

IV-044 - METODOLOGIA DE SELEÇÃO DE MODELOS NÃO LINEARES APLICADA AO CRESCIMENTO DE MACRÓFITAS

Gabriel da Costa Cantos Jerônimo⁽¹⁾

Bacharel em Ciência e Tecnologia e Engenheiro de Minas pela Universidade Federal de Alfenas. Mestre em Ciência e Engenharia Ambiental pela Universidade Federal de Alfenas (UNIFAL-MG). Professor de alemão na Escola Wizard.

Patrícia Neves Mendes⁽²⁾

Bacharel em Estatística pela Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG). Mestre e Doutora em Estatística e Experimentação Agropecuária pela Universidade Federal de Lavras (UFLA). Professora adjunta da Universidade Federal de Alfenas (UNIFAL-MG).

Paulo Augusto Zaitune Pamplin⁽³⁾

Possui graduação em Ciências Biológicas pela Universidade Federal de São Carlos. Mestre em Ciências da Engenharia Ambiental pela Universidade de São Paulo e doutor em Ecologia e Recursos Naturais pela Universidade Federal de São Carlos. Professor associado da Universidade Federal de Alfenas (UNIFAL-MG).

Luiz Felipe Ramos Turci⁽⁴⁾

Graduado em Engenharia Elétrica pela Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho. Mestre e Doutor em Engenharia Eletrônica e Computação pelo Instituto Tecnológico de Aeronáutica. Pós-doutorado realizado no Laboratório de Computação e Matemática Aplicada do INPE na área de redes complexas. Professor adjunto da Universidade Federal de Alfenas (UNIFAL-MG).

Endereço⁽¹⁾: Rua Francisco Cantos Davo, 40 – Jardim Formosa – Poços de Caldas - MG - CEP: 37700-489 - Brasil - Tel: (35) 3697-4748 - e-mail: gabriel.ccjeronimo@gmail.com

RESUMO

O estudo de plantas aquáticas (macrófitas) é importante uma vez que essas plantas apresentam potencial de utilização em estudos de ecotoxicologia, como bioindicadores, no tratamento de águas residuárias. A modelagem criteriosa do crescimento dessas plantas, especificamente a *Lemna minor*, é útil na determinação das condições de otimização dessas aplicações; assim deseja-se sempre obter o modelo que melhor representa a dinâmica de crescimento populacional da planta em estudo. Neste trabalho, apresenta-se uma metodologia de ajuste e seleção de modelos de crescimento não lineares com base em indicadores estatísticos que servem como avaliadores de qualidade dos modelos. Para ilustrar o uso da metodologia, foi feito o cultivo de *Lemna minor* em meio Steinberg e foram ajustados três modelos aos dados médios de crescimento de suas frondes, selecionando o modelo Logístico como o melhor.

PALAVRAS-CHAVE: Modelos de Crescimento, Avaliadores de Qualidade, Plantas Aquáticas, Lemna Minor.

INTRODUÇÃO

Atualmente, o estudo do crescimento populacional de macrófitas tem sido considerado muito importante, uma vez que essas plantas desempenham um papel fundamental nos ecossistemas aquáticos, ou como produtoras de gás oxigênio, ou ainda como habitat para diversos organismos. Outra razão para o estudo de macrófitas é sua potencialidade de utilização no tratamento de águas residuárias [1].

A utilização de macrófitas também se dá no campo da bioindicação, mais especificamente na eutrofização. A eutrofização é um processo natural caracterizado pelo aumento da quantidade de nutrientes inorgânicos e matéria orgânica em corpos hídricos. Wetzel [2] descreve esse aumento como um dos estados de sucessão natural de um ecossistema aquático e que, conforme há o aumento da concentração de nutrientes, há também aumento na florescência de algas. Esse processo, quando ocorrido naturalmente, é lento e gradual; atividades antrópicas podem, no entanto, acelerar o processo e causar um desequilíbrio ecológico no corpo hídrico, caracterizando um impacto ambiental chamado eutrofização artificial, ou cultural [3].

