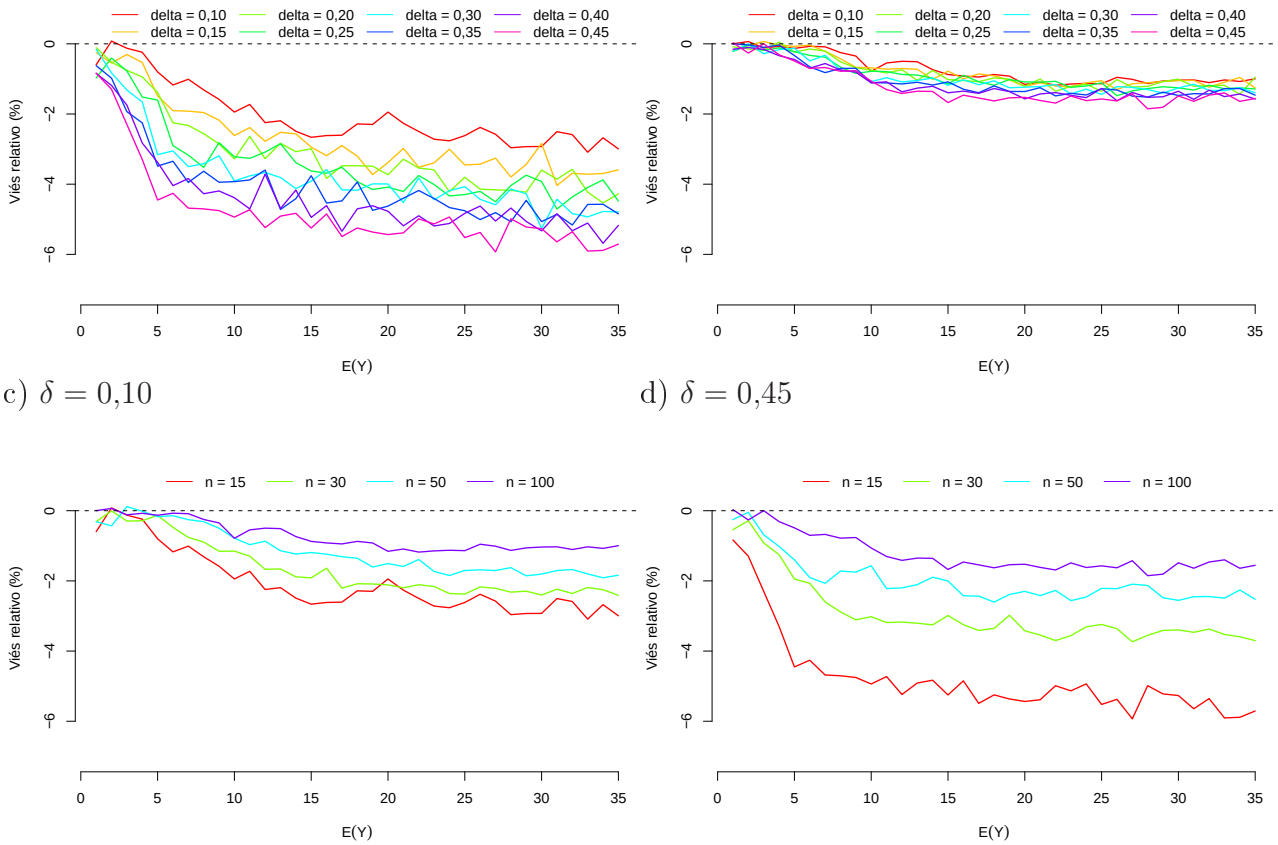
Dos resultados da simulação, mostrados na Tabela 18, foi observado que quanto maior o tamanho da amostra n, menor são as médias dos VR% e dos EQM, observando as médias em valores absolutos. Nota-se, ainda, que o parâmetro de escala da distribuição de Weibull foi pouco afetado pela mudança dos limites de $\xi = 0{,}11$ para 0,5, sendo as médias dos VR% quando $\xi = 0{,}11$, um pouco inferiores, fato ocorrido, tanto para $\alpha = 1{,}5$ quanto para $\alpha = 2$. Pode-se observar ainda, que o viés relativo percentual é menor, em valor absoluto da média, para $\alpha = 1{,}5$ em relação a $\alpha = 2$, porém essa afirmação é contrária para as médias dos EQM. Além disso, a partir dos sinais apresentados pelas médias dos VR%, conclui-se que as estimativas de β subestimam o valor do parâmetro.

Tabela 18 – Médias dos valores de viés relativo (VR%) e de erros quadrados médios (EQM) de $\widehat{\beta}$ em função de α, ξ e n, considerando-se 280 situações dadas pelas combinações dos 8 valores de δ e dos 35 valores de $\mathbb{E}(Y)$ amostradas 4000 vezes

		VR%			EQM		
n	α	$\xi = 0{,}11$	$\xi = 0{,}50$	Média	$\xi = 0{,}11$	$\xi = 0{,}50$	Média
15	1,5	-2,8650	-2,9935	-2,9292	50,3063	51,0536	50,6800
	2,0	-3,5325	-3,6459	-3,5892	32,3003	30,1297	31,2150
Média		-3,1987	-3,3197	-3,2592	41,3033	40,5917	40,9475
30	1,5	-1,5845	-1,6053	-1,5949	25,7377	26,0424	25,8901
	2,0	-2,2897	-2,2661	-2,2779	16,6125	15,6497	16,1311
Média		-1,9371	-1,9357	-1,9364	21,1751	20,8461	21,0106
50	1,5	-0,8904	-0,8762	-0,8833	15,6294	15,8844	15,7569
	2,0	-1,4869	-1,5232	-1,5051	9,9704	9,5918	9,7811
Média		-1,1887	-1,1997	-1,1942	12,7999	12,7381	12,7690
100	1,5	-0,5852	-0,4006	-0,4929	8,1382	8,1181	8,1281
	2,0	-0,9744	-0,9121	-0,9433	5,2111	4,9928	5,1020
Média		-0,7798	-0,6564	-0,7181	6,6747	6,5554	6,6151

Na Figura 24 são apresentados os viéses relativos percentuais de $\widehat{\beta}$ em função da $\mathbb{E}(Y)$, dado $\alpha = 2$ e $\xi = 0{,}11$ para diferentes valores de δ e tamanho amostral $n = 15$ ou $n = 100$, ou para diferentes tamanhos amostrais n e $\delta = 0{,}10$ ou $\delta = 0{,}45$. Nestes, observa-se que o VR% de β aumenta no sentido negativo para valores de $\mathbb{E}(Y)$ entre 1 e 10 estabilizando para valores maiores que 10. Nas Figuras 24 (a) e (c), observa-se que o VR% é menor para $\delta = 0{,}10$ tornando-se maior com o aumento do valor de δ independente do tamanho da amostra ou da $\mathbb{E}(Y)$, o que pode ser confirmado na Tabela 35 que encontra-se no Anexo D. Os gráficos das Figura 24 (a) e (c), por sua vez, revelam, para $\delta = 0{,}10$ e 0,45, que, para $n = 15$, o viés relativo percentual é maior que para amostras de tamanhos maiores, independente do valor de $\mathbb{E}(Y)$.

a) $n = 15$ b) $n = 100$



c) $\delta = 0{,}10$ d) $\delta = 0{,}45$

Figura 24 – Viés relativo percentual de $\widehat{\beta}$ em função da $\mathbb{E}(Y)$, dado $\alpha = 2$ e $\xi = 0{,}11$ para diferentes valores de δ e tamanho amostral $n = 15$ (a) ou $n = 100$ (b), ou para diferentes tamanhos amostrais n e $\delta = 0{,}10$ (c) ou $\delta = 0{,}45$ (d)

Na Tabela 19 são apresentados as médias dos valores de viés relativo (VR%) e de erros quadrados médios (EQM) de $\widehat{\mathbb{E}(Y)}$ em função de α, ξ e n, considerando-se 280 situações dadas pelas combinações dos 8 valores de δ e dos 35 valores de $\mathbb{E}(Y)$ amostradas 4000 vezes. Nesta, como para os parâmetros do modelo, a utilização de amostras maiores leva a médias menores de VR% e de EQM paras as estimativas de $\mathbb{E}(Y)$, como pode ser visto na Tabela 19. Os resultados de simulação mostram, ainda, que os valores de ξ considerados pouco influenciaram as médias dos VR% e dos EQM. Entretanto, a diferença considerada nos valores fixados de α influenciaram no VR% e no EQM, sendo os VR% para $\alpha = 1{,}5$ maiores, em valor absoluto, e os EQM menores, comparados aos valores para $\alpha = 2$. Considerando ainda a Tabela 19, verifica-se que $\mathbb{E}(Y)$ é, geralmente, subestimada. Quanto à influência dos valores de δ usados nas simulações sobre as estimativas da $\mathbb{E}(Y)$, observa-se nas Tabelas 36 e

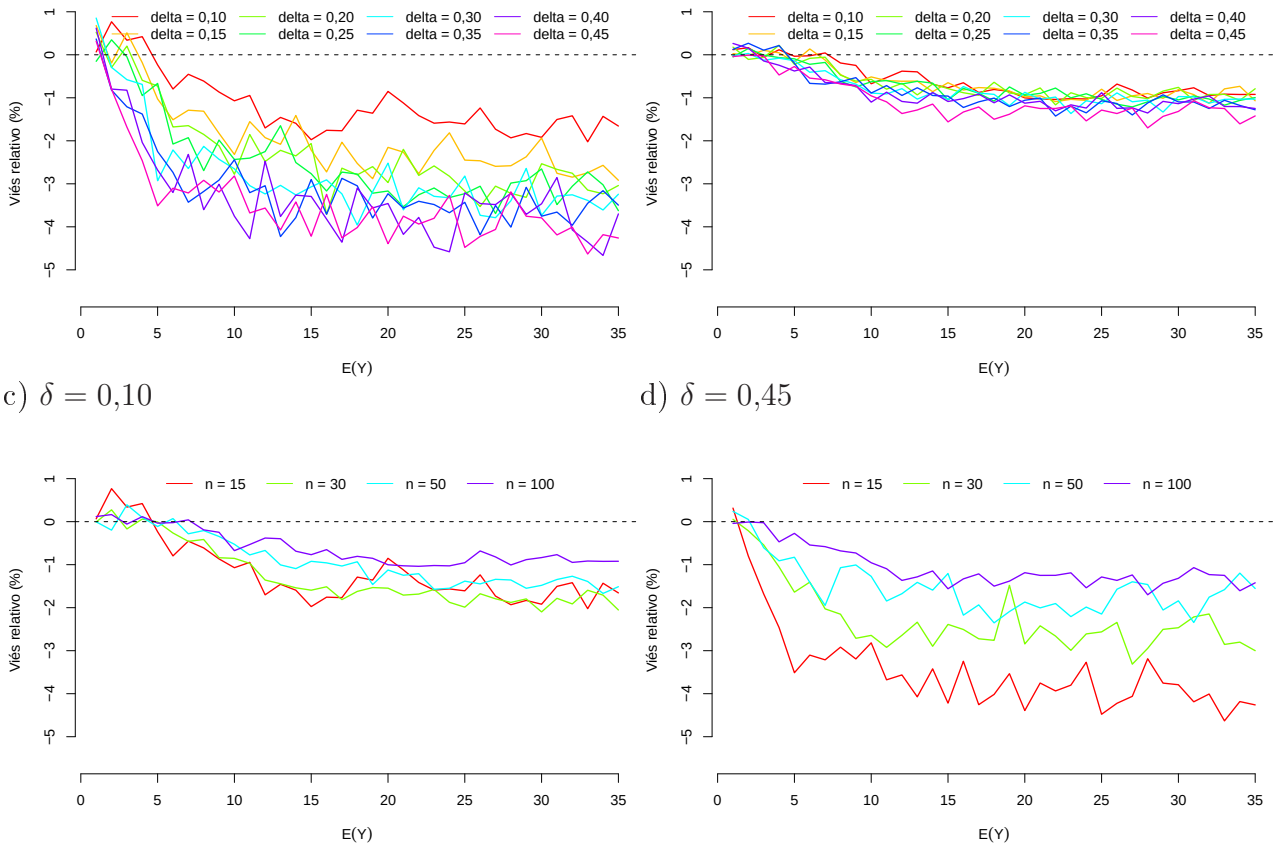
40 apresentadas no Anexo D, que valores de menores δ levam a VR% e EQM melhores.

Tabela 19 – Médias dos valores de viés relativo (VR%) e de erros quadrados médios (EQM) de $\widehat{\mathbb{E}(Y)}$ em função de α, ξ e n, considerando-se 280 situações dadas pelas combinações dos 8 valores de δ e dos 35 valores de $\mathbb{E}(Y)$ amostradas 4000 vezes

		VR%			EQM		
n	α	$\xi = 0{,}11$	$\xi = 0{,}50$	Média	$\xi = 0{,}11$	$\xi = 0{,}50$	Média
15	1,5	-1,7781	-1,8772	-1,8277	29,7500	29,5863	29,6681
	2,0	-2,5585	-2,6061	-2,5823	22,6838	22,2299	22,4568
Média		-2,1683	-2,2416	-2,2050	26,2169	25,9081	26,0625
30	1,5	-1,0849	-1,0594	-1,0721	14,9021	14,9200	14,9111
	2,0	-1,8009	-1,7422	-1,7715	11,4649	11,2378	11,3514
Média		-1,4429	-1,4008	-1,4218	13,1835	13,0789	13,1312
50	1,5	-0,6134	-0,5525	-0,5829	8,9799	9,0415	9,0107
	2,0	-1,1819	-1,1884	-1,1851	6,9227	6,8499	6,8863
Média		-0,8977	-0,8704	-0,8840	7,9513	7,9457	7,9485
100	1,5	-0,4110	-0,2549	-0,3330	4,5784	4,5648	4,5716
	2,0	-0,7945	-0,7203	-0,7574	3,5302	3,4960	3,5131
Média		-0,6028	-0,4876	-0,5452	4,0543	4,0304	4,0424

Os gráficos do viés relativo percentual de $\widehat{\mathbb{E}(Y)}$ em função de $\mathbb{E}(Y)$ para situações envolvendo diferentes valores de n e δ, apresentados na Figura 25, mostram que os VR% são negativos para maioria dos valores de $\mathbb{E}(Y)$ considerados na simulação. Além disso, nota-se na Figura 25 (a) e (c), que para valores baixos de δ e de n com $\mathbb{E}(Y) = 1$ o viés relativo percentual pode ser muito maior em valor absoluto do que para $\mathbb{E}(Y) = 2$, em que geralmente é o valor que apresenta VR% mais próximo de zero. O VR% tente aumentar para $\mathbb{E}(Y) = 2$ aumentando até $\mathbb{E}(Y) = 10$, estabilizando para valores maiores de $\mathbb{E}(Y)$. Deve-se ressaltar, entretanto, que o maior valor observado de VR% é inferior a 6%, em valor absoluto, o que sugere que mesmo na situação mais crítica, não há grandes problemas na utilização pratica da metodologia.

a) $n = 15$ b) $n = 100$



c) $\delta = 0{,}10$ d) $\delta = 0{,}45$

Figura 25 – Viés relativo percentual de $\widehat{\mathbb{E}(Y)}$ em função da $\mathbb{E}(Y)$, dado $\alpha = 2$ e $\xi = 0{,}11$ para diferentes valores de δ e tamanho amostral $n = 15$ (a) ou $n = 100$ (b), ou para diferentes tamanhos amostrais n e $\delta = 0{,}10$ (c) ou $\delta = 0{,}45$ (d)

De modo a analisar mais detalhadamente os resultados obtidos por meio das simulações, foram construídos histogramas das estimativas dos parâmetros e gráficos de dispersão para os pares de parâmetros, como apresentados as Figuras 37 a 42, no Anexo E, para valores de $\mathbb{E}(Y)$ de 1 a 17. Por meio dos histogramas, observou-se que as estimativas para δ e β apresentaram simetria em praticamente todos os cenários e que as estimativas do parâmetro α geralmente apresentam uma pequena assimetria positiva.

Além disso, $\widehat{\delta}$ apresentou comportamento tendendo ao discreto como na Figura 26. Os pontos sob o eixo das abcissas na Figura 26, representam os 50 pontos (do tamanho da amostra) distribuídos de forma equidistante no intervalo $[0,\ 1]$ e os asteriscos $(*)$ a probabilidade do ponto ser zero.

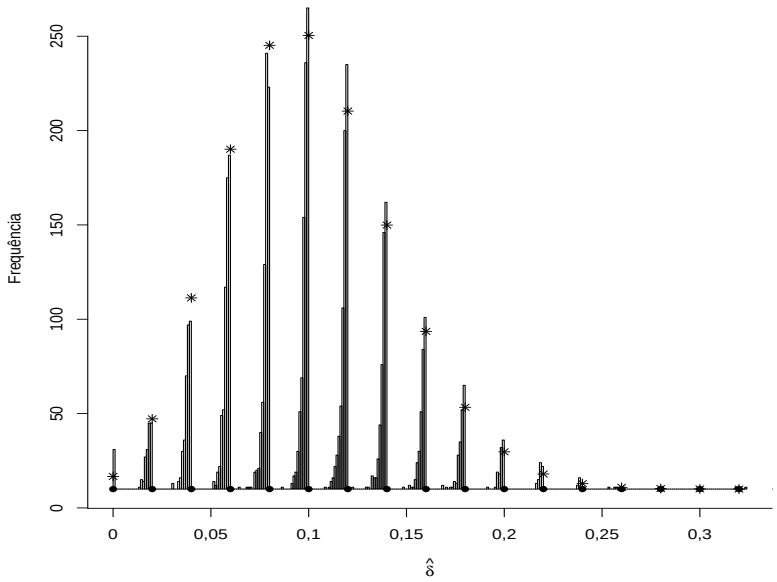


Figura 26 – Histograma de 4000 estimativas do parâmetro $\delta = 0{,}10$ para amostras de tamanho $n = 50$ e sendo $\alpha = 1{,}5$, $\beta = 7,3849$, $\mathbb{E}(Y) = 6$ e $\xi = 0{,}11$ em que os $(\bullet)$ são marcadores das 50 subdivisões do intervalo $[0, 1]$ e $*$ as probabilidades de cada ponto ocorrer

Na Figura 27 são apresentados gráficos de dispersão de 4000 estimativas dos parâmetros $\delta = 0{,}10$, $\alpha = 1{,}5$ e $\beta = 7,3849$ considerando amostras de tamanho $n = 50$, $\mathbb{E}(Y) = 6$ e $\xi = 0{,}11$ onde em (a) tem-se $\widehat{\delta}$ versus $\widehat{\alpha}$, em (b) $\widehat{\delta}$ versus $\widehat{\beta}$ e em (c) $\widehat{\alpha}$ versus $\widehat{\beta}$. Nesta, observa-se que o centro de massa das estimativas coincidem com o cruzamento das linhas tracejadas que representam os valores dos parâmetros utilizados nas simulações. Este comportamento indica que há acurácia nas estimativas.

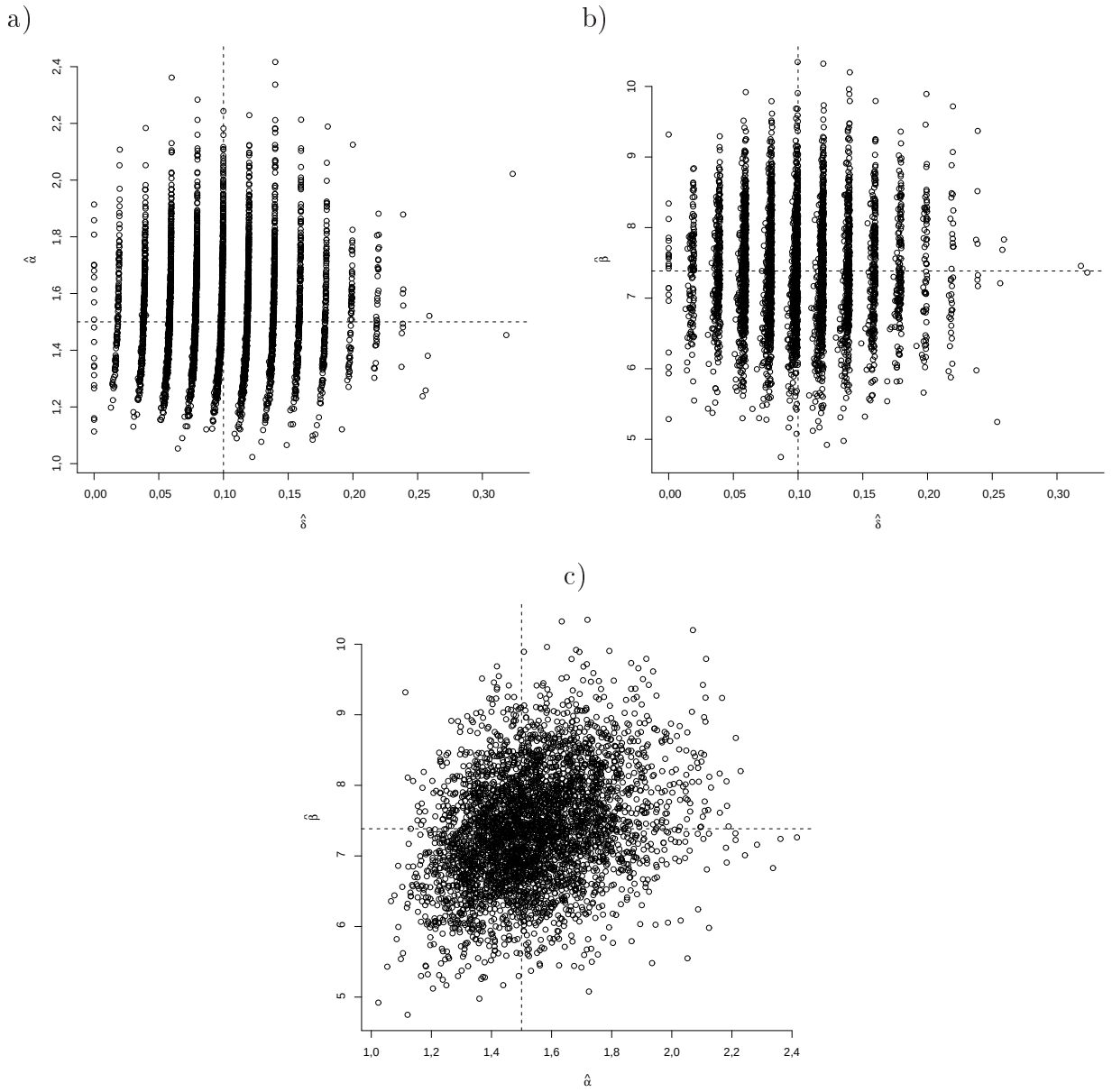


Figura 27 – Gráficos de dispersão de 4000 estimativas dos parâmetros $\delta = 0{,}10$, $\alpha = 1{,}5$ e $\beta = 7{,}3849$ considerando amostras de tamanho $n = 50$, $\mathbb{E}(Y) = 6$ e $\xi = 0{,}11$ onde em (a) tem-se $\widehat{\delta}$ versus $\widehat{\alpha}$, em (b) $\widehat{\delta}$ versus $\widehat{\beta}$ e em (c) $\widehat{\alpha}$ versus $\widehat{\beta}$

4.2.3 Conclusões

O método de estimação M4 aliado à parametrização P2 da distribuição de Weibull mostraram bons resultados como mostrado nas Tabelas 12 e 13, com maior facilidade de implementação. Apresentando, ainda, boa probabilidade de cobertura para os parâmetros do modelo (51), conforme pode ser observado das Tabelas 14 e 15.

Como esperado o tamanho da amostra teve grande influência nas estimativas

dos parâmetros do modelo e no valor médio ($\mathbb{E}(Y)$). Amostras grandes produziram reduções consideráveis tanto nos viéses relativos quanto nos erros quadráticos médios.

O aumento na quantidade de zeros, nas amostras, fizeram com que os valores de VR% e os de EQM aumentassem para todas as estimativas, exceto para os de VR% para o parâmetro δ, que para quantidades maiores de zeros verdadeiros, acarretou uma diminuição no VR%.

O valor usado como ponto de censura teve grande influência sobre as estimativas do parâmetros δ e α, sendo que o valor maior de ξ implicou em maiores VR% e EQM. Porém, exerceu pouca influência sobre $\widehat{\beta}$ e $\widehat{\mathbb{E}(Y)}$.

Com o parâmetro de forma da distribuição de Weibull fixado em 1,5 ocorreu maior VR% para δ e α e maior EQM para δ, β e $\mathbb{E}(Y)$.

Além disso, considerando os valores de δ e α fixados, a variação de $\mathbb{E}(Y) = 1$ até $\mathbb{E}(Y) = 35$ não prejudica as estimativas da probabilidade de zeros verdadeiros, porém causa um aumento no sentido negativo do VR% das estimativas da $\mathbb{E}(Y)$, que se estabiliza para $\mathbb{E}(Y) > 10$, sendo, na pior situação, inferior a -6%.

Assim, para dados censurados e inflacionados de zeros com valores maiores que zero seguindo distribuição de Weibull, o modelo de mistura de Weibull (51) aliado a metodologia de estimação proposta produz resultados satisfatórios.

4.3 Simulação para mistura com distribuição gama

4.3.1 Avaliação dos valores iniciais

Na Tabela 20, são apresentadas as médias dos VR% e dos EQM das estimativas iniciais para os parâmetros da densidade de mistura gama (MG) dada em (61), calculados a partir de 10000 amostragens dos 80 cenários obtidos dos possíveis quartetos $(\xi, \delta, \alpha, \mathbb{E}(Y))$, resultantes das combinações das coordenadas dos vetores $\xi = (0{,}11; 0{,}50)$, $\delta = (0{,}10; 0{,}30)$, $\alpha = (1{,}5; 2)$, $n = (15; 50)$ e $\mathbb{E}(Y) = (2; 4; 6; 8; 10)$, de acordo com as idéias propostas na seção 3.2.8, todas estimadas considerando as amostras na formas Y_T, Y_I e Y_2, definidas em (67). Além disso, na última linha da Tabela 20 estão dispostas as médias dos VR% e dos EQM da estimativas de δ baseadas nas proporções de zeros das amostras, isto é, n_0/n. Essa estimativa foi obtida sem a preocupação em discriminar zeros verdadeiros e zeros provenientes de censuras. Resultados mais detalhados são apresentados nas Tabelas 41 e 42 do Anexo F,

página 165.

