

MODELO DE CALIBRAÇÃO COM ERROS SIMÉTRICOS

Francisco William Pereira Marciano

Orientador: Prof. Dr. Francisco José de Azevedo Cysneiros

Co-orientadora: Profa. Dra. Betsabé Grimalda Blas Achic

Área de Concentração: Estatística Aplicada

Dissertação submetida como requerimento parcial para obtenção do grau
de Mestre em Estatística pela Universidade Federal de Pernambuco

Recife, fevereiro de 2012

Catálogo na fonte
Bibliotecária Jane Souto Maior, CRB4-571

Marciano, Francisco William Pereira
Modelo de calibração com erros simétricos /
Francisco William Pereira Marciano - Recife: O Autor,
2012.

xix, 116 folhas: il., fig., tab.

Orientador: Francisco José de Azevedo Cysneiros.
Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de
Pernambuco. CCEN, Estatística, 2012.

Inclui bibliografia.

1. Estatística aplicada - Modelagem. 2. Modelos de
calibração. I. Cysneiros, Francisco José de Azevedo
(orientador). II. Título.

519.536

CDD (23. ed.)

MEI2012 – 028

Universidade Federal de Pernambuco
Pós-Graduação em Estatística

27 de fevereiro de 2012

Nós recomendamos que a dissertação de mestrado de autoria de

Francisco William Pereira Marciano

intitulada

“Modelo de calibração com erros simétricos”

seja aceita como cumprimento parcial dos requerimentos para o grau de Mestre em Estatística.

Coordenador da Pós-Graduação em Estatística

Banca Examinadora:

Betsabé Grimalda Blas Achic

co-orientadora

Claudia Regina Oliveira de Paiva Lima

Michelli Karinne Barros da Silva (UFCG)

Este documento será anexado à versão final da dissertação.

Dedicatória

Dedico este trabalho aos meus pais e aos meus irmãos, a eles minha gratidão eterna.

Agradecimentos

A tarefa de agradecer, ao meu entender, não é uma tarefa fácil. Deixar de citar pessoas importantes em uma jornada como essa é um pecado que pode não ter perdão. Desta forma, serei o mais sucinto possível de forma a contemplar pessoas que passaram em minha vida nessa caminhada e deixaram uma marca importante.

Primeiro quero agradecer a Deus pela oportunidade de existir e por todas as vezes que foi o suporte necessário para que eu superasse obstáculos durante essa caminhada. Não posso deixar de agradecer aos meus pais, Maria Pereira Marciano e Moacir Marciano, por me darem, acima de tudo, a vida. Agradeço o amor, a afetividade, a educação e os valores morais que nortearam a formação do meu caráter. Agradeço também os incentivos diversos no sentido de alimentar-me o desejo de ser uma pessoa melhor.

Quero agradecer imensamente o meu orientador, o Prof. Francisco José de Azevedo Cysneiros, assim como a minha co-orientadora, a Profa. Betsabé Grimalda Blas Achic, pela orientação e principalmente pela confiança depositada em meu trabalho. Agradeço a forma que conduziram esse trabalho, pela paciência (que não foi pouca), pela disposição, apoio e auxílio no decorrer do desenvolvimento desta dissertação, principalmente nos momentos de dificuldade.

Seria injusto se não agradecesse a minha família, em especial aos meus irmãos, por

me incentivarem nas minhas escolhas e por serem o sustentáculo para que eu superasse inúmeras dificuldades vividas nesse período.

Fiz grandes amigos em Recife, em especial na Pós-Graduação em Estatística da UFPE. Não posso deixar de mencionar e agradecer ao meu amigo Manoel, por ter me dado todo o suporte necessário para que eu me instalasse em Recife. Agradeço a sua disposição em me ajudar sempre, pelas nossas longas conversas madrugada adentro e pelo ótimo convívio durante esse período.

A minha amiga e irmã de coração que descobri em Recife, Mariana Araújo, por todos os momentos alegres e tristes, por todas as risadas e choros, pelas longas jornadas de estudo (até dia de domingo), enfim, pela confiança conquistada em tão pouco tempo e por uma amizade sincera e respeitosa, obrigado por te encontrar.

Aos meus colegas da turma de mestrado, Daniel, Fernando, Fernanda, Mel, Vinicius, Flavius e Rodrigo por dividirem momentos de estudo e lazer, além do convívio harmonioso.

Aos amigos que dividiram apartamento comigo, seja por pouco ou tempo suficiente, durante essa minha estada em Recife, a Alice, Jeremias, Jadson e José Antônio, agradeço o bom convívio, momentos de conversa e distração e por me suportarem nesse período.

Quero agradecer a todos os profissionais que fazem a Pós-Graduação em Estatística da UFPE, tanto os docentes quanto os funcionários, que trabalham duro para que esse Programa seja uma referência nacional. Não posso deixar de citar a secretária da Pós-Graduação, Valéria Bittencourt, por todo o carinho e atenção que dispensa a quem necessite de seu auxílio.

Agradeço também aos professores e funcionários do Departamento de Estatística e Matemática Aplicada da UFC, por contribuírem na minha formação acadêmica, em especial, a minha orientadora de iniciação científica, a Profa. Silvia Maria de Freitas, o Prof. Juvêncio Santos Nobre e o Prof. João Mauricio de Araujo Mota, por me incentivarem a continuar estudando pelo exemplo que são de excelentes profissionais.

Aos amigos que fiz na graduação em Estatística na UFC, Lívia, Antônio, Dival, Roberto e Mota, que me ajudaram muito e, sem dúvida, contribuíram para que eu chegasse até aqui.

Aos amigos orfãos que deixei em Fortaleza, não citarei nomes para evitar discussões posteriores, agradeço a amizade, o carinho, as palavras de incentivo, por me apoiarem na decisão de estudar tão longe de casa e por entenderem a minha ausência em fatos importantes de suas vidas durante esse período.

As professoras, Michelli Karinne Barros da Silva e Claudia Regina Oliveira de Paiva Lima, pelas valiosas observações, sugestões e correções, que muito contribuíram para o melhoramento do presente trabalho.

Enfim, agradeço ao CNPq pelo suporte financeiro concedido e a todos aqueles que direta ou indiretamente contribuíram para que eu conquistasse mais essa vitória.

Epígrafe

“Embora ninguém possa voltar atrás e fazer um novo começo, qualquer um pode começar agora e fazer um novo fim.”

Chico Xavier

Resumo

Neste trabalho é considerado o problema de calibração linear simétrico. A maioria dos modelos de calibração presentes na literatura supõe que os erros são normalmente distribuídos, no entanto, a distribuição normal é extremamente sensível à presença de observações atípicas. O uso de distribuições de caudas pesadas da classe de distribuições simétricas pode ser uma solução a este tipo de problema. Distribuições alternativas pertencentes à classe simétrica de distribuições como suposição para os erros do modelo de calibração linear com repetições na variável resposta são propostas neste trabalho, além da distribuição normal, estudamos as distribuições t-Student, exponencial potência e logística tipo II. A metodologia de máxima verossimilhança é empregada para obter as estimativas dos parâmetros para cada um dos modelos em estudo. Realizamos estudos de simulação para verificar o comportamento assintótico dos estimadores dos parâmetros para cada um dos modelos. Finalmente apresentamos aplicações dos modelos propostos a conjuntos de dados reais.

Palavras-Chave: modelo de calibração linear; distribuição simétrica; outliers.

Abstract

This work considers the problem of linear calibration model with symmetrical errors. Most calibration models in the literature assume that the errors are normally distributed, however, the normal distribution is extremely sensitive to the presence of atypical observations. The use of heavy tails distributions of the class of symmetric distributions can be a solution to this problem. Alternatively, it is proposed a new linear calibration model with replicates, assuming error distributions from the class of symmetric distributions. Particularly, we study the distribution t-Student, power exponential and logistic-II and also the normal distribution for comparison purposes. The maximum likelihood method is used to obtain the parameter estimates for each model under study. We conducted simulation studies to verify the asymptotic behavior of estimators of the parameters for each model. Finally, we present some applications of the proposed models to real data sets.

Keywords: linear calibration model; symmetrical distribution; outliers.

Índice

Lista de Figuras	xiii
Lista de Tabelas	xiv
1 Introdução	1
1.1 Exemplos de aplicação	2
1.2 Histórico	4
1.3 Objetivos e organização da dissertação	7
2 Modelo de calibração linear simples	9
2.1 Introdução	9
2.2 Modelo de calibração linear simples	12
2.3 Modelo de calibração normal com repetições	14
3 Calibração linear com repetições e erros simétricos	15
3.1 Introdução	15
3.2 Distribuições simétricas	18

<i>Índice</i>	xii
3.3 M-proposto	19
3.4 Estimação do modelo proposto	20
3.4.1 Função escore e Matriz de Informação de Fisher	21
4 Resultados de Simulação	26
4.1 Simulação	26
4.1.1 Caso Normal	27
4.1.2 Caso t-Student	47
4.1.3 Caso Exponencial Potência	66
4.1.4 Caso logística tipo II	85
5 Aplicação	104
5.1 Critérios de informação	104
5.2 Dados de zinco de Brüggemann e Wennrich (2002)	105
5.3 Dados de zinco de Neto et al. (2007)	108
6 Considerações finais	110
Referências bibliográficas	112

Lista de Figuras

2.1	Relação entre o domínio das amostras e o domínio das medidas na análise química.	11
2.2	Representação esquemática do experimento de calibração.	12
4.1	Box plot para a amostra Monte Carlo gerada para $n = 5$ e $r = 3$ quando $X_0 = 0,01$ no caso logística do tipo II.	88

Lista de Tabelas

3.1	Expressões para $W_h(u)$ e $W'_h(u)$ para algumas distribuições simétricas. . . .	21
3.2	Valores de d_h e f_h para algumas distribuições simétricas.	25
4.1	Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_0$ para $r = 3$ e $\sigma^2 = 0,04$ quando $\beta_0 = 0,1$ no caso normal.	29
4.2	Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_1$ para $r = 3$ e $\sigma^2 = 0,04$ quando $\beta_1 = 2$ no caso normal.	30
4.3	Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{X}_0$ para $r = 3$ e $\sigma^2 = 0,04$ no caso normal.	31
4.4	Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_0$ para $r = 20$ e $\sigma^2 = 0,04$ quando $\beta_0 = 0,1$ no caso normal.	32
4.5	Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_1$ para $r = 20$ e $\sigma^2 = 0,04$ quando $\beta_1 = 2$ no caso normal.	33
4.6	Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{X}_0$ para $r = 20$ e $\sigma^2 = 0,04$ no caso normal.	34
4.7	Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_0$ para $r = 100$ e $\sigma^2 = 0,04$ quando $\beta_0 = 0,1$ no caso normal.	35

4.8	Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_1$ para $r = 100$ e $\sigma^2 = 0,04$ quando $\beta_1 = 2$ no caso normal.	36
4.9	Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{X}_0$ para $r = 100$ e $\sigma^2 = 0,04$ no caso normal.	37
4.10	Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 3$ e $\sigma^2 = 0,04$ quando $X_0 = 0,01$ no caso Normal.	38
4.11	Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 3$ e $\sigma^2 = 0,04$ quando $X_0 = 0,8$ no caso Normal.	39
4.12	Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 3$ e $\sigma^2 = 0,04$ quando $X_0 = 1,9$ no caso Normal.	40
4.13	Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 20$ e $\sigma^2 = 0,04$ quando $X_0 = 0,01$ no caso Normal.	41
4.14	Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 20$ e $\sigma^2 = 0,04$ quando $X_0 = 0,8$ no caso Normal.	42
4.15	Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 20$ e $\sigma^2 = 0,04$ quando $X_0 = 1,9$ no caso Normal.	43
4.16	Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 100$ e $\sigma^2 = 0,04$ quando $X_0 = 0,01$ no caso Normal.	44
4.17	Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 100$ e $\sigma^2 = 0,04$ quando $X_0 = 0,8$ no caso Normal.	45
4.18	Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 100$ e $\sigma^2 = 0,04$ quando $X_0 = 1,9$ no caso Normal.	46
4.19	Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_0$ para $r = 3$ e $\sigma^2 = 0,08$ quando $\beta_0 = 0,1$ no caso t-Student.	48
4.20	Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_1$ para $r = 3$ e $\sigma^2 = 0,08$ quando $\beta_1 = 2$ no caso t-Student.	49
4.21	Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{X}_0$ para $r = 3$ e $\sigma^2 = 0,08$ no caso t-Student.	50

4.22 Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_0$ para $r = 20$ e $\sigma^2 = 0,08$ quando $\beta_0 = 0,1$ no caso t-Student.	51
4.23 Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_1$ para $r = 20$ e $\sigma^2 = 0,08$ quando $\beta_1 = 2$ no caso t-Student.	52
4.24 Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{X}_0$ para $r = 20$ e $\sigma^2 = 0,08$ no caso t-Student.	53
4.25 Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_0$ para $r = 100$ e $\sigma^2 = 0,08$ quando $\beta_0 = 0,1$ no caso t-Student.	54
4.26 Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_1$ para $r = 100$ e $\sigma^2 = 0,08$ quando $\beta_1 = 2$ no caso t-Student.	55
4.27 Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{X}_0$ para $r = 100$ e $\sigma^2 = 0,08$ no caso t-Student.	56
4.28 Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 3$ e $\sigma^2 = 0,08$ quando $X_0 = 0,01$ no caso t-Student.	57
4.29 Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 3$ e $\sigma^2 = 0,08$ quando $X_0 = 0,8$ no caso t-Student.	58
4.30 Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 3$ e $\sigma^2 = 0,08$ quando $X_0 = 1,9$ no caso t-Student.	59
4.31 Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 20$ e $\sigma^2 = 0,08$ quando $X_0 = 0,01$ no caso t-Student.	60
4.32 Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 20$ e $\sigma^2 = 0,08$ quando $X_0 = 0,8$ no caso t-Student.	61
4.33 Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 20$ e $\sigma^2 = 0,08$ quando $X_0 = 1,9$ no caso t-Student.	62
4.34 Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 100$ e $\sigma^2 = 0,08$ quando $X_0 = 0,01$ no caso t-Student.	63
4.35 Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 100$ e $\sigma^2 = 0,08$ quando $X_0 = 0,8$ no caso t-Student.	64

4.36	Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 100$ e $\sigma^2 = 0,08$ quando $X_0 = 1,9$ no caso t-Student.	65
4.37	Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_0$ para $r = 3$ quando $\beta_0 = 0,1$ no caso exponencial potência.	67
4.38	Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_1$ para $r = 3$ quando $\beta_1 = 2$ no caso exponencial potência.	68
4.39	Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{X}_0$ para $r = 3$ no caso exponencial potência.	69
4.40	Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_0$ para $r = 20$ quando $\beta_0 = 0,1$ no caso exponencial potência.	70
4.41	Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_1$ para $r = 20$ quando $\beta_1 = 2$ no caso exponencial potência.	71
4.42	Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{X}_0$ para $r = 20$ no caso exponencial potência.	72
4.43	Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_0$ para $r = 100$ quando $\beta_0 = 0,1$ no caso exponencial potência.	73
4.44	Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_1$ para $r = 100$ quando $\beta_1 = 2$ no caso exponencial potência.	74
4.45	Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{X}_0$ para $r = 100$ no caso exponencial potência.	75
4.46	Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 3$ quando $X_0 = 0,01$ no caso exponencial potência.	76
4.47	Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 3$ quando $X_0 = 0,8$ no caso exponencial potência.	77
4.48	Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 3$ quando $X_0 = 1,9$ no caso exponencial potência.	78
4.49	Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 20$ quando $X_0 = 0,01$ no caso exponencial potência.	79

4.50	Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 20$ quando $X_0 = 0,8$ no caso exponencial potência.	80
4.51	Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 20$ quando $X_0 = 1,9$ no caso exponencial potência.	81
4.52	Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 100$ quando $X_0 = 0,01$ no caso exponencial potência.	82
4.53	Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 100$ quando $X_0 = 0,8$ no caso exponencial potência.	83
4.54	Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 100$ quando $X_0 = 1,9$ no caso exponencial potência.	84
4.55	Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_0$ para $r = 3$ quando $\beta_0 = 0,1$ no caso logística tipo II.	86
4.56	Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_1$ para $r = 3$ quando $\beta_1 = 2$ no caso logística tipo II.	87
4.57	Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{X}_0$ para $r = 3$ no caso logística tipo II.	88
4.58	Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_0$ para $r = 20$ quando $\beta_0 = 0,1$ no caso logística tipo II.	89
4.59	Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_1$ para $r = 20$ quando $\beta_1 = 2$ no caso logística tipo II.	90
4.60	Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{X}_0$ para $r = 20$ no caso logística tipo II.	91
4.61	Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_0$ para $r = 100$ quando $\beta_0 = 0,1$ no caso logística tipo II.	92
4.62	Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_1$ para $r = 100$ quando $\beta_1 = 2$ no caso logística tipo II.	93
4.63	Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{X}_0$ para $r = 100$ no caso logística tipo II.	94

4.64	Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 3$ quando $X_0 = 0,01$ no caso logística tipo II.	95
4.65	Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 3$ quando $X_0 = 0,8$ no caso logística tipo II.	96
4.66	Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 3$ quando $X_0 = 1,9$ no caso logística tipo II.	97
4.67	Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 20$ quando $X_0 = 0,01$ no caso logística tipo II.	98
4.68	Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 20$ quando $X_0 = 0,8$ no caso logística tipo II.	99
4.69	Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 20$ quando $X_0 = 1,9$ no caso logística tipo II.	100
4.70	Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 100$ quando $X_0 = 0,01$ no caso logística tipo II.	101
4.71	Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 100$ quando $X_0 = 0,8$ no caso logística tipo II.	102
4.72	Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 100$ quando $X_0 = 1,9$ no caso logística tipo II.	103
5.1	Concentração (mg/l) e intensidade das soluções-padrão do elemento zinco. .	106
5.2	Estimativas dos parâmetros e erros padrão entre parênteses para os modelos de calibração propostos.	107
5.3	Crítérios de informação para os modelos de calibração propostos usando os dados de zinco de Brüggemann e Wennrich (2002).	107
5.4	Concentração e absorbância das soluções-padrão do elemento zinco.	108
5.5	Estimativas dos parâmetros e erros padrão entre parênteses para os modelos de calibração propostos.	109

5.6	Critérios de informação para os modelos de calibração propostos usando os dados de zinco de Neto et al. (2007).	109
-----	---	-----

Introdução

O problema de calibração é muito explorado na literatura devido a sua aplicabilidade nas mais diversas áreas do conhecimento. Não faltam exemplos práticos em que técnicas de calibração são aplicadas. A aferição de instrumentos de medição de grandezas físicas é um exemplo de aplicação na Engenharia e na Física (veja, por exemplo, Guimarães-Filho e Helene (2003)). Já na Medicina, a calibração é aplicada para avaliar os efeitos de dosagens de drogas ou calibrar instrumentos, como por exemplo, termômetros e medidores de pressão sanguínea (vide Costa e Caldas (2003)). Na área de Economia ou Administração, a calibração é utilizada para prever possíveis causas em cenários de instabilidade econômica vividos anteriormente (veja, por exemplo, McDonald (2009)). Na Biologia e na Química, a técnica de calibração é útil para determinar a composição de materiais, bem como a concentração de substâncias (veja, Thomas e Ge (2000)).

O problema de calibração é caracterizado pela relação entre duas variáveis X e Y através de uma função f conhecida. Em um primeiro momento, denominado experimento de calibração, selecionam-se n observações de uma variável aleatória Y , a partir de valores prefixados de X , a fim de estimar a função que relaciona as duas variáveis. Assim, Y e X podem se relacionar através do modelo $Y = f(X) + \epsilon$, em que ϵ é o erro do modelo. Em um segundo momento, na calibração propriamente dita, observam-se r ($r \geq 1$) variáveis aleatórias, que são r realizações de uma variável aleatória Y_0 , associadas a um valor desco-

nhcido X , aqui denotado por X_0 . O interesse reside em estimar este valor desconhecido X_0 baseado no conhecimento da função f .

Cabe aqui fazer uma diferenciação entre dois tipos de problemas de calibração abordados na literatura. Williams (1969a) abordou esse problema e os classificou convenientemente em “calibração absoluta” e “calibração comparativa”. A calibração absoluta utiliza uma medida padrão conhecida, ou então, é aplicada com erro experimental desprezível. Já na calibração comparativa, vários instrumentos ou técnicas de medida são calibrados e nenhum deles é considerado como medida padrão. Nesse tipo de calibração, o experimentador pretende determinar a relação entre diversos testes ou instrumentos que fornecem medidas indiretas similares, não existindo, porém, medidas padrões como referência. Vale ressaltar que no presente trabalho leva-se em consideração apenas a calibração absoluta, que será chamada simplesmente de calibração.

1.1 Exemplos de aplicação

A seguir ilustramos o problema de calibração com alguns exemplos práticos encontrados na literatura.

Exemplo 1

Branco (1997) ilustra a utilização de calibração aplicada à genética, conjecturando a situação de um possível acidente nuclear, onde um certo trabalhador foi exposto a uma dose de radiação desconhecida X_0 . O número de células efetivamente afetadas pela radiação foi determinado por meio de amostras de sangue do trabalhador e expresso por Y_0 . Por questões éticas, o estimador da dose X_0 de radiação recebida pelo trabalhador deve ser obtido em um experimento que envolvia medições laboratoriais que espelhem as mesmas características do hipotético acidente nuclear com cobaias, por exemplo. Assim, é suficiente

expor as cobaias a doses conhecidas de radiação $X_1, \dots, X_n$ e anotar os efeitos citogenéticos produzidos $Y_1, \dots, Y_n$.

Exemplo 2

Ramos (1987) descreve um exemplo interessante na área de Física. Uma partícula move-se em movimento uniforme a partir de um ponto de referência, segundo a equação, $D = a + bT$, em que D é a distância percorrida em determinado intervalo de tempo T . É assumido que o tempo pode ser observado sem erro de medida. Contudo, a distância D não pode ser medida exatamente, de modo que podemos somente observar o valor de Y , em que $Y = D + \epsilon$, ou seja, a verdadeira distância percorrida D mais um erro aleatório ϵ . Uma amostra de tamanho n é obtida pelo pesquisador prefixando o tempo T_i e observando as distâncias Y_i correspondentes. Assim, o pesquisador pode estimar o modelo $Y = a + bT + \epsilon$. Tendo o pesquisador observado que a partícula se moveu uma distância Y_0 , ele quer saber qual foi o tempo necessário T_0 para que a partícula percorresse essa distância Y_0 .

Exemplo 3

Ramos (1987) descreve uma aplicação na área Médica em que certo tipo de droga é usado para baixar a pressão sanguínea. Nota-se que o número de unidades que a pressão sanguínea se reduz é uma função da quantidade de droga administrada em um período de tempo, por exemplo, em uma semana. Nesse período de tempo, n pacientes recebem o tratamento com diferentes níveis X_i da droga, e os decréscimos da pressão sanguínea Y_i são então observados. Na aplicação do tratamento, um médico mede a pressão do paciente e verifica quantas unidades Y_0 devem ser reduzidas. O problema consiste, então, em saber quantas unidades da droga X_0 deve ser aplicada ao paciente para baixar Y_0 unidades da pressão.

Como pode ser observado, a calibração pode ser aplicada nas mais diversas áreas do

conhecimento, não obstante, nesta dissertação, o foco de aplicação é na área de química analítica, cujo interesse principal é utilizar a calibração e determinar a concentração de uma substância.

1.2 Histórico

É muito comum encontrarmos na literatura artigos que tratam do problema de calibração linear. Em geral, trabalha-se com a suposição que os erros de observação associados a variável aleatória Y possuem distribuição normal. Desta forma, o estimador de máxima verossimilhança ou mínimos quadrados de X_0 é chamado de estimador clássico. Um outro estimador muito utilizado na prática é o chamado estimador inverso, que é baseado na regressão inversa de X em Y , apesar de X não ser uma variável aleatória. Na regressão inversa supõe-se falsamente que os erros do modelo são independentes dos Y_i 's e através do método de mínimos quadrados obtém-se o estimador de X_0 .

Existe, no entanto, uma discussão acerca de qual dos estimadores pontuais é o melhor; se o clássico ou o inverso, e qual critério seria melhor para compará-los. Essa discussão começou a partir do trabalho de Eisenhart (1939) que alegou que o estimador clássico seria preferível, uma vez que o método inverso não apresentava a propriedade de ser um estimador de máxima verossimilhança. Krutchkoff (1967) deu novos rumos às pesquisas nessa área e endossou a discussão. Em seu artigo, ele verificou que o erro quadrático médio do estimador inverso era uniformemente menor que o do estimador clássico e que, portanto, deveria ser preferível. Posteriormente, contudo, Krutchkoff (1969) constatou que a superioridade do estimador inverso desaparecia quando o valor a ser estimado extrapolava os limites dos valores X_i prefixados. O critério de comparação utilizado por Krutchkoff (1969) foi discutido no trabalho de Williams (1969b), que mostrou que o erro quadrático médio do estimador clássico é infinito, enquanto que o estimador inverso é finito, para $n \geq 4$, em que n é o tamanho da amostra na primeira etapa. Outros critérios alternativos

para confrontar os dois estimadores foram propostos por Halperin (1970). Ele concluiu que se o parâmetro X_0 estiver próximo a média dos valores iniciais de X , o estimador inverso fornece melhores estimativas, e caso contrário, o estimador clássico é preferível. Berkson (1969) e Shukla (1972) estudaram o comportamento assintótico dos dois estimadores e obtiveram resultados equivalentes aos de Halperin (1970). Em seus artigos, eles obtiveram aproximações para o vício e o erro quadrático médio assintótico dos dois estimadores.

Shukla (1972) constatou que o número de observações n no experimento de calibração influencia no erro quadrático médio. Se n for pequeno, o estimador inverso produz um erro quadrático médio menor que o do estimador clássico. Porém, se o número de observações for grande na segunda etapa, não há garantias que o estimador inverso seja melhor que o clássico. Assim sendo, é aconselhável um estimador consistente para grandes amostras, sendo o estimador clássico adequado a tal situação. Um trabalho interessante foi proposto após essa discussão por Lwin (1981). Em seu artigo, ele obteve expressões aproximadas para os erros quadráticos médios dos estimadores para o modelo de calibração sem a suposição de erros normais. A única suposição era de que a distribuição dos erros pertence a uma família de distribuições com o quarto momento finito.

No Brasil, o problema de calibração passou a ser alvo de estudo na área de estatística a partir da década de 1980 com o trabalho de dissertação de mestrado de Ramos (1987), em que é apresentado um estudo sobre o modelo de calibração linear simples. Posteriormente, Galea-Rojas (1995) apresentou em sua tese de doutorado um estudo sobre calibração comparativa estrutural e funcional. Francisconi (1996) realizou um estudo para comparar instrumentos de medição usando calibração comparativa. Já Lima (1996) apresentou um estudo sobre calibração absoluta com erros nas variáveis em sua tese de doutorado. Em Branco (1997) é apresentada uma abordagem bayesiana para o modelo de calibração, em sua tese de doutorado, ela propôs a classe das distribuições elípticas que generalizou o uso de diversas distribuições para modelar o erro aleatório do ponto de vista bayesiano em problemas de calibração. Bolfarine et al. (1997) obtiveram aproximações de primeira ordem para o vício e o erro quadrático médio assintótico dos estimadores clássico e inverso con-

siderando o modelo de calibração funcional com a suposição de que a razão das variâncias é conhecida. Bolfarine et al. (1999a) fizeram um estudo similar considerando o modelo de calibração funcional com uma das variâncias conhecida. Já Bolfarine et al. (1999b) abordaram o modelo de calibração com erros de medida multiplicativos. Alfaro-Garcia (2000) estudou modelos de calibração comparativa em grupos em sua tese de doutorado.