Dentre as macrófitas mais abundantes em ecossistemas aquáticos, encontra-se a *Lemna minor*, mais conhecida como lentilha d'água, que é uma angiosperma, monocotiledônea que reconhecidamente apresenta alta

capacidade adsortiva [1] e, portanto, apresenta o potencial supracitado. Khellaf [4], em seu estudo sobre a resposta do crescimento de *Lemna minor* sob condições de alta concentração de metais pesados, descreve sua capacidade adsortiva como potencial hiperacumulador, o que também se vê em [5], versado em acumulação de níquel- Ni, cobre- Cu e manganês- Mn.

A utilização de macrófitas no campo da ecotoxicologia já está há tempos bem estabelecida, como citado em [6], que aponta como justificativa para isso, a sensibilidade das plantas aos poluentes ambientais e sua capacidade de acumulação, principalmente no que se refere aos metais pesados. No caso da macrófita *Lemna minor*, ela ganha destaque nos estudos de ecotoxicologia por ser seletiva na acumulação de certas espécies químicas, por causa do seu tamanho diminuto, e por ter propriedades fisiológicas bem conhecidas [7].

O crescimento populacional dessas plantas, relacionado à sua capacidade adsortiva seletiva, pode ser caracterizado a partir de modelos não lineares apropriados. A utilização de modelos não lineares é muito eficaz para a modelagem de crescimento populacional, uma vez que eles se valem de parâmetros que possuem interpretação biológica e, portanto, são passíveis de análises mais adequadas e precisas.

Neste trabalho será apresentada uma metodologia de ajuste e de seleção de modelos de crescimento populacional não lineares com base em indicadores estatísticos que servem como avaliadores de qualidade dos modelos. Para ilustrar o uso da metodologia, foi feito o cultivo de *Lemna minor* em meio Steinberg e foram ajustados três modelos não lineares aos dados médios de crescimento de suas frondes.

METODOLOGIA

A metodologia utilizada envolve 4 partes: (i) os materiais; (ii) os modelos não lineares de crescimento populacional; (iii) o ajuste dos modelos; (iv) os indicadores estatísticos da qualidade de ajuste.

(i) Materiais:

A fim de realizar o cultivo da macrófita foi necessária a preparação das soluções estoque que constituem o meio Steinberg, que é o meio que gera o melhor crescimento de *Lemna minor*. As concentrações e metodologias de padronização foram devidamente normalizadas conforme proposto por Steinberg [8]. A proporção escolhida para elaboração do meio experimental foram 20/180 seguindo a relação M/A em que M é a quantidade em mL de solução Steinberg e A é a quantidade, também em mL, de água deionizada.

O experimento foi realizado em triplicata a fim de se obter um valor médio do número de frondes ao longo do crescimento populacional. Em cada um dos recipientes foram colocados o número inicial de cinco frondes, e o tempo de duração do experimento foi de 40 dias. Na tentativa de expor as macrófitas às condições luminosas mais próximas o possível da natural, não foi utilizada câmara de fotoperíodo, assim as plantas passaram por horas com incidência direta de luz solar e horas com incidência indireta de luz solar (efeito de nuvens ou reflexos).

(ii) Modelos não lineares de crescimento populacional

Vários modelos não lineares são utilizados para descrever a dinâmica de crescimento populacional de plantas aquáticas como as macrófitas. Dentre eles, os modelos mais utilizadas são os modelos Logístico, de Gompertz e Morgan-Mercer-Flodin (MMF) [9,10]. Os modelos e suas equações estão apresentados na Tabela 1.

