

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

CLODOALDO JOSÉ FIGUEREDO

APLICAÇÃO DE REGRESSÃO NÃO LINEAR PARA AVALIAÇÃO DE
MODELOS DE EQUAÇÕES ESTRUTURAIS ATRAVÉS DOS ÍNDICES DE
QUALIDADE DE AJUSTAMENTO

CURITIBA

2019

CLODOALDO JOSÉ FIGUEREDO

APLICAÇÃO DE REGRESSÃO NÃO LINEAR PARA AVALIAÇÃO DE
MODELOS DE EQUAÇÕES ESTRUTURAIS ATRAVÉS DOS ÍNDICES DE
QUALIDADE DE AJUSTAMENTO

Tese apresentada como requisito parcial à obtenção do grau de Doutor em Métodos Numéricos em Engenharia, na Área de Concentração em Programação Matemática, no Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia - PPGMNE, do Departamento de Construção Civil e do Departamento de Matemática, dos Setores de Ciências Exatas e de Tecnologia, da Universidade Federal do Paraná.

Orientador:
Prof. Dr. Jair Mendes Marques

CURITIBA

2019

Catálogo na Fonte: Sistema de Bibliotecas, UFPR
Biblioteca de Ciência e Tecnologia

F475a Figueredo, Clodoaldo José
Aplicação de regressão não linear para avaliação de modelos de equações estruturais através dos índices de qualidade de ajustamento [recurso eletrônico] / Clodoaldo José Figueredo – Curitiba, 2019.

Tese - Universidade Federal do Paraná, Setores de Ciências Exatas e de Tecnologia, Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia.

Orientador: Prof. Dr. Jair Mendes Marques

1. Regressão não linear 2. Equações estruturais (Modelo). I. Universidade Federal do Paraná. II. Marques, Jair Mendes. III. Título.

CDD: 519.536

ibliotecária: Roseny Rivelini Morciani CRB-9/1585



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
SETOR DE CIÊNCIAS EXATAS
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO MÉTODOS NUMÉRICOS
EM ENGENHARIA - 40001016030P0

TERMO DE APROVAÇÃO

Os membros da Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em MÉTODOS NUMÉRICOS EM ENGENHARIA da Universidade Federal do Paraná foram convocados para realizar a arguição da tese de Doutorado de **CLODOALDO JOSÉ FIGUEREDO** intitulada: **Aplicação de Regressão Não Linear para Avaliação de Modelos de Equações Estruturais através dos Índices de Qualidade de Ajustamento**, sob orientação do Prof. Dr. JAIR MENDES MARQUES, que após após terem inquirido o aluno e realizado a avaliação do trabalho, são de parecer pela sua APROVAÇÃO no rito de defesa. A outorga do título de doutor está sujeita à homologação pelo colegiado, ao atendimento de todas as indicações e correções solicitadas pela banca e ao pleno atendimento das demandas regimentais do Programa de Pós-Graduação.

CURITIBA, 06 de Setembro de 2019.


JAIR MENDES MARQUES
Presidente da Banca Examinadora


INÁCIO ANDRUSKI GUIMARÃES
Avaliador Externo (UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO
PARANÁ)


MAURÍCIO KUBAY DO AMARAL
Avaliador Externo (UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO
PARANÁ)


ELISA HENNING
Avaliador Externo (UNIVERSIDADE DO ESTADO DE SANTA
CATARINA)


MOACIR MANOEL RODRIGUES JUNIOR
Avaliador Externo (UNIVERSIDADE REGIONAL DE BLUMENAU)

Dedico este trabalho a DEUS que, em todo momento, estende sua mão para ajudar a quem nele crê e o aceita como Senhor e Salvador.

Dedico também a minha esposa e meus filhos. Esteja eu onde estiver, meu coração estará sempre com minha família onde o amor e o apoio são sinceros e inesgotáveis

AGRADECIMENTOS

Essa tese de doutoramento não é um trabalho de uma única pessoa. É um trabalho de pesquisa que foi desenvolvido tendo a contribuição e a dedicação de pessoas que possibilitaram a realização de um projeto dessa natureza e merecem todo o meu agradecimento e minha consideração.

Agradeço aos meus familiares, em especial a minha esposa e filhos, que sempre me apoiaram e sempre compreenderam as necessidades e exigências do caminho percorrido. Amo todos vocês.

Agradeço ao meu orientador, Prof. Dr. Jair Mendes Marques que confiou no meu trabalho desde o início e sempre esteve pronto a auxiliar nos momentos de dificuldades e dúvidas. Espero contar com sua sabedoria e amizade para sempre.

Aos professores Paulo H. M. Prado, Sachiko A. Lira e Walmes Zeviani da UFPR por suas colaborações no decorrer dos trabalhos. Aos membros da banca examinadora, cujas críticas apontaram novos caminhos e perspectivas e, em especial, a Profa. Elisa Henning pelas suas contribuições e questionamentos precisos sobre o trabalho.

Aos membros do grupo SEMNET em especial aos professores Cameron McIntosh e Ed Rigdon pelas colaborações na hora de dúvidas e sugestões de leitura.

Aos demais professores e colegas do PPGMNE que propiciaram minha formação.

As bibliotecárias da biblioteca do Colégio Elias Moreira e SOCIESC que abriram seus espaços para que eu pudesse estudar e realizar minhas pesquisas.

Ao meu amigo, e irmão de fé, Volnei A. Soethe pela ajuda e incentivo em todo momento e ao falecido amigo Edson Rovina, que sempre dizia que eu era louco por estar fazendo doutorado. A você Rovina, que Deus levou tão prematuramente, deixo uma frase de Marguerite Yourcenar que disse: “Creio que quase sempre é preciso um golpe de loucura para se construir um destino”.

A todos, MUITO OBRIGADO.

E tudo o que fizerdes, seja em palavra, seja em ação, fazei-o em nome do Senhor Jesus, dando por ele graças a Deus Pai.