Almeida (1999) apresentou um estudo sobre calibração absoluta funcional sem a suposição de normalidade, em sua dissertação de mestrado, ela considerou uma classe de modelos com o 4º momento finito e estudou o caso aditivo funcional com erros nas variáveis no modelo de calibração linear. Já Domingos-Filho (2000) também considerou em sua dissertação de mestrado uma classe de modelos com o 4º momento finito, no entanto, ele estudou o caso aditivo estrutural também com erros nas variáveis no modelo de calibração linear. Sousa (2002) apresentou em sua dissertação de mestrado um estudo sobre estimação robusta no modelo de calibração supondo para os erros do modelo de calibração linear simples uma distribuição t-Student e normal contaminada, vide também Lima et al. (2007). Blas (2005) estudou calibração controlada aplicada na química analítica em sua dissertação de mestrado, em que modelos de calibração homoscedástico e heteroscedástico foram propostos além de considerar erros de medida do tipo Berkson nas variáveis independentes, vide também Blas et al. (2007). Figueiredo (2009) estudou a calibração linear assimétrica, em que foram apresentados aspectos teóricos e aplicados do modelo de calibração linear com erros distribuídos conforme a distribuição normal-assimétrica e t-normal-assimétrica com enfoque frequentista e bayesiano. Blas (2010) apresentou um estudo sobre calibração com erros de medida do tipo Berkson na variável independente e considerou medidas repetidas na variável dependente, vide também Blas et al. (2011). Em seu trabalho considerou o modelo de calibração controlada supondo que os erros de medida seguem uma distribuição de mistura de escala normal, em que foram consideradas as distribuições normal, t-Student, Slash e normal contaminada.

1.3 Objetivos e organização da dissertação

Na literatura em modelos de calibração tem-se muitos exemplos que assumem que os erros associados a variável aleatória Y são normalmente distribuídos. A distribuição normal é sensível à presença de observações atípicas, portanto, nem sempre é adequada. Desta forma, distribuições alternativas de caudas pesadas podem ser estudadas a fim de contornar esse tipo de problema. A literatura apresenta alguns trabalhos que tratam do problema de calibração com distribuições alternativas a normal como suposição para os erros do modelo de calibração, como pode ser observado em Lwin (1981), Branco (1997), Almeida (1999), Domingos-Filho (2000), Lima et al. (2007) e Blas (2010) citados na seção anterior. Contudo, boa parte desses modelos propostos na literatura não levam em consideração a repetição na variável resposta ou propõem isoladamente distribuições alternativas para os erros do modelo de calibração. O ponto de inserção deste trabalho está exatamente na flexibilidade da suposição de normalidade na modelagem do problema de calibração, pressupondo que a distribuição dos erros aleatórios pertence à classe de distribuições simétricas e considerando repetições na variável resposta com aplicação na química analítica. Este trabalho é composto por mais cinco capítulos e o conteúdo deles é resumido a seguir.

No Capítulo 2 inserimos o problema de calibração na química analítica e fazemos uma breve revisão sobre o modelo de calibração linear simples, assim como o modelo de calibração normal com repetições. Descrevemos os modelos e apresentamos os seus estimadores.

No Capítulo 3 é apresentada a contribuição do presente trabalho. Aqui é abordado o estudo do problema de calibração linear com repetições na variável resposta supondo erros simétricos, sendo estudadas, além da distribuição normal, a t-Student, exponencial potência e logística tipo II. Descrevemos o modelo de calibração linear com repetições na variável resposta e supondo erros simétricos, aqui denominado M-proposto; apresentamos a estimação dos parâmetros e calculamos a matriz de informação de Fisher.

No Capítulo 4 são apresentados resultados de simulação para avaliar a performance dos

estimadores dos parâmetros para as diferentes distribuições usadas neste trabalho.

No Capítulo 5 são apresentados exemplos de aplicação a fim de verificar a adequabilidade do M-proposto do Capítulo 3.

O Capítulo 6 é destinado às considerações finais do trabalho, bem como às sugestões de pesquisas para trabalhos futuros.

Modelo de calibração linear simples

Neste capítulo, descrevemos um pouco sobre a área de aplicação do presente trabalho. A motivação do nosso trabalho são os processos da área de química analítica, cujo interesse em utilizar a calibração é determinar a concentração de uma substância química. Apresentamos também uma breve revisão sobre o modelo de calibração linear simples, assim como também o modelo de calibração linear normal com repetições na variável resposta.

2.1 Introdução

Segundo Ferreira et al. (1999), a calibração é um processo para obter um algoritmo matemático com a propriedade de interesse obtida a partir dos resultados registrados em um instrumento. O algoritmo matemático deve ser entendido como uma função matemática que relaciona duas variáveis, por exemplo, X e Y . Os instrumentos de laboratório não produzem diretamente as concentrações como resposta, mas registram resultados que dependem da concentração de um determinado componente químico¹. O espectrofotômetro, por exemplo,

¹Aqui, componente químico deve ser entendido como elemento químico ou composto químico.

é um instrumento de laboratório que registra absorvâncias que naturalmente dependem da concentração de um determinado componente químico. Assim, a associação entre o instrumento de laboratório e o algoritmo matemático funciona como se fosse um novo “instrumento” e a partir desse algoritmo é possível prever a concentração de um componente químico de interesse em amostras de composição desconhecida, utilizando para o qual a resposta instrumental das mesmas.

Neste sentido, o modelo de calibração é caracterizado pela observação de duas variáveis X e Y , que se relacionam através de uma função conhecida f . Assim, X representa o valor de uma característica de interesse e Y , por outro lado, representa a variável resposta que está relacionada a X .

Assim, na química analítica, temos que a calibração estabelece a relação entre o domínio das amostras e o domínio das medidas, cuja relação é fornecida pelo instrumento de leitura das amostras, que pode ser um sinal observado, como por exemplo, no caso do método de espectrometria de plasma o sinal é a intensidade, e para o método de absorção atômica é a absorvância².

Segundo Pimentel et al. (2008), a relação dos domínios é expressada por uma função do tipo $X = g(Q)$ que representa a associação entre alguma grandeza específica das espécies químicas, como número atômico ou de massa, e suas quantidades ou concentrações X em uma dada amostra. Na Figura 2.1, encontrada em Pimentel et al. (2008), podemos observar a relação entre o domínio das amostras e o domínio das medidas. A Figura 2.1, lado esquerdo mostra a associação entre os analitos³ Q que pode ser, por exemplo, alumínio, cobre, zinco, etc e suas quantidades ou concentrações X em uma dada amostra. Já na Figura 2.1, lado

²Absorvância pode ser entendida como a capacidade natural dos materiais em absorver radiações em uma determinada frequência específica. As medidas de absorvâncias são comumente utilizadas em química analítica, uma vez que a absorvância é proporcional à espessura de uma amostra e a concentração da substância presente na mesma.

³Analito pode ser definido como um constituinte químico ou substância que é o foco na análise química. No contexto apresentado se refere as substâncias de interesse.

direito é observada uma função de medida do tipo $Y = f(Z)$, em que Y representa um sinal observado em uma dada posição Z no caso de espectrometria. A resposta do instrumento (Y) está associada a uma posição (z) que corresponde a um pico característico de um analito presente na amostra.

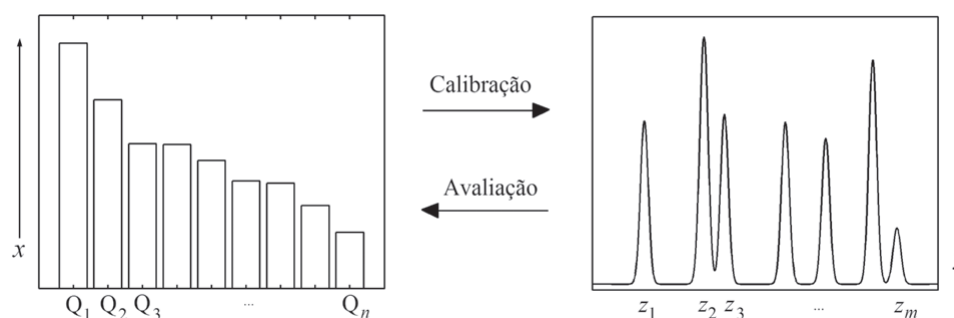


Figura 2.1: Relação entre o domínio das amostras e o domínio das medidas na análise química.

A partir dessa relação é possível estabelecer várias relações entre as grandezas associadas a ela, e o caso mais comum é estabelecer a relação entre a concentração de um determinado analito X e o sinal Y associado a ele, obtendo-se a partir dessa relação a função de calibração ou curva analítica. Uma vez estabelecida essa relação é possível fazer a avaliação e prever, em amostras desconhecidas, a concentração de um determinado analito de interesse. Dessa forma, modelos de calibração podem ser utilizados para realizar tal intento.

Os modelos de calibração consideram dois estágios, descritos a seguir:

No primeiro estágio são fixadas n quantidades do analito X nas amostras padrão, e para cada uma delas o instrumento fornece as respostas Y_i , $i = 1, 2, \dots, n$, em termos de uma unidade de medida, de modo que esses dados constituem o experimento de calibração e são usados para estimar a função que relaciona as duas variáveis. Uma representação esquemática correspondente à obtenção das medidas de leitura do instrumento pode ser observado na Figura 2.2, retirada do artigo de Ferreira et al. (1999). Na figura é esquematizado o processo de obtenção da variável resposta (Y) nos laboratórios de química. Através

de procedimentos padrões as amostras são preparadas contendo um determinado analito de interesse e colocadas em um instrumento, na figura representado por um espectrofotômetro, em que este instrumento está acoplado a um computador. No caso do espectrofotômetro, o instrumento fornece como resultado espectros, que correspondem a picos como os observados na Figura 2.1, lado direito e que caracterizam a presença de analitos na amostra. Através do interfaciamento do instrumento com o computador é possível converter esses resultados em valores numéricos através da utilização de leis químicas, e então, o computador fornece a resposta (Y), neste caso a absorbância.

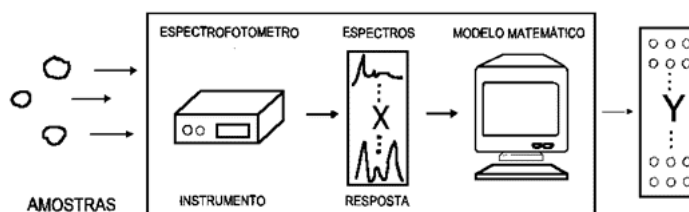


Figura 2.2: Representação esquemática do experimento de calibração.

No segundo estágio da calibração são preparadas r soluções-amostra com a mesma concentração desconhecida X_0 e obtém-se a resposta Y_{0i} , $i = n + 1, n + 2, \dots, n + r$. A partir dos dados obtidos nos dois estágios é possível estimar a concentração de X_0 .

2.2 Modelo de calibração linear simples

O modelo de calibração linear simples, aqui denotado por M-usual, é definido pelas seguintes equações

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_i + \epsilon_i, \quad i = 1, \dots, n \quad (2.1a)$$

$$Y_{0i} = \beta_0 + \beta_1 X_0 + \epsilon_{0i}, \quad i = n + 1, \dots, n + r. \quad (2.1b)$$

em que $\epsilon_1, \dots, \epsilon_n$ e $\epsilon_{01}, \dots, \epsilon_{0r}$ são variáveis normais independentes e identicamente distribuídos (i.i.d) com média zero e variância σ^2 . Além disso, $X_1, \dots, X_n$ são constantes

conhecidas e $\beta_0, \beta_1, X_0, \sigma^2$ são parâmetros desconhecidos.

Na química analítica X_0 representa a concentração desconhecida. Na literatura tem-se dois tipos de estimadores para essa quantidade. Assumindo a suposição de normalidade para os erros do modelo, o estimador de máxima verossimilhança (EMV) é igual ao estimador de mínimos quadrados (EMQ), conhecido como estimador clássico e o outro estimador é conhecido como o estimador inverso (Shukla, 1972), o qual é baseado na regressão de X em Y e é obtido pelo método de mínimos quadrados. Aqui vale ressaltar que no cálculo do estimador inverso X é visto como variável aleatória, mas na realidade X_i ($i = 1, \dots, n$) são constantes conhecidas.

O EMV para X_0 é dado por

$$\hat{X}_{0C} = \frac{\bar{Y}_0 - \hat{\beta}_0}{\hat{\beta}_1} \quad (2.2)$$

Para obter o estimador inverso consideramos $\hat{\gamma}$ e $\hat{\phi}$ como os estimadores de mínimos quadrados de γ e ϕ obtidos do modelo $x_i = \gamma + \phi y_i + \epsilon_i$, $i = 1, \dots, n$, em que $\gamma = -\frac{\beta_0}{\beta_1}$ e $\phi = \frac{1}{\beta_1}$, então

$$\hat{X}_{0I} = \hat{\gamma} + \hat{\phi} \bar{Y}_0 \quad (2.3)$$

é o estimador inverso de X_0 .

Detalhes sobre esses estimadores podem ser encontrados em Lima (1996) e Blas (2005).

2.3 Modelo de calibração normal com repetições

O modelo de calibração com repetições na variável resposta foi estudado em Blas (2010) e Blas et al. (2011) e definido pelas seguintes equações,

$$Y_{ij} = \beta_0 + \beta_1 X_i + \epsilon_{ij}, \quad j = 1, \dots, m_i \quad \text{e} \quad i = 1, \dots, n \quad (2.4a)$$

$$Y_{0i} = \beta_0 + \beta_1 X_0 + \epsilon_{0i}, \quad i = n+1, \dots, n+r. \quad (2.4b)$$

No primeiro estágio, equação (2.4a), observa-se as medidas (X_i, Y_{ij}) com $j = 1, \dots, m_i$ e $i = 1, \dots, n$. No segundo estágio, equação (2.4b), tem-se as respostas do instrumento Y_{0i} 's como uma função da concentração desconhecida X_0 das soluções amostras.

Considera-se como suposições do modelo que ϵ_{ij} e $\epsilon_{0i} \stackrel{iid}{\sim} N(0, \sigma^2)$. A variável X_i é um valor fixo e os parâmetros do modelo são β_0 , β_1 , X_0 e σ^2 , cujo interesse principal é estimar o valor de X_0 .

Os EMV do modelo com repetições na variável dependente são dados por

$$\begin{aligned} \hat{\beta}_0 &= \bar{Y} - \hat{\beta}_1 \bar{X}, & \hat{\beta}_1 &= \frac{S_{XY}}{S_{XX}}, & \hat{X}_0 &= \frac{\bar{Y}_0 - \hat{\beta}_0}{\hat{\beta}_1}, \\ \hat{\sigma}^2 &= \frac{1}{r+N} \left[\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{m_i} (Y_{ij} - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 X_i)^2 + \sum_{i=n+1}^{n+r} (Y_{0i} - \bar{Y}_0)^2 \right], \end{aligned}$$

em que

$$\begin{aligned} \bar{X} &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i, \quad \bar{Y} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{m_i} Y_{ij}, \quad S_{XY} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{m_i} (X_i - \bar{X})(Y_{ij} - \bar{Y}), \\ S_{XX} &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n m_i (X_i - \bar{X})^2, \quad \bar{Y}_0 = \frac{1}{r} \sum_{i=n+1}^{n+r} Y_{0i}, \quad N = \sum_{i=1}^n m_i. \end{aligned}$$

Observa-se que quando $m_i = 1$ tem-se o M-usual como caso particular do modelo com repetições.

Calibração linear com repetições e erros simétricos

Neste capítulo apresentamos o modelo de calibração linear com repetições na variável dependente supondo que os erros pertencem à classe de distribuições simétricas. Este modelo é a nossa proposta nesta dissertação e o chamaremos de M-proposto.

3.1 Introdução

Na química analítica o uso da calibração é comumente utilizada para determinar a concentração de analitos em amostras desconhecidas. Um processo minucioso é realizado em laboratório químico para preparar amostras a serem analisadas, para detalhes ver Blas (2005, Cap. 3, pg. 19). De uma forma geral, a rotina constitui-se em preparar amostras padrão, em que são conhecidas as concentrações (X) nessas amostras e que, posteriormente, são lidas em um instrumento de medição que fornece uma medida correspondente a variável resposta (Y), cuja etapa corresponde a equação do primeiro estágio do modelo de calibração. Na segunda etapa, amostras para análise com uma mesma concentração desconhecida (X_0) são lidas no instrumento de medição e as medidas correspondentes a

concentração desconhecida das amostras são registradas pelo instrumento e correspondem a variável (Y_0) do segundo estágio. Levando-se em conta as equações dos dois estágios, que compõem o modelo de calibração, estima-se a concentração de X_0 .

Nas rotinas de laboratório de análise química é muito comum a realização de repetições na variável resposta, isto porque, no processo de preparação das amostras padrão são cometidos erros que podem ser desprezíveis ou não e, para minimizar esse problema, os analistas químicos fazem repetições na variável resposta (Y). São conhecidos dois tipos de repetições dentro das rotinas de laboratório, uma é conhecida por repetição instrumental e a outra por repetição autêntica. A repetição instrumental consiste em medir mais de uma vez, no instrumento de medição, uma mesma amostra padrão. Já a repetição autêntica consiste em medir no instrumento de medição um mesmo nível de concentração, em diferentes amostras padrão preparadas sob as mesmas condições. A repetição instrumental não demanda tanto custo mas a repetição autêntica, dependendo do que se tenha interesse em analisar, é bastante custoso do ponto de vista econômico e temporal. Uma observação merece ser feita acerca dos procedimentos realizados em análise química, em geral, na análise de rotina de laboratório não se trabalha com as medições em sua totalidade, na prática, utiliza-se a média das repetições para compor uma observação (Y) do primeiro estágio. Essa prática dos laboratórios é, possivelmente, devido à falta de modelos de calibração na literatura que levem em conta as medidas repetidas.

Um outro ponto que pode ser observado nessa rotina laboratorial é o registro, não raro, nos instrumentos que fornecem a resposta (Y) de valores que destoam dos demais. Isto ocorre, possivelmente, por conta de condições ambientais que influenciam a amostra padrão a ser lida pelo instrumento, como por exemplo o aumento ou diminuição da temperatura ambiente, ou até mesmo, por conta de má manipulação das amostras padrão. O que é comum ser feito, nessas ocasiões, é desconsiderar a observação atípica para efeito de análise e uma nova amostra padrão deve ser preparada para substituir a amostra “ruim”. Do ponto de vista prático isto é custoso, uma vez que deve ser despendido algum tempo para preparar uma nova amostra padrão e, dependendo da análise de interesse, pode ser custoso

economicamente, uma vez que determinados procedimentos químicos requerem um alto custo de utilização.

Como é bem sabido na literatura, o modelo de calibração assume que os erros associados a variável resposta Y são normalmente distribuídos, veja por exemplo, Krutchkoff (1967), Shukla (1972), Lima (1996), Blas (2005), Blas et al. (2007), Blas e Sandoval (2010). Não obstante, sabe-se na literatura que observações atípicas podem influenciar significativamente a modelagem sob a suposição de erros normalmente distribuídos. Desta forma, o foco principal deste trabalho é estudar outras distribuições com caudas mais pesadas do que a normal para os erros do modelo de calibração linear considerando repetições na variável resposta. A classe da família simétrica de distribuições é utilizada como suposição para os erros do modelo. Várias distribuições importantes pertencem a essa classe como a distribuição normal, t-Student, exponencial potência, logística do tipo II, entre outras. Há ainda generalizações das distribuições citadas que também pertencem a esta classe, como a distribuição t-Student generalizada, logística generalizada, Kotz generalizada, dentre outras distribuições.

O ponto de inserção deste trabalho é motivado na inadequabilidade da distribuição normal na modelagem do problema de calibração, pressupondo que a distribuição dos erros aleatórios pertence a classe de distribuições simétricas, que também inclui a normal. Assim, como alternativa a normal, neste trabalho abordaremos mais três distribuições pertencente a essa família de distribuições, a t-Student, exponencial potência e logística tipo II. A possibilidade de um leque maior para a distribuição dos erros do modelo de calibração, juntamente com a necessidade de propor um modelo menos sensível a observações atípicas considerando repetições na variável resposta foi a motivação para realização desse trabalho. Como já citado no Capítulo 1, a literatura já apresenta trabalhos que supõem distribuições alternativas a distribuição normal como suposição para os erros do modelo de calibração linear, vide por exemplo Branco (1997), Lima et al. (2007), Figueiredo (2009) e Blas (2010). Outros trabalhos fazem suposições menos restritivas sobre os erros do modelo de calibração, como pode ser observado em Lwin (1981), Almeida (1999) e Domingos-Filho

(2000). A diferença basilar de todos esses trabalhos propostos na literatura para o apresentado nesta dissertação está exatamente na consideração da repetição na variável resposta do presente trabalho, assim como o estudo das propriedades dos estimadores para o modelo de calibração linear supondo distribuições ainda não exploradas na literatura, como a exponencial potência e a logística do tipo II. Desta forma, considerando repetição na resposta, pretende-se aproveitar toda a informação disponível em laboratório de análise química para propor um modelo o mais próximo da realidade vivida nessa área.

3.2 Distribuições simétricas

O uso das distribuições simétricas (ou elípticas no caso multivariado) passou a desenvolver-se com um interesse crescente a partir da década de 70 com a publicação do trabalho de Kelker (1970). Aspectos teóricos e aplicados dessa classe de distribuições têm sido bastante abordados nas últimas décadas, vide por exemplo, Fang et al. (1990), Fang e Zhang (1990) e Fang e Anderson (1990).

A seguir é apresentada a definição da classe simétrica univariada e alguns resultados teóricos pertinentes a essa classe.

Definição 1 Dizemos que uma variável aleatória (v.a.) Y tem distribuição simétrica com parâmetro de locação $\mu \in \mathbb{R}$ e parâmetro de escala $\phi > 0$, se sua função densidade de probabilidade for dada por

$$f(y; \mu, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\phi}} h \left[\frac{(y - \mu)^2}{\phi} \right], \quad y \in \mathbb{R}, \quad (3.1)$$

para alguma função $h(\cdot)$ chamada função geradora de densidades, com $h(u)$ definida em $\mathbb{R}^+$, para $u > 0$ e $\int_0^{+\infty} u^{-\frac{1}{2}} h(u) du = 1$.

Esta última condição garante que $f(y; \mu, \phi)$ é uma função de densidade (ver Fang et al. (1990)). A função de densidade dada em (3.1) será denotada por $S(\mu, \phi, h)$.

Fang et al. (1990) verificou que se $y \sim S(\mu, \phi, h)$ então a função característica de Y , $\psi_Y(t) = \mathbb{E}(e^{ity})$ é dada por $e^{it\mu}\psi(t^2\phi)$, $t \in \mathbb{R}$ para alguma função ψ , com $\psi(u) \in \mathbb{R}$ para $u > 0$. Se existem, a $\mathbb{E}(Y) = \mu$ e $Var(Y) = \delta\phi$, em que $\delta > 0$ é uma constante obtida a partir da derivada da função característica avaliada em zero dada por $\delta = -2\psi'(0)$ com $\psi'(0) = \partial\psi(u)/\partial u|_{u=0}$ independente dos parâmetros μ e ϕ . Kelker (1970) constatou que se $u^{-1/2(k+1)}h(u)$ for integrável, então o k -ésimo momento de Y existe. Uma outra importante propriedade herdada da distribuição normal vem do fato que, se temos $Y \sim S(\mu, \phi, h)$ então $a + bY \sim S(a + b\mu, b^2\phi, h)$, em que $a, b \in \mathbb{R}$ com $b \neq 0$, isto é, a distribuição de qualquer combinação linear de uma v.a. com distribuição simétrica, também é simétrica. Desta forma, tem-se que a função densidade de probabilidade de $z = \frac{(y-\mu)}{\sqrt{\phi}}$ é $f(z; 0, 1) = h(z^2)$, $z \in \mathbb{R}$, isto é, a forma padrão da distribuição simétrica em que $z \sim S(0, 1, h)$. Outras propriedades podem ser encontradas em Fang et al. (1990) e Cysneiros et al. (2005).

3.3 M-proposto

O modelo proposto com repetições e erros simétricos é definido pelas seguintes equações

$$Y_{ij} = \mu_{ij} + \epsilon_{ij}, \quad j = 1, \dots, m_i \quad \text{e} \quad i = 1, \dots, n \quad (3.2a)$$

$$Y_{0i} = \mu_{0i} + \epsilon_{0i}, \quad i = n+1, \dots, n+r \quad (3.2b)$$

em que $\mu_{ij} = \beta_0 + \beta_1 X_i$ e $\mu_{0i} = \beta_0 + \beta_1 X_0$ são as componentes sistemáticas do primeiro e segundo estágios respectivamente que são funções contínuas e diferenciáveis em relação aos parâmetros desconhecidos de X_0 e do vetor $\boldsymbol{\beta} = (\beta_0, \beta_1)^\top$. $\mathbf{Y}_i = (Y_{i1}, Y_{i2}, \dots, Y_{im_i})^\top$ e $\mathbf{Y}_0 = (Y_{0n+1}, Y_{02}, \dots, Y_{0n+r})^\top$ correspondem ao vetor de respostas observadas no primeiro e segundo estágios, respectivamente, e $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_n)$ corresponde ao vetor de variáveis explicativas no primeiro estágio.

No primeiro estágio, observa-se as medidas (X_i, Y_{ij}) com $j = 1, \dots, m_i$ e $i = 1, \dots, n$, em que $\epsilon_{ij} \stackrel{iid}{\sim} S(0, \phi, h)$. No segundo estágio, tem-se as respostas do instrumento Y_{0i} como

uma função da concentração desconhecida X_0 das soluções amostras e $\epsilon_{0i} \stackrel{iid}{\sim} S(0, \phi, h_0)$. As funções h e h_0 definem a distribuição pertencente à classe simétrica de distribuições.

Temos que ϵ_{ij} e ϵ_{0i} são não correlacionados. Assim, a densidade de Y_{ij} e Y_{0i} são dadas por

$$f_{Y_{ij}}(y_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{\phi}} h(u_{ij}) \quad \text{e} \quad f_{Y_{0i}}(y_{0i}) = \frac{1}{\sqrt{\phi}} h_0(u_{0i}), \quad (3.3)$$

em que $u_{ij} = (y_{ij} - \mu_{ij})^2 / \phi$, $u_{0i} = (y_{0i} - \mu_{0i})^2 / \phi$ onde $y_{ij} \sim S(\mu_{ij}, \phi, h)$ e $y_{0i} \sim S(\mu_{0i}, \phi, h_0)$. Portanto, os modelos de calibração lineares simétricos são definidos por (3.1), (3.2a) e (3.2b).