Tabela 1: Modelos não lineares de crescimento populacional e suas equações

Modelo	Equações
Logístico	$A(1+Be^{-kt})^{-1}$
Gompertz	$A\exp(-Be^{-kt})$
Morgan-Mercer-Flodin (MMF)	$(Bk+At^d)/(k+t^d)$

O parâmetro A é o valor assintótico, ou seja, valor para o qual o crescimento se estabiliza; B é uma constante de integração e não tem interpretação biológica; k é a taxa de crescimento (exceto no modelo MMF, no qual não possui significado biológico); o parâmetro d que serve para flexibilizar o ajuste do modelo, está ligado com o ponto de inflexão do modelo.

(iii) Ajuste dos modelos

O ajuste dos parâmetros dos modelos foi realizado a partir do método de mínimos quadrados não linear generalizado [11]. Em particular, no software R [12], o método pode ser executado a partir da função `gnls`, contida no pacote `nlme`.

(iv) Indicadores estatísticos da qualidade do ajuste

A seleção do modelo é realizada a partir de um esquema de pontuação dos modelos descrito a seguir:

Aplicando o teste t, com nível de significância (α) desejado, verifica-se a significância estatística de cada modelo comparando o valor-p do teste t ao nível de significância. Se o valor-p do teste t é menor que o nível de significância utilizado para todos os estimadores paramétricos de um modelo, então, considera-se o modelo como estatisticamente significativo e representativo da dinâmica de crescimento populacional da planta. Caso algum estimador paramétrico não seja estatisticamente significativo, então, o modelo é descartado, ou, pontuado negativamente, caso o estimador paramétrico não significativo não tenha significado físico/biológico.

A fim de selecionar o modelo que melhor representa a dinâmica de crescimento populacional dentre os modelos estatisticamente significativos foram utilizados também os seguintes testes e avaliadores de qualidade para avaliação da qualidade de ajuste dos modelos: teste de Durbin-Watson [13] para autocorrelação residual, coeficiente de determinação ajustado- R^2_a , critério de informação de Akaike- AIC [14], critério de informação Bayesiano- BIC e Desvio Padrão Residual- DPR.

A geração dos indicadores estatísticos de avaliação de qualidade dos modelos também foi realizada com a utilização dos pacotes `nlme` e `car` do software R.

As curvas de crescimento são a base em que são aplicados os modelos não lineares e elas são obtidas pela coleta de dados de crescimento, em uma determinada amostra, ao longo do tempo. Por isso, talvez a hipótese de independência dos erros não seja apropriada, pois pode haver correlação entre o erro relativo a um período e o erro da observação anterior, portanto, há que se verificar a existência de correlação entre os erros. O teste DW deve ser realizado para todos os modelos testados para verificação da existência de autocorrelação nos resíduos. Neste teste, a hipótese nula de que os resíduos não são autocorrelacionados é testada contra a hipótese de que os resíduos seguem um processo autoregressivo de primeira ordem [15]. Quando um modelo apresentar valor-p menor que o nível de significância utilizado, então, o modelo é pontuado negativamente. Com relação aos demais testes, pontua-se positivamente o modelo com: menores valores AIC, BIC e DPR; maiores valores R^2_a . Também se pontuam positivamente os modelos com menores números de parâmetros.

RESULTADOS

Nesta seção, será aplicada a metodologia supracitada para a modelagem do crescimento da *Lemma minor*.

- Ajuste dos modelos:

Aplicando-se o método dos mínimos quadrados não linear generalizado, foram obtidos os estimadores paramétricos para os modelos Logístico, de Gromptz, e MMF. Aplicando o teste t, com nível de significância (α) de 5%, verificou-se que o valor-p do teste t é menor que o nível de significância para todos os estimadores paramétricos de todos os modelos, exceto para o parâmetro k do modelo MMF. Os valores dos parâmetros dos modelos e seus respectivos erros padrões são apresentados nas Tabelas 2 a 4.