Colossenses 3-17

RESUMO

Um dos requisitos para o uso da técnica estatística multivariada de modelagem de equações estruturais (MEE) é a necessidade de uma grande quantidade de observações, relativamente à quantidade de variáveis e a complexidade do modelo avaliado. Em muitos casos, principalmente nas áreas sociais, humanas e da saúde, não é possível a obtenção de grandes quantidades de observações tornando restrita a aplicação da técnica de MEE, com limitações principalmente na obtenção de resultados confiáveis e na validação do ajuste dos modelos. Para proporcionar uma confiança maior dos resultados obtidos, em problemas com poucas observações, procura-se estabelecer uma metodologia para validação dos modelos mediante o uso de regressão não linear sobre as médias das estimativas dos índices de qualidade de ajustamento. A partir de um número limitado de observações, determinada por estudos da taxa de convergência dos modelos usados e, baseado nos estudos sobre a estabilidade dos índices de ajustamento, essa pesquisa propõe um ajuste não linear aos resultados dos índices de qualidade obtidos e a extrapolação do modelo de forma a determinar os valores preditos para os índices, criando um horizonte preditivo, avaliando os resultados através dos intervalos de predição. Procura-se com isso disponibilizar uma metodologia que permita aos pesquisadores na área de MEE, em problemas com número de observações reduzidas, a aplicação da técnica com determinada garantia de ajustamento e resultados mais confiáveis, por meio dos índices de qualidade de ajustamento do modelo. Os resultados obtidos nos modelos ajustados mostraram que a diferença entre os valores extrapolados e as estimativas calculadas sobre os dados originais foram pequenas, e que os limites do intervalo de predição estão entre os valores considerados ótimos para um ajuste de um modelo de equação estrutural, mostrando que a proposta pode ser aplicada com bom grau de confiabilidade.

Palavras chave: Modelagem de equações estruturais. Índices de qualidade de ajustamento. Regressão não linear.

ABSTRACT

One of the requirements for the use of the multivariate statistical technique of structural equation modeling (SEM) is the need for a large amount of observations regarding the amount of variables and the complexity of the evaluated model. In many cases, especially in the social, human and health areas, it is not possible to obtain large amounts of observations, thus restricting the application of the SEM technique, with limitations mainly in obtaining reliable results and validating the fit of the models. To provide greater confidence of the results obtained, in problems with few observations, we seek to establish a methodology for model validation through the use of nonlinear regression on the means of the estimates of the adjustment quality indices. From a limited number of observations, determined by studies of the convergence rate of the models used and, based on the studies on the stability of the adjustment indices, this research proposes a nonlinear adjustment to the obtained quality index results and the extrapolation of the model to determine the predicted values for the indices, creating a predictive horizon, evaluating the results through the prediction intervals. The aim is to provide a methodology that allows researchers in the area of SEM, in problems with reduced number of observations, the application of the technique with certain assurance of fit and more reliable results, through the model's quality of fit indices. The results obtained in the adjusted models showed that the difference between the extrapolated values and the estimates calculated on the original data were small, and that the prediction interval limits are among the optimal values for a structural equation model adjustment, showing that the proposal can be applied with good reliability.

Keywords: Modeling of Structural Equations. Quality of Adjustment Index. Nonlinear Regression.

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1 – DIAGRAMA DE CAMINHOS.....	32
FIGURA 2 – REPRESENTAÇÃO DE MODELOS FORMATIVOS E REFLEXIVOS.....	33
FIGURA 3 – MODELO DE ANÁLISE DE CAMINHOS.....	33
FIGURA 4 – MODELO DE ANÁLISE FATORIAL CONFIRMATÓRIA.....	34
FIGURA 5 – MODELO DE ANÁLISE FATORIAL CONFIRMATÓRIA DE SEGUNDA ORDEM.....	35
FIGURA 6 – MODELO ESTRUTURAL DE REGRESSÃO.....	35
FIGURA 7 – MODELO DE CURVA DE CRESCIMENTO (<i>Growth Curve Modeling</i>).....	36
FIGURA 8 – FLUXOGRAMA DAS ETAPAS DE UM PROCESSO DE ANÁLISE POR EQUAÇÕES ESTRUTURAIS.....	41
FIGURA 9 – MODELO DE EQUAÇÕES ESTRUTURAIS.....	54
FIGURA 10 – MODELO DE PERFORMANCE DE GESTORES.....	58
FIGURA 11 – REPRESENTAÇÃO ESQUEMÁTICA GENÉRICA DE UM MODELO DE REGRESSÃO.....	91
FIGURA 12 – REPRESENTAÇÃO GRÁFICA DO MODELO 1 (Modelo_PTSD).....	106
FIGURA 13 – REPRESENTAÇÃO GRÁFICA DO MODELO 2 (Modelo_Burnout).....	107
FIGURA 14 – REPRESENTAÇÃO GRÁFICA DO MODELO 3 (Modelo_Exemplo).....	107
FIGURA 15 – REPRESENTAÇÃO GRÁFICA DO MODELO 4 (Modelo_Eutanasia).....	108
FIGURA 16 – REPRESENTAÇÃO GRÁFICA DO MODELO 5 (Modelo_Banco).....	109
FIGURA 17 – REPRESENTAÇÃO GRÁFICA DO MODELO 6 (Modelo_Hotel).....	110
FIGURA 18 – FLUXOGRAMA DAS ATIVIDADES DA PESQUISA.....	111