3.4 Estimação do modelo proposto

Para obtenção dos estimadores dos parâmetros do modelo proposto (M-proposto) utilizaremos o método de máxima verossimilhança, que consiste em maximizar a função de verossimilhança ou o logaritmo da função de verossimilhança.

A partir do logaritmo da função de verossimilhança podemos obter a função escore e a matriz de informação de Fisher, derivando-a com relação aos parâmetros desconhecidos, no entanto, algumas condições de regularidade devem ser satisfeitas, veja maiores detalhes em Cox e Hinkley (1974) e Serfling (1980).

O logaritmo da função de verossimilhança de $\theta = (\beta_0, \beta_1, X_0, \phi)^\top$ para o M-proposto é dado por

$$l(\theta) = -\frac{1}{2} \log \phi \left(\sum_{i=1}^n m_i + r \right) + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{m_i} \log h(u_{ij}) + \sum_{i=n+1}^{n+r} \log h_0(u_{0i}). \quad (3.4)$$

3.4.1 Função escore e Matriz de Informação de Fisher

Na literatura é usual definir $W_h(u)$ e $W'_h(u)$ de tal forma que $W_h(u) = \partial \log[h(u)]/\partial u$ e $W'_h(u) = \partial W_h(u)/\partial u$. Para obter a função escore para os parâmetros do modelo precisamos obter as derivadas em relação aos parâmetros de (3.4),

$$\begin{aligned} \mathbf{U}(\beta_0) &= \frac{\partial l(\theta)}{\partial \beta_0} = -\frac{2}{\phi} \left\{ \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{m_i} W_h(u_{ij})(y_{ij} - \mu_{ij}) + \sum_{i=n+1}^{n+r} W_{h_0}(u_{0i})(y_{0i} - \mu_{0i}) \right\}, \\ \mathbf{U}(\beta_1) &= \frac{\partial l(\theta)}{\partial \beta_1} = -\frac{2}{\phi} \left\{ \sum_{i=1}^n x_i \sum_{j=1}^{m_i} W_h(u_{ij})(y_{ij} - \mu_{ij}) \right. \\ &\quad \left. + X_0 \sum_{i=n+1}^{n+r} W_{h_0}(u_{0i})(y_{0i} - \mu_{0i}) \right\}, \\ \mathbf{U}(X_0) &= \frac{\partial l(\theta)}{\partial X_0} = -\frac{2\beta_1}{\phi} \sum_{i=n+1}^{n+r} W_{h_0}(u_{0i})(y_{0i} - \mu_{0i}), \\ \mathbf{U}(\phi) &= \frac{\partial l(\theta)}{\partial \phi} = -\frac{1}{2\phi} \left[\sum_{i=1}^n m_i + r \right] - \frac{1}{\phi} \left\{ \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{m_i} W_h(u_{ij})u_{ij} + \sum_{i=n+1}^{n+r} W_{h_0}(u_{0i})u_{0i} \right\}. \end{aligned}$$

As expressões $W_h(u)$ e $W'_h(u)$ para as distribuições simétricas utilizadas nesse trabalho são apresentadas na Tabela 3.1.

Tabela 3.1: Expressões para $W_h(u)$ e $W'_h(u)$ para algumas distribuições simétricas.

Distribuição	$W_h(u)$	$W'_h(u)$
Normal	$-\frac{1}{2}$	0
t-Student (v)	$-\frac{(v+1)}{2(v+u)}$	$\frac{(v+1)}{2(v+u)^2}$
Exponencial Potência (k)	$-\frac{1}{2(k+1)u^{k/(k+1)}}$	$\frac{k}{2(k+1)^2 u^{(2k+1)/(k+1)}}$
Logística-II	$-\frac{\exp(-\sqrt{u})-1}{(-2\sqrt{u})[1+\exp(-\sqrt{u})]}$	$\frac{2\sqrt{u} \exp(-\sqrt{u}) + \exp(-2\sqrt{u}) - 1}{-4u^{3/2}[1+\exp(-\sqrt{u})]^2}$

FONTE: Cysneiros et al. (2005)

Para obtenção dos estimadores de máxima verossimilhança igualamos as funções escore a zero, contudo, observa-se que as estimativas de máxima verossimilhança dos parâmetros do

modelo não podem ser obtidas em forma analítica, desta forma, precisam ser obtidas por maximização numérica do logaritmo da função de verossimilhança usando um algoritmo de otimização não-linear, tais como Newton-Raphson ou o método scoring de Fisher (para detalhes ver Nocedal e Wright (1999)). Para a estimação dos parâmetros nos modelos de calibração lineares simétricos utilizamos um processo iterativo conjunto. Assim, temos que o processo iterativo assume a seguinte forma

$$\boldsymbol{\beta}^{(m+1)} = \{\mathbf{X}^{(m)\top} \mathbf{D}(v^{(m)}) \mathbf{X}^{(m)}\}^{-1} \mathbf{X}^{(m)\top} \mathbf{D}(v^{(m)}) \mathbf{y} \quad (3.5)$$

$$\phi^{(m+1)} = \frac{1}{N+r} \{\mathbf{y} - \mathbf{X}^{(m)} \boldsymbol{\beta}^{(m+1)}\}^\top \mathbf{D}(v^{(m+1)}) \{\mathbf{y} - \mathbf{X}^{(m)} \boldsymbol{\beta}^{(m+1)}\} \quad (3.6)$$

$$X_0^{(m+1)} = \operatorname{argmax}_{X_0} \{l(\boldsymbol{\beta}^{(m+1)}, \phi^{(m+1)}, X_0)\} \quad (m = 0, 1, 2, \dots) \quad (3.7)$$

em que a matriz $\mathbf{X}^{(m)}$ contém as variáveis explicativas do primeiro e segundo estágios, assim como o vetor $\mathbf{y}$ que, além dos valores observados do primeiro estágio também incorpora os valores referentes ao segundo estágio. $\mathbf{D}(v) = \operatorname{diag}\{v_1, v_2, \dots, v_n, v_{n+1}, \dots, v_{n+r}\}$ em que $v_i = -2W_h(\cdot)$. O algoritmo para obtenção dos estimadores de máxima verossimilhança para o M-proposto pode ser descrito da seguinte maneira:

No passo $m = 0$, utiliza-se algum valor inicial para X_0 , neste caso pode ser considerado o estimador clássico como valor inicial. Com este valor alimenta-se as matrizes $\mathbf{X}^{(0)}$ e $\mathbf{D}(v^{(0)})$ constituindo os r últimos elementos das respectivas matrizes. Com essas matrizes estima-se $\boldsymbol{\beta}^{(1)}$ e, posteriormente, com $\boldsymbol{\beta}^{(1)}$ atualiza-se a matriz $\mathbf{D}(v^{(1)})$ e estima-se $\phi^{(1)}$. Com essas estimativas de $\boldsymbol{\beta}^{(1)}$ e $\phi^{(1)}$ utiliza-se um algoritmo do tipo BFGS implementado no *software* R para encontrar o argumento de X_0 que maximiza o logaritmo da função de verossimilhança, e assim, obtem-se $X_0^{(1)}$. Um critério de convergência é adotado para checar convergência de X_0 dado por $\left\| \frac{X_0^{(m+1)} - X_0^{(m)}}{X_0^{(m+1)}} \right\|$. Se a condição de convergência for suficientemente pequena, então o algoritmo para e $X_0^{(1)}$ é a estimativa de máxima verossimilhança de X_0 . Caso contrário, o algoritmo segue para o passo $m = 1$, em que $X_0^{(1)}$ alimenta as matrizes $\mathbf{X}^{(1)}$ e $\mathbf{D}(v^{(1)})$ como definida anteriormente e o algoritmo segue a mesma sequência definida para o passo $m = 0$ até que seja obtida convergência. Vale ressaltar que a condição de convergência adotada, em alguns casos, pode não ser obedecida. Observar que não foram

definidos critérios de convergência para $\beta^{(m+1)}$ e $\phi^{(m+1)}$, uma vez que foram utilizadas funções já implementadas computacionalmente com critérios de convergência internamente definidos.

Supondo satisfeitas as condições de regularidade, o cálculo da matriz de informação de Fisher pode ser definido como segue

$$K_{\theta} = \mathbb{E} \left[\left(\frac{\partial l(\theta)}{\partial \theta} \right)^2 \right] \quad (3.8)$$

Assim, a matriz de informação de Fisher para θ pode ser expressa da seguinte maneira

$$\mathbf{K}_{\theta} = \begin{bmatrix} K_{\beta_0} & K_{\beta_0\beta_1} & K_{\beta_0X_0} & K_{\beta_0\phi} \\ & K_{\beta_1} & K_{\beta_1X_0} & K_{\beta_1\phi} \\ & & K_{X_0} & K_{X_0\phi} \\ & & & K_{\phi} \end{bmatrix},$$

Os elementos que compõem a matriz de informação de Fisher são dadas por

$$\begin{aligned} K_{\beta_0} &= \frac{4}{\phi} \left\{ Nd_h + rd_{h_0} \right\} & K_{\beta_0\beta_1} &= \frac{4}{\phi} \left\{ \sum_{i=1}^n m_i X_i d_h + r X_0 d_{h_0} \right\} \\ K_{\beta_1} &= \frac{4}{\phi} \left\{ \sum_{i=1}^n m_i X_i^2 d_h + r X_0^2 d_{h_0} \right\} & K_{\beta_0X_0} &= \frac{4}{\phi} r \beta_1 d_{h_0} \\ K_{X_0} &= \frac{4}{\phi} r \beta_1^2 d_{h_0} & K_{\beta_1X_0} &= \frac{4}{\phi} r \beta_1 X_0 d_{h_0} \\ K_{\phi} &= \frac{1}{4\phi^2} \left\{ N(4f_h - 1) + r(4f_{h_0} - 1) \right\} & K_{\beta_0\phi} &= K_{\beta_1\phi} = K_{X_0\phi} = 0 \end{aligned}$$

em que $N = \sum_{i=1}^n m_i$, $d_h = \mathbb{E}[W_h^2(U)U]$, $d_{h_0} = \mathbb{E}[W_{h_0}^2(U_0)U_0]$, $f_h = \mathbb{E}[W_h^2(U)U^2]$, $f_{h_0} = \mathbb{E}[W_{h_0}^2(U_0)U_0^2]$.

Para exemplificar como foram obtidas as expressões para a matriz de informação será

mostrado a obtenção de K_{β_0} . Partindo da função escore de $U(\beta_0)$ calculamos o seguinte produto

$$\begin{aligned} \mathbf{U}(\beta_0) \cdot \mathbf{U}(\beta_0) &= \left[-\frac{2}{\phi} \left\{ \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{m_i} \frac{h'(u_{ij})}{h(u_{ij})} (y_{ij} - \mu_{ij}) + \sum_{i=n+1}^{n+r} \frac{h'(u_{0i})}{h(u_{0i})} (y_{0i} - \mu_{0i}) \right\} \right] \\ &\quad \times \left[-\frac{2}{\phi} \left\{ \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{m_i} \frac{h'(u_{ij})}{h(u_{ij})} (y_{ij} - \mu_{ij}) + \sum_{i=n+1}^{n+r} \frac{h'(u_{0i})}{h(u_{0i})} (y_{0i} - \mu_{0i}) \right\} \right] \end{aligned}$$

Como temos observações i.i.d consideramos o caso para uma única observação para facilidade de cálculo e obtemos o seguinte produto

$$\begin{aligned} \mathbf{U}(\beta_0) \cdot \mathbf{U}(\beta_0) &= \frac{4}{\phi^2} \left\{ \left[\frac{h'(u_{ij})}{h(u_{ij})} \right]^2 (y_{ij} - \mu_{ij})^2 + 2 \frac{h'(u_{ij})}{h(u_{ij})} (y_{ij} - \mu_{ij}) \frac{h'(u_{0i})}{h(u_{0i})} (y_{0i} - \mu_{0i}) \right. \\ &\quad \left. + \left[\frac{h'(u_{0i})}{h(u_{0i})} \right] (y_{0i} - \mu_{0i})^2 \right\} \end{aligned}$$

Utilizando a definição de $W_h(\cdot)$ e reorganizando a expressão acima temos que

$$\mathbf{U}(\beta_0) \cdot \mathbf{U}(\beta_0) = \frac{4}{\phi} \left\{ W_h^2(u_{ij}) u_{ij} + 2 W_h(u_{ij}) \sqrt{u_{ij}} W_{h_0}(u_{0i}) \sqrt{u_{0i}} + W_{h_0}^2(u_{0i}) u_{0i} \right\}$$

Aplicando o exercício proposto em Fang et al. (1990, pg. 94) para o cálculo das esperanças obtemos

$$K_{\beta_0} = \frac{4}{\phi} \left\{ \mathbb{E} [W_h^2(U_{ij}) U_{ij}] + 2 \mathbb{E} [W_h(U_{ij}) \sqrt{U_{ij}}] \mathbb{E} [W_{h_0}(U_{0i}) \sqrt{U_{0i}}] + \mathbb{E} [W_{h_0}^2(U_{0i}) U_{0i}] \right\}$$

Assim, para uma única observação temos que

$$K_{\beta_0} = \frac{4}{\phi} \left\{ m_i d_h + d_{h_0} \right\}$$

em que $d_h = \mathbb{E} [W_h^2(U) U]$, $d_{h_0} = \mathbb{E} [W_{h_0}^2(U_0) U_0]$ e $\mathbb{E} [W_h(U) \sqrt{U}] = 0$. Desta forma,

considerando todas as observações encontramos

$$K_{\beta_0} = \frac{4}{\phi} \left\{ \sum_{i=1}^n m_i d_h + r d_{h_0} \right\}$$

As funções h e h_0 , para efeito de cálculo, podem ser consideradas diferentes, no entanto, em modelos de calibração são supostas as mesmas distribuições para os erros do modelo nos dois estágios, ou seja, ϵ_{ij} e ϵ_{0i} seguem uma mesma distribuição simétrica $S(0, \phi, h)$. Assim, d_h e d_{h_0} correspondem a mesma expressão, assim como f_h e f_{h_0} . Os valores de $d_h = d_{h_0}$ e $f_h = f_{h_0}$ para as distribuições simétricas utilizadas nesse trabalho são apresentadas na Tabela 3.2. Se considerarmos, por exemplo, a distribuição normal para os erros do modelo de calibração temos que $d_h = d_{h_0} = \frac{1}{4}$, vide Tabela 3.2, e se fizermos $m_i = 1$, caso em que temos o M-usual, obtemos a seguinte expressão para $K_{\beta_0} = \frac{1}{\phi} \{n + r\}$ que corresponde exatamente ao elemento de β_0 na matriz de informação de Fisher do M-usual, como pode ser constatado em Blas (2005). O M-usual é um caso particular do M-proposto, assim, substituindo em todas as expressões os valores de d_h , d_{h_0} , f_h e f_{h_0} para o caso normal, obtem-se os elementos da matriz de informação de Fisher do M-usual.

Tabela 3.2: Valores de d_h e f_h para algumas distribuições simétricas.

Distribuição	d_h	f_h
Normal	$\frac{1}{4}$	$\frac{3}{4}$
t-Student (v)	$\frac{(v+1)}{4(v+3)}$	$\frac{3(v+1)}{4(v+3)}$
Exponencial Potência (k)	$\frac{\Gamma(\frac{3-k}{2})}{4(2^{k-1})(k+1)^2\Gamma(\frac{k+1}{2})}$	$\frac{(k+3)}{4(k+1)}$
Logística-II	$\frac{1}{12}$	0.60749

FONTE: Cysneiros et al. (2005)

Resultados de Simulação

Neste capítulo apresentamos um estudo de simulação para verificar o desempenho dos estimadores nos modelos normal, t-Student, exponencial potência e logística tipo II visando verificar o comportamento dos estimadores β_0 , β_1 e X_0 nos modelos propostos.

4.1 Simulação

Os resultados de simulação foram obtidos utilizando o *software* R versão 2.11.1. Foram geradas 10000 amostras Monte Carlo de tamanhos $n = 5, 20, 40$, e 100 para o primeiro estágio e $r = 3, 20$, e 100 para o segundo estágio. Em todas as amostras foram fixados os valores de β_0 e β_1 em 0, 1 e 2, respectivamente. Os valores de x_i são fixados na faixa de concentração $[0, 2]$, sendo valores para concentrações padrões, $x_1 = 0$ e $x_i = x_{i-1} + 2/(n-1)$, $i = 2, \dots, n$. Já os valores para X_0 foram fixados em 0, 01, 0, 8 e 1, 9 e para todos os modelos apresentados o valor de $\sigma^2 = 0, 04$.

Para cada uma das amostras foi calculado a média, desvio padrão, viés (vício empírico), erro quadrático médio empírico (EQM), assimetria e a curtose das estimativas de β_0 , β_1 e X_0 . Os vícios médios empíricos são dados por $\sum_{i=1}^{10000} (\hat{\eta} - \eta)/10000$ e os EQMs empíricos são

dados por $\sum_{i=1}^{10000} (\hat{\eta} - \eta)^2 / 10000$, em que $\hat{\eta}$ é um estimador de $\eta = \beta_0, \beta_1$ ou X_0 .

4.1.1 Caso Normal

As Tabelas de 4.1 a 4.9 apresentam a média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose para os estimadores de β_0 , β_1 e X_0 nos diferentes tamanhos amostrais de r . As tabelas apresentam resultados que se comportam de maneira semelhante. Podemos verificar pelas tabelas que os valores médios dos estimadores de β_0 e β_1 não sofrem uma variação muito grande nos diferentes cenários de $X_0 = 0,01$, $0,8$ e $1,9$. Isto pode ser explicado pelo fato de $\hat{\beta}_0$ e $\hat{\beta}_1$ não dependerem do segundo estágio. Podemos observar, em geral, que os vieses apresentam valores muito pequenos e, independente do tamanho de amostra no primeiro estágio, as estimativas dos parâmetros são próximas do verdadeiro valor fixado. Pode ser observado também, que em geral os menores valores para os vieses, em módulo, é quando $X_0 = 0,8$, ou seja, as estimativas de X_0 aproximam-se melhor do verdadeiro valor quando $X_0 = 0,8$. O desvio padrão assim como o EQM diminuem conforme o tamanho da amostra no primeiro estágio aumenta, da mesma forma que os valores em módulo dos vieses apresentam uma tendência a diminuir com o aumento da amostra no primeiro estágio. Nas Tabelas 4.3, 4.6 e 4.9 referentes ao estimador de X_0 , podemos verificar que nos casos em que $X_0 = 0,01$ e $X_0 = 0,8$ a assimetria é sempre à esquerda, já no caso quando $X_0 = 1,9$ a assimetria é sempre à direita, com exceção na Tabela 4.3 para $n = 100$. Os valores da curtose também apresentam comportamento semelhante nos vários cenários abordados, com valores bem próximos ao valor da curtose da distribuição normal (3), e que, para os valores da curtose referente ao estimador de X_0 , observamos que essas medidas estão acima ou abaixo do valor da curtose da distribuição normal, indicando que a distribuição é leptocúrtica.

Já nas Tabelas de 4.10 a 4.18 mostram os quantis amostrais para os diferentes valores de r e X_0 . Os quantis amostrais foram calculados usando um algoritmo descrito em Hyndman e Fan (1996) em que eles são obtidos por interpolação linear entre a j -ésima

estatística de ordem e $p(j) = MODA[F(x[j])]$, uma função implementada em R foi utilizada para realização desse cálculo. Para efeito de comparação, os quantis amostrais são padronizados, e ainda, alguns quantis de referência são utilizados para comparar com os resultados de simulação. Os quantis de referência utilizados e seus respectivos valores para a distribuição normal são apresentados nas tabelas. Inferimos que os estimadores de β_0 , β_1 e X_0 seguem aproximadamente uma distribuição normal, devido a proximidade dos valores dos quantis amostrais com os valores dos quantis da distribuição normal, com ressalvas em amostras pequenas para o caso de X_0 , que apresentam valores dos quantis amostrais ligeiramente diferentes dos valores dos quantis da distribuição normal. Concluimos também que conforme o tamanho da amostra na primeira etapa aumenta, os quantis tendem a estar mais próximos dos quantis da distribuição normal. Verificamos ainda que o aumento do tamanho da amostra no segundo estágio faz com que os valores dos quantis próximos as caudas da distribuição sejam levemente maiores do que quando o tamanho da amostra no segundo estágio é menor, e tendem a ser maiores na cauda inferior quando $X_0 = 0,01$ e a ser maiores na cauda superior quando $X_0 = 1,9$.

Tabela 4.1: Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_0$ para $r = 3$ e $\sigma^2 = 0,04$ quando $\beta_0 = 0, 1$ no caso normal.

X_0	n	$\hat{\beta}_0$					
		Média	Desvio padrão	Viés	EQM	Assimetria	Curtose
0,01	5	0,0995	0,1548	-0,0005	0,0240	-0,0427	3,0632
	20	0,0988	0,0870	-0,0012	0,0076	0,0259	2,9969
	40	0,1004	0,0626	0,0004	0,0039	0,0416	2,9423
	100	0,0995	0,0398	-0,0005	0,0016	-0,0298	2,9471
0,8	5	0,1023	0,1545	0,0023	0,0239	0,0005	3,0425
	20	0,0996	0,0870	-0,0004	0,0076	-0,0045	3,0148
	40	0,1002	0,0614	0,0002	0,0038	0,0180	2,9963
	100	0,1002	0,0399	0,0002	0,0016	0,0000	3,0192
1,9	5	0,1019	0,1532	0,0019	0,0235	0,0360	2,8989
	20	0,1004	0,0859	0,0004	0,0074	-0,0142	3,0051
	40	0,0993	0,0627	-0,0007	0,0039	0,0043	3,0814
	100	0,0999	0,0394	-0,0001	0,0016	0,0033	3,0489

Tabela 4.2: Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_1$ para $r = 3$ e $\sigma^2 = 0,04$ quando $\beta_1 = 2$ no caso normal.

X_0	n	$\hat{\beta}_1$					
		Média	Desvio padrão	Viés	EQM	Assimetria	Curtose
0,01	5	2,0009	0,1256	0,0009	0,0158	0,0500	3,0705
	20	2,0006	0,0741	0,0006	0,0055	-0,0417	2,9675
	40	1,9996	0,0539	-0,0004	0,0029	-0,0189	2,9831
	100	2,0001	0,0342	0,0001	0,0012	0,0340	2,9588
0,8	5	1,9986	0,1260	-0,0014	0,0159	0,0218	3,0297
	20	1,9994	0,0740	-0,0006	0,0055	0,0079	3,0002
	40	1,9997	0,0530	-0,0003	0,0028	-0,0150	2,9893
	100	1,9998	0,0344	-0,0002	0,0012	0,0007	2,9637
1,9	5	1,9995	0,1254	-0,0005	0,0157	-0,0276	2,9401
	20	1,9994	0,0739	-0,0006	0,0055	0,0154	2,9705
	40	2,0004	0,0537	0,0004	0,0029	0,0019	3,0785
	100	1,9996	0,0342	-0,0004	0,0012	0,0180	3,0890

Tabela 4.3: Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{X}_0$ para $r = 3$ e $\sigma^2 = 0,04$ no caso normal.

X_0	n	$\hat{X}_0$					
		Média	Desvio padrão	Viés	EQM	Assimetria	Curtose
0,01	5	0,0066	0,0965	-0,0034	0,0093	-0,2904	3,3080
	20	0,0088	0,0722	-0,0012	0,0052	-0,0991	3,0359
	40	0,0086	0,0652	-0,0014	0,0043	-0,0605	3,0365
	100	0,0099	0,0607	-0,0001	0,0037	-0,0110	3,0365
0,8	5	0,7988	0,0739	-0,0012	0,0055	-0,0628	3,0885
	20	0,8012	0,0625	0,0012	0,0039	-0,0345	3,0130
	40	0,8003	0,0603	0,0003	0,0036	-0,0032	3,0781
	100	0,8001	0,0590	0,0001	0,0035	-0,0214	3,0538
1,9	5	1,9035	0,0926	0,0035	0,0086	0,2631	3,2217
	20	1,9014	0,0702	0,0014	0,0049	0,0904	3,0032
	40	1,8996	0,0646	-0,0004	0,0042	0,0341	3,1395
	100	1,8995	0,0607	-0,0005	0,0037	-0,0106	2,8841

Tabela 4.4: Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_0$ para $r = 20$ e $\sigma^2 = 0,04$ quando $\beta_0 = 0, 1$ no caso normal.

X_0	n	$\hat{\beta}_0$					
		Média	Desvio padrão	Viés	EQM	Assimetria	Curtose
0,01	5	0,0977	0,1529	-0,0023	0,0234	-0,0656	2,9967
	20	0,0990	0,0858	-0,0010	0,0074	-0,0108	2,9857
	40	0,0997	0,0626	-0,0003	0,0039	0,0032	2,9717
	100	0,0995	0,0397	-0,0005	0,0016	0,0270	3,0272
0,8	5	0,1009	0,1549	0,0009	0,0240	-0,0065	3,0294
	20	0,1002	0,0860	0,0002	0,0074	0,0297	3,0458
	40	0,1009	0,0614	0,0009	0,0038	0,0099	3,0377
	100	0,0994	0,0399	-0,0006	0,0016	-0,0433	3,0526
1,9	5	0,0981	0,1529	-0,0019	0,0234	-0,0040	3,0145
	20	0,0997	0,0860	-0,0003	0,0074	-0,0255	3,0566
	40	0,0993	0,0620	-0,0007	0,0039	-0,0223	3,0315
	100	0,0998	0,0394	-0,0002	0,0016	0,0189	2,9322

Tabela 4.5: Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_1$ para $r = 20$ e $\sigma^2 = 0,04$ quando $\beta_1 = 2$ no caso normal.

X_0	n	$\hat{\beta}_1$					
		Média	Desvio padrão	Viés	EQM	Assimetria	Curtose
0,01	5	2,0009	0,1255	0,0009	0,0158	0,0109	2,9943
	20	2,0006	0,0726	0,0006	0,0053	0,0167	3,0312
	40	2,0000	0,0537	0,0000	0,0029	-0,0265	2,9955
	100	2,0001	0,0344	0,0001	0,0012	-0,0116	2,9823
0,8	5	1,9975	0,1271	-0,0025	0,0162	0,0053	2,9434
	20	1,9999	0,0743	-0,0001	0,0055	-0,0481	2,9879
	40	1,9993	0,0530	-0,0007	0,0028	-0,0388	2,9980
	100	2,0002	0,0345	0,0002	0,0012	0,0582	3,0816
1,9	5	2,0003	0,1243	0,0003	0,0154	0,0188	3,0506
	20	2,0006	0,0732	0,0006	0,0054	0,0195	2,9898
	40	2,0004	0,0534	0,0004	0,0029	-0,0039	3,0308
	100	2,0002	0,0343	0,0002	0,0012	-0,0238	2,9879

Tabela 4.6: Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{X}_0$ para $r = 20$ e $\sigma^2 = 0,04$ no caso normal.