Com base nos resultados constantes na Tabela 20, observa-se, de forma geral, que das formas estudadas para obtenção de valores iniciais para o vetor de parâmetros (δ, α, β), a melhor performance é alcançada com o uso de Y_I e o método dos momentos da distribuição gama para os parâmetros α e β, ou seja, o procedimento MM em conjunto com Y_I apresentou as menores médias dos VR% e dos EQM. Contudo, considerando-se somente as menores médias dos VR%, tem-se outra proposta que consiste em utilizar Y_T com NM para obter estimativas, menos viesads de (α, β) e Y_2 com EMV para estimar δ.

Tabela 20 – Médias dos viéses relativos percentuais (VR%) e dos erros quadráticos médios (EQM) para estimativas dos parâmetros do modelo MG (61) pelos procedimentos propostos na seção 3.2.8, em função de três composições amostrais Y_T, Y_I e Y_2, resultantes de 80 combinações das coordenadas dos vetores $\xi = (0{,}11; 0{,}50)$, $\delta = (0{,}10; 0{,}30)$, $\alpha = (1{,}5; 2)$ e $\mathbb{E}(Y) = (2; 4; 6; 8; 10)$, considerando $n = (15; 50)$ e 10000 repetições

		Viés médio			EQM médio		
	Método	$\widehat{\alpha}$	$\widehat{\beta}$	$\widehat{\delta}$	$\widehat{\alpha}$	$\widehat{\beta}$	$\widehat{\delta}$
Y_T	MM	-22,2347	33,0949	-19,5507	0,0128	0,0238	0,0123
	NM	2,4522	1,6612	-35,8379	0,0144	0,0144	0,0132
	MIS	4,8852	5,3314	-48,2369	0,0142	0,0144	0,0323
	EMV	-55,0946	7,5558	4,7118	0,0337	0,0143	0,0144
Y_I	MM	4,6052	4,6052	1,7889	0,0153	0,0153	0,0154
	NM	-28,8970	-31,4248	9,9349	0,8427	0,8860	0,0144
	MIS	-47,3333	26,0336	79,1687	1,1250	5,1876	8,0369
	EMV	91,8657	29,7788	22,7024	16,5139	8,2974	5,1205
Y_2	MM	34,9584	100,9083	38,4156	67,1465	259,9633	67,2621
	NM	29,4065	36,3674	47,9968	14,9323	21,0978	251,4060
	MIS	80,0367	-5,3762	-21,5722	44,8059	9,3328	10,8616
	EMV	-23,6089	-11,1116	-1,6582	10,9660	5,9068	11,9101
	n_0/n			-16,6376			5,7622

Tabela 21 – Médias dos VR% e dos EQM para estimativas de α, β, δ e $\mathbb{E}(Y)$ para o modelo MG (61) considerando $n = 15$, $\delta = 0{,}10$ ou $0{,}30$ e $\alpha = 1{,}5$ ou 2 em função de ξ e $\mathbb{E}(Y)$, baseado em 10000 repetições, segundo descrito na Seção 3.2.7

$(\xi;\tau)$	VR% médio				EQM médio			
Método	$\widehat{\alpha}$	$\widehat{\beta}$	$\widehat{\delta}$	$\widehat{\mathbb{E}(Y)}$	$\widehat{\alpha}$	$\widehat{\beta}$	$\widehat{\delta}$	$\widehat{\mathbb{E}(Y)}$
(0,11; 0,22)								
M1 e K_1	31,7273	-6,9195	-1,0927	-0,0622	3,8016	10,9437	0,0202	5,9069
M2 e K_1	31,4820	-6,5954	-1,0975	-0,1204	3,8099	11,0385	0,0202	5,9027
M3 e K_1	31,4820	-6,5954	-1,0975	-0,1204	3,8099	11,0379	0,0202	5,9027
M4 e K_1	31,6960	-6,4895	-1,0985	-0,0623	3,8103	11,2701	0,0202	5,9107
M1 e K_2	31,7351	-6,9056	-1,0933	-0,0596	3,8269	10,9794	0,0202	5,9079
M2 e K_2	31,4891	-6,5634	-1,0989	-0,1182	3,8356	11,2986	0,0202	5,9041
M3 e K_2	31,4891	-6,5634	-1,0989	-0,1182	3,8356	11,2990	0,0202	5,9041
M4 e K_2	31,3425	-6,0301	-1,1001	-0,0568	3,8508	11,7685	0,0202	5,9130
(0,50; 1,00)								
M1 e K_1	37,0293	-4,3821	-1,3573	-1,1831	5,2157	13,7384	0,0256	6,0255
M2 e K_1	36,2013	-3,5882	-1,3537	-1,4317	5,2283	13,9606	0,0256	6,0117
M3 e K_1	36,2013	-3,5882	-1,3537	-1,4317	5,2283	13,9606	0,0256	6,0117
M4 e K_1	36,6489	-3,8372	-1,3561	-1,2067	5,2095	13,9820	0,0256	6,0275
M1 e K_2	37,0580	-4,3641	-1,3606	-1,1807	5,2874	13,7739	0,0256	6,0267
M2 e K_2	36,2254	-3,4893	-1,3603	-1,4318	5,2961	14,1531	0,0256	6,0154
M3 e K_2	36,2254	-3,4889	-1,3603	-1,4318	5,2961	14,1561	0,0256	6,0155
M4 e K_2	36,4280	-3,5053	-1,3655	-1,2091	5,2961	14,4500	0,0256	6,0324

Nota: K_1: considerado Y_I em conjunto com o método dos momentos MM na obtenção de estimativas iniciais de δ, α e β.
K_2: considerando as estimativas de (α, β) obtidas com Y_T em conjunto com NM e EMV para δ com Y_2 .

A comparação dos métodos M1, M2, M3 e M4, descritos na Seção 3.2.7, foi realizada a partir das médias dos VR% e dos EQM de $\widehat{\alpha}$, $\widehat{\beta}$, $\widehat{\delta}$ e $\widehat{\mathbb{E}(Y)}$, apresentadas na Tabela 21. Nesta, os resultados foram calculados a partir de 10000 repetições dos 40 cenários obtidos dos possíveis quartetos $(\xi, \delta, \alpha, \mathbb{E}(Y))$, resultantes das combinações das coordenadas dos vetores $\xi = (0{,}11; 0{,}50)$ $\delta = (0{,}10; 0{,}30)$, $\alpha = (1{,}5; 2)$ e $\mathbb{E}(Y) = (2; 4; 6; 8; 10)$. Para a

estimação de α, β e δ, adotram-se duas formas para obtenção das estimativas iniciais de δ, α e β, sendo, na primeira, considerado Y_I em conjunto com o método dos momentos MM, na segunda as estimativas de (α, β) são obtidas com Y_T em conjunto com NM e estimativas de δ obtidas por meio do método de maxima verossimilhança (EMV) com Y_2 .

Os resultados obtidos, expostos na Tabela 21, apontam que quando se considera VR% e EQM simultaneamente os métodos M2 e M3 apresentam melhores resultados independentemente dos procedimentos para obtenção dos valores iniciais. Isso tanto para $\xi = 0{,}11$ quanto $\xi = 0{,}50$. Como o objetivo é buscar métodos que forneçam melhores resultados e maior parcimônia, é então plausível a escolha do método M2 com valores iniciais obtidos por meio do método dos momentos MM considerando amostras do tipo Y_I, haja visto que M3 é o método M2 com um passo adicional e MM com Y_I requer menos tempo computacional, não necessitando de métodos iterativos.

Na Tabela 22 são apresentadas as proporções de regiões de 90, 95 e 99% de confiança contendo as estimativas do vetor de parâmetros (δ, α, β) resultantes de 10000 amostras aleatórias simuladas de tamanho 15, para cada um dos 40 cenários utilizados na escolha do melhor método de estimação dos parâmetros do modelo MG. As probabilidades de coberturas empíricas que não rejeitam a hipótese de serem iguais aos valores de coberturas nominais estão acompanhadas de um asterisco (*), conforme resultados apresentados no Anexo B, página 142. Para estimar os parâmetros do modelo foi utilizado M2 com valores iniciais obtidos por MM considerando amostras do tipo Y_I, e para cada uma das repetições foi calculada a região de confiança conjunta com 99%; 95% e 90% de confiança, conforme o Anexo A (página 141).

Por meio da Tabela 22, constata-se que há uma tendência da probabilidade de cobertura empírica subestimar os valores nominais esperados de 0,99, 0,95 e 0,90 e essa diferença se torna maior à medida que a confiança da região diminui. Além disso, nota-se que não há diferença aparente entre os resultados obtidos com $\xi = 0{,}11$ e 0,50.

Apesar de a maioria das probabilidades de cobertura empíricas não atingirem os limites de seus intervalos de confiança, podem ser consideradas boas, pois são valores bastante próximos dos valores nominais. Deve ser considerado, ainda, que os intervalos conjuntos para cada amostra foram obtidos por razão de verossimilhança, método esse muito influenciado pelo tamanho da amostra, que no caso foi $n = 15$. Como em exemplos relatados por Casella

e Berger (2002, p. 502), este método pode trazer probabilidades de coberturas inferiores às esperadas e ter melhor performance com o aumento do tamanho da amostra.

Tabela 22 – Proporção de regiões de confiança contendo as estimativas do vetor de parâmetros (δ, α, β) resultantes de 10000 amostras aleatórias simuladas de tamanho $n = 15$ em função de $\mathbb{E}(Y)$, δ, α e ξ

			$\xi = 0{,}11$			$\xi = 0{,}5$		
$\mathbb{E}(X)$	δ	α	99%	95%	90%	99%	95%	90%
2	0,1	1,5	98,9*	94,1	88,0	98,8*	94,0	88,7
		2	98,7	93,6	87,6	98,6	93,8	87,1
	0,3	1,5	98,2	93,3	87,3	98,7	94,0	89,0
		2	98,6	93,8	87,9	98,4	94,1	88,3
4	0,1	1,5	98,9*	94,0	87,9	98,7	94,0	87,5
		2	98,7	94,0	87,9	98,8*	93,7	88,0
	0,3	1,5	98,3	93,5	87,5	98,3	93,3	87,5
		2	98,2	93,4	87,5	98,3	93,8	87,6
6	0,1	1,5	98,9*	93,7	87,6	98,9*	94,1	87,9
		2	98,7	94,1	87,8	98,8*	94,2	88,0
	0,3	1,5	98,4	93,7	87,7	98,1	93,5	87,6
		2	98,3	93,7	87,6	98,4	93,5	87,5
8	0,1	1,5	98,7	94,3	88,2	98,8*	93,9	88,5
		2	98,7	93,8	87,8	98,9*	94,1	88,2
	0,3	1,5	98,1	93,4	87,6	98,3	93,4	87,5
		2	98,2	93,3	87,3	98,2	93,4	87,9
10	0,1	1,5	99,0*	94,1	87,7	98,5	93,5	87,8
		2	98,9*	94,2	88,4	99,0*	94,0	87,8
	0,3	1,5	98,2	93,6	87,4	98,2	93,2	87,3
		2	98,4	93,5	87,8	98,4	93,5	87,6

Nota: Erro padrão aproximado igual a 0,001, 0,002 e 0,003 para 99%, 95% e 90%, respectivamente.
(*): probabilidade de cobertura dentro da região de aceitação.

Na Figura 28 (a) podem ser visualizadas, nas dimensões de α e β, as regiões de 90, 95 e 99% confiança contendo os pontos $(\widehat{\alpha}, \widehat{\beta})$ resultantes de 10000 amostras aleatórias simuladas para $(n, \xi, \delta, \alpha, \mathbb{E}(Y)) = (15, 0{,}5, 0{,}10, 1{,}5, 4)$, caso em que proporção de regiões de confiança contendo as estimativas do vetor de parâmetros (δ, α, β) foi 87,5, 94,0 e 98,7,

conforme Tabela 22. Nota-se, que apesar das regiões não serem elípticas, os valores nominais de $\alpha = 1{,}5$ e $\beta = 2{,}96$ encontram-se no centro de massa das mesmas. Na Figura 28 (b) é apresentado o gráfico de dispersão das mesmas estimativas $\widehat{\delta}$, $\widehat{\alpha}$ e $\widehat{\beta}$, podendo ser observado os aglomerados de pontos formados entorno de alguns dos 15 pontos equidistantes no intervalo de 0 a 1. Sendo que a maior concentração ocorre próximo ao ponto $\widehat{\delta} = 0{,}10$, valor fixado para simulação.

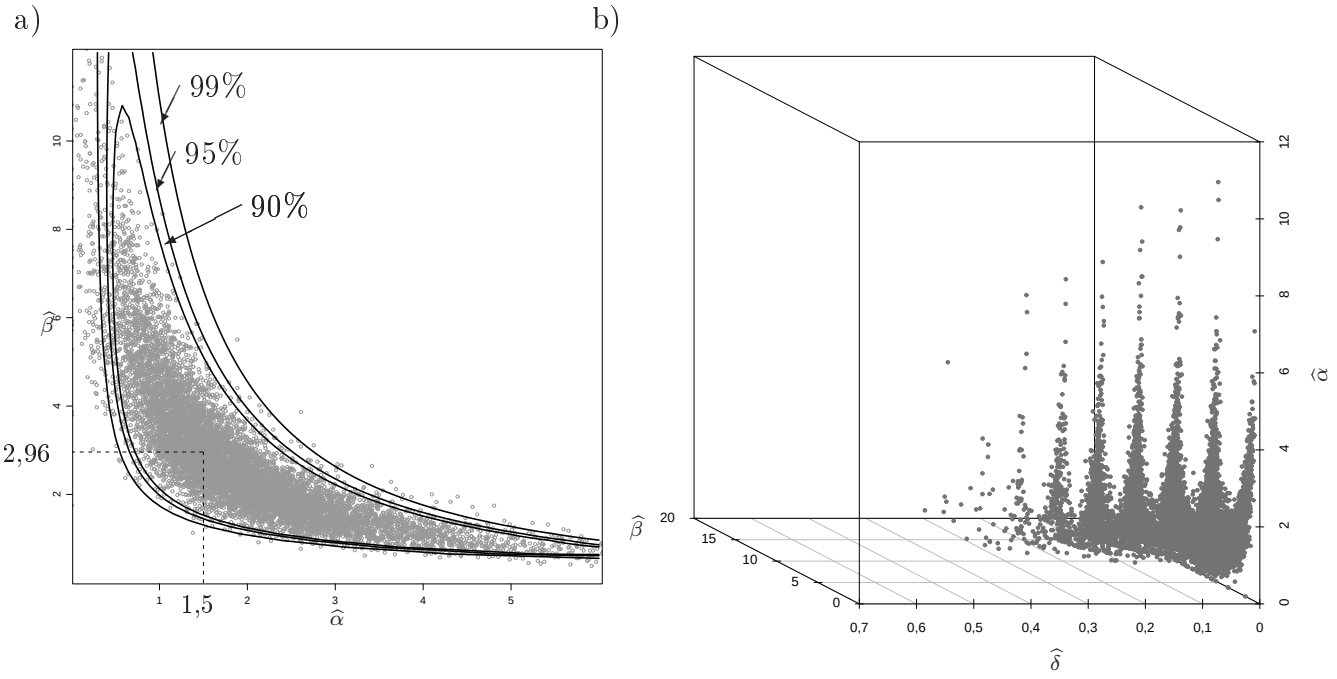


Figura 28 – Regiões de 90, 95 e 99% confiança contendo as estimativas do vetor de parâmetros (δ, α, β) resultantes de 10000 amostras aleatórias simuladas para $(n, \xi, \delta, \alpha, \mathbb{E}(Y)) = (15, 0{,}5, 0{,}10, 1{,}5, 4)$ em (a) e gráfico de dispersão das mesmas estimativas em (b)

4.3.2 Avaliação das estimativas dos parâmetros e $\mathbb{E}(Y)$ considerando diferentes valores esperados

Nesta seção, será estudada, por meio de simulação, a qualidade do ajuste do modelo MG para valores esperados variando de 1 a 35. Este intervalo foi escolhido visando o caso de medidas da contaminação com aflatoxina B1 observadas em grãos de milho, pois preocupa-se em verificar se há contaminação com o fungo, mesmo em baixas quantidades, e verificar também se a concentração de fungo ultrapassa 20 ppb, limite máximo permitido para consumo no Brasil. Este estudo consiste das simulações de 4000 amostras de cada um dos possíveis quintetos $(\xi, n, \delta, \alpha, \mathbb{E}(Y))$, sendo $\xi = (0{,}11; 0{,}50)$, $n = (15; 30; 50; 100)$,

$\delta = (0{,}10; 0{,}15; 0{,}20; 0{,}25; 0{,}30; 0{,}35; 0{,}40; 0{,}45)$, $\alpha = (1{,}5; 2{,}0)$ e $\mathbb{E}(Y) = (1; 3; 4; \ldots; 35)$. As estimativas foram obtidas considerando o método de estimação M2 com valores iniciais obtidos por MM considerando amostras do tipo Y_I, que apresentou melhores resultados na seção 4.3.1.

Nas Tabelas 23, 24, 25, 26, são apresentadas as médias dos VR% e EQM das estimativas dos parâmetros δ, α e β e dos valores médios $\mathbb{E}(Y)$, respectivamente, resultantes de 280 cenários baseados nas combinações dos valores assumidos para δ e $\mathbb{E}(Y)$, cada cenário amostrado 4000 vezes, em função de n, α e ξ. Estes foram obtidos por meio das médias das linhas das Tabelas 43 a 46, apresentadas no Anexo F. Os resultados dessas tabelas são provenientes da aplicação das equações (71) e (72).

A partir dos valores apresentados na Tabela 23, observa-se que o aumentando-se o tamanho das amostras n obtém-se melhores resultados, isto é, menores valores em módulo de VR% e EQM. Quanto aos limites de censuras utilizados, ξ, nota-se para o valor 0,11 tanto os VR% quanto os EQM apresentam menores médias quando comparados a $\xi = 0{,}50$, mostrando a influência dos limites de detecção e quantificação sobre a estimação de zeros verdadeiros. As variações no parâmetro de forma α, tiveram influência considerável sobre as estimativas de δ no tocante ao VR% sendo as médias dos viéses relativos percentuais maiores para $\alpha = 1{,}50$ do que para $\alpha = 2$. No entanto, para as médias dos valores de EQM, esse efeito foi sentido apenas nos casos em que $\xi = 0{,}50$. Observa-se, ainda, pelos sinais das médias dos VR%, que as estimativas do parâmetro δ subestimaram seu valor nominal. Pelos resultados das Tabelas 43 e 47, apresentadas no Anexo F, verifica-se que aumento nos valores de δ implicam em redução do VR%, entretanto provoca aumento nos EQM, independente do tamanho da amostra.

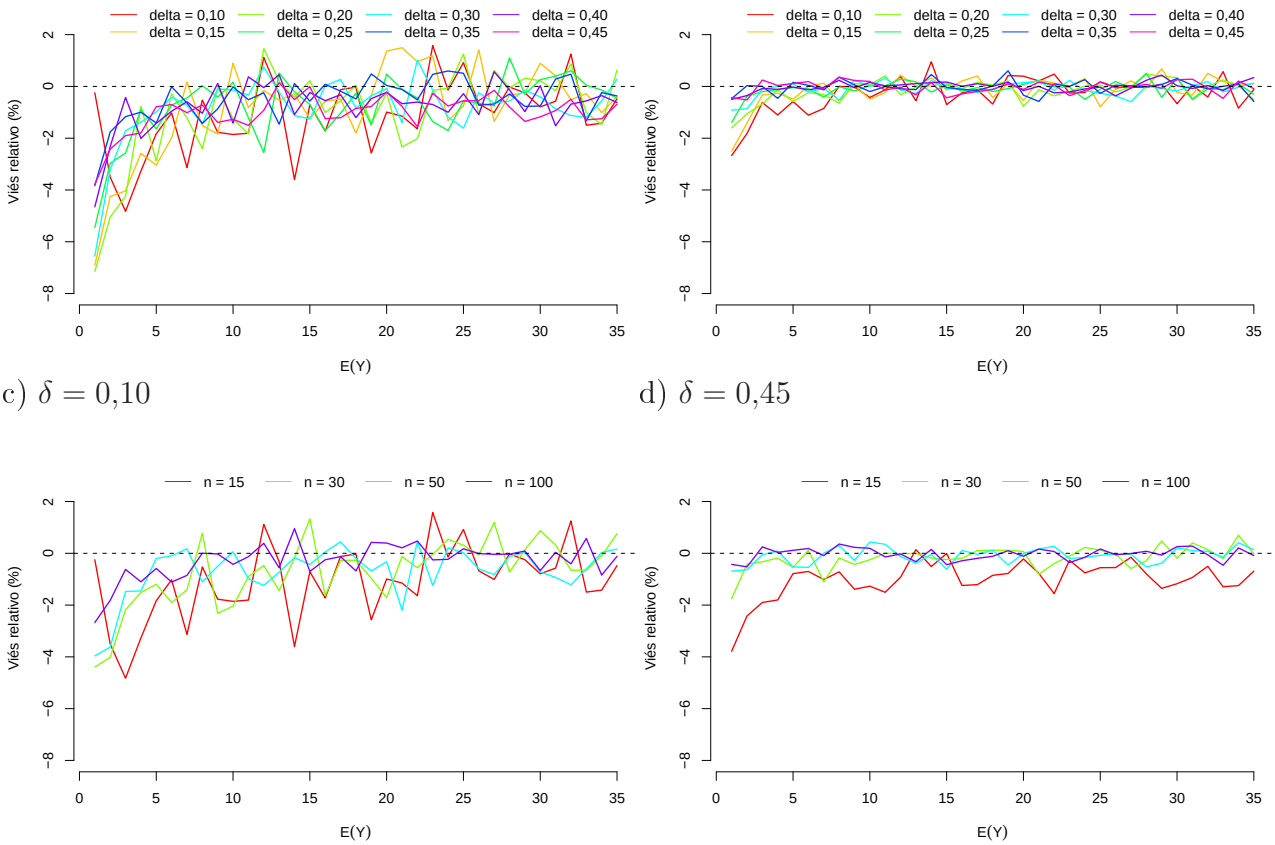
Tabela 23 – Médias dos valores de viés relativo (VR%) e de erros quadrados médios (EQM) de $\widehat{\delta}$ em função de α, ξ e n, considerando-se 280 situações dadas pelas combinações dos 8 valores de δ e dos 35 valores de $\mathbb{E}(Y)$ amostradas 4000 vezes

		VR%			EQM		
n	alpha	$\xi = 0{,}11$	$\xi = 0{,}50$	Média	$\xi = 0{,}11$	$\xi = 0{,}50$	Média
15	1,5	-0,8502	-1,7443	-1,2972	0,0125	0,0143	0,0134
	2,0	-0,6046	-1,1253	-0,8650	0,0123	0,0133	0,0128
Média		-0,7274	-1,4348	-1,0811	0,0124	0,0138	0,0131
30	1,5	-0,3945	-1,0558	-0,7251	0,0063	0,0077	0,0070
	2,0	-0,1284	-0,6160	-0,3722	0,0062	0,0070	0,0066
Média		-0,2614	-0,8359	-0,5487	0,0063	0,0073	0,0068
50	1,5	-0,2565	-0,7614	-0,5090	0,0038	0,0048	0,0043
	2,0	-0,1144	-0,4518	-0,2831	0,0038	0,0043	0,0040
Média		-0,1854	-0,6066	-0,3960	0,0038	0,0045	0,0042
100	1,5	-0,1105	-0,4765	-0,2935	0,0019	0,0025	0,0022
	2,0	-0,0650	-0,2847	-0,1748	0,0019	0,0022	0,0020
Média		-0,0877	-0,3806	-0,2342	0,0019	0,0024	0,0021

Os gráficos apresentados na Figura (29), referem-se aos viéses relativos médios percentuais de $\widehat{\delta}$ em função de $\mathbb{E}(Y)$ para situações envolvendo diferentes valores de n e δ. Conforme apresentado na Figuras (29) (a) e (b), observa-se que os VR%, independente do valores de δ, na maioria das vezes são inferiores a zero, indicando uma subestimação do parâmetro, isto para todos os valores de $\mathbb{E}(Y)$ estudados. Além disso, nas Figuras (29) (c) e (d), este efeito também é observado quando se leva em consideração o tamanho da amostra, porém com redução no VR% para amostras maiores. Observa-se, ainda, que em todos os casos os VR% são altos, em valor absoluto, para $\mathbb{E}(Y)$ próximo de 1, já para valores em torno de $\mathbb{E}(Y) = 20$ os VR% são baixos e encontram-se estabilizados. Finalmente, evidenciam que, independente do valor de δ e $\mathbb{E}(Y)$, amostras de tamanho $n = 15$ produzem estimativas menos acuradas.