LISTA DE GRÁFICOS

GRÁFICO 1 – GRÁFICO <i>Q-Q PLOT</i> PARA DADOS MULTIVARIADOS NORMALMENTE DISTRIBUIDOS.....	46
GRÁFICO 2 – REPRESENTAÇÃO GRÁFICA DE UM MODELO DE REGRESSÃO EXPONENCIAL ADAPTADO COM DUAS FASES.....	118
GRÁFICO 3 – COMPARATIVO ENTRE VARIAÇÕES NO AJUSTAMENTO DO MODELO EXPONENCIAL SOBRE OS MESMOS PONTOS COM RESPECTIVOS COEFICIENTES DE DETERMINAÇÃO.....	119
GRÁFICO 4 – GRÁFICO <i>Q-Q PLOT</i> PARA OS DADOS DO MODELO 1.....	124
GRÁFICO 5 – GRÁFICO <i>Q-Q PLOT</i> PARA OS DADOS DO MODELO 2.....	126
GRÁFICO 6 – GRÁFICO <i>Q-Q PLOT</i> PARA OS DADOS DO MODELO 3.....	127
GRÁFICO 7 – GRÁFICO <i>Q-Q PLOT</i> PARA OS DADOS DO MODELO 4.....	128
GRÁFICO 8 – GRÁFICO <i>Q-Q PLOT</i> PARA OS DADOS DO MODELO 5.....	129
GRÁFICO 9 – GRÁFICO <i>Q-Q PLOT</i> PARA OS DADOS DO MODELO 6.....	131
GRÁFICO 10 – ESTIMATIVAS DOS ÍNDICES DE QUALIDADE DE AJUSTAMENTO RMSEA, GFI, NFI E CFI PARA O MODELO 1.....	135
GRÁFICO 11 – ESTIMATIVAS DOS ÍNDICES DE QUALIDADE DE AJUSTAMENTO RMSEA, GFI, NFI E CFI PARA O MODELO 2.....	136
GRÁFICO 12 – ESTIMATIVAS DOS ÍNDICES DE QUALIDADE DE AJUSTAMENTO RMSEA, GFI, NFI E CFI PARA O MODELO 3.....	137
GRÁFICO 13 – ESTIMATIVAS DOS ÍNDICES DE QUALIDADE DE AJUSTAMENTO RMSEA, GFI, NFI E CFI PARA O MODELO 4.....	139
GRÁFICO 14 – ESTIMATIVAS DOS ÍNDICES DE QUALIDADE DE AJUSTAMENTO RMSEA, GFI, NFI E CFI PARA O MODELO 5.....	140
GRÁFICO 15 – ESTIMATIVAS DOS ÍNDICES DE QUALIDADE DE AJUSTAMENTO RMSEA, GFI, NFI E CFI PARA O MODELO 6.....	141
GRÁFICO 16 – AJUSTAMENTO SOBRE AS MÉDIAS DAS ESTIMATIVAS DO ÍNDICE DE QUALIDADE RMSEA DO MODELO 1 COM RESPECTIVA BANDA DE CONFIANÇA.....	146
GRÁFICO 17 – AJUSTAMENTO SOBRE AS MÉDIAS DAS ESTIMATIVAS DO ÍNDICE DE QUALIDADE GFI DO MODELO 1 COM RESPECTIVA BANDA DE CONFIANÇA.....	148
GRÁFICO 18 – AJUSTAMENTO SOBRE AS MÉDIAS DAS ESTIMATIVAS DO ÍNDICE DE QUALIDADE NFI DO MODELO 1 COM RESPECTIVA BANDA DE CONFIANÇA.....	149
GRÁFICO 19 – AJUSTAMENTO SOBRE AS MÉDIAS DAS ESTIMATIVAS DO ÍNDICE DE QUALIDADE CFI DO MODELO 1 COM RESPECTIVA BANDA DE CONFIANÇA.....	150

LISTA DE QUADROS

QUADRO 1 – COEFICIENTES DE CORRELAÇÃO APLICADOS EM MEE EM FUNÇÃO DO TIPO DE VARIÁVEL ANALISADA.....	30
QUADRO 2 – ELEMENTOS UTILIZADOS NA CONSTRUÇÃO DE UM DIAGRAMA DE CAMINHOS.....	31
QUADRO 3 – ADEQUAÇÃO AMOSTRAL SEGUNDO O CRITÉRIO KMO.....	48
QUADRO 4 – CONSISTÊNCIA INTERNA SEGUNDO O ALFO DE CRONBACH.....	50
QUADRO 5 – PRINCIPAIS MÉTODOS DE ESTIMAÇÃO DISPONÍVEIS NA APLICAÇÃO DA TÉCNICA DE MEE.....	63
QUADRO 6 – VALORES DE REFERÊNCIA (PONTOS DE CORTE) PARA ÍNDICES DE QUALIDADE DE AJUSTAMENTO.....	81
QUADRO 7 – AVALIAÇÃO DOS AJUSTES POR REGRESSÃO NÃO LINEAR AS ESTIMATIVAS DOS ÍNDICES DE AJUSTAMENTO PARA UM MODELO ESTRUTURAL (Modelo de Michaelis-Menten).....	172
QUADRO 8 – AVALIAÇÃO DOS AJUSTES POR REGRESSÃO NÃO LINEAR AS ESTIMATIVAS DOS ÍNDICES DE AJUSTAMENTO PARA UM MODELO ESTRUTURAL (Modelo Exponencial).....	172
QUADRO 9 – PACOTES E FUNÇÕES PARA O SOTWARE R, PARA ANÁLISE DOS DADOS A SEREM UTILIZADOS EM UMA MEE.....	188
QUADRO 10 – ASPECTOS DAS TÉCNICAS CSM, PLS e OLS.....	189

LISTA DE TABELAS

TABELA 1 – TESTE DA NORMALIDADE UNIVARIADA PARA AS VARIÁVEIS DO MODELO 1.....	123
TABELA 2 – RESULTADOS DO TESTE DE MARDIA PARA OS DADOS DO MODELO 1.....	124
TABELA 3 – TESTE DA NORMALIDADE UNIVARIADA PARA AS VARIÁVEIS DO MODELO 2.....	125
TABELA 4 – RESULTADOS DO TESTE DE MARDIA PARA OS DADOS DO MODELO 2.....	125
TABELA 5 – TESTE DA NORMALIDADE UNIVARIADA PARA AS VARIÁVEIS DO MODELO 3.....	126
TABELA 6 – RESULTADOS DO TESTE DE MARDIA PARA OS DADOS DO MODELO 3.....	126
TABELA 7 – TESTE DA NORMALIDADE UNIVARIADA PARA AS VARIÁVEIS DO MODELO 4.....	127
TABELA 8 – RESULTADOS DO TESTE DE MARDIA PARA OS DADOS DO MODELO 4.....	128
TABELA 9 – TESTE DA NORMALIDADE UNIVARIADA PARA AS VARIÁVEIS DO MODELO 5.....	129
TABELA 10 – RESULTADOS DO TESTE DE MARDIA PARA OS DADOS DO MODELO 5.....	129
TABELA 11 – TESTE DA NORMALIDADE UNIVARIADA PARA AS VARIÁVEIS DO MODELO 6.....	130
TABELA 12 – RESULTADOS DO TESTE DE MARDIA PARA OS DADOS DO MODELO 6.....	130
TABELA 13 – TAXA DE CONVERGÊNCIA POR MODELO USANDO OS DADOS ORIGINAIS (NÃO NORMAIS) ESTIMADOS POR ML.....	132
TABELA 14 – TAXA DE CONVERGÊNCIA POR MODELO USANDO OS DADOS ORIGINAIS (NÃO NORMAIS) ESTIMADOS POR GLS.....	132
TABELA 15 – TAXA DE CONVERGÊNCIA POR MODELO USANDO DADOS NORMAIS GERADOS A PARTIR DOS DADOS ORIGINAIS (NÃO NORMAIS) ESTIMADOS POR ML.....	133
TABELA 16 – TAXA DE CONVERGÊNCIA POR MODELO USANDO DADOS NORMAIS GERADOS A PARTIR DOS DADOS ORIGINAIS (NÃO NORMAIS) ESTIMADOS POR GLS.....	133
TABELA 17 – ESTIMATIVAS PARA OS ÍNDICES DE QUALIDADE DE AJUSTAMENTO DO MODELO 1.....	135
TABELA 18 – ESTIMATIVAS PARA OS ÍNDICES DE QUALIDADE DE AJUSTAMENTO DO MODELO 2.....	136