X_0	n	$\hat{X}_0$					
		Média	Desvio padrão	Viés	EQM	Assimetria	Curtose
0,01	5	0,0072	0,0796	-0,0028	0,0063	-0,2148	3,0656
	20	0,0091	0,0483	-0,0009	0,0023	-0,1449	3,0471
	40	0,0094	0,0382	-0,0006	0,0015	-0,1252	3,0125
	100	0,0102	0,0298	0,0002	0,0009	-0,0933	3,0348
0,8	5	0,7998	0,0515	-0,0002	0,0026	-0,0892	3,1275
	20	0,7997	0,0322	-0,0003	0,0010	-0,0705	2,9830
	40	0,7999	0,0281	-0,0001	0,0008	-0,0558	3,0400
	100	0,7999	0,0249	-0,0001	0,0006	-0,0404	3,0565
1,9	5	1,9038	0,0755	0,0038	0,0057	0,2870	3,2981
	20	1,9009	0,0455	0,0009	0,0021	0,1401	3,1455
	40	1,9005	0,0365	0,0005	0,0013	0,1403	3,1162
	100	1,9001	0,0288	0,0001	0,0008	0,0861	3,0429

Tabela 4.7: Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_0$ para $r = 100$ e $\sigma^2 = 0,04$ quando $\beta_0 = 0, 1$ no caso normal.

X_0	n	$\hat{\beta}_0$					
		Média	Desvio padrão	Viés	EQM	Assimetria	Curtose
0,01	5	0,1023	0,1448	0,0023	0,0210	-0,0440	3,2675
	20	0,1018	0,0830	0,0018	0,0069	-0,0241	3,1775
	40	0,0998	0,0608	-0,0002	0,0037	0,0024	3,1127
	100	0,0999	0,0399	-0,0001	0,0016	0,0170	2,9998
0,8	5	0,0998	0,1518	-0,0002	0,0230	0,0044	2,9981
	20	0,1003	0,0860	0,0003	0,0074	-0,0330	3,0040
	40	0,1004	0,0617	0,0004	0,0038	0,0481	2,9536
	100	0,1001	0,0392	0,0001	0,0015	-0,0369	2,9742
1,9	5	0,1007	0,1546	0,0007	0,0239	-0,0452	3,0290
	20	0,1007	0,0861	0,0007	0,0074	0,0184	3,0605
	40	0,0994	0,0620	-0,0006	0,0038	0,0115	3,0648
	100	0,1001	0,0401	0,0001	0,0016	0,0129	3,0092

Tabela 4.8: Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_1$ para $r = 100$ e $\sigma^2 = 0,04$ quando $\beta_1 = 2$ no caso normal.

X_0	n	$\hat{\beta}_1$					
		Média	Desvio padrão	Viés	EQM	Assimetria	Curtose
0,01	5	1,9987	0,1214	-0,0013	0,0147	-0,0134	3,0799
	20	1,9979	0,0717	-0,0021	0,0051	0,0269	3,1230
	40	2,0002	0,0525	0,0002	0,0028	-0,0324	3,0101
	100	1,9997	0,0343	-0,0003	0,0012	-0,0276	2,9742
0,8	5	2,0000	0,1260	0,0000	0,0159	0,0150	2,9445
	20	1,9995	0,0737	-0,0005	0,0054	0,0075	3,0284
	40	1,9997	0,0536	-0,0003	0,0029	-0,0214	2,9475
	100	2,0001	0,0343	0,0001	0,0012	0,0302	3,0123
1,9	5	1,9997	0,1228	-0,0003	0,0151	0,0179	3,1081
	20	1,9993	0,0724	-0,0007	0,0052	-0,0248	3,0845
	40	2,0003	0,0527	0,0003	0,0028	0,0206	3,1289
	100	2,0002	0,0342	0,0002	0,0012	-0,0032	3,0171

Tabela 4.9: Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{X}_0$ para $r = 100$ e $\sigma^2 = 0,04$ no caso normal.

X_0	n	$\hat{X}_0$					
		Média	Desvio padrão	Viés	EQM	Assimetria	Curtose
0,01	5	0,0052	0,0735	-0,0048	0,0054	-0,2803	3,4556
	20	0,0077	0,0426	-0,0023	0,0018	-0,1713	3,2630
	40	0,0095	0,0317	-0,0005	0,0010	-0,1435	3,1231
	100	0,0097	0,0220	-0,0003	0,0005	-0,0989	3,1197
0,8	5	0,7993	0,0460	-0,0007	0,0021	-0,1097	3,2515
	20	0,7997	0,0252	-0,0003	0,0006	-0,0840	3,1911
	40	0,8000	0,0194	0,0000	0,0004	-0,0609	3,0046
	100	0,7999	0,0143	-0,0001	0,0002	0,0308	2,9638
1,9	5	1,9034	0,0700	0,0034	0,0049	0,3521	3,5647
	20	1,9014	0,0402	0,0014	0,0016	0,1861	3,1340
	40	1,9007	0,0298	0,0007	0,0009	0,1338	3,1148
	100	1,9000	0,0207	0,0000	0,0004	0,0668	3,0448

Tabela 4.10: Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 3$ e $\sigma^2 = 0,04$ quando $X_0 = 0,01$ no caso Normal.

Quantil (N(0,1))	$n = 5$			$n = 20$			$n = 40$			$n = 100$		
	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$
0,5% (-2,5758)	-2,6250	-2,5461	-2,8957	-2,5665	-2,5246	-2,6159	-2,5639	-2,5254	-2,6100	-2,5671	-2,4995	-2,5665
1% (-2,3263)	-2,3489	-2,3047	-2,5561	-2,3615	-2,3057	-2,3638	-2,2859	-2,2961	-2,3670	-2,3550	-2,2663	-2,3735
2,5% (-1,9599)	-1,9909	-1,9243	-2,0866	-1,9368	-1,9872	-2,0252	-1,9377	-1,9779	-1,9911	-1,9962	-1,9382	-1,9871
5% (-1,6448)	-1,6807	-1,6148	-1,6912	-1,6234	-1,6569	-1,6771	-1,6244	-1,6542	-1,6801	-1,6552	-1,6521	-1,6425
50% (0)	0,0091	-0,0149	0,0395	-0,0017	0,0158	0,0177	-0,0052	0,0076	0,0059	-0,0005	-0,0013	0,0011
95% (1,6448)	1,6336	1,6686	1,5697	1,6333	1,6470	1,6184	1,6700	1,6502	1,6050	1,6410	1,6436	1,6339
97,5% (1,9599)	1,9486	2,0019	1,8279	1,9787	1,9430	1,9053	1,9871	1,9707	1,9023	1,9441	1,9479	1,9615
99% (2,3263)	2,2886	2,3415	2,1510	2,3326	2,2759	2,2221	2,3525	2,3204	2,2738	2,2598	2,3587	2,3629
99,5% (2,5758)	2,5076	2,6136	2,3110	2,5689	2,5090	2,4271	2,6056	2,5328	2,4862	2,4896	2,5846	2,5807

Tabela 4.11: Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 3$ e $\sigma^2 = 0,04$ quando $X_0 = 0,8$ no caso Normal.

Quantil (N(0,1))	$n = 5$			$n = 20$			$n = 40$			$n = 100$		
	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$
0,5% (-2,5758)	-2,5871	-2,6211	-2,6745	-2,6584	-2,5421	-2,6833	-2,5361	-2,5832	-2,6244	-2,5749	-2,4921	-2,5939
1% (-2,3263)	-2,3659	-2,3870	-2,3762	-2,3812	-2,2998	-2,3566	-2,2861	-2,3296	-2,3391	-2,2942	-2,2913	-2,3913
2,5% (-1,9599)	-1,9443	-1,9339	-1,9966	-1,9649	-1,9359	-1,9595	-1,9667	-1,9820	-1,9708	-1,9577	-1,9507	-2,0001
5% (-1,6448)	-1,6395	-1,6217	-1,6789	-1,6235	-1,6436	-1,6365	-1,6468	-1,6427	-1,6448	-1,6444	-1,6694	-1,6515
50% (0)	0,0000	-0,0086	0,0101	-0,0032	0,0002	0,0041	0,0059	0,0098	-0,0118	0,0053	0,0192	0,0030
95% (1,6448)	1,6587	1,6532	1,6349	1,6435	1,6319	1,6163	1,6453	1,6422	1,6499	1,6594	1,6461	1,6369
97,5% (1,9599)	1,9390	1,9725	1,9354	1,9780	1,9571	1,9432	1,9465	1,9451	1,9707	1,9836	1,9624	1,9618
99% (2,3263)	2,2896	2,3229	2,3095	2,3319	2,3004	2,3015	2,2958	2,3087	2,3198	2,3164	2,3585	2,3230
99,5% (2,5758)	2,6109	2,6215	2,5586	2,5464	2,5541	2,5668	2,5650	2,6009	2,6219	2,5907	2,6415	2,6398

Tabela 4.12: Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 3$ e $\sigma^2 = 0,04$ quando $X_0 = 1,9$ no caso Normal.

Quantil (N(0,1))	$n = 5$			$n = 20$			$n = 40$			$n = 100$		
	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$
0,5% (-2,5758)	-2,5294	-2,5735	-2,3648	-2,5737	-2,5165	-2,4507	-2,5741	-2,6142	-2,5874	-2,6749	-2,5412	-2,5584
1% (-2,3263)	-2,2663	-2,3334	-2,1467	-2,3257	-2,3122	-2,2450	-2,3328	-2,3289	-2,3521	-2,3201	-2,3374	-2,3103
2,5% (-1,9599)	-1,9559	-1,9618	-1,8556	-1,9555	-1,9548	-1,8998	-1,9514	-1,9485	-1,9835	-1,9545	-1,9577	-1,9693
5% (-1,6448)	-1,6476	-1,6533	-1,5725	-1,6490	-1,6406	-1,6111	-1,6185	-1,6477	-1,6550	-1,6372	-1,6513	-1,6673
50% (0)	-0,0070	0,0081	-0,0406	0,0023	0,0093	-0,0142	0,0058	-0,0053	-0,0021	-0,0071	0,0022	-0,0055
95% (1,6448)	1,6652	1,6369	1,7103	1,6497	1,6435	1,6796	1,6235	1,6216	1,6545	1,6770	1,6360	1,6474
97,5% (1,9599)	1,9685	1,9480	2,0653	1,9775	1,9781	2,0092	1,9625	1,9651	1,9920	1,9874	1,9656	1,9502
99% (2,3263)	2,3193	2,2870	2,5990	2,2959	2,3386	2,3671	2,3714	2,3214	2,3990	2,3192	2,3887	2,3106
99,5% (2,5758)	2,5744	2,5142	2,9185	2,5648	2,6093	2,6468	2,7124	2,5954	2,6552	2,5551	2,6645	2,4807

Tabela 4.13: Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 20$ e $\sigma^2 = 0,04$ quando $X_0 = 0,01$ no caso Normal.

Quantil (N(0,1))	$n = 5$			$n = 20$			$n = 40$			$n = 100$		
	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$
0,5% (-2,5758)	-2,6285	-2,5650	-2,7427	-2,5399	-2,5881	-2,7313	-2,5267	-2,5831	-2,7020	-2,5096	-2,5633	-2,6816
1% (-2,3263)	-2,3835	-2,3647	-2,4680	-2,3139	-2,3594	-2,4630	-2,2782	-2,3024	-2,3940	-2,3058	-2,3369	-2,3991
2,5% (-1,9599)	-2,0056	-1,9641	-2,0888	-1,9587	-1,9421	-2,0298	-1,9301	-1,9393	-2,0166	-1,9514	-1,9980	-2,0293
5% (-1,6448)	-1,6845	-1,6536	-1,7125	-1,6482	-1,6334	-1,7073	-1,6403	-1,6752	-1,6765	-1,6337	-1,6632	-1,6954
50% (0)	0,0064	-0,0081	0,0390	0,0048	-0,0002	0,0135	-0,0146	0,0088	0,0150	0,0056	-0,0056	0,0059
95% (1,6448)	1,6369	1,6429	1,6010	1,6460	1,6344	1,5880	1,6421	1,6559	1,6092	1,6642	1,6409	1,6194
97,5% (1,9599)	1,9124	1,9873	1,8727	1,9439	1,9736	1,9016	1,9692	1,9600	1,8498	1,9993	1,9499	1,9021
99% (2,3263)	2,2337	2,3323	2,1968	2,3067	2,3473	2,2320	2,3064	2,3200	2,2244	2,3538	2,3155	2,2880
99,5% (2,5758)	2,5174	2,6140	2,3855	2,5637	2,5837	2,4821	2,5761	2,5255	2,4315	2,6094	2,5543	2,5040

Tabela 4.14: Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 20$ e $\sigma^2 = 0,04$ quando $X_0 = 0,8$ no caso Normal.

Quantil (N(0,1))	$n = 5$			$n = 20$			$n = 40$			$n = 100$		
	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$
0,5% (-2,5758)	-2,5985	-2,5483	-2,6996	-2,5262	-2,5878	-2,6204	-2,5387	-2,6146	-2,6487	-2,6561	-2,5238	-2,6903
1% (-2,3263)	-2,3467	-2,2912	-2,4540	-2,3076	-2,3590	-2,3580	-2,3561	-2,3589	-2,3598	-2,3408	-2,2758	-2,3748
2,5% (-1,9599)	-1,9598	-1,9211	-2,0266	-1,9593	-1,9914	-1,9718	-1,9726	-1,9715	-1,9798	-1,9675	-1,9272	-1,9911
5% (-1,6448)	-1,6433	-1,6325	-1,6905	-1,6413	-1,6590	-1,6530	-1,6380	-1,6685	-1,6688	-1,6469	-1,6430	-1,6765
50% (0)	0,0054	0,0023	0,0084	0,0035	0,0011	0,0224	0,0062	0,0066	0,0040	-0,0078	-0,0003	0,0223
95% (1,6448)	1,6597	1,6607	1,6267	1,6389	1,6401	1,6315	1,6399	1,6496	1,6248	1,6170	1,6370	1,6280
97,5% (1,9599)	1,9623	1,9814	1,9257	1,9633	1,9273	1,9340	1,9955	1,9593	1,9443	1,9213	1,9862	1,9491
99% (2,3263)	2,3463	2,2765	2,2877	2,3712	2,2686	2,2645	2,3660	2,2739	2,2782	2,2973	2,3571	2,2923
99,5% (2,5758)	2,5325	2,5453	2,5462	2,6638	2,4697	2,5180	2,6214	2,5294	2,5050	2,5426	2,7070	2,5927

Tabela 4.15: Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 20$ e $\sigma^2 = 0,04$ quando $X_0 = 1,9$ no caso Normal.

Quantil (N(0,1))	$n = 5$			$n = 20$			$n = 40$			$n = 100$		
	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$
0,5% (-2,5758)	-2,5652	-2,6033	-2,3312	-2,6156	-2,5274	-2,4840	-2,6572	-2,6100	-2,4635	-2,5198	-2,5971	-2,4908
1% (-2,3263)	-2,3782	-2,3446	-2,1821	-2,3538	-2,2831	-2,2513	-2,3609	-2,3097	-2,2649	-2,3362	-2,3584	-2,2403
2,5% (-1,9599)	-1,9789	-1,9569	-1,8623	-1,9991	-1,9664	-1,9077	-2,0067	-1,9550	-1,9168	-1,9581	-2,0048	-1,9098
5% (-1,6448)	-1,6338	-1,6565	-1,6010	-1,6580	-1,6495	-1,6052	-1,6470	-1,6514	-1,5960	-1,6420	-1,6445	-1,6191
50% (0)	-0,0112	-0,0002	-0,0494	0,0071	0,0010	-0,0184	0,0095	0,0041	-0,0181	-0,0024	-0,0001	-0,0100
95% (1,6448)	1,6431	1,6422	1,7465	1,6437	1,6684	1,6846	1,6277	1,6521	1,6888	1,6605	1,6356	1,6526
97,5% (1,9599)	1,9546	1,9969	2,0858	1,9603	1,9886	2,0066	1,9676	1,9394	2,0283	1,9810	1,9178	1,9837
99% (2,3263)	2,3541	2,3303	2,5407	2,3082	2,3408	2,4664	2,3302	2,3293	2,4548	2,3788	2,3085	2,4116
99,5% (2,5758)	2,6026	2,6659	2,9168	2,5801	2,5480	2,7474	2,5997	2,5661	2,7316	2,6164	2,5762	2,7090

Tabela 4.16: Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 100$ e $\sigma^2 = 0,04$ quando $X_0 = 0,01$ no caso Normal.

Quantil (N(0,1))	$n = 5$			$n = 20$			$n = 40$			$n = 100$		
	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$
0,5% (-2,5758)	-2,6913	-2,5809	-2,9451	-2,6507	-2,6139	-2,7995	-2,6006	-2,6204	-2,7105	-2,5569	-2,6238	-2,7005
1% (-2,3263)	-2,3982	-2,3824	-2,6644	-2,3379	-2,3558	-2,5174	-2,3764	-2,3504	-2,4799	-2,2908	-2,3313	-2,4369
2,5% (-1,9599)	-2,0390	-1,9755	-2,1210	-1,9788	-1,9523	-2,0387	-1,9721	-1,9676	-2,0446	-1,9653	-1,9566	-1,9889
5% (-1,6448)	-1,7075	-1,6560	-1,6956	-1,6720	-1,6416	-1,6856	-1,6397	-1,6754	-1,7000	-1,6479	-1,6616	-1,6730
50% (0)	0,0009	-0,0083	0,0652	-0,0014	-0,0004	0,0525	0,0053	0,0054	0,0166	-0,0071	0,0192	0,0175
95% (1,6448)	1,6314	1,6674	1,5955	1,6305	1,6704	1,6259	1,6488	1,6423	1,6009	1,6545	1,6422	1,6117
97,5% (1,9599)	1,9809	1,9846	1,8911	1,9707	1,9770	1,8965	1,9857	1,9747	1,9052	1,9648	1,9496	1,9392
99% (2,3263)	2,3983	2,3497	2,1956	2,3785	2,3328	2,2185	2,3496	2,2687	2,2696	2,3333	2,3119	2,2946
99,5% (2,5758)	2,6131	2,5926	2,4101	2,6363	2,6029	2,4971	2,6409	2,5224	2,4756	2,5917	2,5158	2,5075

Tabela 4.17: Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 100$ e $\sigma^2 = 0,04$ quando $X_0 = 0,8$ no caso Normal.

Quantil (N(0,1))	$n = 5$			$n = 20$			$n = 40$			$n = 100$		
	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$
0,5% (-2,5758)	-2,5580	-2,5407	-2,6986	-2,6135	-2,5461	-2,7619	-2,5058	-2,5843	-2,6424	-2,5569	-2,5227	-2,5116
1% (-2,3263)	-2,3345	-2,3352	-2,4625	-2,3700	-2,2987	-2,4366	-2,2809	-2,3304	-2,3735	-2,3595	-2,3060	-2,3080
2,5% (-1,9599)	-1,9672	-1,9509	-2,0221	-1,9941	-1,9803	-1,9819	-1,9034	-1,9641	-1,9971	-1,9725	-1,9521	-1,9513
5% (-1,6448)	-1,6517	-1,6160	-1,6937	-1,6728	-1,6491	-1,6524	-1,6290	-1,6657	-1,6724	-1,6418	-1,6509	-1,6379
50% (0)	0,0009	0,0038	0,0153	0,0047	0,0030	0,0110	-0,0099	0,0086	0,0048	0,0138	-0,0062	-0,0011
95% (1,6448)	1,6346	1,6602	1,6069	1,6319	1,6567	1,6111	1,6468	1,6278	1,6190	1,6125	1,6720	1,6380
97,5% (1,9599)	1,9632	1,9793	1,9318	1,9294	1,9739	1,9074	1,9733	1,9527	1,9303	1,9605	1,9843	1,9865
99% (2,3263)	2,3230	2,3324	2,3217	2,3167	2,3782	2,2970	2,3347	2,2902	2,2693	2,2735	2,3327	2,3632
99,5% (2,5758)	2,5618	2,6138	2,5788	2,5523	2,6126	2,5328	2,5891	2,5865	2,4781	2,5282	2,6029	2,6135

Tabela 4.18: Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 100$ e $\sigma^2 = 0,04$ quando $X_0 = 1,9$ no caso Normal.

Quantil (N(0,1))	$n = 5$			$n = 20$			$n = 40$			$n = 100$		
	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$
0,5% (-2,5758)	-2,6619	-2,5845	-2,3459	-2,5949	-2,6876	-2,3892	-2,6643	-2,6133	-2,4708	-2,6190	-2,5959	-2,5230
1% (-2,3263)	-2,3578	-2,3444	-2,1437	-2,2889	-2,3720	-2,1860	-2,3141	-2,3776	-2,2663	-2,3691	-2,3176	-2,3024
2,5% (-1,9599)	-2,0000	-1,9608	-1,8266	-1,9622	-1,9950	-1,8996	-1,9630	-1,9987	-1,9358	-1,9517	-1,9320	-1,9379
5% (-1,6448)	-1,6531	-1,6402	-1,5796	-1,6373	-1,6569	-1,6161	-1,6347	-1,6442	-1,6424	-1,6272	-1,6405	-1,6320
50% (0)	-0,0030	-0,0058	-0,0480	0,0038	-0,0013	-0,0339	-0,0004	0,0058	-0,0226	-0,0045	0,0057	-0,0026
95% (1,6448)	1,6405	1,6547	1,7518	1,6512	1,6574	1,7155	1,6512	1,6370	1,7115	1,6437	1,6592	1,6686
97,5% (1,9599)	1,9306	1,9938	2,1069	1,9923	1,9904	2,0335	1,9614	1,9360	1,9942	1,9675	1,9341	1,9981
99% (2,3263)	2,2612	2,3655	2,6203	2,3352	2,3156	2,4436	2,3461	2,3841	2,4607	2,3107	2,3109	2,3743
99,5% (2,5758)	2,5208	2,5876	2,9546	2,6128	2,5328	2,7362	2,5833	2,6396	2,7260	2,5364	2,6047	2,6280

4.1.2 Caso t-Student

Nas Tabelas de 4.19 a 4.27 são apresentados os resultados de simulação para avaliação dos estimadores de β_0 , β_1 e X_0 para os diferentes valores de r . Nas tabelas é constatado que os EQMs, assim como os desvios padrão, diminuem com o aumento do tamanho da amostra no primeiro estágio. Observamos nas Tabelas 4.21, 4.24 e 4.27 referentes ao estimador de X_0 , no que tange a assimetria, que em todos os cenários de simulação quando $X_0 = 0,01$ e $0,8$ apresentam valores assimétricos à esquerda, com exceção na Tabela 4.21 para $X_0 = 0,8$ com $n = 20$ e $n = 100$, e para $X_0 = 1,9$ apresentam valores assimétricos à direita. Nas Tabelas 4.21 e 4.24 pode ser observado que para $n = 5$ quando $X_0 = 0,01$ a estimativa média de X_0 apresenta valores negativos, isto pode ser explicado pelo fato do valor verdadeiro de X_0 estar próximo de zero e possivelmente por conta do tamanho amostral na primeira etapa. No entanto, estes valores não apresentam interpretação prática, e que portanto, merecem ser melhor analisados. Pode ser observado também que os valores da curtose para os três estimadores tendem a ser maiores quando $n = 5$ para os diferentes valores de X_0 , com exceção na Tabela 4.21 para $X_0 = 0,8$. Concluimos também que a medida que o tamanho amostral da primeira etapa aumenta, os valores da curtose tendem a se aproximar do valor da curtose da distribuição normal (3), também com exceções na Tabela 4.21.

Nas Tabelas de 4.28 a 4.36 são apresentados os valores dos quantis amostrais para os diferentes valores de r e X_0 . Comparamos os valores desses quantis amostrais com os valores dos quantis de referência da distribuição normal. Podemos inferir pelas tabelas que os valores referentes aos quantis amostrais para os estimadores de β_0 e β_1 nos diferentes cenários de simulação apresentam valores mais próximos dos quantis da distribuição normal quando o tamanho da amostra na primeira etapa aumenta. Pode ser verificado também que os valores referentes aos quantis amostrais para o estimador de X_0 tendem a se aproximar dos valores dos quantis da distribuição normal quando o tamanho amostral na primeira e segunda etapas aumentam. Pode ser observado ainda que os valores dos quantis amostrais próximos as caudas da distribuição tendem a ser ligeiramente maiores na cauda inferior

quando $X_0 = 0,01$ e ligeiramente maiores na cauda superior quando o valor de $X_0 = 1,9$.

Tabela 4.19: Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_0$ para $r = 3$ e $\sigma^2 = 0,08$ quando $\beta_0 = 0,1$ no caso t-Student.

X_0	n	$\hat{\beta}_0$					
		Média	Desvio padrão	Viés	EQM	Assimetria	Curtose
0,01	5	0,1021	0,2951	0,0021	0,0871	-0,1170	5,1363
	20	0,0996	0,1508	-0,0004	0,0227	0,0229	3,2230
	40	0,0996	0,1049	-0,0004	0,0110	-0,0196	3,0997
	100	0,0995	0,0674	-0,0005	0,0045	-0,0208	2,9696
0,8	5	0,0993	0,3017	-0,0007	0,0910	-0,1700	5,1301
	20	0,0999	0,1473	-0,0001	0,0217	-0,0243	3,2034
	40	0,1005	0,1066	0,0005	0,0114	-0,0107	3,1253
	100	0,0998	0,0671	-0,0002	0,0045	0,0181	2,9864
1,9	5	0,0991	0,2990	-0,0009	0,0894	-0,0042	4,9473
	20	0,1020	0,1479	0,0020	0,0219	0,0452	3,2587
	40	0,1001	0,1049	0,0001	0,0110	0,0088	3,2586
	100	0,0994	0,0671	-0,0006	0,0045	-0,0017	3,0144

Tabela 4.20: Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_1$ para $r = 3$ e $\sigma^2 = 0,08$ quando $\beta_1 = 2$ no caso t-Student.

X_0	n	$\hat{\beta}_1$					
		Média	Desvio padrão	Viés	EQM	Assimetria	Curtose
0,01	5	1,9977	0,2463	-0,0023	0,0607	-0,0037	4,8706
	20	2,0006	0,1283	0,0006	0,0165	-0,0289	3,1572
	40	2,0004	0,0910	0,0004	0,0083	0,0266	3,0592
	100	2,0006	0,0581	0,0006	0,0034	0,0269	3,0411
0,8	5	1,9999	0,2509	-0,0001	0,0629	0,0659	4,7070
	20	1,9997	0,1260	-0,0003	0,0159	-0,0125	3,0899
	40	2,0001	0,0916	0,0001	0,0084	0,0124	3,1131
	100	1,9997	0,0578	-0,0003	0,0033	-0,0095	3,0137
1,9	5	2,0007	0,2468	0,0007	0,0609	0,0687	4,5346
	20	1,9991	0,1263	-0,0009	0,0159	-0,0203	3,1395
	40	1,9998	0,0900	-0,0002	0,0081	0,0236	3,1455
	100	2,0005	0,0581	0,0005	0,0034	0,0018	3,0712

Tabela 4.21: Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{X}_0$ para $r = 3$ e $\sigma^2 = 0,08$ no caso t-Student.