Na Tabela 24, são apresentadas as médias dos valores de viés relativo e dos erros

a) $n = 15$ b) $n = 100$



c) $\delta = 0{,}10$ d) $\delta = 0{,}45$

Figura 29 – Viés relativo percentual de $\widehat{\delta}$ em função da $\mathbb{E}(Y)$, dado $\alpha = 1{,}5$ e $\xi = 0{,}11$ para diferentes valores de δ e tamanho amostral $n = 15$ (a) ou $n = 100$ (b), ou para diferentes tamanhos amostrais n e $\delta = 0{,}10$ (c) ou $\delta = 0{,}45$ (d)

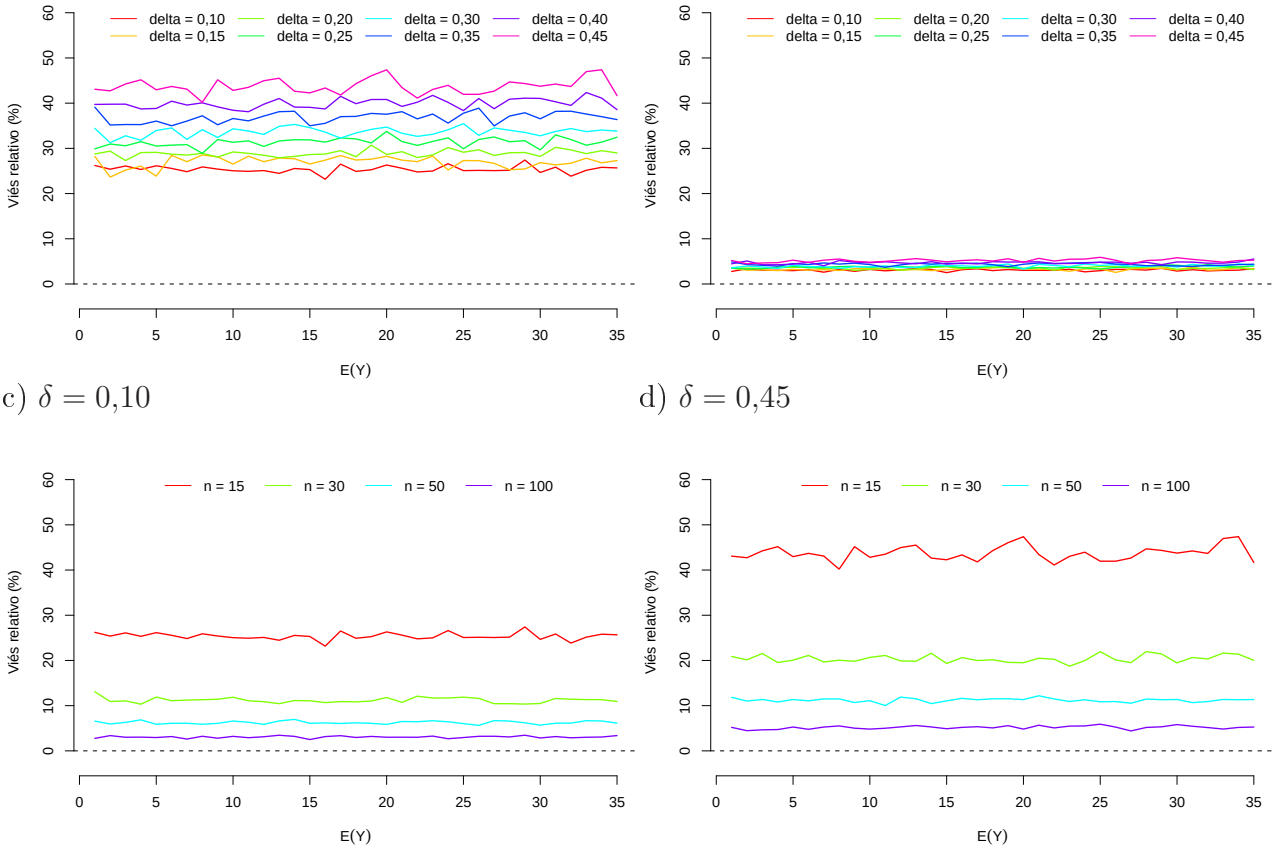
quadrados médios de $\widehat{\alpha}$ em função de α, ξ e n, considerando-se 280 situações dadas pelas combinações dos 8 valores de δ e dos 35 valores de $\mathbb{E}(Y)$ amostradas 4000 vezes. Nesta, observa-se que as estimativas do parâmetro de forma α são claramente melhores estimados com aumento do tamanho das amostras e que os valores considerados de ξ também afetaram as estimativas, mostrando que valores menores de ξ refletem em VR% e EQM menores. Além disso, houve concordância entre viés relativo percentual e erro quadrático médio quando aumentou-se o valor do parâmetro de forma da distribuição gama. O aumento de α causou aumento em VR% e EQM. Outra observação feita nos valores da Tabela 24, é que as médias dos VR% são todas positivas, indicando a superestimação do parâmetro por parte das estimativas $\widehat{\alpha}$.

Tabela 24 – Médias dos valores de viés relativo (VR%) e de erros quadrados médios (EQM) de $\widehat{\alpha}$ em função de α, ξ e n, considerando-se 280 situações dadas pelas combinações dos 8 valores de δ e dos 35 valores de $\mathbb{E}(Y)$ amostradas 4000 vezes

		VR%			EQM		
n	alpha	$\xi = 0{,}11$	$\xi = 0{,}50$	Média	$\xi = 0{,}11$	$\xi = 0{,}50$	Média
15	1,5	34,2898	36,7139	35,5018	1,4968	1,7949	1,6458
	2,0	33,3418	34,0826	33,7122	2,2971	2,5290	2,4130
Média		33,8158	35,3982	34,6070	1,8969	2,1619	2,0294
30	1,5	14,5252	15,9021	15,2136	0,3961	0,5334	0,4648
	2,0	15,0579	15,6261	15,3420	0,7071	0,8384	0,7728
Média		14,7916	15,7641	15,2778	0,5516	0,6859	0,6188
50	1,5	8,1163	8,8577	8,4870	0,1757	0,2462	0,2109
	2,0	8,3963	8,7481	8,5722	0,3138	0,3858	0,3498
Média		8,2563	8,8029	8,5296	0,2447	0,3160	0,2804
100	1,5	3,8522	4,2036	4,0279	0,0706	0,1011	0,0858
	2,0	3,9716	4,1157	4,0437	0,1248	0,1561	0,1404
Média		3,9119	4,1597	4,0358	0,0977	0,1286	0,1131

Na Figura 30, são apresentado os gráficos de VR% para $\widehat{\alpha}$ em função de $\mathbb{E}(Y)$ variando de 1 a 35, para $\alpha = 2$ e $\xi = 0{,}11$ e diferentes valores de n e δ. Na Figura 30 (a), fica fácil ver a influência da proporção de zeros na estimativa do parâmetro α, quanto maior o valor de δ maior o VR%. As Figuras 30 (c) e (d) evidenciam o viés causado pelo tamanho da amostra, deixando claro que amostras pequenas tornam difícil a estimação do parâmetro. Este mesmo comportamento ocorreu para combinações dos outros valores de α e ξ propostos no plano de simulação apresentado na seção 3.2.7-II, com a diferença que, para $\xi = 0{,}50$, ocorreu acréscimo no VR% para $\mathbb{E}(Y)$ indo de 2 para 1.

a) $n = 15$ b) $n = 100$



c) $\delta = 0{,}10$ d) $\delta = 0{,}45$

Figura 30 – Viés relativo percentual de $\widehat{\alpha}$ em função da $\mathbb{E}(Y)$, dado $\alpha = 2$ e $\xi = 0{,}11$ para diferentes valores de δ e tamanho amostral $n = 15$ (a) ou $n = 100$ (b), ou para diferentes tamanhos amostrais n e $\delta = 0{,}10$ (c) ou $\delta = 0{,}45$ (d)

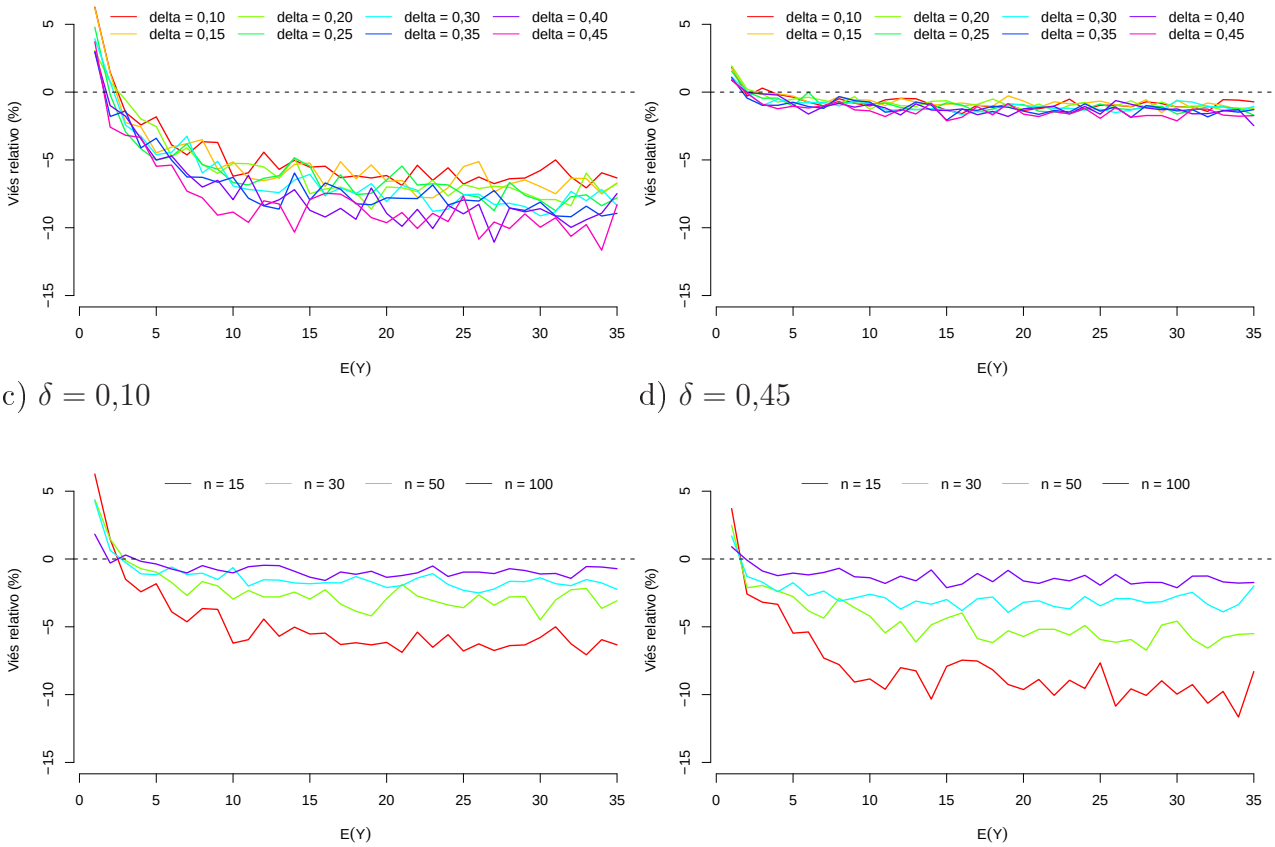
Dos resultados da simulação, mostrados na Tabela 25, foi observado que quanto maior o tamanho da amostra n menor são as médias dos VR% e dos EQM, observando as médias em valores absolutos. Nota-se, que o parâmetro de escala da distribuição de gama é afetado pela mudança dos limites de $\xi = 0{,}11$ para 0,5, entretanto valor $\xi = 0{,}11$ resultaram em VR% e EQM menores. Essa discordância entre viés relativo percentual e erro quadrático também é observada entre os cenários. Para os diferentes valores de α, sendo que para $\alpha = 1{,}5$ os VR% foram menores e os EQM maiores, em relação a $\alpha = 2{,}0$. Ainda, a partir dos sinais apresentados pelas médias dos VR%, conclui-se que as estimativas de β subestimam o valor do parâmetro.

Tabela 25 – Médias dos valores de viés relativo (VR%) e de erros quadrados médios (EQM) de $\widehat{\beta}$ em função de α, ξ e n, considerando-se 280 situações dadas pelas combinações dos 8 valores de δ e dos 35 valores de $\mathbb{E}(Y)$ amostradas 4000 vezes

		VR%			EQM		
n	alpha	$\xi = 0{,}11$	$\xi = 0{,}50$	Média	$\xi = 0{,}11$	$\xi = 0{,}50$	Média
15	1,5	-7,5566	-5,5118	-6,5342	96,1688	107,7798	101,9743
	2,0	-8,1620	-6,3183	-7,2401	48,3498	52,0247	50,1872
Média		-7,8593	-5,9150	-6,8872	72,2593	79,9023	76,0808
30	1,5	-3,8259	-2,7673	-3,2966	46,8098	50,9183	48,8640
	2,0	-4,3565	-3,3470	-3,8517	24,4802	25,5871	25,0336
Média		-4,0912	-3,0571	-3,5742	35,6450	38,2527	36,9488
50	1,5	-2,3222	-1,5618	-1,9420	27,8397	29,8946	28,8672
	2,0	-2,5973	-2,0061	-2,3017	14,6073	15,1768	14,8920
Média		-2,4597	-1,7840	-2,1219	21,2235	22,5357	21,8796
100	1,5	-1,1496	-0,7857	-0,9677	13,8282	14,6315	14,2299
	2,0	-1,2862	-0,9744	-1,1303	7,2764	7,5118	7,3941
Média		-1,2179	-0,8801	-1,0490	10,5523	11,0716	10,8120

A Figura 31 permite verificar que os VR% para $\widehat{\beta}$ são positivos para $\mathbb{E}(Y) = 1$ tendendo para valores negativos quando alteramos os cenários variando a esperança de Y até o valor 35. Porém, há um ponto, que depende do tamanho da amostra, em que esse decréscimo estabiliza. Como pode ser visto, para $n = 15$ o ponto está próximo de 10 independente do valor de δ e para $n = 100$ próximo de 5, ilustrados nas Figuras 31 (a) e (b). Além disso, as Figura 31 (c) e (d) permitem ver a influência do tamanho da amostra na obtenção de $\widehat{\beta}$, isto é, amostras pequenas prejudicam as estimativas de β.

a) $n = 15$ b) $n = 100$



c) $\delta = 0{,}10$ d) $\delta = 0{,}45$

Figura 31 – Viés relativo percentual de $\widehat{\beta}$ em função da $\mathbb{E}(Y)$, dado $\alpha = 2$ e $\xi = 0{,}50$ para diferentes valores de δ e tamanho amostral $n = 15$ (a) ou $n = 100$ (b), ou para diferentes tamanhos amostrais n e $\delta = 0{,}10$ (c) ou $\delta = 0{,}45$ (d)

Como ocorreu para os parâmetros do modelo, o aumento no tamanho da amostra provocou redução nos viéses relativo percentual e nos erros quadráticos médios de $\widehat{\mathbb{E}(Y)}$, como pode ser observado na Tabela 26. Considerando os valores absolutos das médias dos VR%, nota-se que as estimativas são melhores para $\xi = 0{,}11$ do que para 0,50, já entre as médias dos EQM não houve variação devido aos valores de ξ. Com relação aos efeitos dos valores de α utilizados, observa-se que os VR% em valores absolutos são menores quando $\alpha = 1{,}5$ apenas nos casos em que $\xi = 0{,}11$, ocorrendo o contrário para $\xi = 0{,}50$ e que as médias dos EQM são sempre maiores quando $\alpha = 1{,}5$. Observa-se, ainda, que a $\mathbb{E}(Y)$ é sempre subestimada nas situações em que $\xi = 0{,}50$. Pelos resultados apresentados na Tabela 50, do Anexo F, verifica-se valores maiores de δ fazem aumentar o EQM.

Tabela 26 – Médias dos valores de viés relativo (VR%) e de erros quadrados médios (EQM) de $\widehat{\mathbb{E}(Y)}$ em função de α, ξ e n, considerando-se 280 situações dadas pelas combinações dos 8 valores de δ e dos 35 valores de $\mathbb{E}(Y)$ amostradas 4000 vezes

		VR%			EQM		
n	alpha	$\xi = 0{,}11$	$\xi = 0{,}50$	Média	$\xi = 0{,}11$	$\xi = 0{,}50$	Média
15	1,5	0,0561	-0,4579	-0,2009	38,4820	38,5847	38,5333
	2,0	0,1639	-0,1962	-0,0161	31,8045	31,7688	31,7866
Média		0,1100	-0,3270	-0,1085	35,1433	35,1767	35,1600
30	1,5	0,0079	-0,3935	-0,1928	19,2655	19,2319	19,2487
	2,0	-0,0295	-0,1968	-0,1132	15,9546	15,9728	15,9637
Média		-0,0108	-0,2951	-0,1530	17,6101	17,6024	17,6062
50	1,5	0,0026	-0,2298	-0,1136	11,5852	11,6147	11,6000
	2,0	0,0076	-0,1222	-0,0573	9,5530	9,5614	9,5572
Média		0,0051	-0,1760	-0,0855	10,5691	10,5880	10,5786
100	1,5	0,0130	-0,1115	-0,0493	5,7955	5,7883	5,7919
	2,0	0,0154	-0,0532	-0,0189	4,7775	4,7876	4,7825
Média		0,0142	-0,0823	-0,0341	5,2865	5,2880	5,2872

Na Figura 32 pode ser observado que os VR% de $\widehat{\mathbb{E}(Y)}$ apresentaram comportamento desejado, oscilando em torno de zero por cento, para todos os valores de $\mathbb{E}(Y)$ considerados nas simulações. De forma geral, esse comportamento foi o mesmo para os outros cenários não apresentados na Figura 32, havendo diferença apenas nos cenários em que $\xi = 0{,}50$, cujos valores de VR% apresentaram-se distantes de zero para $\mathbb{E}(Y) = 1$ e 2, chegando a VR%$= -17\%$ para $\delta = 0{,}10$, $\mathbb{E}(Y) = 1$, $\alpha = 1{,}15$ $n = 15$ e 30. Com os gráficos apresentados na Figura 32 conclui-se que o que mais contribui para o aumento viés de $\widehat{\mathbb{E}(Y)}$ é o tamanho da amostra adotado.

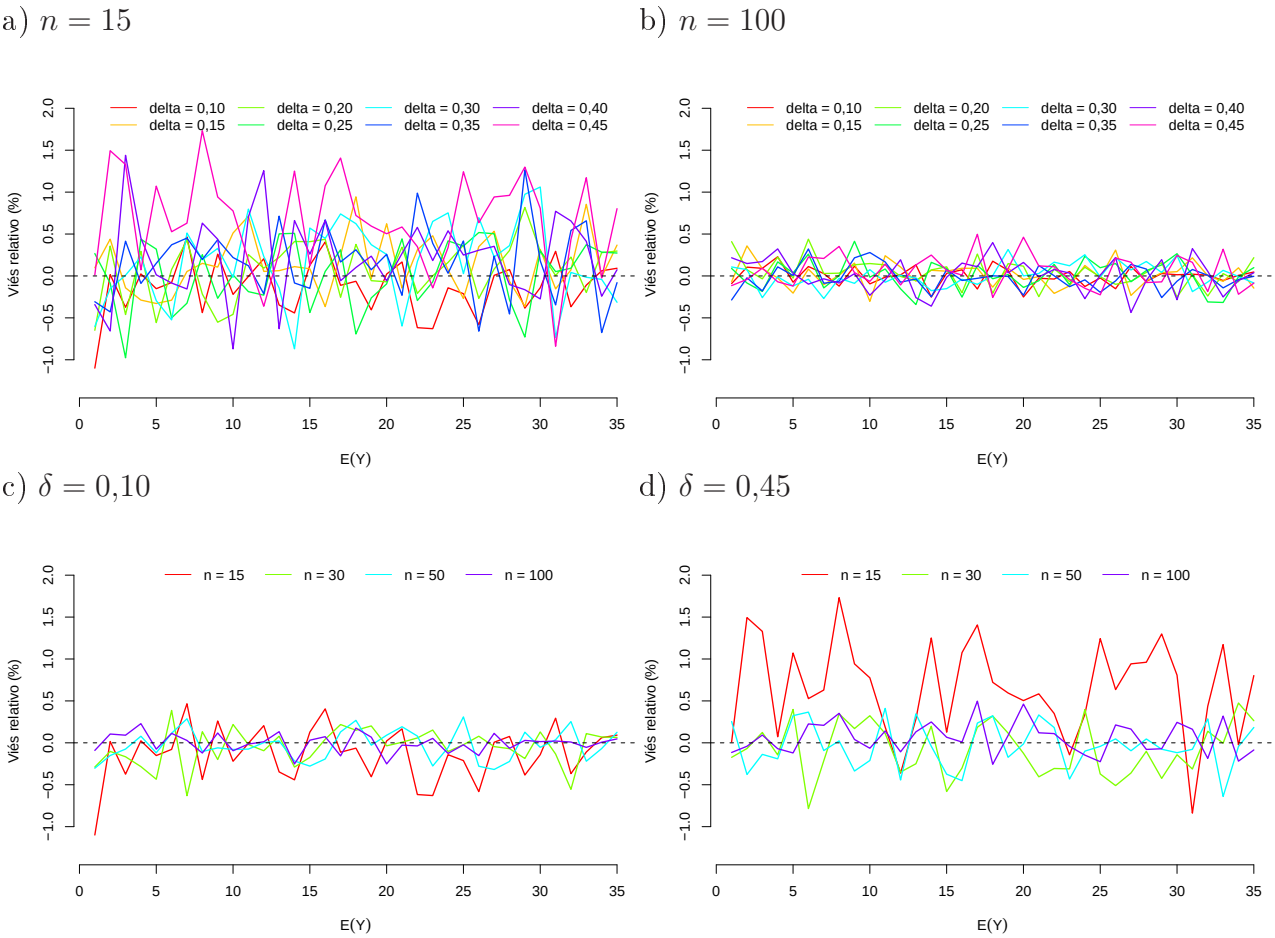


Figura 32 – Viés relativo percentual de $\widehat{\mathbb{E}(Y)}$ em função da $\mathbb{E}(Y)$, dado $\alpha = 2$ e $\xi = 0{,}11$ para diferentes valores de δ e tamanho amostral $n = 15$ (a) ou $n = 100$ (b), ou para diferentes tamanhos amostrais n e $\delta = 0{,}10$ (c) ou $\delta = 0{,}45$ (d)

4.3.3 Conclusões

Da primeira etapa do estudo de simulação para o modelo MG, concluí-se que o método M2 com valores iniciais obtidos por meio do método dos momentos, MM, considerando amostras do tipo Y_I, é o procedimento mais indicado para estimação dos parâmetros do modelo, conforme os resultados apresentados nas Tabelas 20 e 21 e a facilidade de implementação do procedimento. Deve-se observar que este procedimento tende a apresentar probabilidades de cobertura empíricas inferiores aos valores esperados de 0,99, 0,95 e 0,90 para regiões de confiança conjuntas, envolvendo os três parâmetros do modelo, segundo os resultados apresentados por 40 situações com $n = 15$, amostradas 10000 vezes.

O tamanho considerado da amostra teve impacto em todas as estimativas, sendo

que quanto maior a amostra menor o viés relativo percentual e menor o erro quadrático médio.

De acordo com o apresentado nas Figuras 29 a 32, aumentando a proporção de zeros na amostra, isto é, o valor de δ, aumenta-se o valor em módulo do VR%, exceto para as estimativas do parâmetro δ.

De forma geral, as estimativas apresentaram menores valores absolutos dos VR% e menores valores dos EQM para os pontos de censuras $\xi = 0{,}11$ e $\tau = 0{,}22$ que para os pontos $\xi = 0{,}50$ e $\tau = 1$, mostrando que, informações provenientes de intervalos mais amplos tendem a ser mais pobres, no sentido de que as estimativas estão mais distantes dos valores populacionais.

As conclusões a partir dos valores observados para diferentes valores de α, o parâmetro de forma da distribuição gama, não foram unânimes quanto ao que é melhor para se obter estimativas mais acuradas e precisas. Para alguns cenários, com $\alpha = 2$, os valores do VR% foram em módulo menores que para cenários com $\alpha = 1{,}5$, ocorrendo também a situação inversa. O mesmo foi observado para os erros quadráticos médios.

Considerando os valores de δ e α fixados, e variando os valores de $\mathbb{E}(Y) = 1$ até $\mathbb{E}(Y) = 35$ os VR% de $\widehat{\delta}$ e $\widehat{\mathbb{E}(Y)}$ oscilaram em torno de zero, apresentando uma pequena tendência a aumentarem, em valor absoluto, para $\widehat{\delta}$ com $\mathbb{E}(Y)$ variando de aproximadamente 8 para 1, atingindo o valor mais distante de zero, igual a -7%.

Assim, para dados censurados e inflacionados de zeros com valores maiores que zero, seguindo distribuição gama, o modelo de mistura de gama (61) em conjunto com a metodologia de estimação proposta, fornecem resultados satisfatórios para estimação de δ e $\mathbb{E}(Y)$.

4.4 Análise dos dados de comtaminação com aflatoxina B1

Nesta seção são analisados os dados de medidas de contaminação com aflatoxina B1, apresentados na Tabela 2, página 37, considerando-se os modelos de mistura com distribuição exponencial, distribuição de Weibull e distribuição Gama, denotados, respectivamente, por ME, MW e MG.

Observa-se, dos dados apresentados na Tabela 2, que apenas na amostra de número 10 foi possível quantificar, simultaneamente, aflatoxina nas três ramificações do plano de amostragem. Além disso, na amostra 16 foi detectada aflatoxina nas três ramificações,

porém quantificada apenas nas ramificações A e B. Assim, mesmo sendo frações da mesma amostra, na maioria dos casos não se encontra aflatoxina nas três ramificações simultaneamente.

Em um estudo sobre aflatoxina em vagens de amendoim, Cucullu (1966) mostra que muitas vagens têm concentração zero de aflatoxina, mas ocasionalmente pode ser encontrada uma vagem com alta concentração. Segundo Johansson et al. (2000), este mesmo comportamento também ocorre em estudos com milho, que estabeleceram que apenas 6 grãos entre 10000 podem estar contaminados, em um lote que tenha apresentado contaminação de 20 ppb. Assim, se a amostra de teste tem um ou mais grãos altamente contaminados, o teste poderá superestimar a verdadeira concentração de aflatoxina no lote. Estas conclusões explicam a importância do tamanho da amostra na quantificação da aflatoxina.

Na Figura 33 são apresentadas as distribuições acumuladas empíricas (DAE), das medidas de contaminação com aflatoxina B1 apresentadas na Tabela 2, bem como as distribuições acumuladas dos modelos de mistura, ME, MW e MG ajustados. Detalhadamente, na Figura 33 (a), são apresentados os três modelos ajustados aos valores da ramificação A do fluxograma de amostragem (Figura 4), na Figura 33 (b) os modelos ajustados aos valores da ramificação B e para a ramificação C, os modelos ajustados são apresentados na Figura 33 (c).