TABELA 19 – ESTIMATIVAS PARA OS ÍNDICES DE QUALIDADE DE AJUSTAMENTO DO MODELO 3.....	137
TABELA 20 – ESTIMATIVAS PARA OS ÍNDICES DE QUALIDADE DE AJUSTAMENTO DO MODELO 4.....	138
TABELA 21 – ESTIMATIVAS PARA OS ÍNDICES DE QUALIDADE DE AJUSTAMENTO DO MODELO 5.....	140
TABELA 22 – ESTIMATIVAS PARA OS ÍNDICES DE QUALIDADE DE AJUSTAMENTO DO MODELO 6.....	141
TABELA 23 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE RMSEA DO MODELO 1, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO.....	147
TABELA 24 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE GFI DO MODELO 1, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO.....	148
TABELA 25 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE NFI DO MODELO 1, VALORES PREDITOS E INTERVALOS DE CONFIANÇA E PREDIÇÃO.....	149
TABELA 26 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE CFI DO MODELO 1, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO.....	151
TABELA 27 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE RMSEA DO MODELO 2, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO.....	152
TABELA 28 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE GFI DO MODELO 2, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO.....	153
TABELA 29 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE NFI DO MODELO 2, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO.....	154
TABELA 30 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE CFI DO MODELO 2, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO.....	154
TABELA 31 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE RMSEA DO MODELO 3, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO.....	156
TABELA 32 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE GFI DO MODELO 3, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO.....	156
TABELA 33 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE NFI DO MODELO 3, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO.....	157
TABELA 34 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE CFI DO MODELO 3, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO.....	158
TABELA 35 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE RMSEA DO MODELO 4, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO.....	159
TABELA 36 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE GFI DO MODELO 4, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO.....	160
TABELA 37 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE NFI DO MODELO 4, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO.....	161
TABELA 38 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE CFI DO MODELO 4, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO.....	161

TABELA 39 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE RMSEA DO MODELO 5, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO.....	162
TABELA 40 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE GFI DO MODELO 5, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO.....	163
TABELA 41 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE NFI DO MODELO 5, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO.....	164
TABELA 42 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE CFI DO MODELO 5, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO.....	165
TABELA 43 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE RMSEA DO MODELO 6, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO.....	166
TABELA 44 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE GFI DO MODELO 6, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO.....	166
TABELA 45 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE NFI DO MODELO 5, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO.....	167
TABELA 46 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE NFI DO MODELO 5, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO.....	168

LISTA DE SIGLAS

AFC	– Análise Fatorial Confirmatória
AFE	– Análise Fatorial Exploratória
ANOVA	– <i>Analysis of Variance</i> (Análise de Variância)
CFI	– <i>Comparative Fit Index</i> (Índice de Ajuste Comparativo)
CSM	– <i>Covariance Structure Model</i> (Modelo de Estrutura de Covariância)
EQS [®]	– <i>Structural Equation Modeling Software</i> (Software computacional numérico)
GFI	– <i>Goodness of Fit Index</i> (Índice de Qualidade do Ajuste)
GLS	– <i>Generalized Least Square</i> (Mínimos Quadrados Generalizados)
IBM [®]	– <i>International Business Machine</i> (Marca Registrada)
LISREL [®]	– <i>Linear Structural RELationships</i> (Software computacional numérico)
MATLAB [®]	– <i>MATrix LABoratory</i> (Software computacional numérico)
MEE	– Modelagem de Equações Estruturais
ML	– <i>Maximum Likelihood</i> (Máxima Verossimilhança)
NFI	– <i>Normed Fit Index</i> (Índice de Ajuste Normado)
OLS	– <i>Ordinary Least Square</i> (Mínimos Quadrados Ordinários)
PCFI	– <i>Parsimony CFI</i> (Índice de Ajuste Comparativo Parcimonioso):
PGFI	– <i>Parsimony GFI</i> (Índice de Qualidade do Ajuste Parcimonioso)
PLS	– <i>Partial Least Square</i> (Mínimos Quadrados Parciais)
PNFI	– <i>Parsimony NFI</i> (Índice de Ajuste Normado Parcimonioso)
PPGMNE	– Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia
RFI	– <i>Relative Fit Index</i> (índice de Ajuste Relativo)
RMSEA	– <i>Root Mean Square Error of Approximation</i> (Raiz do Erro Quadrático Médio de Aproximação)
RMSR	– <i>Root Mean Square Residual</i> (Raiz do Resíduo Quadrático Médio)
SEM	– <i>Structural Equation Models</i> (Modelos de Equações Estruturais)
SPSS [®]	– <i>Statistical Package for the Social Sciences</i> (Pacote Estatístico para Ciências Sociais)
SR	– <i>Structural Regression</i> (Estrutura de Regressão)
SRMR	– <i>Standardized Root Mean Square Residual</i> (Raiz do Quadrado Médio dos Resíduos Padronizado)
UFPR	– Universidade Federal do Paraná