Tabela 2: Estimativas dos parâmetros, erros padrões e valores-p para o teste t referentes ao modelo de Gompertz ajustado

Parâmetros	Estimativas	Erros padrões	Valor-p (teste t)
A	102,32079	5,73901	0,0000
B	5,23399	0,78195	0,0000
k	0,10528	0,01243	0,0000

Tabela 3: Estimativas dos parâmetros, erros padrões e valores-p para o teste t referentes ao modelo Logístico ajustado

Parâmetros	Estimativas	Erros padrões	Valor-p (teste t)
A	91,87129	2,37069	0,0000
B	31,17971	6,35608	0,0006
k	0,19003	0,01341	0,0000

Tabela 4: Estimativas dos parâmetros, erros padrões e valores-p para o teste t referentes ao modelo MMF ajustado

Parâmetros	Estimativas	Erros padrões	Valor-p (teste t)
A	98,86000	4,70000	0,0000
B	6,71000	1,67000	0,0031
k	39296,02000	44530,65000	0,4005
d	3,56000	0,41000	0,0000

Ainda que o parâmetro A tenha sido superestimado para o modelo Gompertz, a função gera boa estimativa para o comportamento de crescimento, ou seja, isoladamente, o parâmetro A está superestimado, mas em conjunto com os outros parâmetros da função, o valor assintótico gerado pelo modelo aproxima-se do observado na prática.

- Seleção do melhor modelo

Qualitativamente, os modelos são praticamente equivalentes, então, será necessário analisar os avaliadores estatísticos para selecionar o modelo que melhor representa a dinâmica de crescimento populacional experimental. Observe, contudo, que o modelo MMF teve o estimador do parâmetro k considerado estatisticamente não significativo, o que nos permite descartar o modelo MMF.

A Tabela 5 apresenta o resultado dos indicadores Durbin-Watson (DW), Critério de Informação Bayesiano (BIC), Critério de Informação de Akaike (AIC), Coeficiente de Determinação Ajustado (R_a^2), e Desvio Padrão Residual- DPR para cada um dos modelos.

Tabela 5: Avaliadores e testes de qualidade para os modelos ajustados

Modelo	Nº de parâmetros	Valor-p (DW)	BIC	AIC	R_a^2	DPR
Logístico	3	0,402	69,598	67,338	0,993	2,703
Gompertz	3	0,080	76,467	74,207	0,989	3,521
MMF	4	0,728	70,147	67,322	0,993	2,637

Quanto ao número de parâmetros dos modelos ressalta-se que o modelo de Gompertz e Logístico possuem um parâmetro a menos que o modelo MMF, ou seja, mais simples de convergir a um resultado e, ainda assim, possuem dois parâmetros passíveis de interpretação biológica enquanto o modelo MMF possui apenas um. Quanto ao valor de R_a^2 , eles são praticamente iguais para os modelos e indica que cerca de 99% dos dados são explicados pela função ajustada. De acordo com os resultados do AIC, o modelo MMF é apontado como o mais adequado, seguido do Logístico que tem praticamente o mesmo valor AIC. Quando se analisa, o valor de BIC, percebe-se que o modelo Logístico é mais adequado. O DPR, que indica a variabilidade dos dados, sugere novamente o modelo MMF como o melhor para o caso, uma vez que quanto menor o valor do desvio padrão residual, melhor o modelo.

A Tabela 6 mostra a tabela de pontuação dos modelos segundo a análise apresentada. O modelo Logístico se confirma como o melhor modelo para o crescimento de *Lemna minor*, o que está de acordo com o exposto em [16], que traz o modelo Logístico como um dos mais utilizados para descrever o crescimento de plantas.

Tabela 6: Pontuação dos Modelos

Modelo	Nº de parâmetros	Parâmetros não significativos	Valor-p (DW)	BIC	AIC	R_a^2	DPR	Total
Logístico	1	0	0	1	1	1	0	4
Gompertz	1	0	0	0	0	1	0	2
MMF	0	-1	0	0	1	1	1	2

CONCLUSÃO

Neste trabalho foi apresentada uma metodologia de ajuste e de seleção de modelos de crescimento populacional não lineares com base em indicadores estatísticos que servem como avaliadores de qualidade dos modelos. Para ilustrar o uso da metodologia, foi feito o cultivo de *Lemna minor* em meio Steinberg e foram ajustados três modelos não lineares aos dados médios de crescimento populacional de suas frondes.