Uma avaliação gráfica dos modelos ajustados, expostos na Figura 33, leva a crer que os modelos de mistura são apropriados para o tipo de observação proposta neste trabalho. Observa-se ainda, nos gráficos, que as curvas das distribuições acumuladas dos modelos MW e MG ajustados estão bastante próximas, chegando, em alguns casos a se sobreporem. As curvas do modelo ME se distância das curvas dos modelos MW e MG, e também dos pontos da distribuição acumulada empírica. Sendo assim, os gráficos da Figura 33, sugerem que os modelos de mistura com densidade de Weibull e gama se ajustaram melhor aos dados que o modelo com densidade exponencial.

Os resultados apresentados na Tabela 27 referem-se às estimativas de máxima verossimilhança dos parâmetros dos modelos ME, MW e MG, bem como as regiões com 95% de confiança para cada parâmetro, ajustados às medidas de aflatoxina apresentadas na Tabela 2. Para o ajuste do modelo ME foi adotado o médodo sugerido na Seção 3.2.6. As estimativas

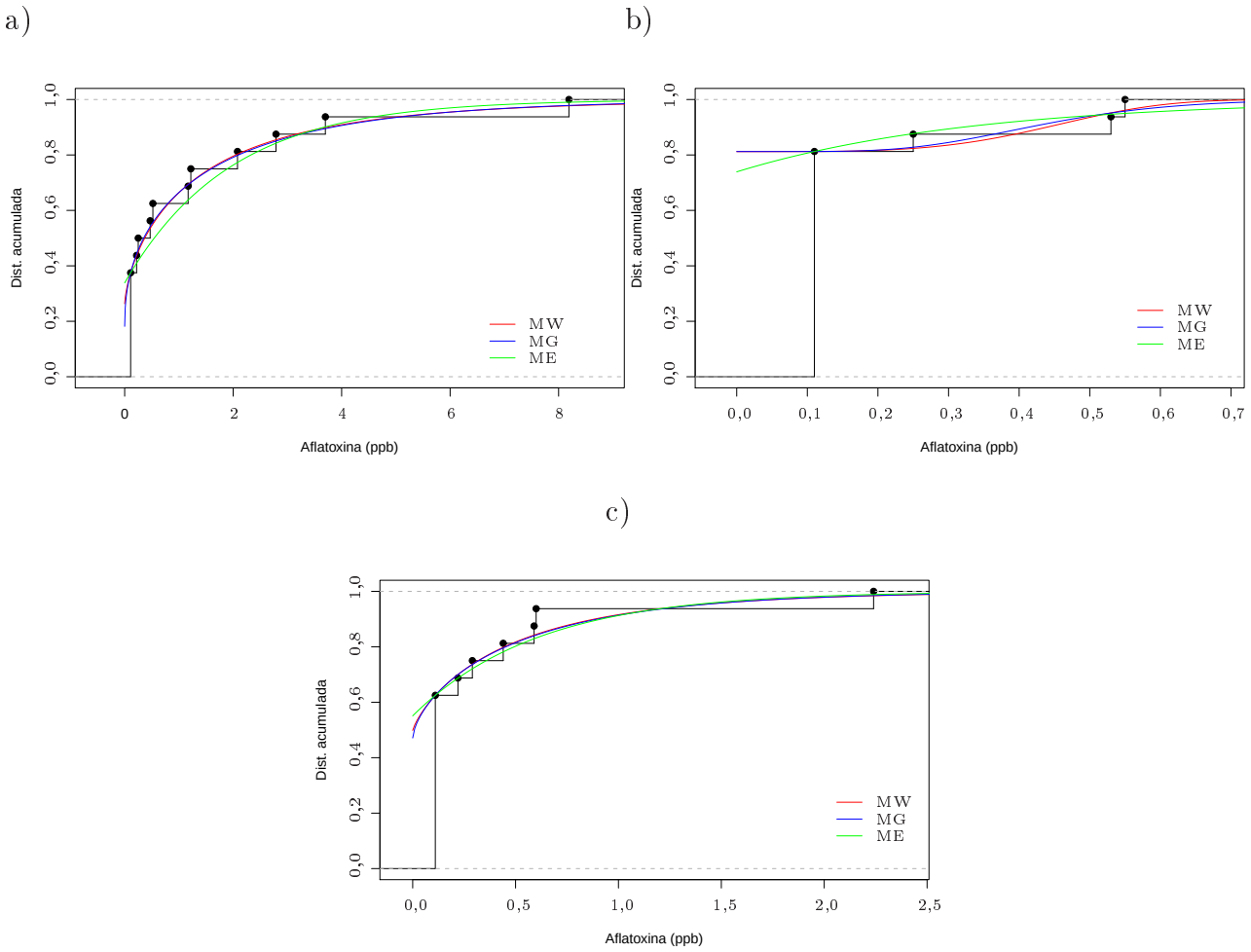


Figura 33 – Distribuição acumulada empírica das observações e as distribuições acumuladas modelos modelos de mistura com distribuição exponencial (ME), distribuição de Weibull (MW) e distribuição gama (MG) ajustados às medidas de contaminação com aflatoxina B1 apresentadas na Tabela 2, sendo o gráfico (a) referente à ramificação A, (b) à ramificação B e (c) à ramificação C da Figura 4, página 33

para os parâmetros do modelo MW foram obtidas considerando o método de estimação M4 com a parametrização P2 apresentados na Seção 3.2.7, considerados de melhor performance na Seção 4.2.1. No caso do modelo MG, as estimativas foram obtidas considerando o método de estimação M2 com valores iniciais obtidos por MM considerando amostras do tipo Y_I, apresentados na Seção 3.2.8, sendo avaliados como de melhor performance na seção 4.3.1. Com base nas regiões de confiança para o parâmetro δ, pode-se afirmar, que apenas para o modelo MG aplicado nas observações de grãos sem separação, constantes da ramificação A, não há necessidade de considerar um modelo de mistura. Porém, como existe interesse do pesquisador em estimar a probabilidade do lote conter ou não aflatoxina, esse parâmetro não deve ser retirado do modelo.

Pode ser observado por meio das estimativas de δ que, para amostras de grãos bons, a chance do lote não estar contaminado é maior do que para amostras com grãos danificados, concordando com o trabalho apresentado por Johansson et al. (2006) onde os autores concluíram que os fungos de aflatoxina concentram-se em grãos de má qualidade. Os resultados das amostras retiradas pela ramificação A, do fluxograma de amostragem, apontam maior chance do lote estar contaminado, isto possivelmente pelo fato dessa amostra ser composta por 5 kg de milho, enquanto que os ramos B e C são as partições de 1 Kg, como discutido em Johansson et al. (2000).

As estimativas dos parâmetros de forma das funções de densidade de Weibull e gama foram menores que 1 para as ramificações A e C, levando às semelhanças das curvas das distribuições de mistura com distribuição exponencial, distribuição de Weibull e distribuição gama, conforme pode ser observado nas Figuras 33 (a) e (c).

Tabela 27 – Estimativas de máxima verossimilhança e regiões com 95% de confiança para os parâmetros dos modelos de mistura com distribuição exponencial (ME), distribuição de Weibull (MW) e distribuição gama (MG) ajustados às medidas de contaminação com aflatoxina B1 apresentadas na Tabela 2

		A	B	C
Modelo	Par.	Est. (RC 95%)	Est. (RC 95%)	Est. (RC 95%)
ME	δ	0,339 (0,121; 0,596)	0,739 (0,420; 0,930)	0,551 (0,260; 0,797)
	θ	1,946 (1,113; 3,874)	0,333 (0,138; 1,268)	0,611 (0,308; 1,511)
MW	δ	0,263 (0,021; 0,549)	0,812 (0,582; 0,950)	0,498 (0,174; 0,773)
	α	0,708 (0,392; 1,076)	4,075 (0,954; 9,264)	0,822 (0,381; 1,323)
	β	1,408 (0,657; 3,634)	0,491 (0,389; 0,691)	0,494 (0,222; 1,439)
MG	δ	0,182 (0,000; 0,499)	0,812 (0,582; 0,950)	0,471 (0,129; 0,761)
	α	0,449 (0,222; 0,843)	8,323 (5,305; 11,716)	0,645 (0,250; 1,438)
	β	3,516 (1,703; 9,294)	0,053 (0,037; 0,082)	0,811 (0,376; 2,382)

Nota: Par.:prarâmetro e Est.: estimativa

Nas Figuras 34, 35 e 36 encontram-se os perfis de verossimilhança com as regiões de 95% de confiança para os parâmetros dos modelos ME, MW e MG ajustados para as medidas de aflatoxina ramificações A, B e C, respectivamente. A amplitude das regiões estão em torno 0,5 para o parâmetro δ em todos os modelos. Essa amplitude pode ser considerada grande, pois se trata da metade do espaço paramétrico. Porém, pode ser explicada pelo tamanho reduzido da amostra. Observa-se, ainda, que existe um padrão para os perfis de verossimilhança de δ e também para os parâmetros de escala das distribuições exponencial, Weibull e gama. Pode ser observado que para os dados de uma mesma ramificação as curvas têm a mesma forma.

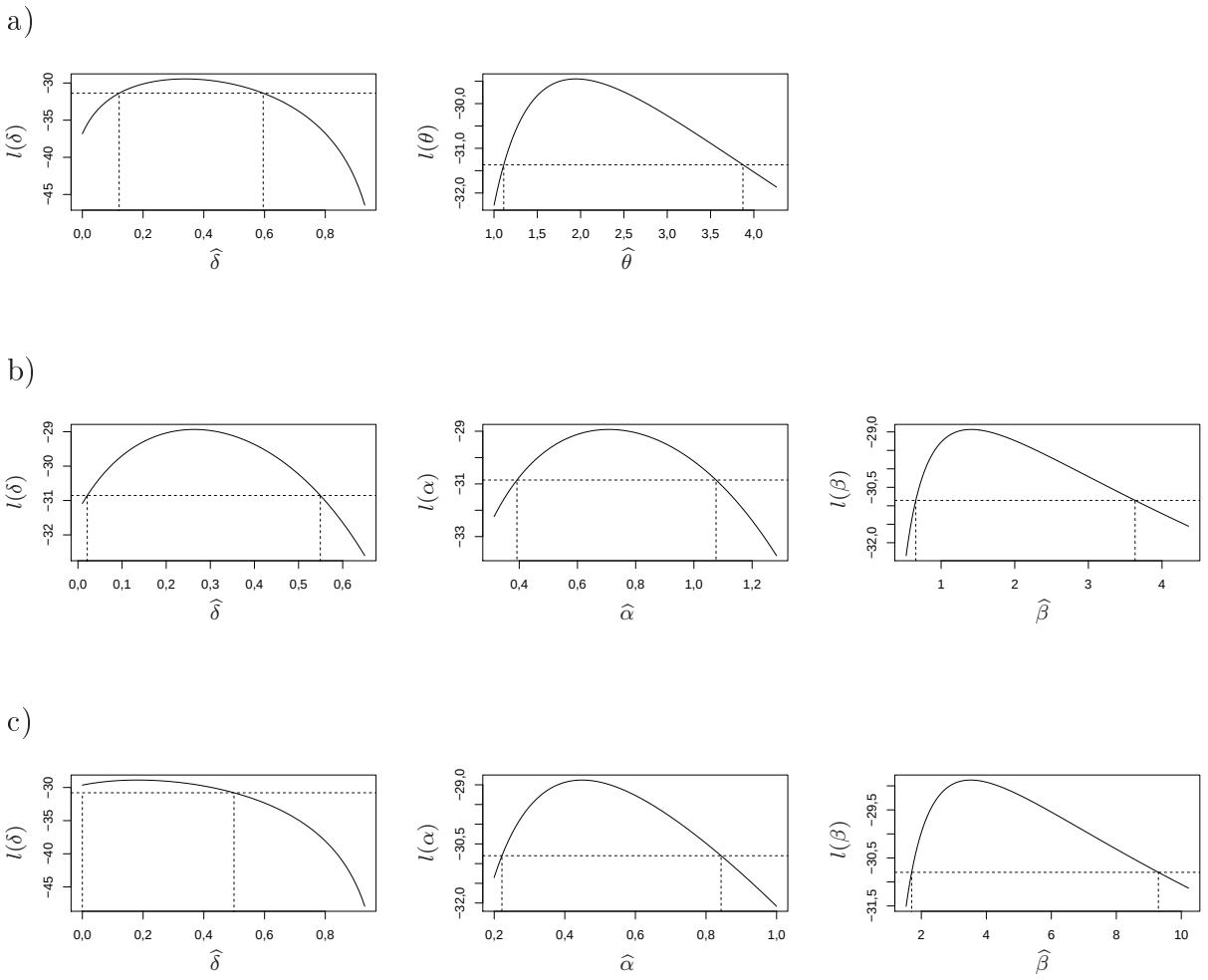
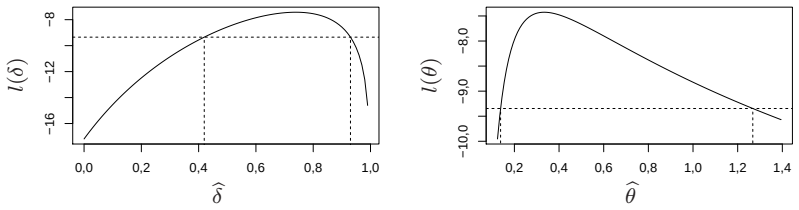
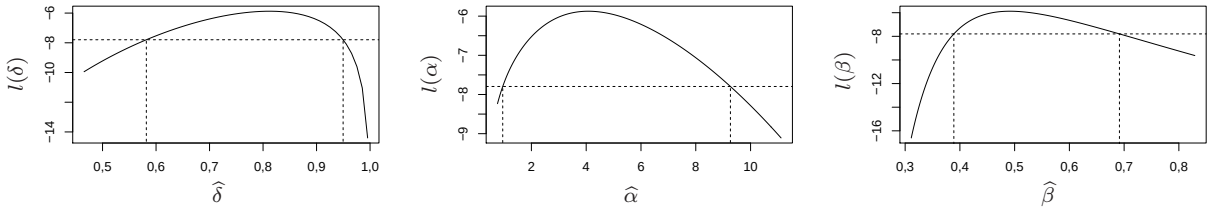


Figura 34 – Verossimilhança perfilada dos parâmetros do modelo de mistura com distribuição exponencial (ME) em (a), distribuição de Weibull (MW) em (b) e distribuição gama (MG) em (c) ajustados às medidas de contaminação com aflatoxina B1 apresentadas na Tabela 2, ramificação A

a)



b)



c)

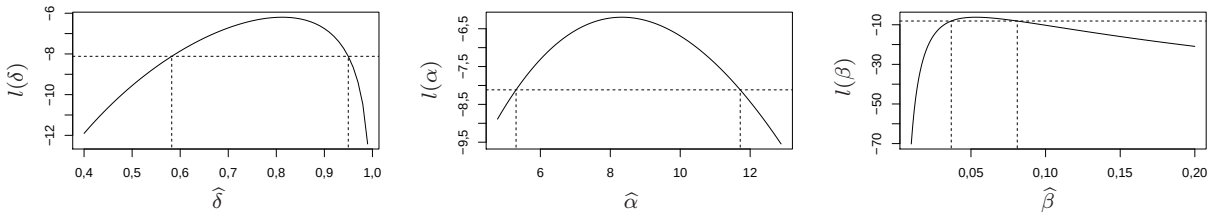


Figura 35 – Verossimilhança perfilada dos parâmetros do modelo de mistura com distribuição exponencial (ME) em (a), distribuição de Weibull (MW) em (b) e distribuição gama (MG) em (c) ajustados às medidas de contaminação com aflatoxina B1 apresentadas na Tabela 2, ramificação B

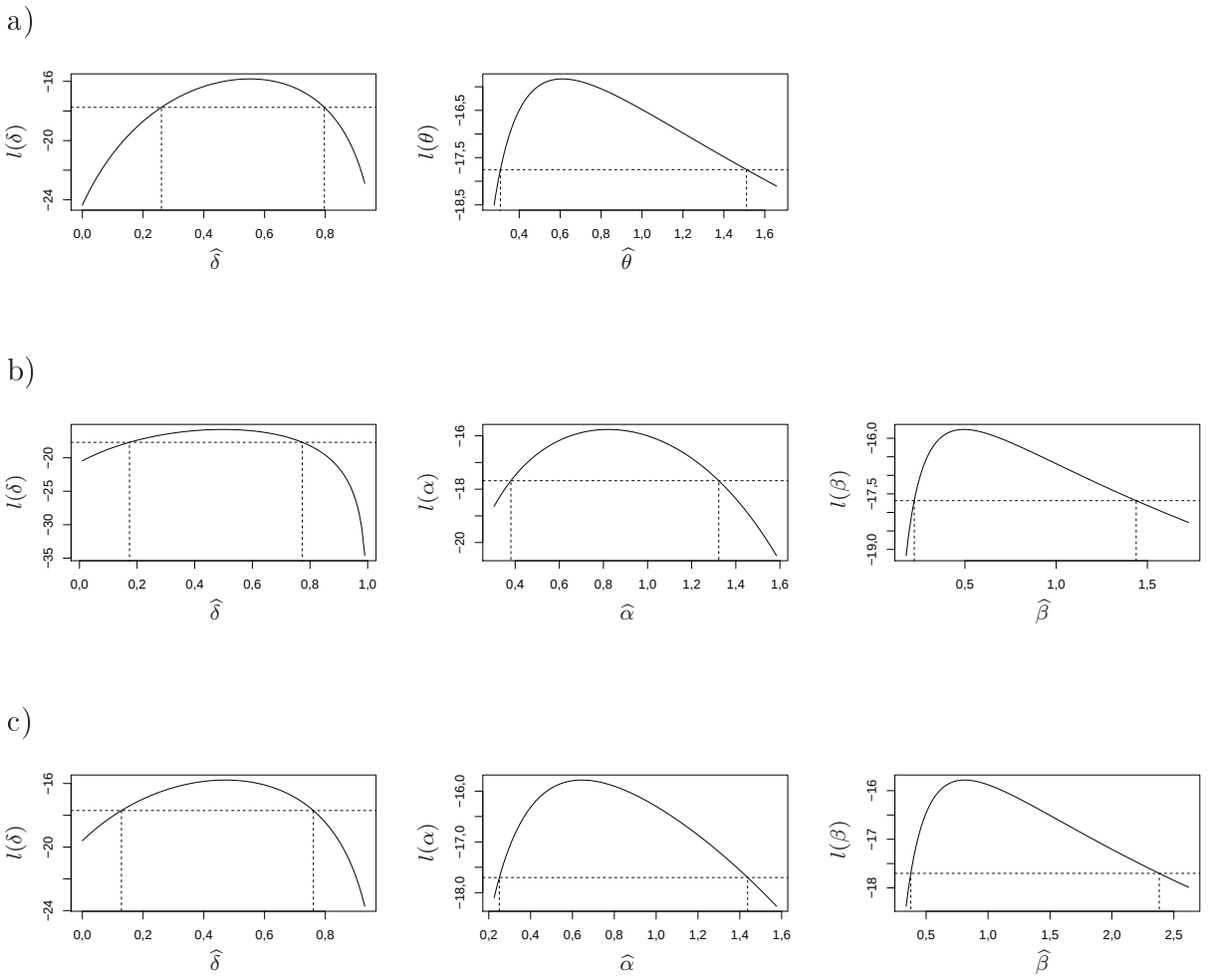


Figura 36 – Verossimilhança perfilada dos parâmetros do modelo de mistura com distribuição exponencial (ME) em (a), distribuição de Weibull (MW) em (b) e distribuição gama (MG) em (c) ajustados às medidas de contaminação com aflatoxina B1 apresentadas na Tabela 2, ramificação C

A Tabela 28, é composta pelas estimativas da quantidade média de aflatoxina, com base nos modelos ME, MW e MG, calculados a partir das expressões para o valor médio, apresentadas nas Seções 3.2.6, 3.2.7 e 3.2.8, bem como seus desvios padrão obtidos por expressões apresentadas no Anexo C. Nota-se, a partir destes resultados, que os modelos levaram a valores médios de aflatoxina muito próximos, o mesmo ocorrendo para cada uma das ramificações. Por outro lado, existe diferença entre os desvios padrão, sendo o maior desvio padrão do valor médio correspondente ao modelo MG.

Tabela 28 – Valores médios e desvios padrão estimados de aflatoxina B1 em ppb obtidos pelo princípio de invariância dos estimadores de máxima verossimilhança através dos parâmetros dos modelos de mistura com distribuição exponencial (ME), distribuição de Weibull (MW) e distribuição gama (MG) ajustados às medidas de contaminação com aflatoxina B1 apresentadas na Tabela 2

	A		B		C	
Modelo	$\widehat{\mathbb{E}}(Y)$	$\widehat{\mathrm{DP}}\big(\widehat{\mathbb{E}}(Y)\big)$	$\widehat{\mathbb{E}}(Y)$	$\widehat{\mathrm{DP}}\big(\widehat{\mathbb{E}}(Y)\big)$	$\widehat{\mathbb{E}}(Y)$	$\widehat{\mathrm{DP}}\big(\widehat{\mathbb{E}}(Y)\big)$
ME	1,2872	0,5026	0,0869	0,0706	0,2742	0,1483
MW	1,2992	1,3626	0,0838	0,0628	0,2757	0,3193
MG	1,2910	2,6786	0,0831	0,1051	0,2765	0,5759

As estatísticas para verificar adequação dos modelos, apresentadas na Seção 3.2.4, foram calculadas para os três modelos considerando as medidas de aflatoxina das três ramificações do plano amostral, cujos resultados são apresentados na Tabela 29. Nesta tabela, os valores da probabilidade de significância indicam que os três modelos se adequam aos dados. Como as estatísticas são baseadas na distância entre a distribuição teórica e a distribuição empírica das medidas de aflatoxina, esperava-se poder decidir por um modelo considerando a magnitude do valor de sua estatística Dif, KS, W^2, A^2, Z_K, Z_W ou Z_A, no caso dos modelos não serem rejeitados pelo teste com base no valor p. Porém, as estatísticas não apresentaram diferenças para os modelos considerados. Por outro lado, os valores p para o modelo MW foi superior aos dos outros modelos e como é sabido, o valor p fornece evidências de que H_0 é verdadeira. Sendo assim, o modelo MW parece mais plausível que os modelos ME e MG.

Tabela 29 – Resultados dos testes da qualidade do ajuste dos modelos dos modelos de mistura com distribuição exponencial (ME), distribuição de Weibull (MW) e distribuição gama (MG) ajustados às medidas de contaminação com aflatoxina B1 apresentadas na Tabela 2

		ME		MW		MG	
Ram.	Estatística	Estimativa	Valor p	Estimativa	Valor p	Estimativa	Valor p
A	Dif	0,0581		0,0276		0,0269	
	KS	0,3750	0,4666	0,3750	0,5181	0,3750	0,3382
	W^2	0,3057	0,4440	0,2900	0,6050	0,2897	0,4830
	A^2	1,6654	0,4493	1,5771	0,6138	1,5764	0,4933
	Z_K	5,5497	0,4666	5,5505	0,5170	5,5503	0,3378
	Z_W	19,8790	0,4992	19,4441	0,6332	19,4199	0,4251
	Z_A	4,2413	0,4149	4,2056	0,5911	4,2065	0,3534
B	Dif	0,0039		0,0070		0,0069	
	KS	0,8124	0,4749	0,8125	0,9847	0,8125	0,4047
	W^2	2,8641	0,5049	2,8641	0,9877	2,8640	0,4361
	A^2	13,8427	0,5339	13,8424	0,9966	13,8417	0,4529
	Z_K	23,8201	0,6449	23,8252	0,9930	23,8247	0,4858
	Z_W	86,5377	0,1830	86,1200	0,7898	86,2571	0,3085
	Z_A	8,6686	0,1532	8,6645	0,7467	8,6654	0,3005
C	Dif	0,0159		0,0129		0,0134	
	KS	0,6250	0,4108	0,6250	0,4838	0,6250	0,4364
	W^2	1,3111	0,4234	1,3106	0,5061	1,3108	0,4364
	A^2	5,7920	0,4126	5,7740	0,5279	5,7770	0,4376
	Z_K	13,2128	0,4150	13,2127	0,4959	13,2125	0,4420
	Z_W	44,4734	0,4198	44,1964	0,5663	44,2305	0,4346
	Z_A	5,9628	0,3875	5,9471	0,5117	5,9491	0,4226

No caso do pesquisador não ter interesse em estimar a probabilidade do lote não ter aflatoxina, ou se não há interesse em trabalhar com modelo de mistura, pode-se optar por um critério mais rigoroso do que a região de rejeição e testar a hipótese $H_0: \ \delta = 0$ contra a hipótese $H_1: \ \delta > 0$, como discutido na Seção 3.2.2. Sendo assim, os resultados para esse

teste, apresentados na Tabela 30, fornecem informações favoráveis para descartar o modelo de mistura MW e MG nas ramificações A e C.

Tabela 30 – Resultados dos testes da razão de verossimilhanças (T_{RV}) dos modelos de mistura com distribuição exponencial (ME), distribuição de Weibull (MW) e distribuição gama (MG) ajustados às medidas de contaminação com aflatoxina B1 apresentadas na Tabela 2

	A		B		C	
Modelo	$T_{RV}(\delta)$	valor p	$T_{RV}(\delta)$	valor p	$T_{RV}(\delta)$	valor p
ME	12,5292	0,0002	7,8679	0,0025	10,7421	0,0005
MW	0,7486	0,1935	4,8890	0,0135	0,6285	0,2140
MG	0,1054	0,3727	3,5059	0,0306	0,1715	0,3394

4.4.1 Conclusões

A utilização dos modelos propostos, mostrou-se coerente, pois apesar das amostras serem de tamanho reduzido, os três modelos adequaram-se aos dados. Além disso, os três modelos fornecem mais informação para o pesquisador do que os citados na literatura, no sentido de que o parâmetro δ avalia a probabilidade do lote não conter aflatoxina e pela modelagem utilizada, onde os valores que se encontram dentro do intervalo de censura não são considerados zeros.