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	20
1.1	LEVANTAMENTO DO PROBLEMA	20
1.2	OBJETIVOS	22
1.2.1	Objetivo Geral	22
1.2.2	Objetivos Específicos	23
1.3	MOTIVAÇÃO E JUSTIFICATIVA	23
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	25
2.1	MODELAGEM DE EQUAÇÕES ESTRUTURAIS	26
2.1.1	O que é Modelagem de Equações Estruturais	26
2.1.2	Variáveis em Modelagem de Equações Estruturais	28
2.1.3	Representação Gráfica de um MEE	30
2.1.4	Tipos de Modelos de Equações Estruturais	33
2.1.5	Modelo Matemático	37
2.1.5.1	Submodelo de medida	37
2.1.5.2	Submodelo estrutural	38
2.1.6	Estágios na Modelagem de Equações Estruturais	40
2.1.6.1	Elaboração do modelo teórico	41
2.1.6.2	Levantamento dos dados (Tamanho da amostra)	42
2.1.6.2.1	Verificação da hipótese de normalidade multivariada	44
2.1.6.2.2	Teste de esfericidade de Bartlett para a matriz de correlação	47
2.1.6.2.3	Critério de Kaiser – Meyer – Olkin (KMO)	48
2.1.6.2.4	Confiabilidade de uma medida – Alfa de Cronbach	48
2.1.6.2.5	Ausência de multicolinearidade	50
2.1.6.2.6	Inexistência de <i>outliers</i>	51
2.1.6.3	Especificação do modelo	52
2.1.6.4	Identificação do modelo	52
2.1.6.5	Estimação dos modelos	55
2.1.6.5.1	Matrizes de covariância	55
2.1.6.5.2	Estimação dos parâmetros	57

2.1.6.5.3	Considerações sobre a não normalidade dos dados e a escolha do método de estimação dos parâmetros.....	63
2.1.6.5.4	Abordagem Bayesiana.....	67
2.1.6.6	Avaliação da qualidade do ajustamento do modelo.....	68
2.1.6.6.1	Teste do qui-quadrado.....	71
2.1.6.6.2	Índices absolutos.....	74
2.1.6.6.3	Índices relativos (ou comparativos).....	76
2.1.6.6.4	Índices de parcimônia.....	78
2.1.6.6.5	Índices de discrepância populacional.....	79
2.1.6.6.6	Considerações sobre os índices de qualidade de ajustamento em modelos de equações estruturais.....	82
2.1.6.6.7	Análise de resíduos, erro padrão e confiabilidade individual dos parâmetros.....	86
2.1.6.7	Reespecificação do modelo.....	88
2.1.6.8	Validação do modelo.....	89
2.2	REGRESSÃO NÃO LINEAR.....	89
2.2.1	Introdução.....	89
2.2.2	Modelos de Regressão.....	90
2.2.3	Regressão Linearizada.....	94
2.2.4	Métodos de Estimação.....	95
2.2.4.1	Método dos mínimos quadrados.....	95
2.2.4.2	Método dos mínimos quadrados generalizados.....	96
2.2.4.3	Método da máxima verossimilhança.....	97
2.2.4.4	Métodos iterativos.....	97
2.2.5	Coeficiente de determinação – R^2	98
2.2.6	Medidas de não linearidade.....	100
2.2.7	Considerações sobre ajustamento de curvas e seu uso em modelos de equações estruturais.....	100
2.2.8	Intervalos de confiança e intervalos de predição (Método Delta).....	102

3 MATERIAL E METODOLOGIA 105

3.1	MATERIAL.....	105
3.2	METODOLOGIA.....	110
3.3	LIMITAÇÕES DA PESQUISA.....	122

4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	123
4.1	VERIFICAÇÃO DOS PRESSUPOSTOS PARA USO DE MEE NAS AMOSTRAS DISPONIBILIZADAS.....	123
4.1.1	Avaliação dos Dados para o Modelo 1 – Modelo_PTSD.....	123
4.1.2	Avaliação dos Dados para o Modelo 2 – Modelo_Burnout.....	125
4.1.3	Avaliação dos Dados para o Modelo 3 – Modelo_Exemplo.....	126
4.1.4	Avaliação dos Dados para o Modelo 4 – Modelo_Eutanasia.....	127
4.1.5	Avaliação dos Dados para o Modelo 5 – Modelo_Banco.....	128
4.1.6	Avaliação dos Dados para o Modelo 6 – Modelo_Hotel.....	130
4.2	DETERMINAÇÃO DO TAMANHO MÍNIMO DE AMOSTRAS (Taxa de convergência).....	132
4.3	ESTABILIDADE DOS ÍNDICES DE QUALIDADE DE AJUSTAMENTO EM RELAÇÃO AO TAMANHO DA AMOSTRA POR TIPO DE MEE.....	134
4.3.1	Avaliação da estabilidade das médias das estimativas dos índices de qualidade de ajustamento para o modelo 1 – Modelo_PTSD.....	135
4.3.2	Avaliação da estabilidade das médias das estimativas dos índices de qualidade de ajustamento para o modelo 2 – Modelo_Burnout.....	136
4.3.3	Avaliação da estabilidade das médias das estimativas dos índices de qualidade de ajustamento para o modelo 3 – Modelo_Exemplo.....	137
4.3.4	Avaliação da estabilidade das médias das estimativas dos índices de qualidade de ajustamento para o modelo 4 – Modelo_Eutanasia.....	138
4.3.5	Avaliação da estabilidade das médias das estimativas dos índices de qualidade de ajustamento para o modelo 5 – Modelo_Banco.....	139
4.3.6	Avaliação da estabilidade das médias das estimativas dos índices de qualidade de ajustamento para o modelo 6 – Modelo_Hotel.....	141
4.4	APLICAÇÃO DE REGRESSÃO NÃO LINEAR SOBRE AS MÉDIAS DAS ESTIMATIVAS DOS COEFICIENTES DE QUALIDADE DE AJUSTAMENTO (para pequenas amostras).....	144
4.4.1	Modelo 1 – Modelo_PTSD	145
4.4.2	Modelo 2 – Modelo_Burnout	152
4.4.3	Modelo 3 – Modelo_Exemplo	155
4.4.4	Modelo 4 – Modelo_Eutanasia	159
4.4.5	Modelo 5 – Modelo_Banco	162
4.4.6	Modelo 6 – Modelo_Hotel	165
4.5	CONSIDERAÇÕES EM RELAÇÃO AOS AJUSTES OBTIDOS SOBRE AS MÉDIAS DAS ESTIMATIVAS DOS ÍNDICES DE QUALIDADE DE AJUSTAMENTO.....	168

4.6	DETERMINAÇÃO DE UM CRITÉRIO DE VALIDAÇÃO E/OU CONFIRMAÇÃO PARA OS ÍNDICES DE QUALIDADE DE AJUSTAMENTO DE UM MEE.....	173
-----	--	-----