X_0	n	$\hat{X}_0$					
		Média	Desvio padrão	Viés	EQM	Assimetria	Curtose
0,01	5	-0,0061	0,1952	-0,0161	0,0384	-1,0616	8,1734
	20	0,0073	0,1302	-0,0027	0,0170	-0,1511	3,7595
	40	0,0095	0,1195	-0,0005	0,0143	-0,0335	4,2386
	100	0,0086	0,1102	-0,0014	0,0121	-0,0783	4,2832
0,8	5	0,7986	0,1441	-0,0014	0,0208	-0,2184	5,9050
	20	0,7980	0,1132	-0,0020	0,0128	0,0096	3,9387
	40	0,8001	0,1096	0,0001	0,0120	-0,0490	4,6205
	100	0,7983	0,1067	-0,0017	0,0114	0,2317	8,2826
1,9	5	1,9150	0,1849	0,0150	0,0344	0,8344	5,8567
	20	1,9046	0,1266	0,0046	0,0160	0,1152	4,0655
	40	1,9047	0,1159	0,0047	0,0135	0,1340	4,0750
	100	1,9007	0,1115	0,0007	0,0124	0,0268	4,1767

Tabela 4.22: Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_0$ para $r = 20$ e $\sigma^2 = 0,08$ quando $\beta_0 = 0, 1$ no caso t-Student.

X_0	n	$\hat{\beta}_0$					
		Média	Desvio padrão	Viés	EQM	Assimetria	Curtose
0,01	5	0,0986	0,2942	-0,0014	0,0866	0,0038	4,6684
	20	0,1004	0,1479	0,0004	0,0219	0,0603	3,2528
	40	0,0985	0,1047	-0,0015	0,0110	-0,0154	3,1218
	100	0,1000	0,0662	0,0000	0,0044	0,0194	3,0684
0,8	5	0,1004	0,2998	0,0004	0,0899	-0,1377	6,0713
	20	0,0983	0,1484	-0,0017	0,0220	0,0345	3,4114
	40	0,1002	0,1046	0,0002	0,0109	0,0567	3,2189
	100	0,0992	0,0675	-0,0008	0,0046	0,0204	3,0668
1,9	5	0,0996	0,2948	-0,0004	0,0869	0,0353	5,2092
	20	0,0987	0,1490	-0,0013	0,0222	0,0483	3,3239
	40	0,0993	0,1057	-0,0007	0,0112	-0,0091	3,1525
	100	0,0990	0,0670	-0,0010	0,0045	0,0034	3,1236

Tabela 4.23: Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_1$ para $r = 20$ e $\sigma^2 = 0,08$ quando $\beta_1 = 2$ no caso t-Student.

X_0	n	$\hat{\beta}_1$					
		Média	Desvio padrão	Viés	EQM	Assimetria	Curtose
0,01	5	1,9998	0,2441	-0,0002	0,0596	0,0540	4,5372
	20	1,9993	0,1272	-0,0007	0,0162	-0,0355	3,2789
	40	2,0008	0,0908	0,0008	0,0082	0,0273	3,0760
	100	1,9997	0,0576	-0,0003	0,0033	-0,0248	2,9856
0,8	5	1,9990	0,2455	-0,0010	0,0603	0,0683	5,1485
	20	2,0003	0,1260	0,0003	0,0159	-0,0321	3,2953
	40	2,0000	0,0903	0,0000	0,0082	-0,0308	3,1294
	100	1,9999	0,0581	-0,0001	0,0034	-0,0218	3,0263
1,9	5	2,0016	0,2407	0,0016	0,0579	0,0651	4,9087
	20	2,0008	0,1273	0,0008	0,0162	-0,0021	3,2971
	40	2,0010	0,0905	0,0010	0,0082	0,0119	3,1289
	100	2,0007	0,0585	0,0007	0,0034	0,0083	3,1311

Tabela 4.24: Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{X}_0$ para $r = 20$ e $\sigma^2 = 0,08$ no caso t-Student.

X_0	n	$\hat{X}_0$					
		Média	Desvio padrão	Viés	EQM	Assimetria	Curtose
0,01	5	-0,0052	0,1623	-0,0152	0,0266	-1,2605	8,6355
	20	0,0061	0,0834	-0,0039	0,0070	-0,3720	3,5920
	40	0,0087	0,0648	-0,0013	0,0042	-0,1650	3,1179
	100	0,0096	0,0506	-0,0004	0,0026	-0,1124	3,0320
0,8	5	0,7964	0,1010	-0,0036	0,0102	-0,6267	8,7404
	20	0,7998	0,0558	-0,0002	0,0031	-0,0559	3,1823
	40	0,7998	0,0471	-0,0002	0,0022	-0,0546	3,1335
	100	0,8002	0,0424	0,0002	0,0018	-0,0557	3,0588
1,9	5	1,9125	0,1500	0,0125	0,0227	1,5561	18,0763
	20	1,9038	0,0785	0,0038	0,0062	0,3044	3,4888
	40	1,9014	0,0620	0,0014	0,0038	0,2085	3,1853
	100	1,9012	0,0489	0,0012	0,0024	0,0777	2,9818

Tabela 4.25: Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_0$ para $r = 100$ e $\sigma^2 = 0,08$ quando $\beta_0 = 0, 1$ no caso t-Student.

X_0	n	$\hat{\beta}_0$					
		Média	Desvio padrão	Viés	EQM	Assimetria	Curtose
0,01	5	0,0902	0,2841	-0,0098	0,0808	-0,1193	4,2455
	20	0,0997	0,1494	-0,0003	0,0223	0,0149	3,2537
	40	0,0994	0,1059	-0,0006	0,0112	0,0164	3,2341
	100	0,1000	0,0669	0,0000	0,0045	-0,0196	3,0735
0,8	5	0,0922	0,2937	-0,0078	0,0863	-0,1979	5,0323
	20	0,0976	0,1473	-0,0024	0,0217	-0,0093	3,3018
	40	0,0999	0,1059	-0,0001	0,0112	-0,0266	3,0892
	100	0,1004	0,0658	0,0004	0,0043	0,0147	2,9225
1,9	5	0,0954	0,2869	-0,0046	0,0823	-0,0019	5,1803
	20	0,1004	0,1474	0,0004	0,0217	-0,0247	3,2175
	40	0,1007	0,1038	0,0007	0,0108	-0,0342	3,0212
	100	0,1004	0,0668	0,0004	0,0045	-0,0086	3,0725

Tabela 4.26: Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_1$ para $r = 100$ e $\sigma^2 = 0,08$ quando $\beta_1 = 2$ no caso t-Student.

X_0	n	$\hat{\beta}_1$					
		Média	Desvio padrão	Viés	EQM	Assimetria	Curtose
0,01	5	2,0084	0,2381	0,0084	0,0568	0,1702	4,5383
	20	2,0006	0,1284	0,0006	0,0165	-0,0280	3,1916
	40	2,0009	0,0914	0,0009	0,0084	-0,0132	3,1656
	100	2,0001	0,0578	0,0001	0,0033	0,0093	3,1302
0,8	5	2,0060	0,2434	0,0060	0,0593	0,1125	4,5367
	20	2,0015	0,1268	0,0015	0,0161	-0,0058	3,2557
	40	2,0003	0,0915	0,0003	0,0084	0,0373	3,0618
	100	1,9999	0,0572	-0,0001	0,0033	-0,0093	2,9836
1,9	5	2,0043	0,2269	0,0043	0,0515	0,0844	4,5968
	20	1,9984	0,1231	-0,0016	0,0151	-0,0075	3,2349
	40	1,9993	0,0884	-0,0007	0,0078	0,0256	3,0668
	100	1,9998	0,0571	-0,0002	0,0033	0,0208	3,1114

Tabela 4.27: Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{X}_0$ para $r = 100$ e $\sigma^2 = 0,08$ no caso t-Student.

X_0	n	$\hat{X}_0$					
		Média	Desvio padrão	Viés	EQM	Assimetria	Curtose
0,01	5	0,0011	0,1478	-0,0089	0,0219	-0,8892	6,0788
	20	0,0061	0,0770	-0,0039	0,0059	-0,3688	3,5634
	40	0,0084	0,0555	-0,0016	0,0031	-0,2653	3,2821
	100	0,0091	0,0373	-0,0009	0,0014	-0,1450	3,1456
0,8	5	0,7983	0,0900	-0,0017	0,0081	-0,5208	6,5134
	20	0,7995	0,0436	-0,0005	0,0019	-0,1039	3,2103
	40	0,7999	0,0328	-0,0001	0,0011	-0,0958	3,0640
	100	0,8000	0,0242	0,0000	0,0006	-0,0732	2,9056
1,9	5	1,9097	0,1331	0,0097	0,0178	0,9265	6,4156
	20	1,9043	0,0686	0,0043	0,0047	0,3644	3,6523
	40	1,9023	0,0510	0,0023	0,0026	0,2202	3,3228
	100	1,9005	0,0343	0,0005	0,0012	0,1360	3,2167

Tabela 4.28: Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 3$ e $\sigma^2 = 0,08$ quando $X_0 = 0,01$ no caso t-Student.

Quantil (N(0,1))	$n = 5$			$n = 20$			$n = 40$			$n = 100$		
	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$
0,5% (-2,5758)	-3,2077	-2,9939	-3,6179	-2,6592	-2,6227	-2,9689	-2,6656	-2,5938	-2,8585	-2,5951	-2,5938	-2,9146
1% (-2,3263)	-2,6011	-2,5637	-2,9241	-2,3446	-2,3680	-2,5358	-2,3685	-2,3082	-2,4996	-2,3241	-2,2976	-2,5486
2,5% (-1,9599)	-2,0087	-1,9978	-2,2411	-1,9640	-1,9849	-2,0867	-1,9801	-1,9299	-2,0126	-1,9773	-1,9307	-2,0210
5% (-1,6448)	-1,6001	-1,6009	-1,7015	-1,6220	-1,6375	-1,6606	-1,6458	-1,6205	-1,6265	-1,6616	-1,6392	-1,6359
50% (0)	0,0059	-0,0095	0,0727	0,0000	0,0020	0,0242	-0,0028	-0,0043	0,0075	0,0047	-0,0050	-0,0014
95% (1,6448)	1,5993	1,5952	1,4348	1,6365	1,6335	1,5710	1,6342	1,6585	1,5941	1,6088	1,6756	1,6131
97,5% (1,9599)	2,0194	2,0017	1,7359	1,9756	1,9206	1,9267	1,9536	2,0003	1,9232	1,9279	2,0061	1,9554
99% (2,3263)	2,5744	2,5561	2,0764	2,4012	2,3281	2,3436	2,3278	2,3836	2,3978	2,3511	2,3630	2,4170
99,5% (2,5758)	2,9715	2,9999	2,2950	2,6946	2,6880	2,6926	2,5749	2,5881	2,8023	2,6018	2,5419	2,8256

Tabela 4.29: Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 3$ e $\sigma^2 = 0,08$ quando $X_0 = 0,8$ no caso t-Student.

Quantil (N(0,1))	$n = 5$			$n = 20$			$n = 40$			$n = 100$		
	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$
0,5% (-2,5758)	-3,1377	-2,8860	-3,0304	-2,6110	-2,5668	-2,7275	-2,7328	-2,5757	-2,9220	-2,5227	-2,5674	-3,0275
1% (-2,3263)	-2,5756	-2,4518	-2,5165	-2,3970	-2,3281	-2,4191	-2,3679	-2,3349	-2,4749	-2,2910	-2,3356	-2,5534
2,5% (-1,9599)	-2,0717	-1,9883	-2,0164	-2,0182	-1,9706	-2,0337	-1,9320	-1,9519	-2,0054	-1,9447	-1,9791	-1,9790
5% (-1,6448)	-1,6537	-1,5810	-1,6100	-1,6432	-1,6539	-1,6709	-1,6261	-1,6346	-1,6316	-1,6317	-1,6473	-1,5671
50% (0)	0,0059	-0,0051	0,0198	0,0017	0,0099	0,0229	0,0047	-0,0018	0,0098	0,0029	-0,0018	0,0031
95% (1,6448)	1,5879	1,6109	1,5722	1,6257	1,6401	1,6048	1,6662	1,6367	1,6142	1,6371	1,6361	1,5731
97,5% (1,9599)	1,9276	2,0363	1,9253	1,9528	1,9525	2,0057	1,9645	1,9762	1,9744	1,9636	1,9364	1,9448
99% (2,3263)	2,5090	2,5551	2,3846	2,3412	2,3336	2,5089	2,3493	2,3606	2,5158	2,3443	2,3542	2,4283
99,5% (2,5758)	2,8958	2,8959	2,7634	2,6520	2,6075	2,9002	2,5674	2,6241	2,8604	2,6137	2,5859	2,8813

Tabela 4.30: Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 3$ e $\sigma^2 = 0,08$ quando $X_0 = 1,9$ no caso t-Student.

Quantil (N(0,1))	$n = 5$			$n = 20$			$n = 40$			$n = 100$		
	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$
0,5% (-2,5758)	-3,0410	-2,9644	-2,3317	-2,6477	-2,6319	-2,6163	-2,6721	-2,6410	-2,7428	-2,6051	-2,6193	-2,8866
1% (-2,3263)	-2,5842	-2,5887	-2,1244	-2,3384	-2,4274	-2,3077	-2,4071	-2,3167	-2,3766	-2,3204	-2,3236	-2,5033
2,5% (-1,9599)	-2,0476	-2,0379	-1,7475	-1,9386	-1,9685	-1,9174	-1,9966	-1,9564	-1,9130	-1,9611	-1,9672	-1,9850
5% (-1,6448)	-1,5491	-1,6273	-1,4443	-1,6377	-1,6402	-1,5755	-1,6481	-1,6442	-1,5825	-1,6587	-1,6509	-1,6030
50% (0)	0,0034	0,0026	-0,0681	-0,0060	-0,0012	-0,0222	0,0002	-0,0123	-0,0134	-0,0021	0,0000	-0,0040
95% (1,6448)	1,6118	1,6284	1,6858	1,6480	1,6333	1,6860	1,6327	1,6278	1,6203	1,6484	1,6291	1,6130
97,5% (1,9599)	2,0314	2,0713	2,2301	1,9914	1,9459	2,0515	1,9391	1,9758	2,0196	1,9711	1,9746	1,9868
99% (2,3263)	2,6084	2,5353	3,0022	2,3754	2,3322	2,5231	2,3638	2,3785	2,5707	2,3413	2,3275	2,4687
99,5% (2,5758)	3,0416	2,9664	3,5587	2,7191	2,5967	2,9341	2,6820	2,6462	2,9329	2,5773	2,5965	2,9515

Tabela 4.31: Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 20$ e $\sigma^2 = 0,08$ quando $X_0 = 0,01$ no caso t-Student.

Quantil (N(0,1))	$n = 5$			$n = 20$			$n = 40$			$n = 100$		
	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$
0,5% (-2,5758)	-3,0582	-2,9249	-3,9345	-2,6305	-2,7151	-2,8631	-2,5982	-2,6093	-2,7642	-2,6063	-2,5715	-2,6525
1% (-2,3263)	-2,5242	-2,5290	-3,1415	-2,3122	-2,3328	-2,5779	-2,3540	-2,3422	-2,5024	-2,3486	-2,3295	-2,4000
2,5% (-1,9599)	-1,9758	-1,9943	-2,2288	-1,9760	-1,9765	-2,1325	-1,9881	-1,9751	-2,0373	-1,9582	-1,9772	-2,0468
5% (-1,6448)	-1,5820	-1,5967	-1,6987	-1,6392	-1,6593	-1,7348	-1,6583	-1,6121	-1,6793	-1,6260	-1,6590	-1,6986
50% (0)	0,0006	0,0029	0,0967	-0,0192	-0,0005	0,0493	0,0112	-0,0188	0,0257	0,0033	0,0087	0,0189
95% (1,6448)	1,6231	1,5740	1,3769	1,6460	1,6194	1,5404	1,6525	1,6666	1,6012	1,6506	1,6045	1,6007
97,5% (1,9599)	2,0062	1,9779	1,6323	1,9979	1,9631	1,8029	1,9860	1,9714	1,8731	1,9579	1,9597	1,8923
99% (2,3263)	2,6270	2,5976	2,0020	2,3528	2,3755	2,1234	2,3716	2,3279	2,1703	2,3838	2,3411	2,2848
99,5% (2,5758)	3,0368	2,9810	2,2691	2,6754	2,6561	2,3522	2,6294	2,6162	2,4744	2,6136	2,6394	2,5118

Tabela 4.32: Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 20$ e $\sigma^2 = 0,08$ quando $X_0 = 0,8$ no caso t-Student.

Quantil (N(0,1))	$n = 5$			$n = 20$			$n = 40$			$n = 100$		
	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$
0,5% (-2,5758)	-3,1207	-3,0679	-3,1277	-2,6393	-2,7350	-2,7328	-2,5353	-2,6358	-2,6445	-2,5599	-2,6210	-2,6443
1% (-2,3263)	-2,6257	-2,5144	-2,7106	-2,3400	-2,4422	-2,4193	-2,3105	-2,3642	-2,3588	-2,3526	-2,3935	-2,3573
2,5% (-1,9599)	-1,9920	-1,9532	-2,0615	-1,9528	-2,0073	-1,9413	-1,9547	-1,9632	-1,9700	-1,9563	-1,9655	-1,9600
5% (-1,6448)	-1,5774	-1,5971	-1,5991	-1,6406	-1,6293	-1,6280	-1,6372	-1,6466	-1,6431	-1,6433	-1,6434	-1,6325
50% (0)	-0,0065	-0,0061	0,0266	0,0000	-0,0040	0,0044	-0,0021	0,0069	0,0085	-0,0018	0,0016	-0,0031
95% (1,6448)	1,5910	1,5855	1,5186	1,6492	1,6211	1,6366	1,6441	1,6362	1,6312	1,6551	1,6478	1,6481
97,5% (1,9599)	2,0197	2,0246	1,8473	1,9880	1,9390	1,9469	1,9670	1,9786	1,9188	1,9817	1,9518	1,9520
99% (2,3263)	2,5867	2,5767	2,2770	2,3984	2,3294	2,3132	2,3547	2,3756	2,2951	2,3633	2,3199	2,3066
99,5% (2,5758)	3,0705	3,0108	2,6670	2,6268	2,6063	2,5412	2,6761	2,6053	2,5351	2,6427	2,5892	2,5422

Tabela 4.33: Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 20$ e $\sigma^2 = 0,08$ quando $X_0 = 1,9$ no caso t-Student.

Quantil (N(0,1))	$n = 5$			$n = 20$			$n = 40$			$n = 100$		
	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$
0,5% (-2,5758)	-2,9735	-2,9325	-2,3170	-2,6531	-2,6832	-2,4032	-2,6514	-2,6412	-2,4352	-2,6431	-2,6633	-2,4887
1% (-2,3263)	-2,4995	-2,5551	-2,0708	-2,3150	-2,3717	-2,1929	-2,3400	-2,3458	-2,1839	-2,3461	-2,3532	-2,2688
2,5% (-1,9599)	-1,9442	-2,0207	-1,6640	-1,9410	-1,9603	-1,8338	-1,9670	-1,9433	-1,8893	-1,9700	-1,9426	-1,9156
5% (-1,6448)	-1,5840	-1,5992	-1,4072	-1,6351	-1,6547	-1,5580	-1,6553	-1,6489	-1,5907	-1,6463	-1,6393	-1,6102
50% (0)	-0,0020	0,0079	-0,0855	-0,0147	0,0062	-0,0480	-0,0060	-0,0080	-0,0368	0,0037	-0,0060	-0,0102
95% (1,6448)	1,5951	1,5612	1,6474	1,6368	1,6508	1,7238	1,6368	1,6398	1,7010	1,6332	1,6440	1,6806
97,5% (1,9599)	1,9861	1,9348	2,1891	1,9984	1,9948	2,1195	1,9729	1,9784	2,0390	1,9618	2,0020	2,0157
99% (2,3263)	2,5748	2,5533	3,0448	2,4454	2,3464	2,5927	2,3956	2,3507	2,4725	2,3918	2,3676	2,3934
99,5% (2,5758)	2,9846	3,0729	3,7624	2,7038	2,7012	2,9611	2,6351	2,5937	2,7840	2,6427	2,6306	2,5856

Tabela 4.34: Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 100$ e $\sigma^2 = 0,08$ quando $X_0 = 0,01$ no caso t-Student.

Quantil (N(0,1))	$n = 5$			$n = 20$			$n = 40$			$n = 100$		
	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$
0,5% (-2,5758)	-2,9640	-2,7933	-3,6391	-2,6872	-2,6095	-3,0146	-2,5759	-2,6762	-2,8601	-2,6122	-2,6043	-2,7034
1% (-2,3263)	-2,5263	-2,4012	-2,9432	-2,3644	-2,3560	-2,6401	-2,3751	-2,4026	-2,5644	-2,4065	-2,3812	-2,4773
2,5% (-1,9599)	-2,0560	-1,9749	-2,2225	-1,9563	-2,0203	-2,1235	-1,9627	-1,9522	-2,0952	-1,9711	-1,9619	-2,0419
5% (-1,6448)	-1,6411	-1,5969	-1,7047	-1,6348	-1,6657	-1,7183	-1,6087	-1,6361	-1,7153	-1,6400	-1,6440	-1,6755
50% (0)	0,0003	-0,0089	0,0879	0,0042	0,0023	0,0485	-0,0065	-0,0096	0,0399	0,0023	0,0059	0,0261
95% (1,6448)	1,5873	1,6250	1,4529	1,6392	1,6271	1,5391	1,6518	1,6208	1,5582	1,6410	1,6450	1,5872
97,5% (1,9599)	1,9770	2,0143	1,7195	1,9930	1,9424	1,8159	2,0187	1,9667	1,8539	1,9876	1,9441	1,9179
99% (2,3263)	2,4408	2,5698	2,0553	2,4128	2,4155	2,1690	2,3863	2,3309	2,1812	2,3386	2,3524	2,2792
99,5% (2,5758)	2,8752	3,0304	2,2656	2,6990	2,6939	2,3671	2,6405	2,5908	2,4286	2,5401	2,6320	2,4986

Tabela 4.35: Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 100$ e $\sigma^2 = 0,08$ quando $X_0 = 0,8$ no caso t-Student.

Quantil (N(0,1))	$n = 5$			$n = 20$			$n = 40$			$n = 100$		
	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$
0,5% (-2,5758)	-3,4067	-2,7802	-3,3408	-2,6693	-2,6747	-2,6866	-2,5990	-2,5721	-2,6847	-2,5580	-2,5508	-2,5972
1% (-2,3263)	-2,6074	-2,4426	-2,7213	-2,4126	-2,3990	-2,4253	-2,3839	-2,3192	-2,3988	-2,2777	-2,2814	-2,3424
2,5% (-1,9599)	-1,9580	-2,0023	-2,1035	-1,9730	-1,9647	-2,0233	-2,0042	-1,9743	-2,0114	-1,9271	-1,9370	-1,9949
5% (-1,6448)	-1,5720	-1,6012	-1,6039	-1,6585	-1,6446	-1,6743	-1,6518	-1,6168	-1,6487	-1,6500	-1,6417	-1,6811
50% (0)	0,0082	-0,0003	0,0199	0,0084	0,0075	0,0145	-0,0078	-0,0089	0,0043	-0,0001	-0,0081	0,0152
95% (1,6448)	1,5919	1,5914	1,5370	1,6432	1,6220	1,6379	1,6271	1,6306	1,6165	1,6461	1,6472	1,6229
97,5% (1,9599)	1,9740	1,9966	1,8911	1,9574	1,9640	1,9231	1,9329	1,9982	1,9099	1,9394	1,9702	1,9137
99% (2,3263)	2,5265	2,5866	2,3918	2,3527	2,3851	2,2680	2,3143	2,3763	2,2403	2,3058	2,2812	2,2409
99,5% (2,5758)	2,8614	3,1110	2,7431	2,6777	2,6685	2,5199	2,6315	2,6245	2,4587	2,5901	2,5671	2,4666

Tabela 4.36: Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 100$ e $\sigma^2 = 0,08$ quando $X_0 = 1,9$ no caso t-Student.

Quantil (N(0,1))	$n = 5$			$n = 20$			$n = 40$			$n = 100$		
	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$
0,5% (-2,5758)	-3,0599	-2,8219	-2,4084	-2,6650	-2,7512	-2,4140	-2,6608	-2,5829	-2,4471	-2,5775	-2,5660	-2,5213
1% (-2,3263)	-2,5453	-2,4987	-2,1192	-2,4267	-2,3824	-2,1485	-2,3761	-2,3283	-2,2239	-2,3434	-2,3084	-2,2611
2,5% (-1,9599)	-1,9445	-2,0062	-1,7223	-2,0220	-1,9700	-1,8454	-2,0104	-1,9449	-1,9023	-1,9916	-1,9594	-1,9026
5% (-1,6448)	-1,5764	-1,6100	-1,4320	-1,6359	-1,6462	-1,5412	-1,6471	-1,6169	-1,5739	-1,6360	-1,6265	-1,6178
50% (0)	-0,0041	-0,0029	-0,0735	0,0037	0,0025	-0,0607	0,0067	-0,0163	-0,0439	0,0018	-0,0132	-0,0145
95% (1,6448)	1,5830	1,5959	1,7418	1,6541	1,6626	1,7531	1,6163	1,6683	1,7235	1,6221	1,6461	1,6896
97,5% (1,9599)	1,9870	2,0312	2,3358	1,9693	1,9849	2,1798	1,9425	2,0035	2,1009	1,9597	2,0123	2,0339
99% (2,3263)	2,5296	2,5568	3,0440	2,3418	2,3956	2,6547	2,3227	2,3686	2,5297	2,3518	2,3908	2,4399
99,5% (2,5758)	2,9579	3,0057	3,7709	2,6362	2,6808	2,9948	2,5717	2,6042	2,8446	2,6163	2,6540	2,7408

4.1.3 Caso Exponencial Potência

As Tabelas de 4.37 a 4.45 apresentam a média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose para os estimadores de β_0 , β_1 e X_0 para os diferentes tamanhos amostrais de r . Podemos observar pelas tabelas que os valores médios para $\hat{\beta}_0$ e $\hat{\beta}_1$ são bem próximos aos valores verdadeiros dos parâmetros em todos os cenários de simulação e que esses valores não sofrem grande variação. Constatamos ainda que os valores dos EQMs e dos desvios padrão diminuem com o aumento do tamanho da amostra no primeiro estágio. Nas tabelas 4.39, 4.42 e 4.45 referentes ao estimador de X_0 podemos verificar que nos casos em que $X_0 = 0,01$ e $X_0 = 0,8$ a assimetria é sempre à esquerda, já no caso quando $X_0 = 1,9$ a assimetria é sempre à direita em todos os cenários de simulação. Nas mesmas tabelas também pode ser observado para $X_0 = 0,01$ quando $n = 5$ que a estimativa média de X_0 apresenta valores negativos e aqui, como no caso t-Student, cabe as mesmas explicações e observações. Também é observado para $X_0 = 0,01$ quando $n = 20$ que os valores para a estimativa média de X_0 apresentam valores muito próximos de zero e na medida que r aumenta esses valores também aumentam na direção do verdadeiro valor de X_0 . Observamos que os valores da curtose são maiores para n pequeno e que eles decrescem conforme o tamanho da amostra na primeira etapa aumenta nos diferentes cenários de simulação. Possivelmente esse fato ocorre porque quando o valor de n aumenta, a distribuição da amostra converge para a distribuição normal cujo valor da curtose é 3.