Como apresentado na Tabela 30, apenas o modelo de mistura exponencial mostrou-se significativo pelo teste da razão de verossimilhanças. Isto possivelmente tenha sido causado pela falta de flexibilidade do modelo, pois a densidade exponencial conta apenas com um parâmetro. Entretanto, o modelo de mistura de Weibull (51) é um modelo de grande flexibilidade, e pode ser considerado o que melhor se ajustou aos três conjuntos de dados, como pode ser observado na Figura 33 e na Tabela 29.

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Procurou-se, por meio do presente trabalho, estabelecer novos modelos capazes de modelar observações inflacionadas de zeros provenientes da própria característica da variável aleatória estudada e com dupla censura, sem que houvesse perda de informação causada em função da transformação dos valores censurados, através de modelos de mistura degenerados em zero. Para tal procedimento, três densidades foram consideradas para mistura, a densidade Exponencial, a densidade de Weibull e a densidade Gama, gerando três modelos de mistura, ME, MW e MG, respectivamente. Tais modelos tiveram seus desempenhos avaliados por meio de estudos de simulação e em aplicações na modelagem de dados oriundos de medidas de contaminação com aflatoxina B1 observadas em grãos de milho obtidas no Laboratório de Micotoxinas do Departamento de Agroindústria, Alimentos e Nutrição da ESALQ/USP.

Na maioria dos casos, as simulações indicaram eficiência dos métodos propostos para as estimações dos parâmetros dos modelos, principalmente para a estimativa do parâmetro δ e do valor esperado, $\mathbb{E}(Y)$. Estes são objetos de grande interesse nesse estudo, devido ao fato de que δ é a probabilidade de zeros verdadeiros, e encontram-se coadunados às observações censuradas, e $\mathbb{E}(Y)$ que poderá ser usada para testar a hipótese da média da variável observada ser menor que um determinado valor. Pelos valores dos viéses relativos percentuais obtidos com a variação de $\mathbb{E}(Y)$, tem-se que os resultados para o estimador de máxima verossimilhança de δ e do valor esperado, $\mathbb{E}(Y)$, foram mais estáveis que os demais, com uma tendência a oscilar numa pequena faixa em torno de zero por cento. Além disso, por meio de simulações pode-se verificar que as probabilidades de cobertura para regiões de 90, 95 e 99% de confiança, considerando amostras de tamanho 15, para o modelo MW, foram alcançadas e no caso do modelo MG foram, na maioria das vezes, subestimadas. Porém, considerando o tamanho da amostra, $n = 15$, e que as regiões foram obtidos por razão de verossimilhanças, podem-se considerar as estimativas como boas.

A modelagem das medidas de aflatoxina proporcionou mostrar a adequabilidade dos modelos aos dados reais, bem como a aplicabilidade dos métodos de estimação dos parâmetros e interpretação de suas estimativas. As estimativas obtidas para a probabilidade do lote não conter aflatoxina não são muito diferentes entre os três modelos para os três conjuntos de dados estudados e os valores $\widehat{\mathbb{E}(Y)}$, foram muito parecidos para os três modelos

nos três conjuntos de dados. Porém, dos modelos considerados, o modelo de mistura com distribuição de Weibull, mostrou-se ajustar melhor aos dados.

Dando continuidade a este trabalho, pretende-se obter curvas características de operação que é uma medida importante na avaliação de planos amostrais. Também pode ser introduzido um teste de hipóteses para o valor médio de aflatoxina. Dentre as possíveis extensões deste trabalho, destaca-se a inclusão de variáveis explicativas nos modelos, aumentado a eficiência dos modelos para avaliações de situações práticas.

REFERÊNCIAS

AITCHISON, J. On the distribution of a positive random variable having a discrete probability mass at the origin. **Journal of the American Statistical Association.** Alexandria, v. 50, p. 901-908, 1955.

AITCHISON, J.; BROWN, J. A. C. **The lognormal distribution:** with special reference to its uses in economics. 2.ed. Cambridge: Cambridge University Press, 1963. 176 p.

BENARD, A.; BOS-LEVENBACH, E. C. The plotting of observations on probability paper. **Statistica Neerlandica.** Neerlandia. v. 7, p. 163-173, 1953.

CASELLA, G.; BERGER, R. L. **Statistical inference**. 2nd ed. Pacific Grove: Editora Duxbury, 2002. 660 p.

CHOI, S. C.; WETTE, R. Maximum likelihood estimation of the parameters of the gamma distribution and their bias. **Technometrics.** Alexandria, v. 11, n. 4, p. 683-690, 1969.

CORDEIRO, G. M. Introdução à teoria assintótica. COLÓQUIO BRASILEIRO DE MATEMÁTICA, 22°, 1999, Rio de Janeiro. **Anais...** Rio de Janeiro: Instituto de Matemática Pura e Aplicada (IMPA), 1999. 160 p.

CRAMÉR, H. **Mathematical methods of statistics**. Princeton: Princeton University Press, 1946. 247 p.

CUCULLU, A. F.; LEE, L. S.; MAYNE, R. Y.; GOLDBLATT, L. A. Determination of aflatoxins in individual peanuts and peanut sections. **Journal of American Oil Chemists' Society.** Urbana, v. 43, p. 89-92, 1966.

D'AGOSTINO, R. B.; STEPHENS, M. A.**Goodness-of-fit techniques.** New York: Marcel Dekker, 1986. 560 p.

DAY, D.; GHOSH, S. K.; MALLICK, B. K. **Generalized linear models:** a bayesian perspective. New York: CRC Press, 2000. 423 p.

DUNN, P. K.; SMYTH, G. K. Series evaluation of Tweedie exponential dispersion models. **Faculty of Sciences Working Paper Series**. 2002. SC-MC-0206. Disponível em: <http://www.sci.usq.edu.au/staff/dunn/research.html#refereeing>. Acesso em: 05 nov. 2007.

DUNN, P. K. **tweedie: Tweedie exponential family models**. R package, 2007. Disponível em: http://cran.r-project.org/src/contrib/Descriptions/tweedie.html. Acesso em: 05 nov. 2007.

FERREIRA, H.; PITTNER, E.; SANCHES, H. F.; MONTEIRO, M. C. Aflatoxins: a risk animal and human health.**Ambiência Guarapuava**, Guarapuava, n. 1, v. 2, p. 113-127, 2006. Disponível em:http://revistas.unicentro.br/index.php/ambiencia/article/view/365/519. Acesso em: 02 jan. 2008.

FONSECA, H. O amendoim e a aflatoxina. **Boletim Técnico**, Piracicaba, n. 13. Disponível em:http://www.micotoxinas.com.br/. Acesso em: 20 jun. 2006.

GIESBRECHT, F. G.; WHITAKER, T. B. Investigations of the problems of assessing aflatoxin levels in peanuts. **Biometrics**, Arlington, v. 54, p. 739-753, 1998.

HALLINAN, A. J. Jr. A Review of the Weibull distribution. **Journal of Quality Technology.** Milwaukee, v. 25, n. 2, p. 85-93, 1993.

HAUPT, R. L.; HAUPT, S. E. **Practical genetic algorithms**, Hoboken: Wiley-Interscience, 2004. 253 p.

HWANG, T-Y.; HUANG, P-H. On new moment estimation of parameters of the gamma distribution using its characterization. **Taiwanese Journal Of Mathematics.** Taiwan, v. 10, n. 4, p. 1083-1093, 2006.

JOHANSSON, A. S.; WHITAKER, T. B.; HAGLER, W. M. Jr.; GIESBRECHT, F. G.; YOUNG, J. Testing shelled corn for aflatoxin, part II: modeling the distribution of aflatoxin test results. **Journal of AOAC International.** Arlington, v. 83, p. 1270-1278, 2000.

JOHANSSON, A. S.; WHITAKER, T. B.; HAGLER, W. M. Jr.; BOWMAN, D. T.; SLATE, A. B.; PAYNE, G. Predicting aflatoxin and fumonisin in shelled corn lots using poor-quality grade components. **Journal of AOAC International.** Arlington, v. 89, n. 2, p. 433-440, 2006.

KAHN, H. D.; RUBIN, M. B. Use of statistical methods in industrial water pollution control regulations in the united states. **Environmental Monitoring and Assessment.** Washington, v. 12, p. 129-148, 1989.

LI, C. S.; TAYLOR, J. M. G; SY, J. P. Identifiability of cure models, **Statistics and Probability Letters.** Maryland Heights, v.54, p. 389–395, 2001.

LINDSAY, B.G. **Mixture models:** theory, geometry and applications. Hayward: Institute of Mathematical Statistics, 1995. 163 p.

MALLER, R. A.; ZHOU, X. Testing for the presence of immune or cured individuals in censored survival data. **Biometrics.** Arlington, v. 51, p. 1197-1205, 1995.

MALLER, R. A.; VU, H. T.; ZHOU, X. Asymptotic properties of a class of mixture models for failure data: the interior and boundary cases. **Annals of the Institute of Statistical Mathematics.** Netherlands, v. 50, p. 627-653, 1998.

McLACHLAN, G. J.; PEEL, D. **Finite mixture models**. New York: Wiley, 2000. 419 p.

MOLENBERGHS, G.; VERBEKE, G. Likelihood ratio, score, and wald tests in a constrained parameter space. **American Statistical Association.** Alexandria, v. 61, p. 22-27, 2007.

MOOD, A.; GRAYBILL, F.; BOES, D. **Introduction to the theory of statistics**. 3rd. Ed. Singapore: MacGraw Hill, 1974. 564 p.

OWEN, W. J.; DeROUEN, T. A. Estimation of the mean for lognormal data containing

zeroes and left-censored values, with applications to the measurement of worker exposure to air contaminants. **Biometrics.** Arlington, v. 36, p. 707-719, 1980.

R DEVELOPMENT CORE TEAM. R: **A Language and Environment for Statistical Computing**. Vienna: R Foundation for Statistical Computing, 2006. Disponível em:<http://www.R-project.org>. Acesso em: 01 julho 2008.

RINNE, H. **The Weibull distribution:** a handbook. Boka Raton: Chapman & Hall, 2008. 784 p.

ROSS, S. N. **Introduction to probability models.**. 4th ed. Burlington: Academic Press, 1997. 669 p.

ROSS, S. M. **Simulation**. 4th ed. Burlington: Academic Press, 2006. 298 p.

SELF, S. F.; LIANG, K-Y. Asymptotic properties of maximum likelihood estimators and likelihood ratio tests under nonstandard conditions. **Journal of the American Statistical Association.** Alexandria, v. 82, p. 605–610, 1987.

TAYLOR, D. J.; KUPPER, L. L.; RAPPAPORT, S. M.; LYLES, R. H. A mixture model for occupational exposure mean testing with a limit of detection, **Biometrics.** Arlington, v. 57, n. 3, p. 681-688, 2001.

TEIXEIRA, A. S. **Adequação e apresentação de parâmetros de validação intralaboratorial de um ensaio para a quantificação de aflatoxinas em castanha-do-brasil (Bertholletia Excelsa Bonpl.) através de cromatografia líquida de alta eficiência.** 2008. Dissertação (Mestrado em Ciência e Tecnologia de Alimentos)- Universidade Federal Rural Do Rio De Janeiro, Seropédica, 2008. Disponível em:<http://www.ufrrj.br/posgrad/ppgcta/dissertacoes/D-260.pdf>. Acesso em: 05 fev. 2009.

WILKS, D.S. Maximum likelihood estimation for the gamma distribution using data containing zeros. **Journal of Climate.** Boston, v. 3, p. 1495-1501, 1990.

YAKOWITZ, S. J.; SPRAGINS, J. D. On the identifiability of finite mixtures , **The Annals of Mathematical Statistics.** Madison, v. 39, n. 1, p. 209-214, 1968.

ZHANG, J. Powerful goodness-of-fit tests based on the likelihood ratio. **Journal of the Royal Statistical Society, Series B.** London, v. 64, pt. 2, p. 281–294, 2002.

ANEXOS

Anexo A Região de confiança baseada na função de verossimilhança

A estatística utilizada na construção das regiões de confiança será baseada no teste da razão de verossimilhanças (TRV), uma outra opção seria uma estatística baseada na matrix de informação de Fisher, como o bem conhecido método de aproximação de Wald. Meeker e Escobar (1995), discutem os dois métodos e apontam, fundamentados em outros autores, as vantagens e e desvantagens entre eles. Os autores concluem a favor do método baseado na razão de verossimilhança, apesar de deixarem evidente que há dificuldades computacionais para obtenção de intervalos. Além disso, reiteram Casella e Berger (1990), que segundo eles não há garantia de o método baseado no TRV seja ótimo, embora raramente será muito ruim.

Limites da região de confiança baseados na TRV, tem como estrutura a seguinte equação:

$$-2\log\left(\frac{L(\boldsymbol{\theta})}{L(\widehat{\boldsymbol{\theta}})}\right) \geq \chi^2_{p,(1-\alpha)}, \tag{73}$$

sendo: $L(\boldsymbol{\theta})$ a função de verossimilhança com vetor de parâmetros $\boldsymbol{\theta}$, desconhecidos; $L(\widehat{\boldsymbol{\theta}})$ a função de verossimilhança avaliada nas estimativas de máxima verossimilhança; $\chi^2_{p,(1-\alpha)}$ é o $(1-\alpha)$ percentil da distribuição qui-quadrado. De forma geral, é imediato de (73), que a região de confiança do vetor de parâmetros $\boldsymbol{\theta}$ com $100(1-\alpha)\%$ de confiança é determinado por

$$\left\{\boldsymbol{\theta} : L(\boldsymbol{\theta}) > L(\widehat{\boldsymbol{\theta}}) - \frac{1}{2}\chi^2_{p,(1-\alpha)}\right\}, \tag{74}$$

De forma geral, resolvendo a equação

$$L(\boldsymbol{\theta}) = L(\widehat{\boldsymbol{\theta}}) - \frac{1}{2}\chi^2_{p,(1-\alpha)},$$

tem-se os limites da região de confiança usados nos gráficos de contornos de confiança. Entretanto, na prática torna-se difícil representar os contornos para os casos em que $p > 2$. Assim, para distribuições com mais de dois parâmetros será representado uma projeção bidimensional da região de confiança.

Anexo B Intervalo de confiança para probabilidade de cobertura

Assumindo que a região contém ou não o parâmetro tem-se uma resposta binária em $r = 10000$ repetições, sendo S o número de sucessos (número de vezes que a região contém o parâmetro), então S tem distribuição Binomial de parâmetros r e p (a proporção de sucessos), isto é,

$$S \sim \mathrm{Bin}(r, p).$$

Uma estimativa para p é dada por $\widehat{p} = S/r$. Pode-se, então, testar a igualdade das probabilidades de cobertura empíricas os valores nominais 0,99; 0,95 e 0,90 ($H_0: \ p = p_0$ versus $H_1: \ p \neq p_0$). É conhecido que assintoticamente, as estimativas $\widehat{p}$ tem distribuição Normal, ou seja,

$$\widehat{p} \sim \mathrm{N}\left(p, \frac{p(1-p)}{n}\right). \tag{75}$$

Desse resultado pode-se construir um teste para igualdade de proporções, segundo Casella e Berger (2002, p. 494). Para isso, tem-se de (75) a seguinte quantidade pivotal,

$$Z = \frac{\widehat{p} - p_0}{\sqrt{\frac{p_0(1-p_0)}{n}}} \sim \mathrm{N}(0, 1).$$

Considerando um nível de significância de 5%, a região de não rejeição do teste é obtida de

$$P(a < \widehat{p} < b | H_0: \ p = p_0) = 0{,}95$$

sendo a e b os limites inferior e superior da região crítica do teste. Para $p_0 = 0,99$, temos

$$P\left(\frac{a - 0{,}99}{\sqrt{\frac{0{,}99(1-0{,}99)}{10000}}} < \widehat{p} < \frac{b - 0{,}99}{\sqrt{\frac{0{,}99(1-0{,}99)}{10000}}} \middle| H_0: \ p = 0{,}99 \right) = 0{,}95$$

obtendo-se a=0,988 e b=0,992. Logo, rejeita-se H_0 se as probabilidades de cobertura empíricas estiverem fora do intervalo (0,988; 0,992). De forma análoga, obtém-se os intervalos (0,946; 0,954) e (0,894; 0,906) para os valores nominais 0,95 e 0,90, respectivamente.

Anexo C Cálculo da variância de $\widehat{\mathbb{E}(Y)}$ para os modelos apresentados

Como apresentado em Casella e Berger (2002, p. 241) pode-se, através de aproximações em séries de Taylor, obter estimativas da média e variância de uma variável aleatória.

Para definição de polinômio de Taylor de ordem r em torno de a, seja $g(\theta)$ uma função que tem derivadas de ordem $r \geq 1$ num intervalo aberto I, isto é, $g^{(r)}(y) = \dfrac{d^r}{dx^r}g(y)$ existe, então para alguma constante a em I, o polinômio de Taylor de ordem r em torno de a é definido por

$$T_r(y) = \sum_{i=0}^{r} \frac{g^{(i)}(a)}{i!}(y-a)^i = g(a) + g^{(1)}(a)(y-a) + \frac{g^{(2)}(a)}{2!}(y-a)^2 + \ldots + \frac{g^{(r)}(a)}{r!}(y-a)^r,$$

sendo $g^{(r)}(a) = \dfrac{d^r}{dx^r}g(x)\Big|_{x=a}$ e $r! = r(r-1)(r-2)\ldots 3 \cdot 2 \cdot 1$.

Como propriedade, os valores das derivadas sucessivas de T_r em a inclusive a de ordem r sempre são iguais aos valores das derivadas sucessivas correspondentes de g em a. Assim $g^{(1)}(a) = T_r^{(1)}(a)$, $g^{(2)}(a) = T_r^{(2)}(a)$, $\ldots, g^{(r)}(a) = T_r^{(r)}(a)$.

Um aspecto importante do polinômio de Taylor T_r de uma função g em a é que a aproximação

$$g(y) \approx T_r(y)$$

é considerada uma aproximação acurada, especialmente para r suficientemente grande e y próximo de a. Entretanto existe um erro, que é a diferença entre o valor real de $g(y)$ e o estimado por $T_r(y)$, chamado de "resto" de Taylor $R_r(y)$, definido por:

$$R_r(y) = g(y) - T_r(y).$$

que, segundo o autor, sempre tende para zero mais rapidamente que o termo de mais alta-ordem explicitado. Porém, em geral, não se tem interesse em explicitar o resto.

O teorema do valor médio do cálculo permite a seguinte extensão: seja r um número inteiro positivo e suponha que g seja uma função que tem derivada de ordem $r+1$ no intervalo aberto I. Então, se a e b são dois valores distintos de I, existirá um número c entre a e b tal que

$$g(b) = g(a) + g^{(1)}(a)(b-a) + \frac{g^{(2)}(a)}{2!}(b-a)^2 + \ldots + \frac{g^{(r)}(a)}{r!}(b-a)^r + R_r$$

sendo $R_r = \frac{g^{(r+1)}(c)}{(r+1)!}(b-a)^{(r+1)}$.

Para aplicações do teorema de Taylor em estatística, há maior interesse na série de Taylor de primeira ordem, isto é, uma aproximação usando derivadas de primeira ordem.

Sejam $Y_1, \ldots, Y_k$ variáveis aleatórias com médias $\theta_1, \ldots, \theta_k$; $\boldsymbol{Y} = (Y_1, \ldots, Y_k)$ e $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \ldots, \theta_k)$. Suponha que exista uma função diferenciável $g(\boldsymbol{Y})$ para a qual se deseja obter uma para estimativa de variância. Defina

$$g_i'(\boldsymbol{\theta}) = \frac{\partial}{\partial y_i} g(\boldsymbol{y})\bigg|_{y_1=\theta_1,\ldots,y_k=\theta_k}.$$

A expanssão em série de Taylor de primeira ordem para g em torno de $\boldsymbol{\theta}$ é

$$g(\boldsymbol{y}) = g(\boldsymbol{\theta}) + \sum_{i=1}^{k} g_i'(\boldsymbol{\theta})(y_i - \theta_i) + R_1,$$

sendo R_1 o resto para o polinômio de Taylor de primeira ordem. Considerando uma aproximação, a estatística pode ser escrita na forma,

$$g(\boldsymbol{y}) \approx g(\boldsymbol{\theta}) + \sum_{i=1}^{k} g_i'(\boldsymbol{\theta})(y_i - \theta_i).$$

Aplicando esperança dos dois lados da aproximação, tem-se que

$$\mathbb{E}_{\boldsymbol{\theta}} g(\boldsymbol{Y}) \approx g(\boldsymbol{\theta}) + \sum_{i=1}^{k} g_i'(\boldsymbol{\theta})\mathbb{E}_{\boldsymbol{\theta}}(y_i - \theta_i) = g(\boldsymbol{\theta}).$$

A aproximação da variância de $g(\boldsymbol{Y})$, por sua vez, é dada por

$$\begin{aligned}
\mathrm{Var}_{\boldsymbol{\theta}} g(\boldsymbol{Y}) &\approx \mathbb{E}_{\boldsymbol{\theta}}\big([g(\boldsymbol{Y}) - g(\boldsymbol{\theta})]^2\big) \\
&\approx \mathbb{E}_{\boldsymbol{\theta}}\left(\left(\sum_{i=1}^{k} g_i'(\boldsymbol{\theta})(Y_i - \theta_i)\right)^2\right) \\
&= \sum_{i=1}^{k} \big[g_i'(\boldsymbol{\theta})\big]^2 \mathrm{Var}_{\boldsymbol{\theta}} Y_i + 2\sum_{i>j}^{k} g_i'(\boldsymbol{\theta}) g_j'(\boldsymbol{\theta}) \mathrm{Cov}_{\boldsymbol{\theta}}(Y_i, Y_j),
\end{aligned}$$

Considerando que $g(\boldsymbol{Y})$ é uma função que depende de dois parâmetros, $g(\theta_1, \theta_2)$, a sua variância pode ser aproximada por,

$$\begin{aligned}
\mathrm{Var}(g(\theta_1,\theta_2)) \approx \left(\frac{dg(\theta_1,\theta_2)}{d\theta_1}\right)^2 \mathrm{Var}(\theta_1) + \left(\frac{dg(\theta_1,\theta_2)}{d\theta_2}\right)^2 \mathrm{Var}(\theta_2) + \\
+ 2\left(\frac{dg(\theta_1,\theta_2)}{d\theta_1}\right)^2 \left(\frac{dg(\theta_1,\theta_2)}{d\theta_2}\right)^2 \mathrm{Cov}(\theta_1,\theta_2)
\end{aligned} \tag{76}$$

e se $g(\boldsymbol{Y})$ é uma função que depende de três parâmetros, $g(\theta_1, \theta_2, \theta_3)$, a sua variância pode ser aproximada por,

$$\begin{aligned}\mathrm{Var}(g(\theta_1,\theta_2,\theta_3)) \approx & \left(\frac{dg(\theta_1,\theta_2,\theta_3)}{d\theta_1}\right)^2 \mathrm{Var}(\theta_1) + \left(\frac{dg(\theta_1,\theta_2,\theta_3)}{d\theta_2}\right)^2 \mathrm{Var}(\theta_2) + \\ & + \left(\frac{dg(\theta_1,\theta_2,\theta_3)}{d\theta_3}\right)^2 \mathrm{Var}(\theta_3) + \\ & + 2\left(\frac{dg(\theta_1,\theta_2,\theta_3)}{d\theta_1}\right)^2 \left(\frac{dg(\theta_1,\theta_2,\theta_3)}{d\theta_2}\right)^2 \mathrm{Cov}(\theta_1,\theta_2) + \\ & + 2\left(\frac{dg(\theta_1,\theta_2,\theta_3)}{d\theta_1}\right)^2 \left(\frac{dg(\theta_1,\theta_2,\theta_3)}{d\theta_3}\right)^2 \mathrm{Cov}(\theta_1,\theta_3) + \\ & + 2\left(\frac{dg(\theta_1,\theta_2,\theta_3)}{d\theta_2}\right)^2 \left(\frac{dg(\theta_1,\theta_2,\theta_3)}{d\theta_3}\right)^2 \mathrm{Cov}(\theta_2,\theta_3).\end{aligned} \tag{77}$$

São apresentados a seguir os estimadores da variância do valor médio para os modelos ME, MW e MG.