5 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES 175

REFERÊNCIAS 178

APÊNDICE 188

APÊNDICE A – PACOTES E FUNÇÕES PARA O SOTWARE R, PARA ANÁLISE DOS DADOS A SEREM UTILIZADOS EM UMA MEE.....	188
--	-----

ANEXOS 189

ANEXO A – ASPECTOS DAS TÉCNICAS <i>CSM (Covariance Structure Model)</i> , <i>PLS (Partial Least Square)</i> e <i>OLS (Ordinary Least Square)</i>	189
ANEXO B – ESCALA DE CORREÇÃO DO TESTE QUI-QUADRADO DE SATORRA-BENTLER.....	190
ANEXO C – COMO ESPECIFICAR AS RELAÇÕES HIPOTÉTICAS NO SOFTWARE R® PARA USO NO PACOTE ‘SEM’.....	191
ANEXO D – ALGORITMOS UTILIZADOS NESSE TRABALHO PARA USO NO <i>SOFTWARE R</i>	194
I – Teste de Normalidade Multivariada Baseado em Distâncias (BIASE, 2011).....	194
II – Esfericidade de Bartlett (GOMES, 2018).....	195
III – Teste KMO (GOMES, 2018).....	195
IV – Função Para Cálculo das Estimativas Usando os Dados Originais e Para Dados Normais Gerados a Partir dos Dados Originais.....	195
V – Looping Para Cálculo das Estimativas.....	196
VI – Modelos de Regressão Usados Para Ajustamento das Estimativas.....	197
VII – Modelos de Michaelis-Menten Linearizados.....	197
VIII – Coeficiente de Determinação.....	198
IX – Gráfico do Ajuste e Banda de Confiança (WALMES, 2011).....	198
X – Obtenção dos valores previstos e intervalos de predição (LAVIELLE, 2019).....	199

1 INTRODUÇÃO

1.1 LEVANTAMENTO DO PROBLEMA

Nos últimos anos houve um crescente interesse em realizar estudos quantitativos em diversas áreas do conhecimento, com um número significativo de variáveis e/ou observações, que exigem o uso de métodos computacionalmente intensivos para sua resolução, utilizando diversas técnicas estatísticas, para ampliar a capacidade de desenvolver e confirmar os resultados esperados de diversas pesquisas. A complexidade de alguns assuntos abordados e a diversidade dos dados levantados e analisados, exigem que os pesquisadores desenvolvam e apliquem técnicas estatísticas multivariadas e computacionalmente intensivas.

Conforme Thompson, a realidade sobre a qual a maioria dos pesquisadores atualmente deseja generalizar é geralmente “ uma realidade na qual o investigador se preocupa com resultados múltiplos, nos quais os resultados têm múltiplas causas e em que a maioria das causas tem vários efeitos” (1986 *apud* THOMPSON, 1995).

Além disso, o desenvolvimento, nos últimos anos, da área da tecnologia de *hardwares* também possibilitou a realização de cálculos, antes de difícil e demorada resolução, por meio de *softwares* apropriados e atualizados constantemente, com acesso a muito mais recursos, principalmente aqueles com interfaces *user-friendly*¹, o que resultou em um avanço nas pesquisas em diversas áreas, principalmente na área da Estatística, e num ganho computacional considerável, em relação principalmente a complexidade e tempo de execução dos cálculos.

Nesse cenário da pesquisa quantitativa e da computação, algumas teorias da Estatística Multivariada, aquelas que exigiam cálculos mais complexos, puderam ser utilizadas com mais frequência, destacando-se nos últimos anos, a metodologia da Modelagem de Equações Estruturais - MEE (*Structural Equation Modeling* – SEM, em inglês). A Modelagem de Equações Estruturais não é uma técnica estatística, mas sim um conjunto de técnicas multivariadas utilizadas para testar a validade de modelos teóricos que definem relações causais e hipotéticas entre variáveis (MARÔCO, 2014).

A MEE utiliza alguns procedimentos estatísticos clássicos. Os métodos mais usados incluem abordagens baseadas em regressão, ANOVA, análise fatorial e análise de agrupamento

¹ Em inglês "*user friendly*" normalmente se refere a *softwares* ou *hardwares* que são fáceis de usar, que não são complicados e não precisa ter grandes conhecimentos técnicos para usar. Informação disponível em: <<https://br.answers.yahoo.com/question/index?qid=20081009120429AA1aBAJ>>, acesso em 10 Ago. 2019

para avaliar relações entre variáveis observáveis e não observáveis, com o objetivo de permitir a realização de análises quantitativas sobre modelos teóricos hipotéticos.

Essa técnica tem atualmente despertado interesse dos pesquisadores em diversas áreas, com vários trabalhos publicados nos últimos anos, principalmente nas áreas sociais aplicadas e da saúde. Os trabalhos de Brei e Liberali Neto (2006) e Prearo, Gouvêa e Romeiro (2011) destacam o crescimento do uso de MEE em trabalhos publicados, tanto no Brasil quanto no exterior, respectivamente. Também o desenvolvimento de programas computacionais específicos para utilização em MEE, tais como, IBM® SPSS® Amos, LISREL®, EQS® e os pacotes computacionais (*packages*) ‘lavaan’ (*LAtent VArIable ANalysis*) e ‘sem’ (*Structural Equation Models*) do *software R*® (R Core Team, 2019), entre outros, ajudaram a popularizar a aplicação da técnica, tornando-a principalmente mais acessível a pesquisadores de diversas áreas. Mas nos últimos anos, muitas áreas de aplicação onde MEE é usada, tem lidado com conjuntos de dados de dimensões muito altas, e tamanhos de amostras que podem ser muito pequenos em relação a dimensão. Todavia para a aplicação da metodologia de MEE alguns pressupostos importantes geralmente precisam ser considerados, sob pena de comprometimento das estimativas obtidas para um modelo.

Um desses pressupostos diz respeito ao número mínimo adequado de observações necessárias para a especificação e estimação dos parâmetros. Existem muitas pesquisas sobre o tema, mas um grande número de pesquisadores concorda que esse é um tema controverso, pois não há uma regra geral que defina qual quantidade mínima ou, até mesmo, máxima de observações por variável, ou quantas variáveis devem ser consideradas na análise de um modelo, de modo a se ter um ajuste adequado do modelo em relação a teoria considerada. Não há uma ‘regra de ouro’ para a determinação do número de observações, relativamente ao número de variáveis observáveis e não observáveis. O que se tem atualmente são referências que foram obtidas a partir do conhecimento empírico extraído do trabalho de diversos pesquisadores.