Já nas Tabelas de 4.46 a 4.54 mostram os valores dos quantis amostrais para os diferentes valores de r e X_0 . Para efeito de comparação utilizamos os valores dos quantis de referência da distribuição normal. Observamos que a medida que o valor de n aumenta, os valores dos quantis amostrais aproximam-se dos valores dos quantis da distribuição normal para os estimadores de β_0 e β_1 . O mesmo comportamento é observado para os valores dos quantis amostrais para o estimador de X_0 , no entanto, isso só ocorre quando o tamanho amostral na segunda etapa também aumenta. Pode ser constatado ainda que os valores dos quantis amostrais próximos a cauda da distribuição tendem a ser maiores na cauda inferior quando

$X_0 = 0,01$ e a ser maiores na cauda superior quando $X_0 = 1,9$.

Tabela 4.37: Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_0$ para $r = 3$ quando $\beta_0 = 0,1$ no caso exponencial potência.

X_0	n	$\hat{\beta}_0$					
		Média	Desvio padrão	Viés	EQM	Assimetria	Curtose
0,01	5	0,0988	0,4074	-0,0012	0,1659	0,0486	3,6170
	20	0,1040	0,2169	0,0040	0,0470	0,0387	3,2916
	40	0,0968	0,1515	-0,0032	0,0230	-0,0046	3,1785
	100	0,1005	0,0945	0,0005	0,0089	0,0209	3,0313
0,8	5	0,0935	0,4042	-0,0065	0,1634	-0,0287	3,6967
	20	0,1002	0,2172	0,0002	0,0472	-0,0378	3,2657
	40	0,1022	0,1529	0,0022	0,0234	-0,0286	3,2787
	100	0,1003	0,0966	0,0003	0,0093	0,0464	2,9830
1,9	5	0,0976	0,4069	-0,0024	0,1655	0,0129	3,5092
	20	0,0967	0,2151	-0,0033	0,0463	-0,0399	3,3534
	40	0,0968	0,1526	-0,0032	0,0233	0,0317	3,1000
	100	0,1005	0,0963	0,0005	0,0093	0,0165	3,0446

Tabela 4.38: Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_1$ para $r = 3$ quando $\beta_1 = 2$ no caso exponencial potência.

X_0	n	$\hat{\beta}_1$					
		Média	Desvio padrão	Viés	EQM	Assimetria	Curtose
0,01	5	2,0011	0,3348	0,0011	0,1121	-0,0130	3,5392
	20	1,9968	0,1846	-0,0032	0,0341	-0,0058	3,3334
	40	2,0018	0,1316	0,0018	0,0173	0,0114	3,1436
	100	2,0000	0,0827	0,0000	0,0068	-0,0171	3,0335
0,8	5	2,0040	0,3336	0,0040	0,1113	-0,0230	3,5072
	20	1,9992	0,1858	-0,0008	0,0345	-0,0092	3,1391
	40	1,9994	0,1325	-0,0006	0,0176	0,0369	3,1922
	100	1,9993	0,0836	-0,0007	0,0070	-0,0411	3,0005
1,9	5	2,0017	0,3333	0,0017	0,1111	0,0158	3,4091
	20	2,0034	0,1843	0,0034	0,0340	0,0250	3,2581
	40	2,0025	0,1311	0,0025	0,0172	0,0243	3,0782
	100	2,0000	0,0826	0,0000	0,0068	0,0184	2,9926

Tabela 4.39: Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{X}_0$ para $r = 3$ no caso exponencial potência.

X_0	n	$\hat{X}_0$					
		Média	Desvio padrão	Viés	EQM	Assimetria	Curtose
0,01	5	-0,0208	0,2927	-0,0308	0,0866	-2,1493	26,1875
	20	0,0000	0,1940	-0,0100	0,0378	-0,2672	3,6959
	40	0,0057	0,1741	-0,0043	0,0303	-0,1449	3,5786
	100	0,0075	0,1610	-0,0025	0,0259	-0,0274	3,6045
0,8	5	0,7970	0,2075	-0,0030	0,0431	-0,1998	4,4113
	20	0,7979	0,1683	-0,0021	0,0283	-0,0649	3,7126
	40	0,7973	0,1606	-0,0027	0,0258	-0,0525	3,7906
	100	0,7977	0,1541	-0,0023	0,0237	-0,0040	3,7623
1,9	5	1,9266	0,2656	0,0266	0,0713	0,9989	6,4660
	20	1,9022	0,1867	0,0022	0,0349	0,3379	3,9119
	40	1,9029	0,1699	0,0029	0,0289	0,1333	3,8539
	100	1,8995	0,1622	-0,0005	0,0263	0,0009	3,8561

Tabela 4.40: Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_0$ para $r = 20$ quando $\beta_0 = 0, 1$ no caso exponencial potência.

X_0	n	$\hat{\beta}_0$					
		Média	Desvio padrão	Viés	EQM	Assimetria	Curtose
0,01	5	0,0996	0,4108	-0,0004	0,1688	-0,0228	3,7137
	20	0,0993	0,2172	-0,0007	0,0472	-0,0242	3,4055
	40	0,1027	0,1542	0,0027	0,0238	0,0067	3,2876
	100	0,1008	0,0964	0,0008	0,0093	0,0330	3,1468
0,8	5	0,1037	0,4146	0,0037	0,1719	0,0043	3,9599
	20	0,0995	0,2147	-0,0005	0,0461	-0,0217	3,2066
	40	0,1012	0,1552	0,0012	0,0241	-0,0210	3,2348
	100	0,1009	0,0961	0,0009	0,0092	-0,0556	3,0422
1,9	5	0,1028	0,4133	0,0028	0,1708	0,0373	3,7023
	20	0,0980	0,2180	-0,0020	0,0475	-0,0310	3,2893
	40	0,0984	0,1522	-0,0016	0,0232	-0,0234	3,1088
	100	0,0985	0,0965	-0,0015	0,0093	-0,0405	3,0656

Tabela 4.41: Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_1$ para $r = 20$ quando $\beta_1 = 2$ no caso exponencial potência.

X_0	n	$\hat{\beta}_1$					
		Média	Desvio padrão	Viés	EQM	Assimetria	Curtose
0,01	5	2,0008	0,3361	0,0008	0,1130	0,0201	3,5923
	20	2,0002	0,1876	0,0002	0,0352	-0,0026	3,3166
	40	1,9976	0,1343	-0,0024	0,0181	-0,0309	3,2071
	100	1,9999	0,0836	-0,0001	0,0070	-0,0041	3,1938
0,8	5	1,9968	0,3388	-0,0032	0,1148	-0,0182	3,6757
	20	2,0008	0,1841	0,0008	0,0339	-0,0058	3,0979
	40	1,9985	0,1337	-0,0015	0,0179	0,0133	3,1609
	100	1,9992	0,0833	-0,0008	0,0069	0,0411	3,0893
1,9	5	1,9958	0,3332	-0,0042	0,1110	-0,0473	3,5479
	20	2,0011	0,1866	0,0011	0,0348	0,0438	3,3609
	40	2,0016	0,1316	0,0016	0,0173	0,0475	3,1311
	100	2,0010	0,0830	0,0010	0,0069	0,0309	3,0367

Tabela 4.42: Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{X}_0$ para $r = 20$ no caso exponencial potência.

X_0	n	$\hat{X}_0$					
		Média	Desvio padrão	Viés	EQM	Assimetria	Curtose
0,01	5	-0,0216	0,2448	-0,0316	0,0609	-2,1477	20,4355
	20	0,0009	0,1239	-0,0091	0,0154	-0,5250	4,0623
	40	0,0034	0,0954	-0,0066	0,0091	-0,3327	3,4614
	100	0,0071	0,0729	-0,0029	0,0053	-0,1779	3,0887
0,8	5	0,7927	0,1528	-0,0073	0,0234	-1,4972	27,3023
	20	0,7984	0,0814	-0,0016	0,0066	-0,1627	3,2848
	40	0,7982	0,0693	-0,0018	0,0048	-0,1195	3,2065
	100	0,8001	0,0607	0,0001	0,0037	-0,0077	3,1410
1,9	5	1,9309	0,2245	0,0309	0,0514	1,6078	10,5500
	20	1,9072	0,1177	0,0072	0,0139	0,5243	4,1064
	40	1,9028	0,0907	0,0028	0,0082	0,2646	3,2770
	100	1,9017	0,0710	0,0017	0,0050	0,1058	3,1373

Tabela 4.43: Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_0$ para $r = 100$ quando $\beta_0 = 0, 1$ no caso exponencial potência.

X_0	n	$\hat{\beta}_0$					
		Média	Desvio padrão	Viés	EQM	Assimetria	Curtose
0,01	5	0,0853	0,4007	-0,0147	0,1607	-0,0992	3,5757
	20	0,0976	0,2135	-0,0024	0,0456	0,0198	3,2600
	40	0,0987	0,1539	-0,0013	0,0237	0,0159	3,1130
	100	0,0998	0,0956	-0,0002	0,0091	-0,0032	3,0673
0,8	5	0,1013	0,4043	0,0013	0,1634	-0,0180	3,7899
	20	0,1013	0,2161	0,0013	0,0467	-0,0168	3,2640
	40	0,0991	0,1533	-0,0009	0,0235	0,0045	3,2667
	100	0,1003	0,0953	0,0003	0,0091	-0,0310	3,1360
1,9	5	0,0983	0,4079	-0,0017	0,1664	0,0462	3,8621
	20	0,1000	0,2143	0,0000	0,0459	0,0179	3,2796
	40	0,0996	0,1516	-0,0004	0,0230	-0,0410	3,1912
	100	0,0997	0,0949	-0,0003	0,0090	0,0325	3,1397

Tabela 4.44: Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_1$ para $r = 100$ quando $\beta_1 = 2$ no caso exponencial potência.

X_0	n	$\hat{\beta}_1$					
		Média	Desvio padrão	Viés	EQM	Assimetria	Curtose
0,01	5	2,0083	0,3295	0,0083	0,1087	0,0508	3,4164
	20	2,0021	0,1837	0,0021	0,0338	-0,0129	3,2172
	40	2,0008	0,1329	0,0008	0,0177	-0,0098	3,1265
	100	1,9999	0,0830	-0,0001	0,0069	0,0422	3,1372
0,8	5	2,0019	0,3302	0,0019	0,1090	0,0049	3,5379
	20	2,0010	0,1856	0,0010	0,0345	0,0318	3,1746
	40	2,0019	0,1329	0,0019	0,0177	-0,0211	3,2657
	100	1,9992	0,0831	-0,0008	0,0069	0,0385	3,0693
1,9	5	2,0007	0,3281	0,0007	0,1076	0,0542	3,6227
	20	1,9994	0,1795	-0,0006	0,0322	-0,0316	3,3689
	40	2,0001	0,1293	0,0001	0,0167	0,0010	3,2267
	100	2,0002	0,0817	0,0002	0,0067	-0,0339	3,1121

Tabela 4.45: Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{X}_0$ para $r = 100$ no caso exponencial potência.

X_0	n	$\hat{X}_0$					
		Média	Desvio padrão	Viés	EQM	Assimetria	Curtose
0,01	5	-0,0113	0,2191	-0,0213	0,0484	-1,0960	5,9648
	20	0,0026	0,1118	-0,0074	0,0126	-0,5683	3,8719
	40	0,0066	0,0814	-0,0034	0,0066	-0,3680	3,3831
	100	0,0082	0,0536	-0,0018	0,0029	-0,1977	3,1280
0,8	5	0,7928	0,1334	-0,0072	0,0179	-0,4471	4,9279
	20	0,7973	0,0643	-0,0027	0,0041	-0,2211	3,5485
	40	0,7989	0,0476	-0,0011	0,0023	-0,1343	3,2154
	100	0,7999	0,0345	-0,0001	0,0012	-0,0420	3,0300
1,9	5	1,9262	0,2079	0,0262	0,0439	1,4297	9,4379
	20	1,9078	0,1012	0,0078	0,0103	0,5811	4,3998
	40	1,9035	0,0744	0,0035	0,0056	0,3715	3,5924
	100	1,9016	0,0501	0,0016	0,0025	0,2692	3,3126

Tabela 4.46: Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 3$ quando $X_0 = 0,01$ no caso exponencial potência.

Quantil (N(0,1))	$n = 5$			$n = 20$			$n = 40$			$n = 100$		
	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$
0,5% (-2,5758)	-2,7223	-2,8071	-3,5800	-2,5810	-2,7359	-3,0367	-2,6561	-2,6117	-2,7930	-2,5358	-2,6159	-2,8214
1% (-2,3263)	-2,4273	-2,4513	-2,9944	-2,3380	-2,3856	-2,6460	-2,4451	-2,3079	-2,5120	-2,3188	-2,4111	-2,5153
2,5% (-1,9599)	-2,0119	-2,0145	-2,2166	-1,9795	-1,9967	-2,1534	-1,9977	-1,9643	-2,0549	-1,9521	-1,9808	-2,0418
5% (-1,6448)	-1,6464	-1,6346	-1,6793	-1,6481	-1,6293	-1,6834	-1,6422	-1,6519	-1,6802	-1,6333	-1,6470	-1,6556
50% (0)	0,0002	-0,0002	0,1182	-0,0086	0,0052	0,0473	-0,0101	-0,0022	0,0300	-0,0109	0,0030	0,0000
95% (1,6448)	1,6611	1,6154	1,3353	1,6516	1,6438	1,5567	1,6510	1,6516	1,5794	1,6513	1,6276	1,6752
97,5% (1,9599)	2,0203	1,9774	1,5875	1,9880	1,9769	1,8835	1,9597	1,9476	1,9369	1,9427	1,9440	2,0315
99% (2,3263)	2,5034	2,4332	1,8104	2,3979	2,3821	2,3099	2,3401	2,3934	2,3257	2,3512	2,3444	2,4533
99,5% (2,5758)	2,8159	2,6982	2,0195	2,7053	2,6961	2,6142	2,6241	2,6471	2,6507	2,6527	2,6095	2,7481

Tabela 4.47: Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 3$ quando $X_0 = 0,8$ no caso exponencial potência.

Quantil (N(0,1))	$n = 5$			$n = 20$			$n = 40$			$n = 100$		
	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$
0,5% (-2,5758)	-2,8635	-2,7721	-2,9904	-2,6905	-2,7124	-2,9447	-2,6591	-2,5754	-2,8793	-2,5362	-2,5895	-2,8650
1% (-2,3263)	-2,4646	-2,4185	-2,5723	-2,3915	-2,4152	-2,5601	-2,3969	-2,3542	-2,5775	-2,2828	-2,3511	-2,4661
2,5% (-1,9599)	-2,0054	-2,0283	-2,0575	-1,9999	-1,9908	-2,0168	-1,9922	-1,9638	-2,0689	-1,9511	-1,9656	-1,9951
5% (-1,6448)	-1,6575	-1,6528	-1,6370	-1,6509	-1,6413	-1,6720	-1,6333	-1,6312	-1,6465	-1,6256	-1,6539	-1,6330
50% (0)	0,0009	-0,0036	0,0188	0,0074	-0,0002	0,0139	0,0205	-0,0095	0,0088	-0,0093	0,0155	0,0006
95% (1,6448)	1,6422	1,6528	1,5905	1,6230	1,6396	1,6124	1,6195	1,6506	1,6307	1,6531	1,6166	1,6751
97,5% (1,9599)	1,9914	1,9536	1,9635	1,9468	2,0084	1,9859	1,9670	1,9605	1,9752	1,9881	1,9514	2,0174
99% (2,3263)	2,4822	2,3523	2,4318	2,3257	2,3654	2,4695	2,3964	2,4130	2,4393	2,3790	2,3237	2,4906
99,5% (2,5758)	2,7767	2,7022	2,7697	2,6448	2,5883	2,8289	2,6497	2,6419	2,8337	2,6320	2,5833	2,7891

Tabela 4.48: Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 3$ quando $X_0 = 1,9$ no caso exponencial potência.

Quantil (N(0,1))	$n = 5$			$n = 20$			$n = 40$			$n = 100$		
	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$
0,5% (-2,5758)	-2,7751	-2,7009	-2,0791	-2,7537	-2,6140	-2,4941	-2,5977	-2,5915	-2,7000	-2,5610	-2,5415	-2,8314
1% (-2,3263)	-2,4692	-2,3846	-1,9249	-2,4375	-2,3757	-2,2756	-2,3620	-2,3449	-2,4110	-2,2983	-2,3031	-2,5224
2,5% (-1,9599)	-2,0452	-1,9824	-1,6658	-1,9885	-1,9786	-1,8472	-1,9617	-1,9625	-1,9572	-1,9638	-1,9464	-2,0487
5% (-1,6448)	-1,6580	-1,6376	-1,4338	-1,6573	-1,6543	-1,5212	-1,6372	-1,6325	-1,6096	-1,6541	-1,6435	-1,6489
50% (0)	-0,0094	0,0032	-0,1005	0,0180	0,0039	-0,0408	-0,0059	-0,0074	-0,0120	-0,0092	0,0031	0,0049
95% (1,6448)	1,6401	1,6458	1,7724	1,6031	1,6380	1,7033	1,6420	1,6358	1,6829	1,6679	1,6770	1,6283
97,5% (1,9599)	2,0250	1,9863	2,2970	1,9759	1,9922	2,1473	1,9752	1,9881	2,0279	1,9929	1,9862	2,0287
99% (2,3263)	2,5272	2,3675	3,0303	2,4656	2,4395	2,6780	2,4114	2,3678	2,4765	2,3665	2,3483	2,5375
99,5% (2,5758)	2,8057	2,7220	3,4447	2,7456	2,7485	2,9782	2,6929	2,6232	2,8766	2,6026	2,5801	2,9265

Tabela 4.49: Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 20$ quando $X_0 = 0,01$ no caso exponencial potência.

Quantil (N(0,1))	$n = 5$			$n = 20$			$n = 40$			$n = 100$		
	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$
0,5% (-2,5758)	-2,7819	-2,6972	-4,0342	-2,7263	-2,7047	-3,1726	-2,5833	-2,6618	-2,9424	-2,5756	-2,6703	-2,7589
1% (-2,3263)	-2,4915	-2,4239	-3,1716	-2,4868	-2,3707	-2,6749	-2,4242	-2,3905	-2,5794	-2,3533	-2,3956	-2,4953
2,5% (-1,9599)	-2,0359	-1,9906	-2,2760	-2,0258	-1,9395	-2,1648	-1,9969	-1,9913	-2,1351	-1,9562	-1,9942	-2,0307
5% (-1,6448)	-1,6723	-1,6258	-1,7025	-1,6341	-1,6442	-1,7313	-1,6265	-1,6718	-1,7205	-1,6429	-1,6519	-1,6873
50% (0)	0,0126	0,0024	0,1290	0,0023	0,0023	0,0722	0,0021	0,0038	0,0504	-0,0056	0,0038	0,0232
95% (1,6448)	1,6487	1,6639	1,3137	1,6457	1,6549	1,5025	1,6746	1,6193	1,5580	1,6720	1,6224	1,5902
97,5% (1,9599)	2,0245	2,0105	1,5295	1,9748	1,9832	1,7575	1,9968	1,9819	1,8323	1,9876	1,9711	1,8688
99% (2,3263)	2,4548	2,4644	1,7592	2,3729	2,4324	2,0696	2,3881	2,3807	2,1658	2,3943	2,3788	2,2000
99,5% (2,5758)	2,7927	2,7565	1,8866	2,6755	2,6899	2,2630	2,6593	2,6678	2,3705	2,6234	2,6472	2,3902

Tabela 4.50: Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 20$ quando $X_0 = 0,8$ no caso exponencial potência.

Quantil (N(0,1))	$n = 5$			$n = 20$			$n = 40$			$n = 100$		
	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$
0,5% (-2,5758)	-2,8663	-2,7641	-3,2875	-2,6245	-2,5992	-2,7595	-2,6618	-2,6296	-2,7607	-2,6397	-2,5172	-2,6745
1% (-2,3263)	-2,4606	-2,4272	-2,7120	-2,4236	-2,3463	-2,4722	-2,3854	-2,4066	-2,4734	-2,4199	-2,3292	-2,3414
2,5% (-1,9599)	-2,0099	-1,9849	-2,0019	-1,9884	-1,9720	-2,0379	-1,9615	-1,9454	-2,0419	-1,9760	-1,9797	-1,9879
5% (-1,6448)	-1,6550	-1,6364	-1,5823	-1,6784	-1,6442	-1,6739	-1,6424	-1,6419	-1,6711	-1,6602	-1,6405	-1,6391
50% (0)	0,0010	-0,0028	0,0476	-0,0068	0,0000	0,0280	-0,0076	0,0011	0,0098	0,0097	-0,0041	0,0109
95% (1,6448)	1,6236	1,6312	1,4753	1,6310	1,6401	1,5860	1,6468	1,6472	1,6252	1,6289	1,6427	1,6262
97,5% (1,9599)	1,9818	1,9700	1,7803	1,9911	1,9544	1,9308	1,9670	1,9774	1,9128	1,9616	1,9709	1,9617
99% (2,3263)	2,5195	2,4119	2,2261	2,3680	2,3069	2,2794	2,3693	2,3324	2,3016	2,2781	2,4027	2,3830
99,5% (2,5758)	2,9176	2,8287	2,4497	2,6206	2,5835	2,5170	2,6055	2,5761	2,5425	2,5480	2,6816	2,6393

Tabela 4.51: Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 20$ quando $X_0 = 1,9$ no caso exponencial potência.

Quantil (N(0,1))	$n = 5$			$n = 20$			$n = 40$			$n = 100$		
	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$
0,5% (-2,5758)	-2,8355	-2,7999	-1,9732	-2,6918	-2,6543	-2,3426	-2,6591	-2,5766	-2,4536	-2,6327	-2,5470	-2,4339
1% (-2,3263)	-2,4498	-2,4933	-1,8238	-2,4115	-2,4131	-2,0928	-2,3645	-2,3292	-2,1691	-2,4284	-2,2658	-2,2245
2,5% (-1,9599)	-1,9830	-2,0501	-1,5391	-2,0150	-1,9984	-1,7641	-1,9843	-1,9407	-1,8540	-1,9797	-1,9272	-1,9093
5% (-1,6448)	-1,6306	-1,6570	-1,3216	-1,6577	-1,6227	-1,5080	-1,6692	-1,6414	-1,5482	-1,6441	-1,6038	-1,6086
50% (0)	0,0013	0,0112	-0,1376	0,0116	-0,0098	-0,0665	0,0028	-0,0093	-0,0450	-0,0025	-0,0024	-0,0115
95% (1,6448)	1,6585	1,6223	1,7626	1,6276	1,6506	1,7339	1,6495	1,6872	1,7269	1,6270	1,6296	1,6810
97,5% (1,9599)	2,0728	1,9704	2,3344	1,9969	2,0139	2,1423	1,9810	2,0399	2,0937	1,9470	1,9685	2,0076
99% (2,3263)	2,5225	2,4256	3,1733	2,3671	2,4693	2,7200	2,3501	2,3698	2,5359	2,3124	2,3520	2,4392
99,5% (2,5758)	2,8877	2,7059	3,9435	2,6390	2,8113	3,1633	2,6349	2,6279	2,8297	2,5728	2,6666	2,6823

Tabela 4.52: Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 100$ quando $X_0 = 0,01$ no caso exponencial potência.

Quantil (N(0,1))	$n = 5$			$n = 20$			$n = 40$			$n = 100$		
	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$
0,5% (-2,5758)	-2,8175	-2,6620	-3,8930	-2,6395	-2,6933	-3,1718	-2,6191	-2,6094	-2,9049	-2,6390	-2,5756	-2,7186
1% (-2,3263)	-2,5403	-2,4329	-3,1772	-2,3417	-2,3855	-2,7688	-2,3864	-2,3631	-2,6221	-2,3759	-2,3253	-2,4336
2,5% (-1,9599)	-2,0385	-2,0314	-2,3920	-1,9649	-1,9950	-2,2230	-1,9762	-1,9704	-2,1230	-1,9511	-1,9218	-2,0342
5% (-1,6448)	-1,6715	-1,6674	-1,8118	-1,6361	-1,6450	-1,7874	-1,6386	-1,6311	-1,7384	-1,6122	-1,6538	-1,7018
50% (0)	0,0045	0,0029	0,1216	-0,0046	0,0055	0,0884	-0,0029	0,0085	0,0527	0,0066	-0,0023	0,0336
95% (1,6448)	1,6416	1,6483	1,3978	1,6755	1,6271	1,4862	1,6696	1,6380	1,5468	1,6547	1,6246	1,5488
97,5% (1,9599)	1,9944	2,0152	1,5996	1,9841	1,9400	1,7371	2,0024	1,9611	1,8099	1,9762	2,0218	1,8625
99% (2,3263)	2,4013	2,4798	1,8929	2,4067	2,3541	2,0319	2,3428	2,3340	2,1299	2,2990	2,4016	2,2260
99,5% (2,5758)	2,6865	2,8453	2,0443	2,6907	2,6296	2,2304	2,5706	2,5800	2,3104	2,6089	2,6685	2,4514

Tabela 4.53: Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 100$ quando $X_0 = 0,8$ no caso exponencial potência.

Quantil (N(0,1))	$n = 5$			$n = 20$			$n = 40$			$n = 100$		
	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$
0,5% (-2,5758)	-2,8663	-2,7479	-3,4046	-2,6840	-2,6315	-2,8790	-2,7368	-2,7072	-2,7627	-2,6244	-2,5454	-2,6108
1% (-2,3263)	-2,4710	-2,4323	-2,7783	-2,4328	-2,3583	-2,5780	-2,3675	-2,4102	-2,4676	-2,3256	-2,3152	-2,3514
2,5% (-1,9599)	-2,0045	-1,9662	-2,1408	-1,9668	-1,9847	-2,1136	-1,9743	-1,9994	-2,0365	-1,9674	-1,9600	-1,9937
5% (-1,6448)	-1,6187	-1,6482	-1,6536	-1,6615	-1,6252	-1,6987	-1,6409	-1,6569	-1,6778	-1,6434	-1,6352	-1,6613
50% (0)	0,0001	0,0019	0,0535	-0,0076	-0,0053	0,0390	-0,0076	-0,0023	0,0180	0,0150	-0,0106	0,0063
95% (1,6448)	1,6563	1,6344	1,5439	1,6531	1,6526	1,5826	1,6626	1,6313	1,6201	1,6539	1,6623	1,6257
97,5% (1,9599)	2,0422	2,0131	1,8897	1,9873	2,0283	1,8905	2,0312	1,9540	1,9265	1,9565	1,9930	1,9366
99% (2,3263)	2,4677	2,4646	2,2848	2,4270	2,4053	2,2707	2,3749	2,3817	2,2869	2,2918	2,3582	2,2729
99,5% (2,5758)	2,8464	2,7288	2,6043	2,7075	2,6544	2,5744	2,6580	2,6974	2,4789	2,5082	2,6267	2,5688

Tabela 4.54: Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 100$ quando $X_0 = 1,9$ no caso exponencial potência.