Para o modelo ME, tem-se que $\mathbb{E}(Y) = (1-\delta)\theta$, então $\frac{d\mathbb{E}(Y)}{d\delta} = -\theta$; $\frac{d\mathbb{E}(Y)}{d\theta} = (1-\delta)$ e aplicando em (76) tem-se que

$$\mathrm{Var}(\mathbb{E}(Y)) \approx \theta^2 \mathrm{Var}(\delta) + (1-\delta)^2 \mathrm{Var}(\theta) + 2\delta^2(1-\delta)^2 \mathrm{Cov}(\delta,\theta). \tag{78}$$

Para o modelo MW, tem-se que $\mathbb{E}(Y) = (1-\delta)\beta\Gamma\big(1+\frac{1}{\alpha}\big)$, então:

$$\frac{d\mathbb{E}(Y)}{d\delta} = -\beta\Gamma\left(1+\frac{1}{\alpha}\right); \quad \frac{d\mathbb{E}(Y)}{d\alpha} = (1-\delta)\beta\Gamma\left(1+\frac{1}{\alpha}\right)\Psi\left(1+\frac{1}{\alpha}\right); \quad \frac{d\mathbb{E}(Y)}{d\beta} = (1-\delta)\Gamma\left(1+\frac{1}{\alpha}\right),$$

sendo $\Psi(\cdot)$ a função digama, isto é,

$$\Psi\left(1+\frac{1}{\alpha}\right) = \frac{d\log\Gamma\big(1+\frac{1}{\alpha}\big)}{d\alpha} = \frac{1}{\Gamma\big(1+\frac{1}{\alpha}\big)}\frac{d\Gamma\big(1+\frac{1}{\alpha}\big)}{d\alpha} \Longleftrightarrow \frac{d\Gamma\big(1+\frac{1}{\alpha}\big)}{d\alpha} = \Gamma\left(1+\frac{1}{\alpha}\right)\Psi\left(1+\frac{1}{\alpha}\right)$$

que substituindo em (77) leva a

$$\begin{aligned}\mathrm{Var}(\mathbb{E}(Y)) \approx & \beta^2\Gamma\left(1+\frac{1}{\alpha}\right)^2 \mathrm{Var}(\delta) + (1-\delta)^2\beta^2\Gamma\left(1+\frac{1}{\alpha}\right)^2 \Psi\left(1+\frac{1}{\alpha}\right)^2 \mathrm{Var}(\alpha) + \\ & + (1-\delta)^2\Gamma\left(1+\frac{1}{\alpha}\right)^2 \mathrm{Var}(\beta) + \\ & + 2\beta^2\Gamma\left(1+\frac{1}{\alpha}\right)^2 (1-\delta)^2\beta^2\Gamma\left(1+\frac{1}{\alpha}\right)^2 \Psi\left(1+\frac{1}{\alpha}\right)^2 \mathrm{Cov}(\delta,\alpha) + \\ & + 2\beta^2\Gamma\left(1+\frac{1}{\alpha}\right)^2 (1-\delta)^2\Gamma\left(1+\frac{1}{\alpha}\right)^2 \mathrm{Cov}(\delta,\beta) + \\ & + 2(1-\delta)^2\beta^2\Gamma\left(1+\frac{1}{\alpha}\right)^2 \Psi\left(1+\frac{1}{\alpha}\right)^2 (1-\delta)^2\Gamma\left(1+\frac{1}{\alpha}\right)^2 \mathrm{Cov}(\alpha,\beta).\end{aligned}$$

Para o modelo MG, tem-se que $\mathbb{E}(Y) = (1-\delta)\alpha\beta$, então

$$\frac{d\mathbb{E}(Y)}{d\delta} = -\alpha\beta, \quad \frac{d\mathbb{E}(Y)}{d\alpha} = (1-\delta)\beta \quad \text{e} \quad \frac{d\mathbb{E}(Y)}{d\beta} = (1-\delta)\alpha$$

e substituindo-se em (77) tem-se que

$$\begin{aligned}\mathrm{Var}(\mathbb{E}(Y)) \approx\ & \alpha^2\beta^2\mathrm{Var}(\delta) + (1-\delta)^2\beta^2\mathrm{Var}(\alpha) + (1-\delta)^2\alpha^2\mathrm{Var}(\beta) + \\ & + 2\alpha^2\beta^2(1-\delta)^2\beta^2\mathrm{Cov}(\delta,\alpha) + 2\alpha^2\beta^2(1-\delta)^2\alpha^2\mathrm{Cov}(\delta,\beta) + \\ & + 2(1-\delta)^2\beta^2(1-\delta)^2\alpha^2\mathrm{Cov}(\alpha,\beta).\end{aligned}$$

Tabela 31 – Médias dos viéses relativos percentuais (VR%) e dos erros quadráticos médios (EQM) para estimativas de α, β, δ e $\mathbb{E}(Y)$ considerando $n = 15$, $\delta = 0{,}10$ ou $0{,}30$, $\alpha = 1{,}5$ ou 2 e $\xi = 0{,}5$ em função de $\mathbb{E}(Y)$, baseado em 10000 repetições, segundo descrito na seção 3.2.7, página 64

(continua)

		VR%				EQM			
$\mathbb{E}(Y)$	Método	$\widehat{\alpha}$	$\widehat{\beta}$	$\widehat{\delta}$	$\widehat{\mathbb{E}(Y)}$	$\widehat{\alpha}$	$\widehat{\beta}$	$\widehat{\delta}$	$\widehat{\mathbb{E}(Y)}$
2	M1 e P1	18,549	-0,723	2,935	-0,665	1,083	0,766	0,028	0,412
	M2 e P1	18,053	-0,957	2,935	-0,885	1,084	0,767	0,028	0,407
	M3 e P1	18,053	-0,957	2,935	-0,885	1,084	0,767	0,028	0,407
	M4 e P1	18,158	-0,690	2,935	-0,629	1,071	0,767	0,028	0,413
	M1 e P2	17,832	-0,797	2,922	-0,741	0,969	0,760	0,028	0,411
	M2 e P2	17,291	-1,023	2,924	-0,935	0,970	0,762	0,028	0,409
	M3 e P2	17,286	-1,023	2,925	-0,936	0,970	0,762	0,028	0,409
	M4 e P2	17,345	-0,764	2,926	-0,703	0,945	0,761	0,028	0,413
	M1 e P3	18,550	-0,751	2,934	-0,694	1,083	0,766	0,028	0,411
	M2 e P3	18,021	-1,000	2,934	-0,933	1,084	0,769	0,028	0,408
	M3 e P3	18,067	-0,935	2,934	-0,870	1,083	0,767	0,028	0,408
	M4 e P3	18,159	-0,725	2,935	-0,666	1,071	0,766	0,028	0,412
4	M1 e P1	15,644	-0,475	-0,366	0,005	0,825	2,503	0,022	1,589
	M2 e P1	15,251	-0,684	-0,369	-0,177	0,828	2,513	0,022	1,580
	M3 e P1	15,251	-0,684	-0,369	-0,177	0,828	2,513	0,022	1,580
	M4 e P1	14,733	-0,359	-0,368	0,177	0,816	2,513	0,022	1,614
	M1 e P2	12,615	-0,981	-0,430	-0,503	0,587	2,397	0,022	1,562
	M2 e P2	12,188	-1,151	-0,432	-0,627	0,591	2,404	0,022	1,554
	M3 e P2	12,188	-1,152	-0,429	-0,629	0,591	2,403	0,022	1,554
	M4 e P2	11,186	-1,011	-0,465	-0,431	0,573	2,371	0,022	1,589
	M1 e P3	15,640	-0,487	-0,370	-0,007	0,825	2,506	0,022	1,591
	M2 e P3	15,240	-0,694	-0,370	-0,188	0,828	2,515	0,022	1,580
	M3 e P3	15,256	-0,625	-0,370	-0,113	0,828	2,511	0,022	1,584
	M4 e P3	14,727	-0,588	-0,369	-0,081	0,817	2,496	0,022	1,578
6	M1 e P1	15,047	-0,507	-0,465	-0,014	0,755	5,334	0,021	3,525
	M2 e P1	14,766	-0,655	-0,469	-0,135	0,758	5,353	0,021	3,512
	M3 e P1	14,766	-0,655	-0,469	-0,135	0,758	5,353	0,021	3,512
	M4 e P1	13,898	-0,345	-0,469	0,246	0,748	5,357	0,021	3,601
	M1 e P2	9,291	-1,710	-0,627	-1,166	0,468	4,950	0,021	3,399
	M2 e P2	8,982	-1,824	-0,626	-1,243	0,471	4,961	0,021	3,392
	M3 e P2	8,984	-1,823	-0,625	-1,243	0,471	4,961	0,021	3,392

Tabela 31 – Médias dos viéses relativos percentuais (VR%) e dos erros quadráticos médios (EQM) para estimativas de α, β, δ e $\mathbb{E}(Y)$ considerando $n = 15$, $\delta = 0{,}10$ ou $0{,}30$, $\alpha = 1{,}5$ ou 2 e $\xi = 0{,}5$ em função de $\mathbb{E}(Y)$, baseado em 10000 repetições, segundo descrito na seção 3.2.7, página 64

(conclusão)

		VR%				EQM			
$\mathbb{E}(Y)$	Método	$\widehat{\alpha}$	$\widehat{\beta}$	$\widehat{\delta}$	$\widehat{\mathbb{E}(Y)}$	$\widehat{\alpha}$	$\widehat{\beta}$	$\widehat{\delta}$	$\widehat{\mathbb{E}(Y)}$
	M4 e P2	7,783	-1,695	-0,675	-0,973	0,470	4,985	0,021	3,521
	M1 e P3	15,043	-0,487	-0,469	0,009	0,755	5,344	0,021	3,539
	M2 e P3	14,757	-0,658	-0,470	-0,142	0,758	5,354	0,021	3,511
	M3 e P3	14,769	-0,586	-0,470	-0,060	0,758	5,345	0,021	3,524
	M4 e P3	13,895	-0,768	-0,469	-0,238	0,748	5,345	0,021	3,490
8	M1 e P1	14,832	-0,391	0,114	-0,065	0,748	9,256	0,020	6,221
	M2 e P1	14,636	-0,497	0,110	-0,150	0,750	9,283	0,020	6,205
	M3 e P1	14,636	-0,497	0,110	-0,150	0,750	9,283	0,020	6,205
	M4 e P1	13,671	-0,214	0,109	0,233	0,745	9,296	0,020	6,373
	M1 e P2	7,128	-2,097	-0,110	-1,652	0,441	8,682	0,020	6,041
	M2 e P2	6,881	-2,182	-0,123	-1,700	0,443	8,696	0,020	6,039
	M3 e P2	6,874	-2,184	-0,123	-1,702	0,443	8,694	0,020	6,038
	M4 e P2	5,934	-1,992	-0,133	-1,364	0,450	8,767	0,020	6,248
	M1 e P3	14,826	-0,345	0,110	-0,012	0,748	9,263	0,020	6,246
	M2 e P3	14,624	-0,501	0,109	-0,155	0,750	9,282	0,020	6,204
	M3 e P3	14,632	-0,433	0,109	-0,076	0,750	9,266	0,020	6,225
	M4 e P3	13,666	-0,677	0,110	-0,300	0,745	9,284	0,020	6,160
10	M1 e P1	14,266	-0,528	-0,548	-0,041	0,729	14,452	0,020	9,800
	M2 e P1	14,111	-0,612	-0,551	-0,108	0,731	14,486	0,020	9,782
	M3 e P1	14,111	-0,612	-0,551	-0,108	0,731	14,486	0,020	9,782
	M4 e P1	12,969	-0,328	-0,553	0,306	0,727	14,524	0,020	10,081
	M1 e P2	5,885	-2,418	-0,786	-1,777	0,429	13,608	0,020	9,509
	M2 e P2	5,710	-2,473	-0,788	-1,805	0,431	13,631	0,020	9,508
	M3 e P2	5,710	-2,473	-0,786	-1,805	0,431	13,634	0,020	9,509
	M4 e P2	4,711	-2,267	-0,822	-1,431	0,441	13,700	0,020	9,842
	M1 e P3	14,260	-0,482	-0,551	0,012	0,729	14,450	0,020	9,830
	M2 e P3	14,097	-0,619	-0,554	-0,114	0,731	14,481	0,020	9,778
	M3 e P3	14,106	-0,552	-0,554	-0,035	0,731	14,456	0,020	9,813
	M4 e P3	12,963	-0,856	-0,552	-0,303	0,727	14,524	0,020	9,713

Tabela 32 – Médias dos viéses relativos percentuais (VR%) e dos erros quadráticos médios (EQM) para estimativas de α, β, δ e $\mathbb{E}(Y)$ considerando $n = 15$, $\delta = 0{,}10$ ou $0{,}30$, $\alpha = 1{,}5$ ou 2 e $\xi = 0{,}11$ em função de $\mathbb{E}(Y)$, baseado em 10000 repetições, segundo descrito na seção 3.2.7, página 64

(continua)

		VR%				EQM			
$\mathbb{E}(Y)$	Método	$\widehat{\alpha}$	$\widehat{\beta}$	$\widehat{\delta}$	$\widehat{\mathbb{E}(Y)}$	$\widehat{\alpha}$	$\widehat{\beta}$	$\widehat{\delta}$	$\widehat{\mathbb{E}(Y)}$
2	M1 e P1	14,839	-0,399	0,164	-0,082	0,750	0,581	0,020	0,393
	M2 e P1	14,665	-0,492	0,160	-0,156	0,752	0,582	0,020	0,392
	M3 e P1	14,665	-0,492	0,160	-0,156	0,752	0,582	0,020	0,392
	M4 e P1	13,569	-0,208	0,159	0,248	0,747	0,584	0,020	0,404
	M1 e P2	14,381	-0,453	0,163	-0,141	0,678	0,577	0,020	0,392
	M2 e P2	14,204	-0,540	0,159	-0,207	0,680	0,578	0,020	0,392
	M3 e P2	14,205	-0,540	0,160	-0,207	0,680	0,578	0,020	0,392
	M4 e P2	13,051	-0,267	0,161	0,187	0,669	0,579	0,020	0,403
	M1 e P3	14,837	-0,400	0,162	-0,083	0,750	0,581	0,020	0,393
	M2 e P3	14,655	-0,497	0,159	-0,161	0,752	0,582	0,020	0,392
	M3 e P3	14,665	-0,537	0,159	-0,207	0,752	0,583	0,020	0,392
	M4 e P3	13,569	-0,225	0,159	0,229	0,747	0,583	0,020	0,403
4	M1 e P1	14,153	-0,347	-1,088	0,303	0,707	2,236	0,020	1,568
	M2 e P1	14,077	-0,389	-1,095	0,273	0,708	2,239	0,020	1,567
	M3 e P1	14,077	-0,389	-1,095	0,273	0,708	2,239	0,020	1,567
	M4 e P1	12,724	-0,102	-1,095	0,756	0,708	2,250	0,020	1,628
	M1 e P2	11,442	-0,832	-1,088	-0,206	0,502	2,139	0,020	1,536
	M2 e P2	11,371	-0,865	-1,093	-0,227	0,503	2,142	0,020	1,534
	M3 e P2	11,366	-0,865	-1,093	-0,227	0,502	2,142	0,020	1,535
	M4 e P2	9,657	-0,745	-1,098	0,108	0,499	2,118	0,020	1,592
	M1 e P3	14,151	-0,351	-1,090	0,299	0,707	2,236	0,020	1,568
	M2 e P3	14,067	-0,392	-1,095	0,270	0,708	2,239	0,020	1,567
	M3 e P3	14,075	-0,403	-1,095	0,256	0,708	2,241	0,020	1,567
	M4 e P3	12,728	-0,198	-1,094	0,641	0,708	2,242	0,020	1,607
6	M1 e P1	14,506	-0,256	0,134	0,085	0,715	5,051	0,020	3,547
	M2 e P1	14,461	-0,281	0,127	0,069	0,716	5,056	0,020	3,546
	M3 e P1	14,461	-0,281	0,127	0,069	0,716	5,056	0,020	3,546
	M4 e P1	13,088	-0,003	0,126	0,562	0,717	5,081	0,020	3,695
	M1 e P2	8,959	-1,453	0,132	-1,103	0,441	4,685	0,020	3,412
	M2 e P2	8,922	-1,472	0,127	-1,113	0,441	4,692	0,020	3,411
	M3 e P2	8,919	-1,472	0,126	-1,113	0,441	4,691	0,020	3,411
	M4 e P2	7,201	-1,384	0,129	-0,755	0,449	4,732	0,020	3,603

Tabela 32 – Médias dos viéses relativos percentuais (VR%) e dos erros quadráticos médios (EQM) para estimativas de α, β, δ e $\mathbb{E}(Y)$ considerando $n = 15$, $\delta = 0{,}10$ ou $0{,}30$, $\alpha = 1{,}5$ ou 2 e $\xi = 0{,}11$ em função de $\mathbb{E}(Y)$, baseado em 10000 repetições, segundo descrito na seção 3.2.7, página 64

(conclusão)

		VR%				EQM			
$\mathbb{E}(Y)$	Método	$\widehat{\alpha}$	$\widehat{\beta}$	$\widehat{\delta}$	$\widehat{\mathbb{E}(Y)}$	$\widehat{\alpha}$	$\widehat{\beta}$	$\widehat{\delta}$	$\widehat{\mathbb{E}(Y)}$
	M1 e P3	14,502	-0,256	0,132	0,085	0,715	5,051	0,020	3,548
	M2 e P3	14,450	-0,284	0,126	0,066	0,716	5,056	0,020	3,546
	M3 e P3	14,456	-0,285	0,126	0,064	0,716	5,057	0,020	3,546
	M4 e P3	13,096	-0,143	0,126	0,390	0,717	5,062	0,020	3,623
8	M1 e P1	14,567	-0,300	-0,276	0,107	0,724	8,975	0,020	6,295
	M2 e P1	14,535	-0,316	-0,284	0,096	0,725	8,981	0,020	6,294
	M3 e P1	14,535	-0,316	-0,284	0,096	0,725	8,981	0,020	6,294
	M4 e P1	13,115	-0,031	-0,285	0,621	0,727	9,034	0,020	6,582
	M1 e P2	6,956	-2,017	-0,266	-1,545	0,424	8,413	0,020	6,089
	M2 e P2	6,967	-2,017	-0,280	-1,540	0,425	8,423	0,020	6,091
	M3 e P2	6,971	-2,017	-0,281	-1,540	0,425	8,422	0,020	6,091
	M4 e P2	5,536	-1,842	-0,254	-1,086	0,437	8,542	0,020	6,434
	M1 e P3	14,561	-0,299	-0,278	0,109	0,724	8,973	0,020	6,296
	M2 e P3	14,525	-0,321	-0,285	0,093	0,725	8,980	0,020	6,293
	M3 e P3	14,530	-0,320	-0,285	0,094	0,725	8,980	0,020	6,294
	M4 e P3	13,119	-0,230	-0,285	0,377	0,727	8,999	0,020	6,411
10	M1 e P1	14,545	-0,296	-0,005	0,040	0,732	13,839	0,020	9,684
	M2 e P1	14,522	-0,310	-0,013	0,032	0,733	13,846	0,020	9,683
	M3 e P1	14,522	-0,310	-0,013	0,032	0,733	13,846	0,020	9,683
	M4 e P1	13,088	-0,028	-0,015	0,560	0,736	13,934	0,020	10,158
	M1 e P2	6,066	-2,239	-0,006	-1,791	0,425	13,026	0,020	9,385
	M2 e P2	6,071	-2,238	-0,017	-1,787	0,425	13,029	0,020	9,385
	M3 e P2	6,068	-2,238	-0,018	-1,785	0,425	13,025	0,020	9,384
	M4 e P2	4,770	-2,037	-0,008	-1,308	0,440	13,171	0,020	9,913
	M1 e P3	14,539	-0,296	-0,006	0,042	0,732	13,834	0,020	9,685
	M2 e P3	14,512	-0,316	-0,015	0,027	0,732	13,843	0,020	9,680
	M3 e P3	14,516	-0,314	-0,015	0,029	0,732	13,842	0,020	9,681
	M4 e P3	13,094	-0,249	-0,015	0,285	0,736	13,895	0,020	9,859

Tabela 33 – Médias dos viéses relativos percentuais (VR%) de δ, em função de n, ξ e δ, considerando-se 4000 amostras de tamanho n e $\mathbb{E}(Y) = \{1, 3, \ldots, 35\}$ para o modelo MW

			δ							
α	ξ	n	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45
1,50	0,11	15	-0,541	-0,359	-0,162	-0,053	-0,233	-0,207	-0,183	-0,160
		30	-0,255	-0,383	-0,310	-0,093	-0,205	0,041	-0,026	0,044
		50	-0,226	-0,080	0,058	-0,004	-0,092	-0,126	0,001	-0,025
		100	-0,044	-0,075	-0,066	-0,042	-0,004	-0,004	0,042	0,077
	0,50	15	2,102	-0,116	-0,695	-0,862	-0,876	-0,823	-0,783	-0,627
		30	0,608	-0,221	-0,629	-0,631	-0,555	-0,485	-0,325	-0,171
		50	-0,019	-0,396	-0,265	-0,378	-0,224	-0,368	-0,202	-0,216
		100	-0,002	-0,147	-0,202	-0,123	-0,126	-0,056	-0,094	-0,057
2,00	0,11	15	0,116	0,101	-0,011	-0,249	-0,194	-0,034	-0,061	-0,145
		30	0,070	-0,140	-0,028	-0,038	0,131	0,056	-0,021	-0,008
		50	-0,123	0,073	0,005	-0,087	0,103	-0,073	0,018	-0,069
		100	0,055	0,033	-0,132	-0,072	0,018	-0,022	-0,068	0,076
	0,50	15	0,681	-0,320	-0,534	-0,687	-0,270	-0,368	-0,339	-0,411
		30	0,291	-0,469	-0,468	-0,328	-0,060	-0,146	-0,073	-0,064
		50	-0,273	-0,242	-0,255	-0,153	-0,130	-0,141	-0,031	-0,015
		100	-0,081	0,022	-0,218	-0,167	-0,016	0,036	-0,048	-0,099

Tabela 34 – Médias dos viéses relativos percentuais (VR%) de α, em função de n, ξ e δ, considerando-se 4000 amostras de tamanho n e $\mathbb{E}(Y) = \{1, 3, \ldots, 35\}$ para o modelo MW

			δ							
α	ξ	n	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45
1,50	0,11	15	3,779	4,815	5,507	6,204	6,633	7,110	7,750	8,863
		30	2,483	2,691	2,704	2,869	2,855	2,886	2,804	2,969
		50	1,386	1,554	1,867	1,986	2,085	2,065	2,004	1,840
		100	0,820	0,832	0,890	0,745	0,572	0,456	0,369	0,286
	0,50	15	5,388	6,149	6,347	6,845	7,166	7,835	8,556	9,346
		30	3,270	3,322	3,202	3,421	3,211	3,218	3,293	3,224
		50	1,955	2,156	2,296	2,297	2,298	2,259	2,094	1,828
		100	1,363	1,418	1,432	1,277	1,174	0,991	0,853	0,746
2,00	0,11	15	0,916	1,711	2,023	2,451	2,689	3,146	3,693	4,719
		30	-0,158	-0,242	-0,149	-0,136	-0,119	-0,182	-0,294	-0,146
		50	-0,414	-0,354	-0,371	-0,351	-0,502	-0,608	-0,946	-1,047
		100	-0,658	-0,751	-0,765	-0,872	-0,932	-1,090	-1,139	-1,250
	0,50	15	1,800	2,052	2,470	2,566	3,067	3,553	3,895	4,784
		30	0,196	0,138	0,098	0,053	0,004	0,065	0,033	0,118
		50	-0,110	-0,187	-0,207	-0,317	-0,495	-0,635	-0,820	-1,049
		100	-0,238	-0,409	-0,570	-0,648	-0,718	-0,819	-0,956	-1,031

Tabela 35 – Médias dos viéses relativos percentuais (VR%) de β, em função de n, ξ e δ, considerando-se 4000 amostras de tamanho n e $\mathbb{E}(Y) = \{1, 3, \ldots, 35\}$ para o modelo MW

			δ							
α	ξ	n	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45
1,50	0,11	15	-1,391	-2,108	-2,474	-2,800	-3,024	-3,309	-3,659	-4,155
		30	-0,916	-1,160	-1,369	-1,384	-1,618	-1,797	-2,073	-2,359
		50	-0,747	-0,761	-0,768	-0,717	-0,853	-0,907	-1,070	-1,300
		100	-0,311	-0,380	-0,413	-0,505	-0,598	-0,706	-0,814	-0,955
	0,50	15	-1,421	-2,101	-2,710	-2,824	-3,347	-3,424	-3,804	-4,317
		30	-0,931	-1,101	-1,287	-1,427	-1,606	-1,947	-2,153	-2,391
		50	-0,644	-0,649	-0,628	-0,711	-0,807	-1,052	-1,101	-1,419
		100	-0,145	-0,151	-0,186	-0,313	-0,402	-0,562	-0,627	-0,819
2,00	0,11	15	-2,065	-2,718	-3,115	-3,400	-3,739	-4,046	-4,374	-4,803
		30	-1,659	-1,897	-2,033	-2,176	-2,344	-2,539	-2,718	-2,952
		50	-1,174	-1,228	-1,275	-1,359	-1,434	-1,606	-1,804	-2,016
		100	-0,740	-0,806	-0,862	-0,924	-0,989	-1,075	-1,151	-1,248
	0,50	15	-2,227	-2,888	-3,179	-3,526	-3,965	-4,101	-4,465	-4,817
		30	-1,697	-1,901	-2,062	-2,118	-2,339	-2,463	-2,643	-2,907
		50	-1,189	-1,265	-1,285	-1,374	-1,543	-1,626	-1,863	-2,041
		100	-0,628	-0,722	-0,803	-0,858	-0,947	-1,019	-1,123	-1,197

Tabela 36 – Médias dos viéses relativos percentuais (VR%) de $\mathbb{E}(Y)$, em função de n, ξ e δ, considerando-se 4000 amostras de tamanho n e $\mathbb{E}(Y) = \{1, 3, \ldots, 35\}$ para o modelo MW

			δ							
α	ξ	n	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45
1,50	0,11	15	-0,104	-1,092	-1,581	-1,964	-2,046	-2,227	-2,436	-2,776
		30	-0,537	-0,763	-0,935	-0,967	-1,072	-1,290	-1,428	-1,688
		50	-0,498	-0,534	-0,586	-0,504	-0,580	-0,574	-0,746	-0,885
		100	-0,214	-0,266	-0,289	-0,346	-0,410	-0,479	-0,577	-0,709
	0,50	15	-0,754	-1,331	-1,802	-1,804	-2,182	-2,119	-2,304	-2,722
		30	-0,747	-0,818	-0,839	-0,914	-0,983	-1,215	-1,393	-1,567
		50	-0,493	-0,444	-0,434	-0,421	-0,512	-0,615	-0,660	-0,842
		100	-0,123	-0,101	-0,098	-0,200	-0,242	-0,382	-0,368	-0,527
2,00	0,11	15	-1,175	-1,922	-2,306	-2,482	-2,782	-3,075	-3,262	-3,466
		30	-1,278	-1,478	-1,612	-1,720	-1,905	-2,033	-2,105	-2,276
		50	-0,926	-1,004	-1,026	-1,071	-1,193	-1,245	-1,451	-1,540
		100	-0,614	-0,670	-0,682	-0,737	-0,818	-0,868	-0,893	-1,072
	0,50	15	-1,480	-2,062	-2,283	-2,500	-3,010	-2,977	-3,199	-3,339
		30	-1,369	-1,455	-1,559	-1,592	-1,851	-1,871	-2,022	-2,218
		50	-0,942	-0,999	-0,987	-1,069	-1,199	-1,233	-1,473	-1,605
		100	-0,509	-0,602	-0,612	-0,650	-0,772	-0,851	-0,883	-0,884