Trabalhos como o de MacCallum *et al.* (1996), Wolf *et al.* (2013) e Westland (2010), entre outros, procuram definir de maneira formal, um número mínimo de observações e variáveis observáveis por amostra. Entretanto algumas pesquisas não possuem observações suficientes para que se possa adotar o uso de MEE, não contemplando um número ‘mínimo adequado’ assim indicado na literatura sobre o tema.

Muitas vezes não existem condições para um levantamento de um número maior de observações, por motivos pertinentes a pesquisa. Apesar desse pressuposto não ser plenamente

contemplado, alguns pesquisadores têm aplicado a MEE em seus trabalhos. Um dos trabalhos que destaca essa problemática e levanta a dificuldade que pesquisadores tem de obter observações suficientes é o de Levers-Landis *et al.* (2011), no qual haviam restrições quando ao número de indivíduos e, conseqüentemente, as observações disponíveis. Apesar do modelo estrutural ser bem simples, a limitação no número de observações não impossibilitou a aplicação da técnica de MEE e apuração de parâmetros que validaram a pesquisa e a teoria analisada. A partir da situação que se apresenta no artigo citado anteriormente, e em outros casos similares, algumas questões foram levantadas e exploradas nesse trabalho de pesquisa.

Como o pesquisador pode validar o ajustamento de um modelo de MEE tendo um número limitado de dados? É possível estimar parâmetros e avaliar um modelo de forma confiável nesse cenário onde o número de observações é considerado ‘insuficiente’?

É a partir dessa temática questionativa que se desenvolve esta pesquisa, a qual pretende analisar o comportamento dos índices de qualidade de ajustamento em problemas de MEE com número reduzido de observações, de forma a contribuir com a discussão a respeito da validade e confiabilidade desses índices, assim como propor uma metodologia que possa ser aplicada para validação do modelo a partir do uso de regressão não linear sobre as médias das estimativas dos índices de qualidade de ajustamento dos modelo de equações estruturais.

1.2 OBJETIVOS

1.2.1 Objetivo Geral

Propor uma metodologia para o uso de MEE, que possa ser aplicada em estudos envolvendo amostras multivariadas com número limitado de observações, para estimação e validação das estimativas dos índices de qualidade de ajustamento global em modelos de equações estruturais. Essa metodologia será desenvolvida aplicando-se a técnica de regressão não linear sobre estimativas obtidas e extrapolando seus resultados a valores além do conjunto de observações de modo a analisar e validar o ajustamento dos dados ao modelo por meio de intervalos de confiança.

1.2.2 Objetivos Específicos

- i) Determinar a taxa de convergência dos modelos aos dados para se obter um número mínimo de observações necessárias à aplicação da metodologia apresentada.
- ii) Analisar a estabilidade dos índices de qualidade de ajustamento conforme a quantidade de observações.
- iii) Testar modelos de equações estruturais com número reduzido de observações, de maneira a obter resultados que possam ser analisados na intenção de se determinar uma maneira de validar as estimativas dos parâmetros para os índices de ajustamento do modelo;
- iv) Disponibilizar uma metodologia de análise dos resultados, para que, aplicada a problemas envolvendo MEE com número pequeno de observações, possa o pesquisador ter condição de avaliar e validar o ajustamento do modelo de equações estruturais e
- v) Fornecer subsídios computacionais para que pesquisadores, principalmente das áreas da saúde, sociais e humanas possam implementar a proposta desse trabalho em suas pesquisas usando o *software* R[®] (R Core Team, 2019).

1.3 MOTIVAÇÃO E JUSTIFICATIVA

A MEE tornou-se uma importante ‘ferramenta’ estatística em muitas áreas do conhecimento, pois possibilita investigar a legitimidade de modelos teóricos que possam explicar as relações entre um conjunto de variáveis. A aplicação da MEE envolve uma série de etapas a serem obedecidas que vão desde a construção do modelo teórico até a especificação, a avaliação da adequação e estimação dos parâmetros e avaliação do ajuste. Muitos pesquisadores têm feito uso de MEE em suas pesquisas como forma de analisar as relações causais hipotéticas entre variáveis, utilizando-se de diversos *softwares* disponíveis para a realização dos cálculos das estimativas de parâmetros e índices relativos.

O uso da técnica de MEE possui regras que possuem alguns pressupostos determinantes para a qualidade da análise efetuada e dos resultados obtidos. Em relação aos dados levantados para a análise do modelo teórico, o pesquisador deve levar em consideração alguns itens que são importantes, como sua normalidade multivariada por exemplo. Mas um ponto ainda mais importante está na quantidade dos dados e, em algumas situações, a quantidade de observações disponíveis é uma questão difícil de se contornar, principalmente em áreas como a da saúde (CURADO *et al.*, 2014).

Esse critério tem sido discutido no decorrer de vários anos, e tem sido um ponto fundamental nas pesquisas envolvendo MEE. Diferentes pesquisadores têm divergido sobre o número mínimo de observações para a aplicação coerente da MEE. Existe uma linha de pensamento que admite que essa quantidade não deve ser pequena, abaixo de 100 observações, mas até esse valor, obtido de forma empírica, não tem um consenso entre pesquisadores na área.

O problema da quantidade de observações disponíveis para aplicação da metodologia de MEE leva os pesquisadores não só a questionarem, como dispensarem, o uso de MEE em seus trabalhos, sob risco do modelo não ter um bom ajustamento, ou até mesmo das estimativas apresentarem inconsistência e viés elevado. Por outro lado, o levantamento de informações pode ser dispendioso e demorado, tendo um custo financeiro e operacional alto para a realização da pesquisa. Mas a questão pertinente nesses casos é o que se pode entender por quantidade ‘ideal’ de observações? Essa questão é um tema de discussão entre os estudos de MEE pois não existe uma regra geral definida. As pesquisas são desenvolvidas levando em consideração valores e ‘pontos de corte’ definidos empiricamente. É claro que existe uma discussão sobre esses valores de referência e isso leva a questionamentos sobre a quantidade necessária de observações num problema de MEE. Como então se deve proceder em problemas com poucas observações? Trabalhos como por exemplo, de Bollen e Stine (1990,1992) e Kim e Millsap (2014), abordam esta questão. Esses e outros trabalhos exploram a situação de aplicação de MEE com número limitado de observações, buscando uma alternativa metodológica que possa ser utilizada para validação dos parâmetros e índices calculados sobre o modelo.