Quantil (N(0,1))	$n = 5$			$n = 20$			$n = 40$			$n = 100$		
	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$
0,5% (-2,5758)	-2,7445	-2,7486	-2,0744	-2,6809	-2,6492	-2,2365	-2,6707	-2,6471	-2,3859	-2,6148	-2,6764	-2,4765
1% (-2,3263)	-2,4276	-2,4448	-1,8880	-2,3500	-2,4008	-2,0664	-2,3978	-2,3828	-2,1857	-2,3182	-2,3994	-2,1727
2,5% (-1,9599)	-2,0181	-1,9743	-1,6058	-1,9585	-1,9999	-1,7995	-2,0037	-1,9911	-1,8196	-1,9451	-1,9753	-1,8227
5% (-1,6448)	-1,6266	-1,6172	-1,3756	-1,6399	-1,6531	-1,5201	-1,6669	-1,6224	-1,5492	-1,6458	-1,6513	-1,5504
50% (0)	-0,0087	-0,0022	-0,1256	-0,0031	0,0079	-0,0763	0,0027	-0,0013	-0,0485	-0,0068	0,0156	-0,0388
95% (1,6448)	1,6302	1,6497	1,7444	1,6349	1,6360	1,7522	1,6219	1,6571	1,7378	1,6452	1,6359	1,7207
97,5% (1,9599)	2,0248	2,0005	2,3664	1,9797	1,9552	2,2247	1,9773	1,9840	2,1086	1,9927	1,9674	2,0729
99% (2,3263)	2,5235	2,5010	3,1136	2,3683	2,3672	2,7494	2,3697	2,3824	2,6501	2,3931	2,3392	2,5709
99,5% (2,5758)	2,9601	2,8515	3,9968	2,6624	2,6347	3,2272	2,5983	2,5925	2,9984	2,6764	2,5724	2,8982

4.1.4 Caso logística tipo II

As Tabelas de 4.55 a 4.63 apresentam a média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose para os estimadores de β_0 , β_1 e X_0 para os diferentes tamanhos amostrais de r . Podemos observar pelas tabelas que os valores médios para $\hat{\beta}_0$ e $\hat{\beta}_1$ são bem próximos aos valores verdadeiros dos parâmetros em todos os cenários de simulação e que esses valores não sofrem grande variação. Constatamos ainda que os valores dos EQMs e dos desvios padrão diminuem com o aumento do tamanho da amostra no primeiro estágio. Nas tabelas 4.57, 4.60 e 4.63 referentes ao estimador de X_0 podemos verificar que nos casos em que $X_0 = 0,01$ e $X_0 = 0,8$ a assimetria é sempre à esquerda, já no caso quando $X_0 = 1,9$ a assimetria é sempre à direita em todos os cenários de simulação. Nessas tabelas também pode ser observado para $X_0 = 0,01$ quando $n = 5$ e $n = 20$ que a estimativa média de X_0 apresenta valores negativos, assim como no caso t-Student e exponencial potência, aqui também cabe as explicações e observações já mencionadas anteriormente. Observamos que os valores da curtose são maiores para n pequeno e que eles decrescem conforme o tamanho da amostra na primeira etapa aumenta nos diferentes cenários de simulação. Vale ressaltar que a Tabela 4.57 apresenta valores para a curtose quando $n = 5$ para $X_0 = 0,01$ e $X_0 = 1,9$ bem destoantes do que nos demais casos. Para o cálculo da curtose foi utilizada a medida de Pearson de curtose, que é sensível a presença de “outliers”. Na figura 4.1 é apresentado o box plot das estimativas de X_0 para a amostra Monte Carlo gerada para $n = 5$ quando $X_0 = 0,01$. Claramente observamos um ponto atípico na amostra e que o valor paramétrico influenciou o valor destoante da medida de Pearson de curtose registrada na Tabela 4.57 quando $n = 5$ para $X_0 = 0,01$. Uma situação semelhante ocorreu para o caso em que $X_0 = 1,9$ quando $n = 5$ também apresentada na Tabela 4.57.

Já nas Tabelas de 4.64 a 4.72 mostram os valores dos quantis amostrais para os diferentes valores de r e X_0 . Aqui também são utilizados os valores dos quantis de referência da distribuição normal para efeito de comparação. Observamos que a medida que o valor de n aumenta, os valores dos quantis amostrais aproximam-se dos valores dos quantis da

distribuição normal para os estimadores de β_0 e β_1 para os diferentes valores de r . Inferimos ainda que os valores dos quantis amostrais para o estimador de X_0 tendem a se aproximar dos valores dos quantis de referência da distribuição normal quando o tamanho amostral na primeira e segunda etapas aumentam. Pode ser constatado ainda que os valores dos quantis amostrais próximos a cauda da distribuição tendem a ser maiores na cauda inferior quando $X_0 = 0,01$ e a ser maiores na cauda superior quando $X_0 = 1,9$.

Tabela 4.55: Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_0$ para $r = 3$ quando $\beta_0 = 0,1$ no caso logística tipo II.

X_0	n	$\hat{\beta}_0$					
		Média	Desvio padrão	Viés	EQM	Assimetria	Curtose
0,01	5	0,1011	0,5056	0,0011	0,2556	-0,0223	3,3763
	20	0,1025	0,2725	0,0025	0,0743	-0,0300	3,2561
	40	0,1002	0,1947	0,0002	0,0379	0,0057	3,0245
	100	0,0999	0,1269	-0,0001	0,0161	-0,0273	3,0521
0,8	5	0,0974	0,5118	-0,0026	0,2620	0,0429	3,6411
	20	0,1000	0,2758	0,0000	0,0760	0,0268	3,0369
	40	0,0995	0,1939	-0,0005	0,0376	-0,0010	3,0148
	100	0,0999	0,1247	-0,0001	0,0156	0,0060	2,9752
1,9	5	0,1015	0,5101	0,0015	0,2602	0,0334	3,6849
	20	0,0965	0,2746	-0,0035	0,0754	-0,0170	3,0990
	40	0,0976	0,1987	-0,0024	0,0395	0,0090	3,0917
	100	0,1003	0,1247	0,0003	0,0155	0,0302	2,9732

Tabela 4.56: Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_1$ para $r = 3$ quando $\beta_1 = 2$ no caso logística tipo II.

X_0	n	$\hat{\beta}_1$					
		Média	Desvio padrão	Viés	EQM	Assimetria	Curtose
0,01	5	1,9992	0,4130	-0,0008	0,1706	0,0131	3,4721
	20	2,0012	0,2322	0,0012	0,0539	0,0137	3,1488
	40	2,0007	0,1683	0,0007	0,0283	-0,0276	2,9410
	100	1,9999	0,1087	-0,0001	0,0118	0,0270	3,1295
0,8	5	2,0006	0,4151	0,0006	0,1723	-0,0483	3,4996
	20	2,0015	0,2366	0,0015	0,0560	-0,0448	3,0843
	40	2,0010	0,1673	0,0010	0,0280	0,0378	3,0408
	100	2,0006	0,1067	0,0006	0,0114	-0,0047	2,9778
1,9	5	1,9963	0,4128	-0,0037	0,1704	-0,0446	3,4647
	20	2,0009	0,2350	0,0009	0,0552	0,0059	3,1198
	40	2,0021	0,1694	0,0021	0,0287	-0,0262	3,0632
	100	1,9999	0,1081	-0,0001	0,0117	-0,0121	2,9974

Tabela 4.57: Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{X}_0$ para $r = 3$ no caso logística tipo II.

X_0	n	$\hat{X}_0$					
		Média	Desvio padrão	Viés	EQM	Assimetria	Curtose
0,01	5	-0,0486	0,6947	-0,0586	0,4860	-61,1911	5171,9084
	20	-0,0040	0,2384	-0,0140	0,0570	-0,4321	4,0007
	40	0,0081	0,2161	-0,0019	0,0467	-0,2011	3,5836
	100	0,0076	0,1977	-0,0024	0,0391	-0,1070	3,3860
0,8	5	0,7880	0,2689	-0,0120	0,0724	-0,7292	7,8092
	20	0,7952	0,2088	-0,0048	0,0436	-0,0590	3,7728
	40	0,8017	0,1966	0,0017	0,0386	-0,0230	3,7141
	100	0,7995	0,1902	-0,0005	0,0362	-0,0411	3,6075
1,9	5	1,9503	0,5017	0,0503	0,2543	34,5268	2365,6678
	20	1,9135	0,2326	0,0135	0,0543	0,3907	3,6802
	40	1,9065	0,2107	0,0065	0,0444	0,2143	3,3205
	100	1,9029	0,1948	0,0029	0,0380	0,0608	3,3274

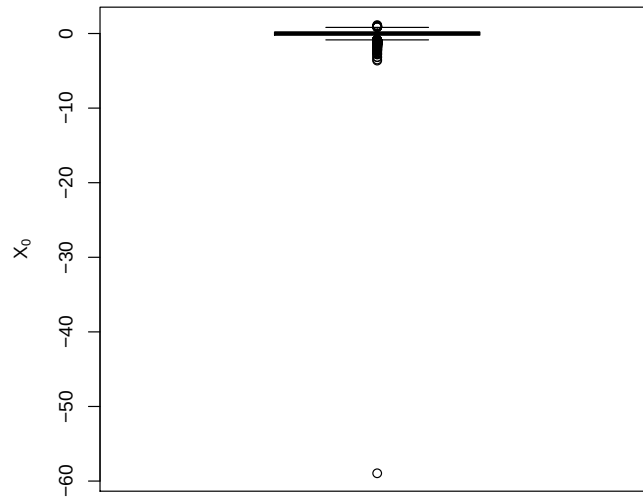


Figura 4.1: Box plot para a amostra Monte Carlo gerada para $n = 5$ e $r = 3$ quando $X_0 = 0,01$ no caso logística do tipo II.

Tabela 4.58: Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_0$ para $r = 20$ quando $\beta_0 = 0, 1$ no caso logística tipo II.

X_0	n	$\hat{\beta}_0$					
		Média	Desvio padrão	Viés	EQM	Assimetria	Curtose
0,01	5	0,1008	0,5028	0,0008	0,2528	-0,0910	3,6885
	20	0,0993	0,2735	-0,0007	0,0748	0,0228	3,1559
	40	0,1005	0,1966	0,0005	0,0387	0,0113	2,9993
	100	0,0989	0,1243	-0,0011	0,0154	-0,0067	3,0177
0,8	5	0,1029	0,5027	0,0029	0,2527	-0,0086	3,3982
	20	0,0980	0,2733	-0,0020	0,0747	0,0483	3,1611
	40	0,0996	0,1972	-0,0004	0,0389	-0,0352	2,9780
	100	0,0997	0,1230	-0,0003	0,0151	-0,0365	3,0190
1,9	5	0,1035	0,5086	0,0035	0,2587	-0,0037	3,5996
	20	0,0954	0,2733	-0,0046	0,0747	0,0102	3,0822
	40	0,0990	0,1962	-0,0010	0,0385	-0,0063	3,0062
	100	0,1000	0,1240	0,0000	0,0154	-0,0134	3,0765

Tabela 4.59: Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_1$ para $r = 20$ quando $\beta_1 = 2$ no caso logística tipo II.

X_0	n	$\hat{\beta}_1$					
		Média	Desvio padrão	Viés	EQM	Assimetria	Curtose
0,01	5	1,9983	0,4137	-0,0017	0,1712	0,0269	3,3765
	20	1,9992	0,2330	-0,0008	0,0543	-0,0159	3,1136
	40	1,9990	0,1703	-0,0010	0,0290	-0,0470	3,0469
	100	2,0012	0,1075	0,0012	0,0116	0,0188	2,9398
0,8	5	2,0003	0,4112	0,0003	0,1691	0,0312	3,3479
	20	2,0006	0,2342	0,0006	0,0549	-0,0204	3,0488
	40	2,0007	0,1705	0,0007	0,0291	0,0410	2,9904
	100	2,0002	0,1061	0,0002	0,0112	-0,0047	2,9645
1,9	5	1,9973	0,4100	-0,0027	0,1681	-0,0256	3,3374
	20	2,0029	0,2352	0,0029	0,0553	-0,0145	3,0697
	40	1,9999	0,1695	-0,0001	0,0287	-0,0001	2,9980
	100	1,9996	0,1069	-0,0004	0,0114	-0,0189	3,0094

Tabela 4.60: Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{X}_0$ para $r = 20$ no caso logística tipo II.

X_0	n	$\hat{X}_0$					
		Média	Desvio padrão	Viés	EQM	Assimetria	Curtose
0,01	5	-0,0413	0,3143	-0,0513	0,1014	-1,9314	12,9952
	20	-0,0052	0,1610	-0,0152	0,0262	-0,6633	4,2337
	40	0,0033	0,1223	-0,0067	0,0150	-0,4053	3,5031
	100	0,0083	0,0946	-0,0017	0,0089	-0,1828	3,2008
0,8	5	0,7888	0,1844	-0,0112	0,0341	-0,6297	5,8129
	20	0,7979	0,1062	-0,0021	0,0113	-0,1877	3,4356
	40	0,7968	0,0901	-0,0032	0,0081	-0,1095	3,2127
	100	0,7992	0,0784	-0,0008	0,0061	-0,0367	3,0364
1,9	5	1,9469	0,3120	0,0469	0,0995	3,2347	36,4322
	20	1,9125	0,1542	0,0125	0,0239	0,6779	4,3697
	40	1,9082	0,1173	0,0082	0,0138	0,4032	3,5398
	100	1,9045	0,0918	0,0045	0,0084	0,1943	3,2017

Tabela 4.61: Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_0$ para $r = 100$ quando $\beta_0 = 0, 1$ no caso logística tipo II.

X_0	n	$\hat{\beta}_0$					
		Média	Desvio padrão	Viés	EQM	Assimetria	Curtose
0,01	5	0,0946	0,4946	-0,0054	0,2447	-0,1572	3,4728
	20	0,1021	0,2781	0,0021	0,0773	0,0304	3,1439
	40	0,0969	0,1972	-0,0031	0,0389	-0,0235	3,0944
	100	0,0984	0,1248	-0,0016	0,0156	0,0006	3,0387
0,8	5	0,0940	0,5007	-0,0060	0,2507	-0,0926	3,5332
	20	0,0968	0,2707	-0,0032	0,0733	0,0124	3,0684
	40	0,1029	0,1954	0,0029	0,0382	-0,0012	3,0828
	100	0,0987	0,1256	-0,0013	0,0158	-0,0119	2,9354
1,9	5	0,0918	0,5015	-0,0082	0,2516	-0,0232	3,4817
	20	0,1007	0,2719	0,0007	0,0739	0,0033	3,1028
	40	0,0980	0,1953	-0,0020	0,0381	-0,0306	3,0716
	100	0,1001	0,1246	0,0001	0,0155	-0,0528	3,0345

Tabela 4.62: Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{\beta}_1$ para $r = 100$ quando $\beta_1 = 2$ no caso logística tipo II.

X_0	n	$\hat{\beta}_1$					
		Média	Desvio padrão	Viés	EQM	Assimetria	Curtose
0,01	5	2,0017	0,4066	0,0017	0,1653	0,1247	3,4431
	20	1,9983	0,2375	-0,0017	0,0564	-0,0096	3,2180
	40	2,0021	0,1708	0,0021	0,0292	0,0375	3,0417
	100	2,0016	0,1078	0,0016	0,0116	-0,0146	2,9819
0,8	5	2,0028	0,4133	0,0028	0,1708	0,0366	3,4449
	20	2,0033	0,2314	0,0033	0,0536	0,0070	3,0835
	40	1,9987	0,1683	-0,0013	0,0283	0,0026	3,0008
	100	2,0002	0,1089	0,0002	0,0119	-0,0112	2,9900
1,9	5	2,0076	0,4041	0,0076	0,1634	0,0568	3,4228
	20	1,9993	0,2307	-0,0007	0,0532	0,0202	3,2267
	40	2,0019	0,1669	0,0019	0,0278	0,0103	3,0103
	100	2,0003	0,1078	0,0003	0,0116	0,0305	3,1520

Tabela 4.63: Média, desvio padrão, viés, EQM, assimetria e curtose de $\hat{X}_0$ para $r = 100$ no caso logística tipo II.

X_0	n	$\hat{X}_0$					
		Média	Desvio padrão	Viés	EQM	Assimetria	Curtose
0,01	5	-0,0327	0,2852	-0,0427	0,0832	-1,3763	7,2446
	20	-0,0055	0,1496	-0,0155	0,0226	-0,7705	4,4672
	40	0,0039	0,1050	-0,0061	0,0111	-0,4315	3,4549
	100	0,0075	0,0701	-0,0025	0,0049	-0,2428	3,1852
0,8	5	0,7926	0,1700	-0,0074	0,0289	-0,5617	7,3432
	20	0,7976	0,0818	-0,0024	0,0067	-0,2667	3,4167
	40	0,7979	0,0619	-0,0021	0,0038	-0,1534	3,1368
	100	0,7997	0,0454	-0,0003	0,0021	-0,1054	3,0460
1,9	5	1,9387	0,2754	0,0387	0,0774	1,7175	10,2068
	20	1,9127	0,1347	0,0127	0,0183	0,6748	4,2577
	40	1,9053	0,0967	0,0053	0,0094	0,4452	3,5039
	100	1,9021	0,0660	0,0021	0,0044	0,2214	3,0748

Tabela 4.64: Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 3$ quando $X_0 = 0,01$ no caso logística tipo II.

Quantil (N(0,1))	$n = 5$			$n = 20$			$n = 40$			$n = 100$		
	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$
0,5% (-2,5758)	-2,7416	-2,7314	-2,0126	-2,7224	-2,6089	-3,1746	-2,5572	-2,5825	-3,0296	-2,6151	-2,5894	-2,7488
1% (-2,3263)	-2,4378	-2,3549	-1,7090	-2,3806	-2,3176	-2,6938	-2,3371	-2,3422	-2,5963	-2,3733	-2,3424	-2,4367
2,5% (-1,9599)	-2,0120	-1,9694	-1,2355	-1,9759	-1,9587	-2,1457	-1,9739	-1,9596	-2,0513	-2,0296	-1,9448	-1,9995
5% (-1,6448)	-1,6413	-1,6491	-0,9293	-1,6591	-1,6456	-1,7303	-1,6422	-1,6678	-1,6729	-1,6339	-1,6444	-1,6542
50% (0)	0,0051	0,0001	0,0834	-0,0058	-0,0015	0,0437	-0,0032	0,0008	0,0281	0,0027	-0,0085	0,0102
95% (1,6448)	1,6168	1,6277	0,6976	1,6215	1,6316	1,5296	1,6799	1,6545	1,6031	1,6360	1,6522	1,6195
97,5% (1,9599)	1,9911	2,0050	0,8242	1,9751	1,9659	1,8232	1,9601	1,9516	1,8971	1,9533	1,9795	1,9459
99% (2,3263)	2,4563	2,4708	0,9439	2,3716	2,3805	2,1950	2,3140	2,2904	2,2945	2,3022	2,4002	2,3237
99,5% (2,5758)	2,7200	2,7571	1,0187	2,6547	2,6756	2,4528	2,6122	2,4926	2,5572	2,6005	2,6528	2,5868

Tabela 4.65: Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 3$ quando $X_0 = 0,8$ no caso logística tipo II.

Quantil (N(0,1))	$n = 5$			$n = 20$			$n = 40$			$n = 100$		
	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$
0,5% (-2,5758)	-2,7200	-2,8147	-3,3058	-2,5960	-2,6585	-2,8824	-2,6105	-2,5859	-2,8346	-2,4576	-2,5484	-2,7164
1% (-2,3263)	-2,4160	-2,4575	-2,7585	-2,3074	-2,3753	-2,4862	-2,3337	-2,2961	-2,4272	-2,2910	-2,3165	-2,3982
2,5% (-1,9599)	-1,9953	-1,9813	-2,0971	-1,9518	-1,9972	-2,0229	-1,9625	-1,9381	-2,0161	-1,9669	-1,9606	-2,0035
5% (-1,6448)	-1,6108	-1,6464	-1,6418	-1,6395	-1,6558	-1,6615	-1,6476	-1,6275	-1,6389	-1,6499	-1,6553	-1,6327
50% (0)	-0,0019	0,0096	0,0425	-0,0110	0,0132	0,0127	0,0031	-0,0128	0,0123	0,0005	0,0073	0,0023
95% (1,6448)	1,6319	1,6487	1,5152	1,6506	1,6442	1,6009	1,6371	1,6591	1,6026	1,6406	1,6492	1,6087
97,5% (1,9599)	1,9906	1,9388	1,8424	2,0125	1,9333	1,9208	1,9464	1,9901	1,9513	1,9634	1,9577	1,9716
99% (2,3263)	2,4795	2,3722	2,2028	2,3527	2,2816	2,2803	2,3393	2,3780	2,4310	2,3528	2,2982	2,4095
99,5% (2,5758)	2,9050	2,6054	2,4908	2,5615	2,5146	2,6058	2,5955	2,6250	2,7563	2,5990	2,6161	2,7170

Tabela 4.66: Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 3$ quando $X_0 = 1,9$ no caso logística tipo II.

Quantil (N(0,1))	$n = 5$			$n = 20$			$n = 40$			$n = 100$		
	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$
0,5% (-2,5758)	-2,7440	-2,7656	-1,4091	-2,6033	-2,6009	-2,3622	-2,5817	-2,6200	-2,4840	-2,5658	-2,5747	-2,6189
1% (-2,3263)	-2,4230	-2,5030	-1,2724	-2,3602	-2,3180	-2,1546	-2,3224	-2,3418	-2,1972	-2,2876	-2,3074	-2,3788
2,5% (-1,9599)	-1,9623	-2,0292	-1,0886	-1,9737	-1,9566	-1,8166	-1,9380	-1,9785	-1,8281	-1,9403	-1,9609	-1,9224
5% (-1,6448)	-1,6172	-1,6439	-0,9388	-1,6401	-1,6372	-1,5554	-1,6113	-1,6464	-1,5379	-1,6282	-1,6464	-1,6287
50% (0)	-0,0204	0,0070	-0,1033	-0,0009	0,0036	-0,0539	-0,0038	0,0033	-0,0498	-0,0019	0,0110	-0,0100
95% (1,6448)	1,6307	1,6268	1,2110	1,6395	1,6441	1,7172	1,6324	1,6313	1,6842	1,6592	1,6449	1,6804
97,5% (1,9599)	2,0352	1,9694	1,6354	1,9605	1,9659	2,1866	1,9645	1,9423	2,0727	1,9620	1,9791	2,0205
99% (2,3263)	2,5165	2,3724	2,2775	2,3306	2,3378	2,7049	2,3906	2,3507	2,5734	2,3393	2,3578	2,4147
99,5% (2,5758)	2,7808	2,6729	2,9579	2,5365	2,6117	3,0574	2,6351	2,5730	2,8485	2,5891	2,5609	2,6714

Tabela 4.67: Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 20$ quando $X_0 = 0,01$ no caso logística tipo II.

Quantil (N(0,1))	$n = 5$			$n = 20$			$n = 40$			$n = 100$		
	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$
0,5% (-2,5758)	-2,8928	-2,7110	-4,2048	-2,6309	-2,6107	-3,2931	-2,5666	-2,6438	-2,9612	-2,5741	-2,5299	-2,8182
1% (-2,3263)	-2,4631	-2,4405	-3,3923	-2,3393	-2,3894	-2,7854	-2,3165	-2,4006	-2,6425	-2,3138	-2,3031	-2,4998
2,5% (-1,9599)	-1,9600	-1,9926	-2,4442	-1,9780	-1,9534	-2,2043	-1,9234	-1,9682	-2,1253	-1,9600	-1,9474	-2,0457
5% (-1,6448)	-1,6324	-1,6372	-1,7192	-1,6289	-1,6400	-1,7757	-1,6383	-1,6532	-1,7091	-1,6545	-1,6511	-1,7040
50% (0)	-0,0004	0,0027	0,1500	-0,0030	0,0034	0,0948	0,0057	-0,0026	0,0511	-0,0020	0,0016	0,0279
95% (1,6448)	1,6388	1,6309	1,2455	1,6359	1,6457	1,4493	1,6636	1,6378	1,5328	1,6559	1,6410	1,5939
97,5% (1,9599)	1,9892	1,9625	1,4368	1,9402	1,9353	1,6902	1,9614	1,9364	1,7892	1,9937	1,9390	1,8949
99% (2,3263)	2,4130	2,4197	1,6571	2,3566	2,3438	1,9702	2,3240	2,3388	2,0874	2,3458	2,3629	2,2167
99,5% (2,5758)	2,7093	2,7514	1,8076	2,6572	2,6160	2,1682	2,5632	2,5041	2,2927	2,5601	2,6180	2,4470

Tabela 4.68: Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 20$ quando $X_0 = 0,8$ no caso logística tipo II.

Quantil (N(0,1))	$n = 5$			$n = 20$			$n = 40$			$n = 100$		
	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$
0,5% (-2,5758)	-2,7113	-2,6116	-3,3659	-2,5111	-2,6504	-2,9066	-2,6213	-2,5465	-2,7831	-2,6323	-2,6167	-2,5911
1% (-2,3263)	-2,4448	-2,3803	-2,8742	-2,3217	-2,3506	-2,4852	-2,3468	-2,3008	-2,4480	-2,3671	-2,3098	-2,3702
2,5% (-1,9599)	-2,0354	-2,0047	-2,1448	-1,9845	-1,9783	-2,0258	-1,9783	-1,9611	-2,0257	-1,9838	-1,9589	-1,9978
5% (-1,6448)	-1,6414	-1,6241	-1,6422	-1,6545	-1,6460	-1,6641	-1,6587	-1,6504	-1,6706	-1,6620	-1,6367	-1,6466
50% (0)	-0,0008	-0,0008	0,0476	-0,0109	-0,0007	0,0130	0,0044	-0,0068	0,0197	0,0107	-0,0069	0,0014
95% (1,6448)	1,6275	1,6456	1,4948	1,6463	1,6365	1,6127	1,6290	1,6655	1,6149	1,6612	1,6470	1,6319
97,5% (1,9599)	1,9513	1,9842	1,8050	2,0124	1,9709	1,9419	1,9318	1,9883	1,9090	1,9440	1,9341	1,9390
99% (2,3263)	2,4553	2,4038	2,1928	2,3761	2,3173	2,2683	2,2992	2,3461	2,2958	2,2835	2,2985	2,2862
99,5% (2,5758)	2,7405	2,7887	2,4520	2,7075	2,6376	2,4776	2,5337	2,5902	2,5741	2,5334	2,5803	2,5073

Tabela 4.69: Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 20$ quando $X_0 = 1,9$ no caso logística tipo II.