Tabela 37 – Médias dos erros quadráticos médios (EQM) de δ, em função de n, ξ e δ, considerando-se 4000 amostras de tamanho n e $\mathbb{E}(Y) = \{1, 3, \ldots, 35\}$ para o modelo MW

			δ							
α	ξ	n	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45
1,50	0,11	15	0,006	0,009	0,011	0,013	0,014	0,015	0,016	0,016
		30	0,003	0,004	0,005	0,006	0,007	0,008	0,008	0,008
		50	0,002	0,003	0,003	0,004	0,004	0,005	0,005	0,005
		100	0,001	0,001	0,002	0,002	0,002	0,002	0,002	0,003
	0,50	15	0,007	0,010	0,012	0,014	0,015	0,016	0,017	0,017
		30	0,004	0,005	0,006	0,007	0,008	0,008	0,009	0,009
		50	0,002	0,003	0,004	0,004	0,005	0,005	0,005	0,005
		100	0,001	0,002	0,002	0,002	0,002	0,002	0,003	0,003
2,00	0,11	15	0,006	0,009	0,011	0,013	0,014	0,015	0,016	0,016
		30	0,003	0,004	0,005	0,006	0,007	0,008	0,008	0,008
		50	0,002	0,003	0,003	0,004	0,004	0,005	0,005	0,005
		100	0,001	0,001	0,002	0,002	0,002	0,002	0,002	0,003
	0,50	15	0,006	0,009	0,011	0,013	0,015	0,016	0,016	0,017
		30	0,003	0,005	0,006	0,007	0,007	0,008	0,008	0,008
		50	0,002	0,003	0,003	0,004	0,004	0,005	0,005	0,005
		100	0,001	0,001	0,002	0,002	0,002	0,002	0,002	0,003

Tabela 38 – Médias dos erros quadráticos médios (EQM) de α, em função de n, ξ e δ, considerando-se 4000 amostras de tamanho n e $\mathbb{E}(Y) = \{1, 3, \ldots, 35\}$ para o modelo MW

			δ							
α	ξ	n	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45
1,50	0,11	15	0,145	0,151	0,162	0,184	0,202	0,261	0,298	0,366
		30	0,060	0,063	0,067	0,072	0,078	0,086	0,094	0,108
		50	0,035	0,037	0,039	0,042	0,045	0,048	0,052	0,056
		100	0,017	0,018	0,019	0,020	0,022	0,024	0,027	0,029
	0,50	15	0,184	0,196	0,206	0,221	0,370	0,277	0,335	0,470
		30	0,075	0,078	0,081	0,087	0,092	0,099	0,108	0,120
		50	0,043	0,046	0,047	0,050	0,052	0,055	0,059	0,063
		100	0,021	0,022	0,023	0,024	0,026	0,027	0,030	0,032
2,00	0,11	15	0,258	0,273	0,295	0,329	0,359	0,422	0,531	0,671
		30	0,116	0,122	0,131	0,141	0,154	0,168	0,183	0,207
		50	0,069	0,072	0,075	0,079	0,085	0,093	0,103	0,117
		100	0,036	0,038	0,040	0,043	0,047	0,051	0,056	0,062
	0,50	15	0,279	0,286	0,312	0,338	0,376	0,445	0,557	0,693
		30	0,123	0,130	0,137	0,147	0,158	0,171	0,188	0,210
		50	0,074	0,076	0,079	0,084	0,091	0,098	0,109	0,119
		100	0,037	0,039	0,042	0,045	0,048	0,052	0,056	0,062

Tabela 39 – Médias dos erros quadráticos médios (EQM) de β, em função de n, ξ e δ, considerando-se 4000 amostras de tamanho n e $\mathbb{E}(Y) = \{1, 3, \ldots, 35\}$ para o modelo MW

			δ							
α	ξ	n	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45
1,50	0,11	15	22,827	27,032	31,582	39,071	47,885	59,628	75,790	98,6365
		30	11,583	13,625	16,379	19,781	24,109	30,318	39,181	50,9269
		50	7,069	8,325	9,888	12,096	14,769	18,590	23,628	30,6710
		100	3,561	4,188	5,078	6,244	7,685	9,756	12,300	16,2945
	0,50	15	23,144	27,049	32,316	38,842	48,094	60,606	77,250	101,1287
		30	11,608	13,806	16,452	20,156	24,500	30,715	39,576	51,5271
		50	7,199	8,492	10,114	12,184	15,004	18,752	24,110	31,2209
		100	3,610	4,305	5,127	6,279	7,677	9,621	12,289	16,0389
2,00	0,11	15	14,478	17,130	20,439	24,599	30,450	38,036	48,854	64,4163
		30	7,358	8,780	10,508	12,693	15,926	19,828	25,167	32,6412
		50	4,519	5,342	6,299	7,592	9,402	11,776	15,077	19,7566
		100	2,292	2,729	3,282	4,024	4,927	6,229	7,836	10,3708
	0,50	15	14,014	16,190	19,157	23,182	28,289	35,330	45,224	59,6517
		30	7,001	8,284	9,967	12,128	14,840	18,666	23,604	30,7097
		50	4,357	5,146	6,059	7,340	9,094	11,365	14,428	18,9471
		100	2,203	2,615	3,139	3,854	4,764	5,956	7,591	9,8227

Tabela 40 – Médias dos erros quadráticos médios (EQM) de $\mathbb{E}(Y)$, em função de n, ξ e δ, considerando-se 4000 amostras de tamanho n e $\mathbb{E}(Y) = \{1, 3, \ldots, 35\}$ para o modelo MW

			δ							
α	ξ	n	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45
1,50	0,11	15	20,024	21,376	23,309	26,244	29,597	34,000	38,929	44,522
		30	8,999	10,129	11,570	13,246	15,041	17,304	20,148	22,780
		50	5,306	6,000	6,854	7,934	9,104	10,565	12,155	13,921
		100	2,658	3,041	3,510	4,122	4,661	5,390	6,157	7,088
	0,50	15	19,326	20,907	23,324	26,122	29,606	33,982	39,041	44,383
		30	8,830	10,060	11,544	13,296	15,122	17,448	19,972	23,089
		50	5,317	6,098	6,900	7,991	9,248	10,555	12,202	14,022
		100	2,660	3,100	3,535	4,075	4,656	5,342	6,123	7,027
2,00	0,11	15	13,472	15,127	17,138	19,646	22,834	26,402	30,802	36,050
		30	6,251	7,254	8,476	9,927	11,862	13,531	15,944	18,475
		50	3,713	4,365	5,121	5,964	7,030	8,276	9,587	11,326
		100	1,867	2,231	2,598	3,085	3,611	4,202	4,883	5,766
	0,50	15	13,124	14,713	16,641	19,295	22,309	26,015	30,553	35,189
		30	6,008	7,023	8,358	9,796	11,436	13,422	15,622	18,238
		50	3,614	4,285	5,036	5,923	6,968	8,150	9,594	11,229
		100	1,823	2,182	2,595	3,089	3,574	4,158	4,869	5,678

Anexo E Gráficos de monitoramento das simulações do modelo MW

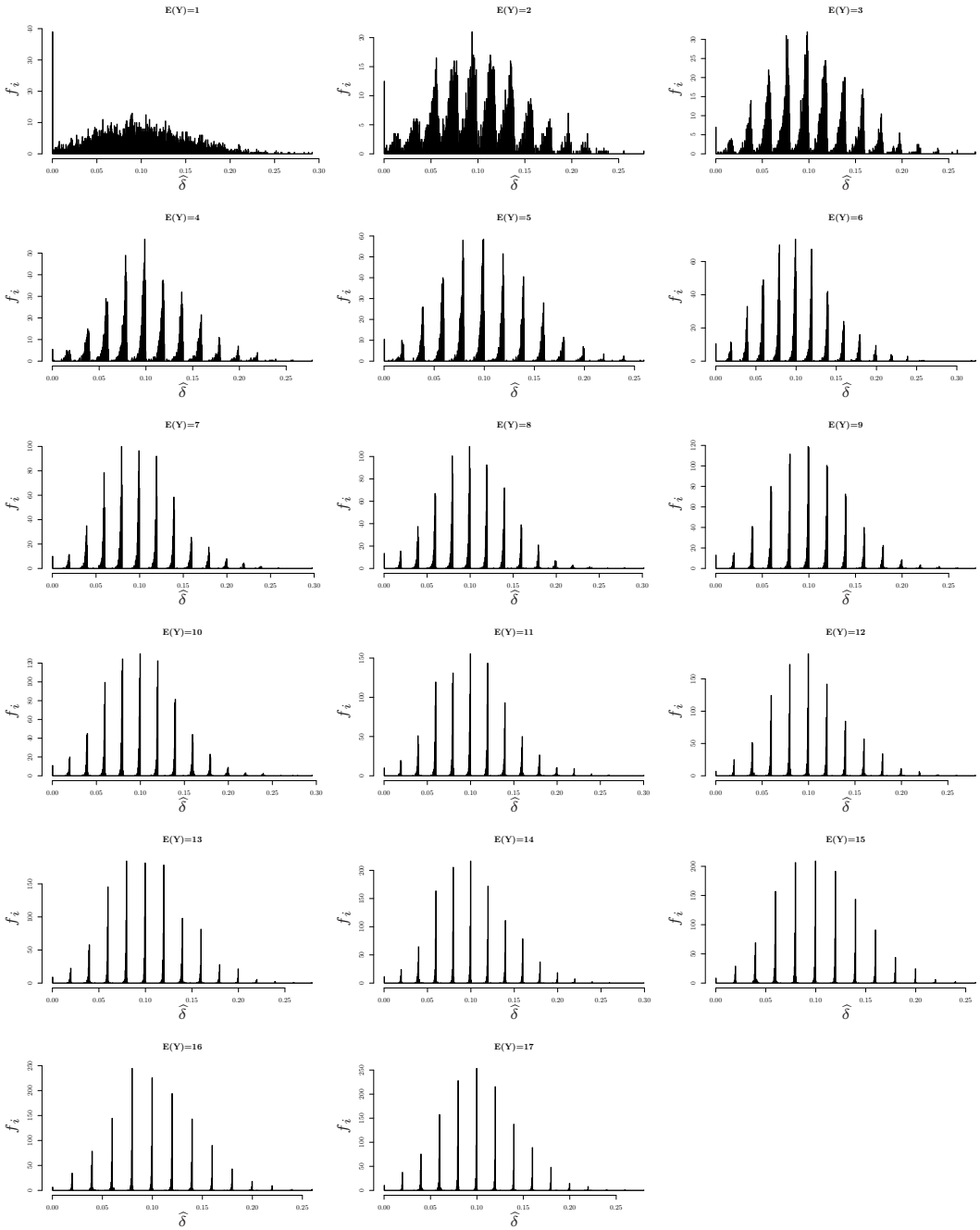


Figura 37 – Histogramas para 4000 estimativas de δ provenientes de simulações com $n = 15$ considerando os parâmetros $\delta = 0{,}1$, $\alpha = 1{,}5$ e $\xi = 0{,}5$ segundo a esperança $\mathbb{E}(Y) = \{1, 2, \ldots, 17\}$

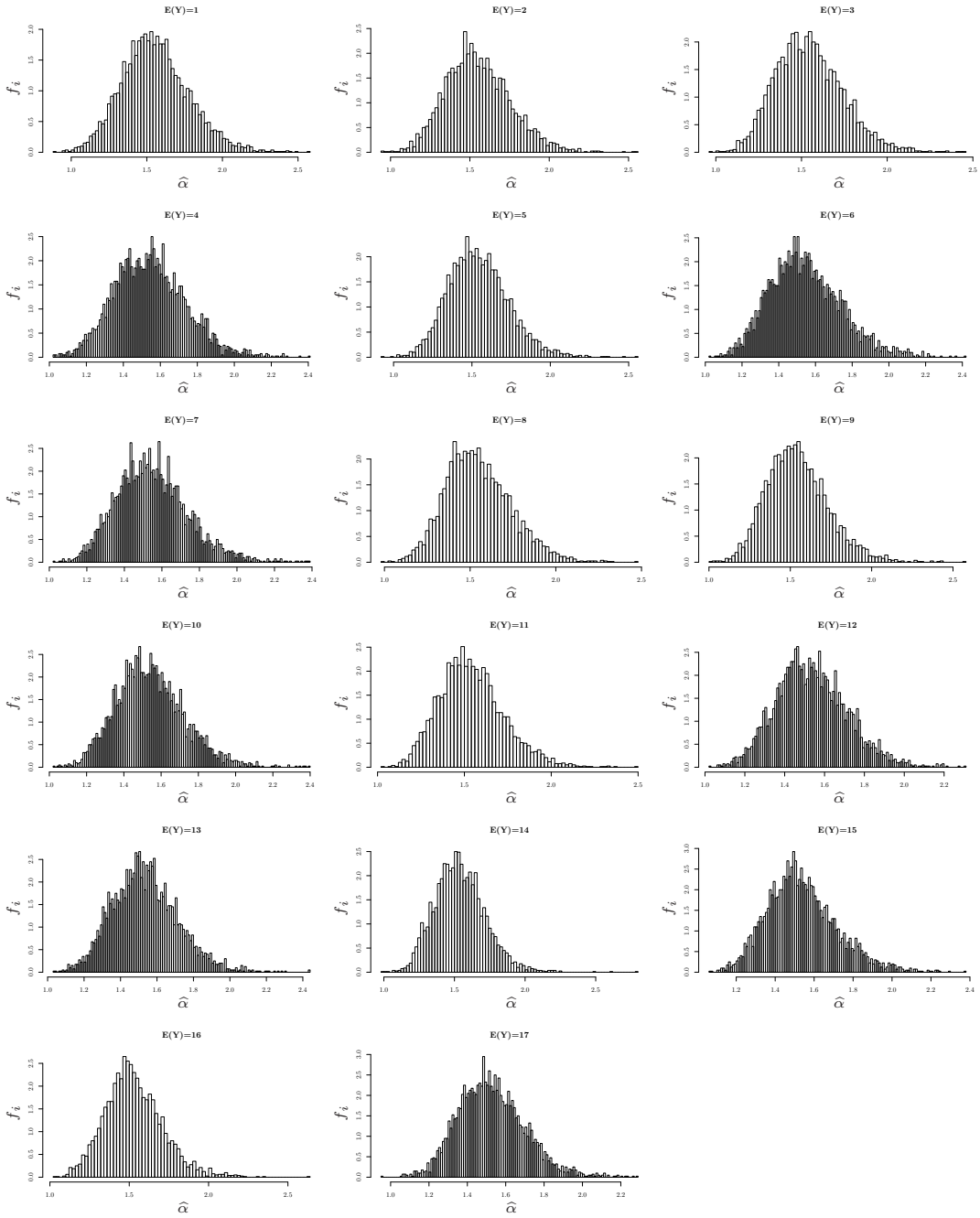


Figura 38 – Histogramas para 4000 estimativas de α provenientes de simulações com $n = 15$ considerando os parâmetros $\delta = 0{,}1$, $\alpha = 1{,}5$ e $\xi = 0{,}5$ segundo a esperança $\mathbb{E}(Y) = \{1, 2, \ldots, 17\}$

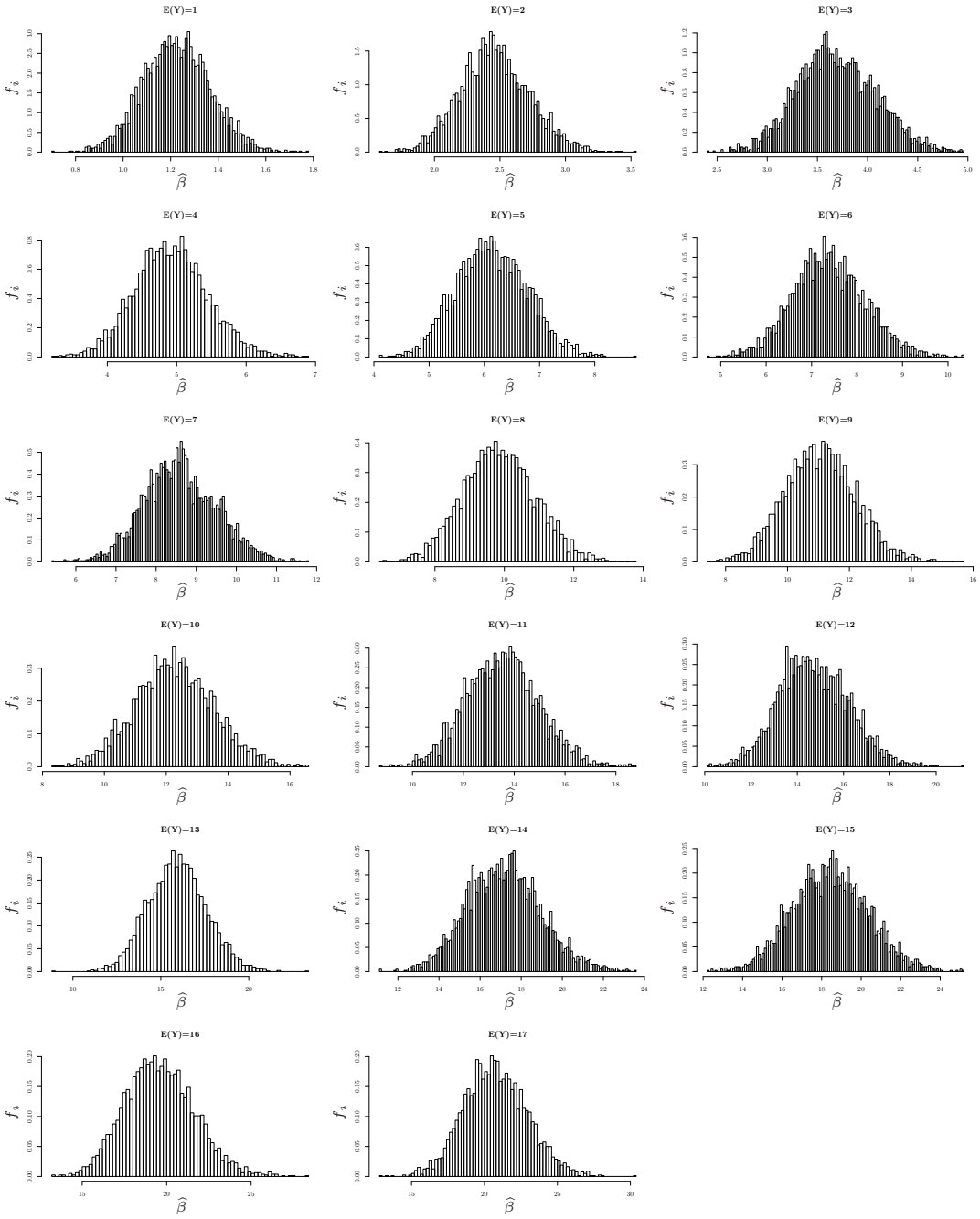


Figura 39 – Histogramas para 4000 estimativas de β provenientes de simulações com $n = 15$ considerando os parâmetros $\delta = 0{,}1$, $\alpha = 1{,}5$ e $\xi = 0{,}5$ segundo a esperança $\mathbb{E}(Y) = \{1, 2, \ldots, 17\}$

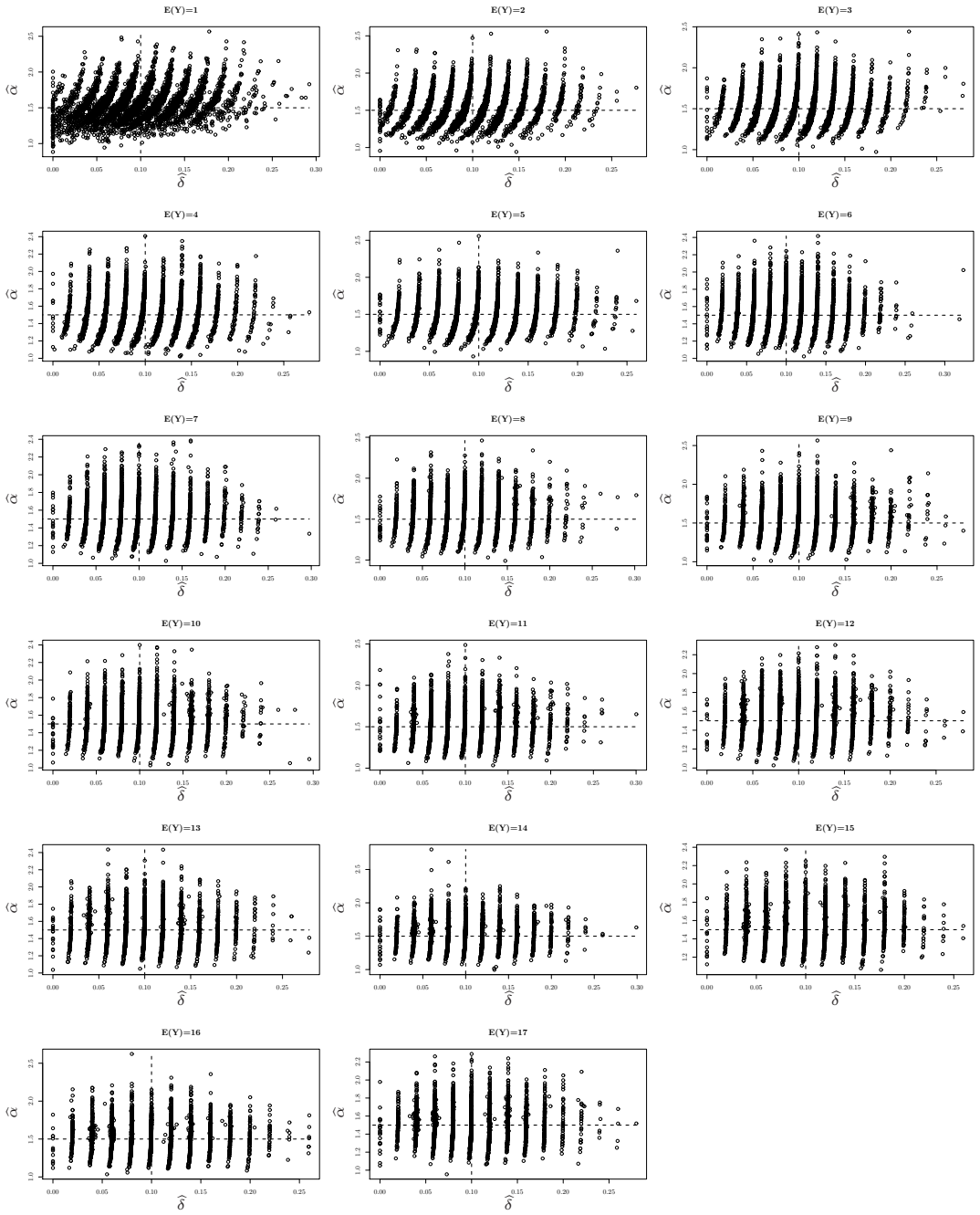


Figura 40 – Gráficos de 4000 estimativas de (δ, α) provenientes de simulações com $n = 15$ considerando os parâmetros $\delta = 0{,}1$, $\alpha = 1{,}5$, representados por (- - - -), e $\xi = 0{,}5$ segundo a esperança $\mathbb{E}(Y) = \{1, 2, \ldots, 17\}$

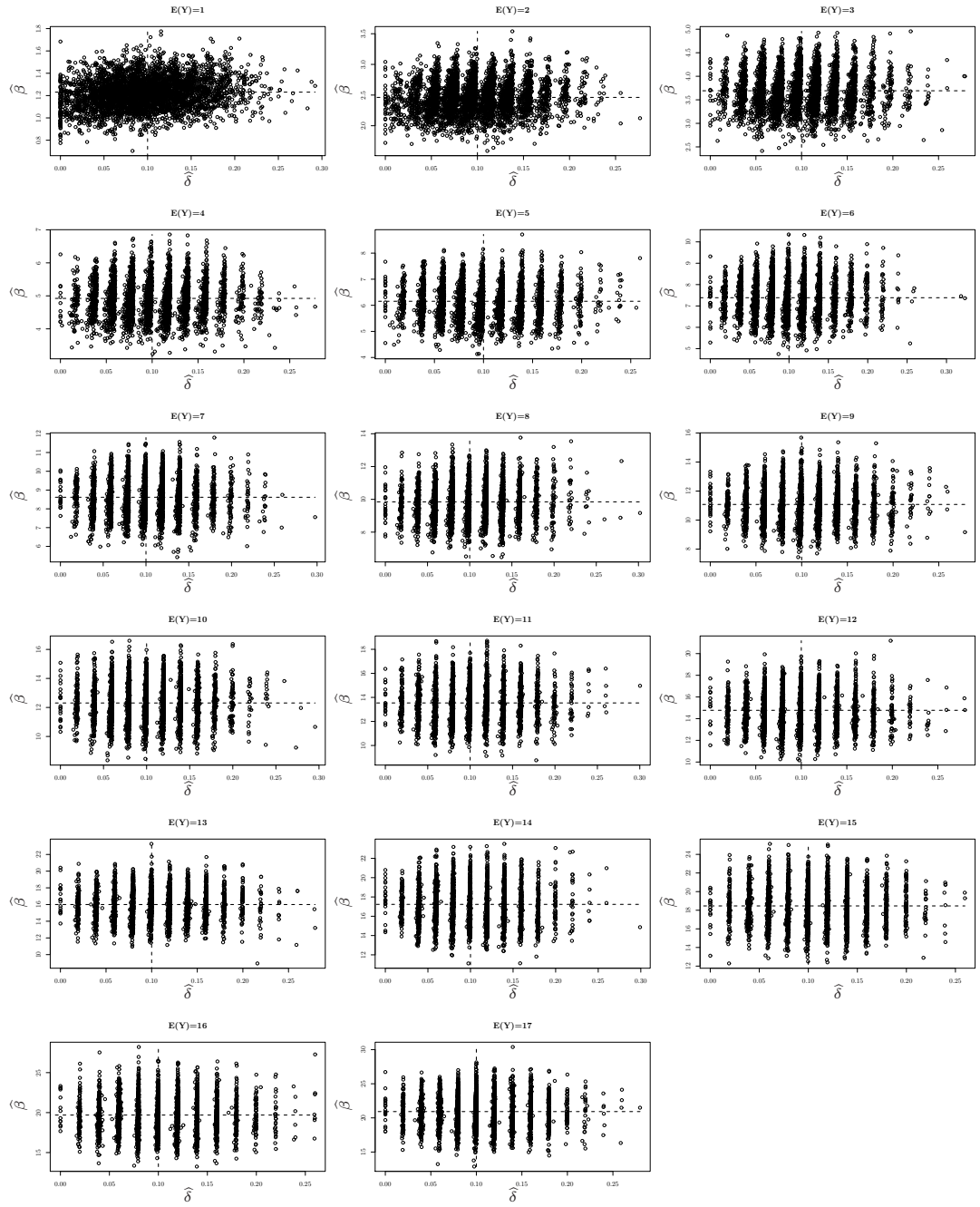


Figura 41 – Gráficos de 4000 estimativas de (δ, β) provenientes de simulações com $n = 15$ considerando os parâmetros $\delta = 0{,}1$, $\alpha = 1{,}5$, representados por (- - - -), e $\xi = 0{,}5$ segundo a esperança $\mathbb{E}(Y) = \{1, 2, \ldots, 17\}$