O ajuste dos modelos ao crescimento de *Lemna minor* e a avaliação dos parâmetros de cada um deles indicam que o modelo Logístico é o que melhor representa a dinâmica de crescimento populacional da macrófita.

Áreas como bioindicação, ecotoxicologia e de tratamento de águas residuárias podem se beneficiar desse resultado uma vez que, estabelecido o melhor modelo de crescimento para a espécie, pode-se então estabelecer parâmetros que permitam realizar o controle da qualidade da água e assim propor medidas corretivas ou preventivas para que a qualidade da água seja mantida em boas condições.

AGRADECIMENTOS

Agradecemos ao apoio da FAPEMIG, CAPES, CNPq.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. ARROYAVE, M. P. La lenteja de agua (*Lemna minor* L.): una planta acuática promisoría. **Revista EIA**. n. 1, p. 33-38. 2004.
2. WETZEL, R. G. **Limnologia**. Fundação Calouste Gulbenkian. 1011 p. 1993.
3. SOUZA, D. A. **Bacia do Riberão e Represa do Lobo: Bases Ecológicas para o Planejamento Regional, Manejo e Conservação**. Tese de Doutorado. São Carlos: USP. 1993.
4. KHELLAF, N., ZERDAOUI, M. Growth response of the duckweed *Lemna minor* to heavy metal pollution. **Iran Journal of Environment, Health, Science and Engineering**. v. 6, n. 3, p. 161-166. 2009.
5. JAIN, S. K. et al. Heavy metal uptake by *Pleurotus sajor-caju* from metal enriched duckweed substrate. **Biol.Wastes**. v. 24, p. 275-282. 1988.
6. FISKESJÖ, G. The Allium test as a standart in environmental monitoring. **Hereditas**. v.102, p.99-112. 1985.
7. RADIC, S. et al. Duckweed *Lemna minor* as a tool for testing toxicity and genotoxicity of surface waters. **Ecotoxicology and Environmental Safety**. v.74, p.182-187. 2011.
8. STEINBERG, R. A. Mineral requirements of *Lemna minor*. **Plant Physiol**. v. 21, p. 42-48. 1946.
9. ARAÚJO, R. O. et al. Ajuste de modelos não-lineares aos dados de crescimento de búfalas da raça Murrah criadas em terras baixas no estado do Rio Grande do Sul. In: REUNIÃO ANUAL DA SOCIEDADE BRASILEIRA DE ZOOTECNIA, Águas de Lindóia. 2009.
10. MENDES, P. N. **Ajuste dos modelos Gompertz e Logístico na descrição das curvas de crescimento de tomates: uma abordagem Bayesiana**. Tese de doutorado. Lavras : UFLA, 2011.
11. HOFFMAN, R.; VIEIRA, S. **Análise de regressão: uma introdução à econometria**. 3. ed. São Paulo: HUCITEC, 1998. 379 p.
12. R DEVELOPMENT CORE TEAM. **R: A language and environment for statistical computing**. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. ISBN 3-900051-07-0. 2013.

13. DURBIN, J.; WATSON, G. S. Testing for Serial Correlation in Least Squares Regression, II, **Biometrika**, v. 38, n.1-2, p. 159–179, jun. 1951.
14. AKAIKE, H. A new look at the statistical model identification. **IEEE Transactions on Automatic Control**, Boston, v. 19, n. 6, p. 716-723, dez. 1974.
15. DRAPER, N. R.; SMITH, H. **Applied regression analysis**. 3. ed. New York: John Wiley, 1998.
16. PUIATTI, G. A. et al. Análise de agrupamento em seleção de modelos de regressão não lineares para descrever o acúmulo de matéria seca em plantas de alho. **Rev. Bras. Biom.**, São Paulo, v.31, n.3, p.337-351. 2013.