Quantil (N(0,1))	$n = 5$			$n = 20$			$n = 40$			$n = 100$		
	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$
0,5% (-2,5758)	-2,8221	-2,7162	-1,7320	-2,6046	-2,6041	-2,1697	-2,6054	-2,5888	-2,2808	-2,5871	-2,6012	-2,4269
1% (-2,3263)	-2,3779	-2,3992	-1,6028	-2,3226	-2,3428	-1,9839	-2,3805	-2,3061	-2,1103	-2,3691	-2,3456	-2,2085
2,5% (-1,9599)	-1,9660	-2,0228	-1,3909	-1,9950	-1,9509	-1,6924	-1,9542	-1,9757	-1,8263	-1,9603	-1,9620	-1,8967
5% (-1,6448)	-1,6136	-1,6453	-1,2038	-1,6434	-1,6474	-1,4741	-1,6289	-1,6250	-1,5352	-1,6441	-1,6487	-1,5978
50% (0)	-0,0039	0,0040	-0,1492	0,0040	0,0034	-0,0955	-0,0041	-0,0025	-0,0572	-0,0026	0,0063	-0,0271
95% (1,6448)	1,6411	1,6326	1,6291	1,6428	1,6476	1,7692	1,6511	1,6599	1,7147	1,6425	1,6360	1,6835
97,5% (1,9599)	1,9708	1,9812	2,2428	1,9591	1,9742	2,2061	1,9650	1,9925	2,1349	1,9375	1,9591	2,0696
99% (2,3263)	2,4723	2,3800	3,1733	2,3262	2,3742	2,7961	2,3238	2,3124	2,7030	2,3170	2,3399	2,4802
99,5% (2,5758)	2,7611	2,6826	4,2318	2,5927	2,5912	3,2534	2,5714	2,5237	3,0712	2,5624	2,5717	2,8274

Tabela 4.70: Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 100$ quando $X_0 = 0,01$ no caso logística tipo II.

Quantil (N(0,1))	$n = 5$			$n = 20$			$n = 40$			$n = 100$		
	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$
0,5% (-2,5758)	-2,8618	-2,6495	-4,2151	-2,5988	-2,6139	-3,3716	-2,6409	-2,5613	-3,0258	-2,5789	-2,5944	-2,8358
1% (-2,3263)	-2,5273	-2,3670	-3,2660	-2,2810	-2,3770	-2,9102	-2,3721	-2,3010	-2,6663	-2,3440	-2,3290	-2,5328
2,5% (-1,9599)	-2,0353	-1,9395	-2,4215	-1,9597	-1,9563	-2,2777	-1,9671	-1,9674	-2,1508	-1,9996	-1,9580	-2,0640
5% (-1,6448)	-1,6638	-1,6324	-1,7727	-1,6414	-1,6400	-1,7704	-1,6300	-1,6238	-1,7135	-1,6498	-1,6422	-1,6842
50% (0)	0,0114	-0,0233	0,1512	-0,0086	0,0049	0,0966	0,0085	-0,0006	0,0694	0,0036	-0,0017	0,0509
95% (1,6448)	1,5993	1,6564	1,2984	1,6411	1,6366	1,4450	1,6238	1,6299	1,5188	1,6356	1,6562	1,5854
97,5% (1,9599)	1,9375	2,0549	1,4939	1,9681	1,9418	1,6525	1,9498	1,9489	1,7647	1,9848	1,9758	1,8664
99% (2,3263)	2,3363	2,5035	1,7513	2,4106	2,3368	1,8806	2,3342	2,3549	2,0782	2,3754	2,3288	2,1599
99,5% (2,5758)	2,5824	2,7722	1,8882	2,6615	2,6481	2,0270	2,5726	2,6754	2,2270	2,5693	2,5144	2,3762

Tabela 4.71: Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 100$ quando $X_0 = 0,8$ no caso logística tipo II.

Quantil (N(0,1))	$n = 5$			$n = 20$			$n = 40$			$n = 100$		
	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$
0,5% (-2,5758)	-2,8590	-2,7023	-3,4636	-2,5688	-2,5649	-2,8679	-2,5719	-2,5777	-2,7171	-2,5429	-2,6420	-2,6566
1% (-2,3263)	-2,5348	-2,4263	-2,8032	-2,3317	-2,3354	-2,5642	-2,3514	-2,2799	-2,4166	-2,3499	-2,3282	-2,4346
2,5% (-1,9599)	-2,0412	-1,9730	-2,1051	-1,9615	-1,9623	-2,1323	-1,9652	-1,9593	-2,0055	-1,9667	-1,9467	-2,0106
5% (-1,6448)	-1,6476	-1,6218	-1,6132	-1,6326	-1,6366	-1,7087	-1,6239	-1,6347	-1,7018	-1,6586	-1,6302	-1,6851
50% (0)	0,0198	-0,0054	0,0436	-0,0033	0,0020	0,0486	0,0003	0,0041	0,0306	-0,0038	0,0031	0,0183
95% (1,6448)	1,6003	1,6306	1,4822	1,6475	1,6335	1,5598	1,6403	1,6346	1,5795	1,6417	1,6394	1,6113
97,5% (1,9599)	1,9808	1,9783	1,8128	1,9524	1,9419	1,8600	1,9710	1,9588	1,8877	1,9436	1,9518	1,9142
99% (2,3263)	2,3810	2,4651	2,2617	2,3248	2,3788	2,2549	2,3560	2,3212	2,2989	2,2628	2,3014	2,2643
99,5% (2,5758)	2,7349	2,7797	2,6234	2,6439	2,6661	2,4564	2,5810	2,5446	2,4944	2,5581	2,5186	2,4564

Tabela 4.72: Quantis amostrais para $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$ para $r = 100$ quando $X_0 = 1, 9$ no caso logística tipo II.

Quantil (N(0,1))	$n = 5$			$n = 20$			$n = 40$			$n = 100$		
	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$
0,5% (-2,5758)	-2,8428	-2,6243	-1,8991	-2,5900	-2,5994	-2,1665	-2,6763	-2,5665	-2,2499	-2,7320	-2,5917	-2,3578
1% (-2,3263)	-2,4865	-2,3811	-1,7512	-2,3255	-2,3627	-1,9763	-2,3792	-2,3941	-2,0534	-2,3758	-2,3490	-2,1864
2,5% (-1,9599)	-1,9824	-1,9978	-1,4978	-1,9722	-1,9735	-1,6928	-1,9796	-1,9769	-1,7873	-1,9761	-1,9632	-1,8656
5% (-1,6448)	-1,6371	-1,6601	-1,2757	-1,6251	-1,6530	-1,4691	-1,6372	-1,6293	-1,5300	-1,6670	-1,6375	-1,5728
50% (0)	0,0014	0,0010	-0,1407	-0,0118	0,0053	-0,0941	-0,0015	-0,0089	-0,0564	0,0127	0,0042	-0,0365
95% (1,6448)	1,6323	1,6252	1,7540	1,6583	1,6175	1,7291	1,6417	1,6540	1,7528	1,6558	1,6548	1,7158
97,5% (1,9599)	1,9646	2,0156	2,4366	1,9733	1,9804	2,2602	1,9403	1,9752	2,1961	1,9730	1,9715	2,0842
99% (2,3263)	2,4107	2,4881	3,3845	2,3336	2,3843	2,8547	2,3428	2,3480	2,7047	2,2926	2,3587	2,4969
99,5% (2,5758)	2,6931	2,7476	4,1469	2,5488	2,7254	3,3359	2,5226	2,5849	3,0943	2,4954	2,6801	2,7673

Aplicação

Neste capítulo aplicamos os resultados apresentados no Capítulo 3 a dois conjuntos de dados obtidos nos trabalhos de Brüggemann e Wennrich (2002) e Neto et al. (2007).

5.1 Critérios de informação

Após o ajuste de vários modelos a um conjunto de dados surge uma indagação natural; qual o melhor modelo? Existem na literatura estatística ferramentas que auxiliam no processo de seleção dos modelos. Algumas dessas ferramentas são os critérios de informação baseados na teoria da decisão que penalizam os modelos conforme o número de parâmetros utilizados. Neste trabalho apresentamos três critérios de informação a saber: AIC (Akaike Information Criterion), o BIC (Bayesian Information Criterion) e o HQ (Hannan-Quinn Criterion) que podem ser definidos de uma forma geral como

$$\begin{aligned}
AIC &= -l(\hat{\theta}) + p, \\
BIC &= -l(\hat{\theta}) + \frac{p}{2} \log(n), \\
HQ &= -l(\hat{\theta}) + p \log(\log(n)),
\end{aligned}$$

em que $l(\hat{\theta})$ é o valor máximo da log-verossimilhança, p é o número de parâmetros do modelo e n representa o número de observações. Como ferramentas no auxílio na seleção de modelos, os critérios supracitados evidenciam o modelo mais adequado quanto menor for o valor dessas estatísticas.

5.2 Dados de zinco de Brüggemann e Wennrich (2002)

A aplicação apresentada nesta seção tem como interesse estimar a concentração de zinco em extratos de água régia que foram retiradas de amostras de sedimentos poluídos. O extrato de água régia foi preparado de acordo com a DIN ISO 11466 (Soil quality - extraction of trace elements soluble in aqua regia. Beuth, Berlin). A concentração de zinco foi determinada em extratos diluídos em água deionizada utilizando a técnica de espectrometria de emissão atômica com nebulização pneumática. O valor certificado para o zinco solúvel em água régia é de 100mg/kg em um intervalo de (87 – 120mg/kg). Se for levado em consideração o fator de conversão a partir da preparação de amostras, a concentração média de zinco nas soluções é de 0.285mg/l. Os dados são apresentados na Tabela 5.1.

Ajustamos um modelo de calibração como definido no Capítulo 3 usando a suposição de erros normais, t de Student, exponencial potência e logística tipo II. Para efeito de

Tabela 5.1: Concentração (mg/l) e intensidade das soluções-padrão do elemento zinco.

Concentração do analito	Resposta de medidas repetidas				
x	y_1	y_2	y_3	y_4	y_5
0	2,3	6,3	0	4,4	11,8
0,1	210,6	216,4	233,7	224,3	216
0,5	1053	1042	1070	1024	1033
1,0	2144	2142	2126	2106	2125
2,0	4288	4380	4387	4431	4376
5,0	11155	11050	11061	11150	11127

aplicação, utiliza-se algum x_i como valor desconhecido de X_0 enquanto y_i será designado como a observação de y_0 . Desta forma, tomaremos x_4 como valor desconhecido de X_0 a ser estimado e os respectivos valores de y_{4j} referentes a essa concentração serão tomados como a observação de y_0 para compor os dados do segundo estágio de calibração.

Para escolha dos valores de v e k , os parâmetros da distribuição t-Student e exponencial potência, respectivamente, aplicamos um procedimento de seleção do tipo Akaike que consiste em minimizar a função $AIC = -l(\hat{\theta}) + p$, em que os menores valores para o AIC foram obtidos quando $v = 5$ e $k = 0,5$ para o exemplo agora apresentado. Na Tabela 5.2 é apresentado as estimativas dos parâmetros do modelo e seus respectivos erros padrões entre parênteses para os modelos apresentados no Capítulo 3. Como podemos verificar pela tabela, as estimativas para o parâmetro X_0 para os quatro modelos apresentados não apresentam uma variação muito grande. Pode-se constatar que existe uma variação acentuada nas estimativas de $\hat{\beta}_0$ e $\hat{\phi}$ quando comparado o caso normal com os demais casos. Verifica-se ainda que os valores dos erros padrão para todos os estimadores são relativamente menores para os modelos alternativos ao caso normal, principalmente no que concerne a estimativa de $\hat{\phi}$.

Tabela 5.2: Estimativas dos parâmetros e erros padrão entre parênteses para os modelos de calibração propostos.

Distribuição	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\phi}$
Normal	-29,3874 (10,7557)	2223,355 (4,4461)	0,9705 (0,0092)	1750,302 (451,9260)
t-Student ($v = 5$)	-22,1871 (10,5789)	2221,220 (4,3731)	0,9683 (0,0091)	1209,445 (413,1042)
Exp. Potência ($k = 0, 5$)	-14,5751 (10,0733)	2217,931 (4,1641)	0,9655 (0,0087)	713,7661 (225,7127)
Log-II	-23,5741 (10,4691)	2221,642 (4,3277)	0,9688 (0,0090)	552,7633 (168,79)

Tabela 5.3: Critérios de informação para os modelos de calibração propostos usando os dados de zinco de Brüggemann e Wennrich (2002).

Distribuição	$l(\hat{\theta})$	AIC	BIC	HQ
Normal	-154,5813	158,5813	161,3837	159,4778
t-Student ($v = 5$)	-154,5112	158,5112	161,3136	159,4077
Exp. Potência ($k = 0, 5$)	-154,9164	158,9164	161,7188	159,8130
Log-II	-154,4226	158,4226	161,2249	159,3191

Na Tabela 5.3 é apresentado alguns critérios de informação para os modelos propostos. Pode-se verificar pela tabela que os menores valores para as três estatísticas ocorre para o modelo logística-II. Observa-se que essas medidas são muito próximas e o modelo normal supera o modelo exponencial potência levando-se em conta esses critérios. Assim, levando-se em conta os critérios de informação, o modelo logística-II é o mais adequado para modelar esses dados.

5.3 Dados de zinco de Neto et al. (2007)

O exemplo agora apresentado corresponde a um conjunto de dados encontrado em Neto et al. (2007) em que o objetivo do experimento é estimar a concentração de zinco. O modelo da calibração relaciona a resposta do instrumento, neste caso a absorbância (y) com a concentração de zinco na amostra (x). A Tabela 5.4 apresenta as concentrações de soluções aquosas contendo íons zinco e as respectivas absorbâncias, obtidas em triplicata utilizando a técnica de espectrometria de absorção atômica.

Tabela 5.4: Concentração e absorbância das soluções-padrão do elemento zinco.

Concentração do analito x	Resposta de medidas repetidas		
	y_1	y_2	y_3
0,0	0,696	0,696	0,706
0,5	7,632	7,688	7,603
1,0	14,804	14,861	14,731
2,0	28,895	29,156	29,322
3,0	43,993	43,574	44,699

Ajustamos um modelo de calibração como definido no Capítulo 3 usando a suposição de erros normais, t-Student, exponencial potência e logística tipo II. Tomamos x_3 como valor desconhecido de X_0 a ser estimado e os respectivos valores de y_{3j} referentes a essa concentração serão tomados como a observação de y_0 para compor os dados do segundo estágio de calibração.

Pelo procedimento de seleção de Akaike, os menores valores para o AIC foram obtidos quando $v = 3$ e $k = 0,5$ para os parâmetros das distribuições t-Student e exponencial potência, respectivamente, para o exemplo agora apresentado. Na Tabela 5.5 é apresentado as estimativas dos parâmetros dos modelos e seus respectivos erros padrão entre parênteses para os modelos considerados em estudo. Podemos observar pela Tabela 5.5 que os modelos

alternativos ao modelo normal apresentam menores erros padrão para as estimativas dos parâmetros. Verifica-se que o modelo de calibração com erros t-Student é o que apresenta os menores erros padrão. Na Tabela 5.6 é apresentado os critérios de informação para os modelos propostos. Observa-se que para todos os critérios de seleção de modelos, as distribuições alternativas a normal apresentam menores valores. Levando-se em conta os critérios de informação, o modelo t-Student é o que apresenta os menores valores em todos os critérios apresentados, assim, é o modelo mais adequado para modelar esses dados.

Tabela 5.5: Estimativas dos parâmetros e erros padrão entre parênteses para os modelos de calibração propostos.

Distribuição	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{X}_0$	$\hat{\phi}$
Normal	0,5159 (0,1290)	14,4526 (0,0708)	0,9882 (0,0132)	0,0857 (0,0313)
t-Student ($v = 3$)	0,5891 (0,0746)	14,3357 (0,0410)	0,9912 (0,0077)	0,0204 (0,0099)
Exp. Potência ($k = 0, 5$)	0,5540 (0,1088)	14,3845 (0,0598)	0,9906 (0,0112)	0,0283 (0,0127)
Log-II	0,5539 (0,1076)	14,3929 (0,0591)	0,9897 (0,0110)	0,0199 (0,0085)

Tabela 5.6: Critérios de informação para os modelos de calibração propostos usando os dados de zinco de Neto et al. (2007).

Distribuição	$l(\hat{\theta})$	AIC	BIC	HQ
Normal	-2,8603	6,8603	8,2764	6,8452
t-Student ($v = 3$)	0,1600	3,8399	5,2560	3,8249
Exp. Potência ($k = 0, 5$)	-1,4678	5,4678	6,8839	5,4528
Log-II	-1,5385	5,5385	6,9546	5,5234

Considerações finais

Um estudo sobre o modelo de calibração linear simétrico foi apresentado nesta dissertação. Considerando os erros do modelo com uma distribuição pertencente à classe simétrica de distribuições foram estudadas quatro distribuições pertencente a esta classe e abordadas neste trabalho, a saber: normal, t-Student, exponencial potência e logística tipo II. Uma breve revisão foi feita sobre os modelos de calibração, assim como, sobre os modelos simétricos. Propomos nesse trabalho o modelo de calibração linear simétrico e utilizamos a estimação de máxima verossimilhança para estimar os parâmetros dos modelos. Também apresentamos as expressões da matriz de informação de Fisher. Um estudo de simulação foi realizado visando verificar o comportamento assintótico dos estimadores dos parâmetros do modelo para as quatro distribuições utilizadas neste trabalho. Para diferentes tamanhos amostrais do primeiro e segundo estágios verificamos o comportamento assintótico de $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ e $\hat{X}_0$. Observamos, por exemplo, o comportamento assintótico dos estimadores para as diferentes distribuições quando o tamanho da amostra na primeira etapa aumenta. Pôde ser constatado que, para tamanhos amostrais pequenos na primeira etapa quando o valor de X_0 estiver próximo de zero acarreta em problemas de estimação negativa. Também comparamos os quantis das distribuições utilizadas neste trabalho com os quantis da distribuição normal para diferentes tamanhos amostrais da primeira e segunda etapas e verificamos que, com o aumento do tamanho amostral na primeira etapa os valores dos

quantis amostrais tendem a se aproximar dos valores dos quantis da distribuição normal para os estimadores de β_0 , β_1 e X_0 . Por fim, aplicações a conjuntos de dados reais da literatura em análise química foram realizadas a fim de aplicar os modelos apresentados no Capítulo 3 e constatamos através dessas aplicações a utilidade dos modelos propostos.

Como sugestões para trabalhos futuros fica a extensão deste modelo para o modelo com erros de medida do tipo funcional e estrutural nas variáveis independentes. Uma abordagem interessante é a análise de diagnóstico neste modelo e em suas extensões, considerando o método de diagnóstico de influência local. Uma outra linha de pesquisa seria considerar este modelo no caso múltiplo, em que existe mais de uma variável de interesse X_0 .

Referências Bibliográficas

ALFARO-GARCIA, K. H. *Modelo de calibração comparativa em grupos*. 134 f. Tese (Doutorado em Estatística) - Instituto de Matemática e Estatística, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2000.

ALMEIDA, S. S. *Calibração absoluta funcional sem a suposição de normalidade*. 77 f. Dissertação (Mestrado em Estatística) - Departamento de Estatística, Universidade Federal de Pernambuco, Recife, 1999.

BERKSON, J. Estimation of a linear function for a calibration line; consideration of a recent proposal. *Technometrics*, v. 11, n. 4, p. 649 – 660, 1969.

BLAS, B. G.; BOLFARINE, H.; LACHOS, V. H. Statistical analysis of controlled calibration model with replicates. *Journal of Statistical Computation and Simulation*, p. 1 – 21, 2011. doi: 10.1080/00949655.2011.643410. URL <http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/00949655.2011.643410>.

BLAS, B. G. *Calibração controlada aplicada na química analítica*. 91 f. Dissertação (Mestrado em Estatística) - Instituto de Matemática e Estatística, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2005.

BLAS, B. G. *Modelos de regressão e calibração com erros de medida*. 75 f. Tese (Doutorado em Estatística) - Instituto de Matemática e Estatística, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2010.

BLAS, B. G.; SANDOVAL, M. C. Heteroscedastic controlled calibration model applied to analytical chemistry. *Journal of Chemometrics*, v. 24, p. 241 – 248, 2010. doi: 10.1002/cem.1275.

BLAS, B. G.; SANDOVAL, M. C.; YOSHIDA, O. S. Homoscedastic controlled calibration model. *Journal of Chemometrics*, v. 21, p. 145 – 155, 2007.

BOLFARINE, H.; LIMA, C. R. O. P.; SANDOVAL, M. C. Linear calibration in functional regression models. *Communications in Statistics: Theory and Methods*, v. 26, n. 10, p. 2307 – 2328, 1997.

BOLFARINE, H.; LIMA, C. R. O. P.; SANDOVAL, M. C. Linear calibration in functional regression models with one of the variances known. *South African Statistical Journal*, v. 33, p. 95 – 116, 1999a.

BOLFARINE, H.; LIMA, C. R. O. P.; SANDOVAL, M. C. Linear calibration in multiplicative measurement error models. *Metron*, v. 58, p. 1 – 23, 1999b.

BRANCO, M. D. *Calibração: uma abordagem bayesiana*. 113 f. Tese (Doutorado em Estatística) - Instituto de Matemática e Estatística, Universidade de São Paulo, São Paulo, 1997.

BRÜGGEMANN, L.; WENNRICH, R. Evaluation of measurement uncertainty for analytical procedures using a linear calibration function. *Accreditation and Quality Assurance: Journal for Quality, Comparability and Reliability in Chemical Measurement*, v. 7, p. 269 – 273, 2002. ISSN 0949-1775. URL <http://dx.doi.org/10.1007/s00769-002-0485-8>. 10.1007/s00769-002-0485-8.

COSTA, A. M.; CALDAS, L. V. E. Intercomparação e calibração de medidores de atividades utilizados em serviços de medicina nuclear. *Radiologia Brasileira*, v. 36, n. 5, p. 293 – 297, 2003.

COX, D. R.; HINKLEY, D. V. *Theoretical Statistics*. Londres: Chapman and Hall, 1974.

CYSNEIROS, F. J. A.; PAULA, G. A.; GALEA, M. *Modelos Simétricos Aplicados*. In: 9ª Escola de Modelos de Regressão, Águas de São Pedro, 2005.

DOMINGOS-FILHO, M. Calibração absoluta estrutural sem a suposição de normalidade. 102 f. Dissertação (Mestrado em Estatística) - Departamento de Estatística, Universidade Federal de Pernambuco, Recife, 2000.

EISENHART, C. The interpretation of certain regression methods, and their use in biological and industrial research. *Annals of Mathematical Statistics*, v. 10, p. 162 – 186, 1939.

FANG, K. T.; ANDERSON, T. W. *Statistical Inference in Elliptical Contoured and Related Distributions*. Nova York: Allerton Press, 1990.

FANG, K. T.; ZHANG, Y. T. *Generalized Multivariate Analysis*. Nova York: Springer-Verlag, 1990.

FANG, K. T.; KOTZ, S.; NG, K. W. *Symmetric Multivariate and Related Distributions*. Londres: Chapman and Hall, 1990.

FERREIRA, M. M. C.; ANTUNES, A. M.; MELGO, M. S.; VOLPE, P. L. O. Quimiometria I: calibração multivariada, um tutorial. *Química Nova*, v. 22, n. 5, p. 724 – 731, 1999. doi: 10.1590/S0100-40421999000500016. URL <http://www.scielo.br/scielo.php?script=sciarttext&pid=S0100-40421999000500016&nrm=iso>.

FIGUEIREDO, C. C. *Calibração linear assimétrica*. 121 f. Tese (Doutorado em Estatística) - Instituto de Matemática e Estatística, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2009.

FRANCISCONI, C. N. *Comparação de instrumentos de medição usando calibração comparativa*. 103 f. Dissertação (Mestrado em Estatística) - Instituto de Matemática e Estatística, Universidade de São Paulo, São Paulo, 1996.

- GALEA-ROJAS, M. Calibração comparativa estrutural e funcional. 188 f. Tese (Doutorado em Estatística) - Instituto de Matemática e Estatística, Universidade de São Paulo, São Paulo, 1995.
- GUIMARÃES-FILHO, Z. O.; HELENE, O. One step self-calibration procedure in gamma-ray energy measurements. *Brazilian Journal of Physics*, v. 33, n. 2, p. 280 – 281, 2003.
- HALPERIN, M. On inverse estimation in linear regression. *Technometrics*, v. 12, p. 727 – 736, 1970.
- HYNDMAN, R. J.; FAN, Y. Sample quantiles in statistical packages. *American Statistician*, v. 50, p. 361 – 365, 1996.
- KELKER, D. Distribution theory of spherical distributions and a location-scale parameter generalization. *Sankhya A*, v. 32, p. 419 – 430, 1970.
- KRUTCHKOFF, R. Classical and inverse regression methods of calibration. *Technometrics*, v. 9, p. 425 – 439, 1967.
- KRUTCHKOFF, R. G. Classical and inverse regression methods of calibration in extrapolation. *Technometrics*, v. 11, p. 605 – 608, 1969.
- LIMA, C. R. O. P. *Calibração absoluta com erros nas variáveis*. 223 f. Tese (Doutorado em Estatística) - Instituto de Matemática e Estatística, Universidade de São Paulo, São Paulo, 1996.
- LIMA, C. R. O. P.; SANDOVAL, M. C; BOLFARINE, H.; SOUSA, S. O. Robust estimation in calibration models using the student-t distribution. *Journal of Applied Statistical Science*, v. 15, p. 253 – 267, 2007.
- LWIN, T. Discussion of hunter and lamboy's 1981 paper. *Technometrics*, v. 23, p. 339 – 341, 1981.
- McDONALD, J. F. Calibration of a monocentric city model with mixed land use and congestion. *Regional Science and Urban Economics*, v. 39, n. 1, p. 90 – 96, 2009.

- NETO, B. B.; SCARMINIO, I. S.; BRUNS, R. E. *Como fazer experimentos: pesquisa e desenvolvimento na ciência e na indústria*. Campinas: Editora da Unicamp, 2007.
- NOCEDAL, J.; WRIGHT, S. J. *Numerical optimization*. Nova York: Springer-Verlag, 1999.
- PIMENTEL, M. F.; GALVÃO, R. K. H.; ARAÚJO, M. C. U. Recomendações para calibração em química analítica parte 2. calibração multianalito. *Química Nova*, v. 31, n. 2, p. 462 – 467, 2008.
- RAMOS, P. G. A. *Calibração linear*. 167 f. Dissertação (Mestrado em Estatística) - Instituto de Matemática e Estatística, Universidade de São Paulo, São Paulo, 1987.
- SERFLING, R. J. *Approximation Theorems of Mathematical Statistics*. Nova York: John Wiley, 1980.
- SHUKLA, G. K. On the problem of calibration. *Technometrics*, v. 14, n. 3, p. 547 – 553, 1972.
- SOUSA, S. O. Estimação robusta no modelo de calibração. 101 f. Dissertação (Mestrado em Estatística) - Departamento de Estatística, Universidade Federal de Pernambuco, Recife, 2002.
- THOMAS, E. V.; GE, N. Development of robust multivariate calibration models. *Technometrics*, v. 42, n. 2, p. 168 – 177, 2000.
- WILLIAMS, E. J. Regression methods in calibration problems. *Bulletin of the international Statistical Institute*, v. 43, p. 17 – 28, 1969a.
- WILLIAMS, E. J. A note on regression methods in calibration. *Technometrics*, v. 11, n. 1, p. 189 – 192, 1969b.