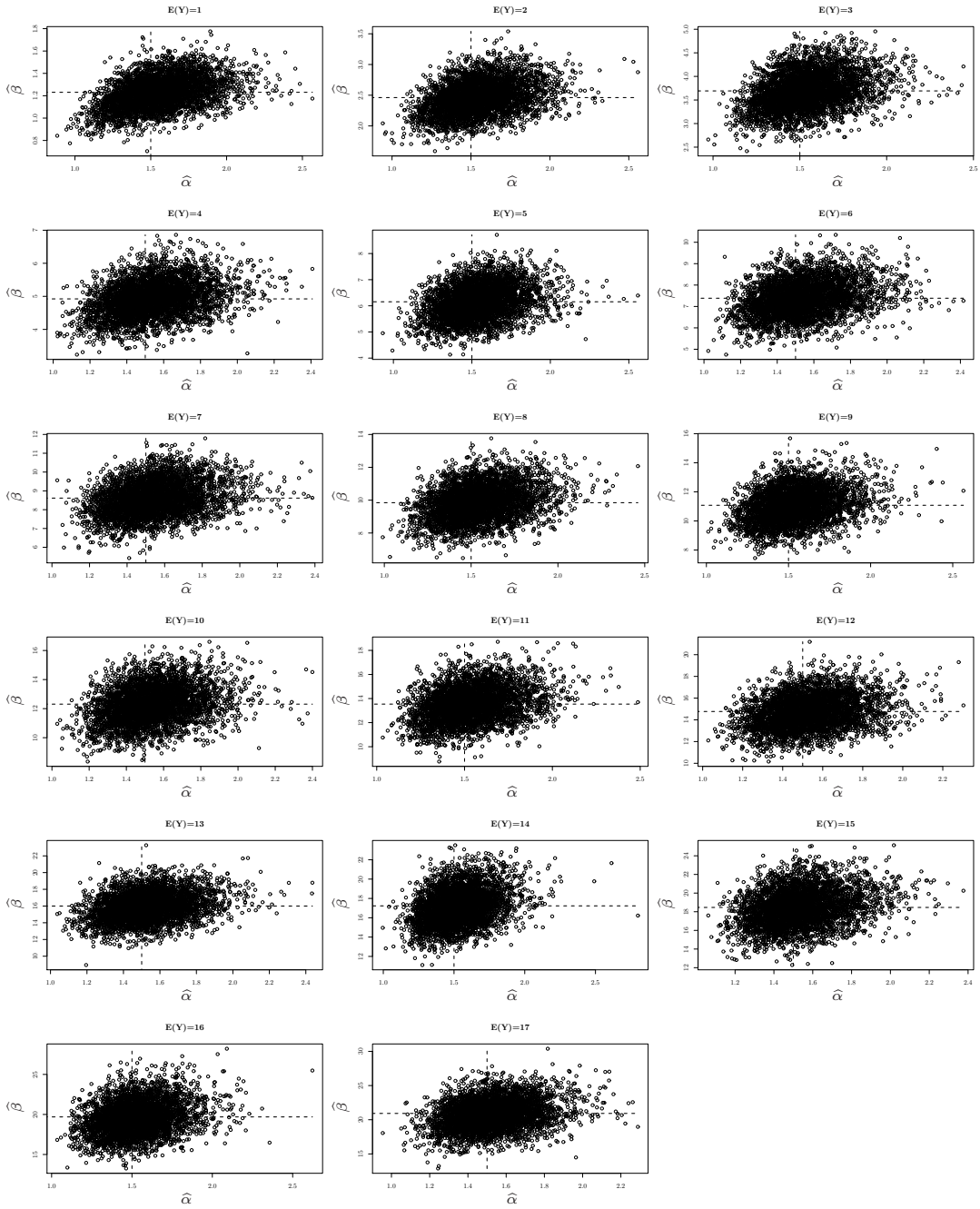


Figura 42 – Gráficos de 4000 estimativas de (α, β) provenientes de simulações com $n = 15$ considerando os parâmetros $\delta = 0{,}1$, $\alpha = 1{,}5$, representados por (- - - -), e $\xi = 0{,}5$ segundo a esperança $\mathbb{E}(Y) = \{1, 2, \ldots, 17\}$

Anexo F Resultados complementares do modelo MG

Tabela 41 – Médias dos viéses relativos percentuais (VR%) e dos erros quadráticos médios (EQM) para estimativas dos parâmetros do modelo MG (61) pelos procedimentos propostos na seção 3.2.8, em função de ξ e de três composições amostrais Y_T, Y_I e Y_2, resultantes de 40 combinações das coordenadas dos vetores $\delta = (0{,}10; 0{,}30)$, $\alpha = (1{,}5; 2)$ e $\mathbb{E}(Y) = (2; 4; 6; 8; 10)$, considerando $n = (15; 50)$ e 10000 repetições

			VR%			EQM		
ξ	Y	Método	$\widehat{\alpha}$	$\widehat{\beta}$	$\widehat{\delta}$	$\widehat{\alpha}$	$\widehat{\beta}$	$\widehat{\delta}$
0,11	Y_T	MM	-12,4768	38,7306	-10,4876	0,0107	0,0254	0,0108
		NM	-0,6981	-1,1620	-29,6386	0,0133	0,0133	0,0114
		MIS	0,1040	-0,4426	-43,3397	0,0132	0,0133	0,0317
		EMV	-45,8004	0,5033	-0,8754	0,0319	0,0132	0,0133
	Y_I	MM	-0,8472	-0,8472	-0,9913	0,0138	0,0138	0,0139
		NM	-29,9940	-32,5217	1,7576	0,8618	0,9069	0,0132
		MIS	-53,9376	21,3852	85,1469	1,3267	7,4578	9,0318
		EMV	90,0935	21,9026	18,1045	21,7338	13,4751	7,4007
	Y_2	MM	19,9885	90,5270	23,2898	7,4999	21,8150	7,5614
		NM	31,1575	38,3970	25,4636	15,2159	21,6264	13,5952
		MIS	105,9598	-3,5629	-22,6013	63,7753	9,3331	10,9175
		EMV	-23,3037	-7,0372	0,2825	10,9593	6,1193	11,9504
		n_0/n			-9,2783			5,9403
0,5	Y_T	MM	-31,9926	27,4592	-28,6139	0,0148	0,0222	0,0138
		NM	5,6024	4,4843	-42,0372	0,0155	0,0156	0,0149
		MIS	9,6665	11,1054	-53,1340	0,0152	0,0155	0,0329
		EMV	-64,3888	14,6083	10,2990	0,0354	0,0154	0,0156
	Y_I	MM	10,0577	10,0577	4,5691	0,0168	0,0168	0,0169
		NM	-27,8000	-30,3278	18,1122	0,8235	0,8651	0,0155
		MIS	-40,7290	30,6820	73,1905	0,9234	2,9173	7,0419
		EMV	93,6379	37,6549	27,3004	11,2941	3,1197	2,8403
	Y_2	MM	49,9282	111,2896	53,5414	126,7930	498,1116	126,9629
		NM	27,6554	34,3378	70,5300	14,6488	20,5691	489,2168
		MIS	54,1137	-7,1896	-20,5431	25,8365	9,3326	10,8057
		EMV	-23,9141	-15,1860	-3,5988	10,9726	5,6942	11,8699
		n_0/n			-23,9969			5,5841

Tabela 42 – Médias dos viéses relativos percentuais (VR%) e dos erros quadráticos médios (EQM) para estimativas dos parâmetros do modelo MG (61) pelos procedimentos propostos na seção 3.2.8, em função de δ e de três composições amostrais Y_T, Y_I e Y_2, resultantes de 40 combinações das coordenadas dos vetores $\xi = (0{,}11; 0{,}50)$, $\alpha = (1{,}5; 2)$ e $\mathbb{E}(Y) = (2; 4; 6; 8; 10)$, considerando $n = (15; 50)$ e 10000 repetições

			VR%			EQM		
δ	Y	Método	$\widehat{\alpha}$	$\widehat{\beta}$	$\widehat{\delta}$	$\widehat{\alpha}$	$\widehat{\beta}$	$\widehat{\delta}$
0,1	Y_T	MM	-20,2783	57,2525	-17,7767	0,0067	0,0201	0,0067
		NM	4,6517	3,5400	-35,4336	0,0094	0,0094	0,0048
		MIS	8,5379	9,4862	-24,8632	0,0094	0,0096	0,0087
		EMV	-35,4817	13,0043	8,6245	0,0083	0,0097	0,0096
	Y_I	MM	8,3414	8,3414	4,1584	0,0102	0,0102	0,0099
		NM	-11,3615	-13,8893	16,7905	0,7382	0,7537	0,0099
		MIS	-31,5622	23,7275	74,1334	0,8701	1,8289	6,9968
		EMV	80,9029	27,5556	20,8358	8,0841	1,6874	1,7806
	Y_2	MM	34,3784	90,2805	37,4033	3,5209	10,7774	3,6062
		NM	13,6150	17,9900	47,1931	7,1634	9,0734	4,2543
		MIS	48,7738	-5,3513	-20,1723	15,7510	6,0735	7,9093
		EMV	-21,3935	-11,2272	-2,2421	7,9398	3,7514	7,3071
		n_0/n			-17,2996			3,7052
0,3	Y_T	MM	-24,1911	8,9373	-21,3247	0,0188	0,0275	0,0178
		NM	0,2526	-0,2176	-36,2423	0,0194	0,0195	0,0215
		MIS	1,2326	1,1766	-71,6105	0,0190	0,0192	0,0559
		EMV	-74,7075	2,1073	0,7992	0,0590	0,0189	0,0193
	Y_I	MM	0,8691	0,8691	-0,5805	0,0204	0,0204	0,0208
		NM	-46,4324	-48,9602	3,0793	0,9472	1,0183	0,0188
		MIS	-63,1044	28,3397	84,2040	1,3800	8,5462	9,0769
		EMV	102,8286	32,0020	24,5690	24,9438	14,9074	8,4603
	Y_2	MM	35,5383	111,5361	39,4279	130,7720	509,1492	130,9181
		NM	45,1979	54,7449	48,8005	22,7013	33,1222	498,5577
		MIS	111,2996	-5,4012	-22,9721	73,8608	12,5922	13,8139
		EMV	-25,8243	-10,9960	-1,0742	13,9921	8,0621	16,5131
		n_0/n			-15,9755			7,8192

Tabela 43 – Médias dos viéses relativos percentuais (VR%) de δ, em função de n, ξ e δ, considerando-se 4000 amostras de tamanho n e $\mathbb{E}(Y) = \{1, 3, \ldots, 35\}$ para o modelo MG

			δ							
α	ξ	n	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45
1,50	0,11	15	-1,105	-0,853	-0,951	-0,776	-0,817	-0,524	-0,761	-1,014
		30	-0,729	-0,719	-0,418	-0,245	-0,229	-0,479	-0,169	-0,168
		50	-0,686	-0,295	-0,210	-0,270	-0,177	-0,187	-0,137	-0,091
		100	-0,301	-0,138	-0,162	-0,106	-0,107	-0,028	-0,009	-0,032
	0,50	15	0,879	-1,635	-2,058	-2,527	-2,109	-2,173	-2,217	-2,115
		30	0,177	-1,189	-1,511	-1,420	-1,416	-1,186	-1,000	-0,901
		50	-0,252	-0,908	-1,149	-0,960	-0,818	-0,763	-0,623	-0,619
		100	-0,196	-0,583	-0,750	-0,579	-0,544	-0,542	-0,326	-0,292
2,00	0,11	15	-0,231	-0,829	-0,567	-0,505	-0,778	-0,448	-0,635	-0,844
		30	-0,230	-0,268	-0,039	-0,158	-0,147	-0,111	-0,063	-0,012
		50	-0,227	-0,194	-0,159	-0,059	-0,085	-0,095	-0,033	-0,064
		100	-0,066	-0,129	-0,169	-0,063	-0,023	0,033	0,007	-0,110
	0,50	15	0,546	-0,898	-1,240	-1,374	-1,423	-1,382	-1,500	-1,733
		30	0,050	-0,747	-0,769	-0,896	-0,761	-0,713	-0,604	-0,490
		50	-0,143	-0,517	-0,653	-0,649	-0,507	-0,379	-0,376	-0,391
		100	-0,139	-0,476	-0,448	-0,404	-0,306	-0,199	-0,210	-0,095

Tabela 44 – Médias dos viéses relativos percentuais (VR%) de α, em função de n, ξ e δ, considerando-se 4000 amostras de tamanho n e $\mathbb{E}(Y) = \{1, 3, \ldots, 35\}$ para o modelo MG

			δ							
α	ξ	n	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45
1,50	0,11	15	24,609	26,639	29,116	31,681	34,565	38,409	42,170	47,129
		30	10,751	11,474	12,381	13,466	14,512	15,952	17,683	19,982
		50	6,188	6,588	7,013	7,572	8,066	8,792	9,709	11,002
		100	2,995	3,185	3,375	3,569	3,841	4,127	4,646	5,081
	0,50	15	27,522	29,694	31,615	34,071	37,134	40,501	44,250	48,925
		30	12,581	12,971	13,898	14,752	15,944	17,239	18,734	21,099
		50	7,080	7,410	7,847	8,511	8,857	9,615	10,311	11,233
		100	3,442	3,658	3,817	3,960	4,261	4,455	4,828	5,208
2,00	0,11	15	25,379	26,970	28,906	31,375	33,643	36,821	39,934	43,705
		30	11,201	11,980	12,852	14,062	15,417	16,342	18,240	20,370
		50	6,261	6,818	7,243	7,700	8,419	9,199	10,318	11,212
		100	3,066	3,263	3,514	3,759	3,954	4,344	4,694	5,179
	0,50	15	26,525	28,297	30,184	32,033	34,401	37,146	40,464	43,610
		30	11,983	12,684	13,569	14,564	15,651	17,060	18,787	20,712
		50	6,914	7,363	7,594	8,159	8,875	9,441	10,348	11,290
		100	3,353	3,399	3,589	3,940	4,165	4,443	4,779	5,260

Tabela 45 – Médias dos viéses relativos percentuais (VR%) de β, em função de n, ξ e δ, considerando-se 4000 amostras de tamanho n e $\mathbb{E}(Y) = \{1, 3, \ldots, 35\}$ para o modelo MG

			δ							
α	ξ	n	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45
1,50	0,11	15	-5,875	-6,117	-6,820	-7,065	-7,611	-8,216	-8,823	-9,925
		30	-2,801	-3,050	-3,321	-3,616	-3,892	-4,213	-4,552	-5,162
		50	-1,756	-1,916	-1,965	-2,172	-2,310	-2,434	-2,771	-3,253
		100	-0,884	-0,911	-1,035	-1,083	-1,103	-1,180	-1,422	-1,579
	0,50	15	-3,750	-4,371	-4,670	-5,182	-5,534	-6,318	-6,880	-7,389
		30	-1,992	-1,960	-2,271	-2,612	-2,762	-3,072	-3,406	-4,063
		50	-1,008	-1,062	-1,270	-1,583	-1,556	-1,811	-2,009	-2,195
		100	-0,512	-0,592	-0,747	-0,694	-0,813	-0,825	-0,987	-1,115
2,00	0,11	15	-6,709	-6,793	-7,346	-7,933	-8,268	-8,768	-9,435	-10,044
		30	-3,354	-3,554	-3,792	-4,162	-4,559	-4,606	-5,123	-5,704
		50	-1,933	-2,107	-2,217	-2,312	-2,587	-2,843	-3,285	-3,494
		100	-0,978	-1,053	-1,143	-1,241	-1,261	-1,420	-1,492	-1,702
	0,50	15	-4,870	-5,308	-5,762	-6,033	-6,374	-6,841	-7,373	-7,987
		30	-2,338	-2,619	-2,821	-3,076	-3,353	-3,793	-4,136	-4,641
		50	-1,348	-1,663	-1,592	-1,840	-2,135	-2,194	-2,468	-2,809
		100	-0,760	-0,685	-0,781	-0,971	-1,006	-1,121	-1,135	-1,337

Tabela 46 – Médias dos viéses relativos percentuais (VR%) de $\mathbb{E}(Y)$, em função de n, ξ e δ, considerando-se 4000 amostras de tamanho n e $\mathbb{E}(Y) = \{1, 3, \ldots, 35\}$ para o modelo MG

			δ							
α	ξ	n	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45
1,50	0,11	15	-0,164	-0,167	-0,117	0,009	-0,039	0,062	0,358	0,507
		30	0,000	-0,027	-0,005	-0,050	-0,062	0,131	-0,021	0,096
		50	-0,006	-0,046	0,035	0,024	-0,039	0,057	0,033	-0,037
		100	0,025	0,036	-0,012	-0,029	0,044	0,018	0,009	0,015
	0,50	15	-1,238	-0,889	-0,781	-0,493	-0,356	-0,216	-0,046	0,355
		30	-0,758	-0,606	-0,484	-0,438	-0,266	-0,199	-0,258	-0,139
		50	-0,475	-0,357	-0,257	-0,209	-0,201	-0,109	-0,172	-0,059
		100	-0,258	-0,150	-0,171	-0,103	-0,038	-0,024	-0,067	-0,083
2,00	0,11	15	-0,134	0,146	0,074	0,024	0,171	0,159	0,217	0,655
		30	-0,050	-0,014	-0,083	-0,008	0,012	0,018	-0,035	-0,076
		50	-0,030	-0,014	0,037	0,031	0,003	0,063	0,003	-0,032
		100	-0,002	0,014	0,040	0,012	0,007	-0,019	0,012	0,059
	0,50	15	-0,850	-0,661	-0,492	-0,320	-0,166	-0,030	0,290	0,659
		30	-0,471	-0,320	-0,274	-0,136	-0,173	-0,117	0,028	-0,112
		50	-0,258	-0,231	-0,149	-0,151	-0,112	-0,124	0,032	0,016
		100	-0,182	-0,096	-0,075	-0,040	-0,010	-0,067	0,055	-0,011

Tabela 47 – Médias dos erros quadráticos médios (EQM) de δ, em função de n, ξ e δ, considerando-se 4000 amostras de tamanho n e $\mathbb{E}(Y) = \{1, 3, \ldots, 35\}$ para o modelo MG

			δ							
α	ξ	n	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45
1,50	0,11	15	0,006	0,009	0,011	0,013	0,014	0,015	0,016	0,016
		30	0,003	0,004	0,006	0,006	0,007	0,008	0,008	0,008
		50	0,002	0,003	0,003	0,004	0,004	0,005	0,005	0,005
		100	0,001	0,001	0,002	0,002	0,002	0,002	0,002	0,003
	0,50	15	0,008	0,010	0,013	0,015	0,016	0,017	0,018	0,018
		30	0,004	0,006	0,007	0,008	0,009	0,009	0,010	0,010
		50	0,003	0,004	0,004	0,005	0,005	0,006	0,006	0,006
		100	0,002	0,002	0,002	0,003	0,003	0,003	0,003	0,003
2,00	0,11	15	0,006	0,009	0,011	0,012	0,014	0,015	0,016	0,016
		30	0,003	0,004	0,005	0,006	0,007	0,008	0,008	0,008
		50	0,002	0,003	0,003	0,004	0,004	0,005	0,005	0,005
		100	0,001	0,001	0,002	0,002	0,002	0,002	0,002	0,003
	0,50	15	0,007	0,009	0,012	0,014	0,015	0,016	0,017	0,017
		30	0,004	0,005	0,006	0,007	0,008	0,008	0,009	0,009
		50	0,002	0,003	0,004	0,004	0,005	0,005	0,005	0,005
		100	0,001	0,002	0,002	0,002	0,002	0,003	0,003	0,003

Tabela 48 – Médias dos erros quadráticos médios (EQM) de α, em função de n, ξ e δ, considerando-se 4000 amostras de tamanho n e $\mathbb{E}(Y) = \{1, 3, \ldots, 35\}$ para o modelo MG

			δ							
α	ξ	n	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45
1,50	0,11	15	0,865	0,985	1,129	1,303	1,494	1,773	2,037	2,389
		30	0,257	0,279	0,308	0,347	0,383	0,444	0,525	0,625
		50	0,125	0,135	0,146	0,159	0,174	0,195	0,218	0,255
		100	0,053	0,057	0,061	0,065	0,071	0,077	0,085	0,095
	0,50	15	1,208	1,317	1,440	1,596	1,798	2,022	2,304	2,674
		30	0,414	0,425	0,456	0,478	0,528	0,578	0,638	0,751
		50	0,205	0,216	0,222	0,231	0,243	0,261	0,282	0,311
		100	0,090	0,092	0,094	0,096	0,100	0,106	0,112	0,120
2,00	0,11	15	1,505	1,651	1,834	2,077	2,318	2,637	2,977	3,378
		30	0,459	0,502	0,555	0,627	0,708	0,788	0,926	1,092
		50	0,219	0,241	0,257	0,281	0,313	0,348	0,398	0,455
		100	0,094	0,100	0,107	0,116	0,124	0,137	0,151	0,169
	0,50	15	1,798	1,950	2,116	2,298	2,538	2,843	3,177	3,512
		30	0,618	0,647	0,701	0,752	0,827	0,924	1,035	1,205
		50	0,313	0,322	0,336	0,356	0,384	0,414	0,456	0,506
		100	0,132	0,137	0,140	0,147	0,155	0,165	0,178	0,194

Tabela 49 – Médias dos erros quadráticos médios (EQM) de β, em função de n, ξ e δ, considerando-se 4000 amostras de tamanho n e $\mathbb{E}(Y) = \{1, 3, \ldots, 35\}$ para o modelo MG

			δ							
α	ξ	n	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45
1,50	0,11	15	41,871	50,248	59,325	73,305	92,241	114,487	145,448	192,426
		30	20,864	25,019	29,595	36,140	44,570	55,516	71,046	91,728
		50	12,450	14,734	17,776	21,379	26,512	33,010	41,871	54,986
		100	6,126	7,347	8,764	10,639	13,086	16,581	20,970	27,113
	0,50	15	48,074	56,428	67,322	81,446	102,613	127,758	163,643	214,956
		30	22,838	27,022	32,338	39,378	48,203	60,278	77,734	99,556
		50	13,612	16,131	19,053	23,043	28,504	35,379	44,786	58,649
		100	6,711	7,916	9,424	11,373	13,882	17,546	21,885	28,315
2,00	0,11	15	21,632	25,742	31,061	37,213	45,701	58,065	72,568	94,816
		30	10,817	12,922	15,541	18,830	23,406	28,895	37,222	48,210
		50	6,482	7,797	9,317	11,259	13,950	17,170	22,078	28,806
		100	3,255	3,883	4,643	5,650	6,865	8,652	10,997	14,266
	0,50	15	23,218	27,604	33,205	40,162	49,099	61,512	78,749	102,650
		30	11,428	13,557	16,237	19,651	24,329	30,496	38,604	50,395
		50	6,845	8,112	9,682	11,743	14,381	18,221	23,059	29,371
		100	3,384	4,037	4,811	5,821	7,170	8,897	11,280	14,695

Tabela 50 – Médias dos erros quadráticos médios (EQM) de $\mathbb{E}(Y)$, em função de n, ξ e δ, considerando-se 4000 amostras de tamanho n e $\mathbb{E}(Y) = \{1, 3, \ldots, 35\}$ para o modelo MG

			δ							
α	ξ	n	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45
1,50	0,11	15	24,016	27,280	30,654	34,458	39,063	44,458	50,399	57,530
		30	12,083	13,708	15,361	17,339	19,553	22,200	25,285	28,595
		50	7,207	8,165	9,297	10,479	11,750	13,366	15,217	17,202
		100	3,633	4,111	4,609	5,193	5,901	6,700	7,596	8,621
	0,50	15	24,146	27,422	30,891	34,865	39,291	44,458	50,143	57,462
		30	12,080	13,677	15,217	17,298	19,534	22,216	25,349	28,486
		50	7,274	8,232	9,235	10,366	11,806	13,375	15,191	17,439
		100	3,632	4,101	4,594	5,212	5,849	6,681	7,628	8,608
2,00	0,11	15	18,985	21,717	24,830	28,644	32,419	36,910	42,395	48,535
		30	9,501	10,914	12,393	14,237	16,126	18,571	21,444	24,451
		50	5,667	6,509	7,485	8,508	9,749	11,117	12,781	14,607
		100	2,837	3,254	3,709	4,257	4,790	5,605	6,423	7,344
	0,50	15	18,752	21,671	24,871	28,355	32,495	36,827	42,362	48,818
		30	9,517	10,974	12,419	14,120	16,282	18,558	21,210	24,704
		50	5,652	6,512	7,426	8,510	9,775	11,127	12,926	14,563
		100	2,830	3,230	3,735	4,254	4,879	5,576	6,356	7,442