Nesta pesquisa se pretende criar uma proposta de trabalho para ser utilizada em trabalhos de pesquisa na área da MEE, de modo que se possa estimar e validar os índices de qualidade de ajustamento, num cenário de poucas observações disponíveis. Aplicando a teoria de regressão não linear sobre as médias das estimativas calculadas dos índices de qualidade de ajustamento, se pretende ajustar um modelo e extrapolar para além dos limites dos dados, obtendo um cenário para uma quantidade maior de informações que podem possibilitar aos pesquisadores uma visão do grau de ajustamento do modelo estrutural caso houvesse um número maior de observações. Isso possibilitará que os trabalhos usando MEE possam ser desenvolvidos em situações com um número reduzido de informações com mais segurança, colaborando com as pesquisas futuras nessa área que não dispõe de muitas informações. Os resultados podem trazer contribuições, principalmente das áreas sociais, humanas e da saúde, onde se concentra o maior número de problemas com esse cenário.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Este capítulo é dedicado a uma revisão bibliográfica sobre Modelagem de Equações Estruturais (MEE) e Regressão não linear. A primeira parte do capítulo (item 2.1) trata da MEE apresentando os principais conceitos necessários para a compreensão da metodologia proposta.

A ênfase será dada aos modelos baseados em estruturas de covariâncias, ou CSM (*Covariance Structure Model*), que descrevem as variâncias e covariâncias das variáveis observadas, por ser mais difundido para a condução de MEE. É certamente possível obter probabilidades sob estatísticas resumidas, e esta é uma característica central da MEE. Uma matriz de covariância é uma estatística suficiente para SEM sob normalidade multivariada.

Os ajustes dos modelos CSM envolvem a minimização das diferenças entre as matrizes de variância e covariâncias observadas e previstas. Um algoritmo de ajuste iterativo é utilizado para estimar os parâmetros simultaneamente. O algoritmo começa a partir de um conjunto inicial de valores dos parâmetros que estão sendo estimados e então os ajusta após sucessivas iterações, até que uma medida escalar de discrepância entre o observado e o previsto seja minimizada. O método mais utilizado nesta estimação é o método da Máxima Verossimilhança.

A estimação das variáveis latentes nos modelos CSM segue os mesmos princípios da estimação dos fatores comuns na Análise Fatorial Confirmatória. Eles são estimados após o ajuste do modelo, através de metodologias baseadas em regressão múltiplas (MENDES, 2006). No anexo A deste trabalho é apresentado um quadro comparativo com alguns aspectos das técnicas de modelagem baseada em covariância – CSM (*Covariance Structure Model*), mínimos quadrados parciais – PLS (*Partial Least Square*) e mínimos quadrados Ordiniais – OLS (*Ordinary Least Squares*). A segunda parte do capítulo (item 2.2) trata do ajustamento de curvas através da teoria de regressão não linear. A partir das estimativas dos índices de qualidade de ajustamento calculadas sucessivas vezes, para diversas quantidades de observações, se aplicará a técnica de regressão não linear ajustando uma curva a partir de modelos não lineares determinados, com o objetivo de extrapolar para quantidades maiores de observações e analisar o comportamento das estimativas e intervalos de predição.

2.1 MODELAGEM DE EQUAÇÕES ESTRUTURAIS

2.1.1 O que é Modelagem de Equações Estruturais

Análise de Estrutura de Covariância ou MEE é um conceito que foi introduzido há mais de 80 anos por Sewall Wright, geneticista estadunidense, a partir dos artigos “*Correlation and Causation*” (1921) e, principalmente por “*The Method of Path Coefficients*” (1934). Ele desenvolveu um método para transformar as correlações observadas num sistema de equações que descreve matematicamente suas hipóteses concernentes às relações causais que foram representadas num diagrama de caminhos. Inicialmente esse método ficou conhecido como análise dos caminhos. Jöreskog e Sörbom (1979) transformaram a análise de caminhos em uma nova técnica chamada de modelagem de equações estruturais, que combinava métodos estatísticos multivariados com a análise de caminhos de Wright e que era capaz de testar, além de simplesmente descrever, as relações causais entre as variáveis. Essas relações são expressas por parâmetros que, conforme Chou e Bentler (1995) são coeficientes de regressão, variâncias e covariâncias das variáveis independentes e indicam a magnitude do efeito que as variáveis apresentam umas sobre as outras. A MEE pode ser descrita, de forma simples, como uma combinação das técnicas de Análise Fatorial e de Regressão.

Porém é mais do que a soma dessas duas técnicas estatísticas. A própria Correlação Canônica é, na verdade, um caso especial do modelo de equações estruturais. A MEE permite examinar os erros de medidas nas próprias variáveis como também analisar as dependências entre os fatores não observáveis do modelo de medida. Segundo Codes (2005), essa é uma das diferenças mais importantes entre MEE e as demais técnicas de modelagem, pois os procedimentos clássicos de análise de dados modelam apenas as mensurações observáveis.

Um modelo não deve ser desenvolvido sem alguma teoria inerente (HAIR *et al.*, 2010), sendo assim MEE baseia-se num cenário teórico inicial que o pesquisador acredita ser válido, sendo assim a hipótese nula que especifica esse modelo e, os dados analisados servem para demonstrar que o modelo escolhido explica convenientemente as relações observadas entre as variáveis envolvidas. A teoria é a geradora da análise, contrariamente ao paradigma da estatística clássica em que os dados, e não a teoria, estão no centro do processo de análise (MARÔCO, 2014).

A MEE tem como base um conjunto de relações, sendo cada uma com variáveis dependentes e independentes, apresentando algumas vantagens em relação as demais técnicas, a citar (OLIVEIRA, 2016):

- a) permite a incorporação dos erros de medição no processo de estimação do modelo de maneira simples;
- b) consiste na estimação simultânea de diversas relações de dependência inter-relacionadas;
- c) permite que uma variável dependente em uma etapa do modelo se torne uma variável independente nas subsequentes relações de dependência e
- d) a capacidade de definir suposições elaboradas com base no suporte teórico e incluí-las no modelo dá a MEE flexibilidade no exame de questões analíticas dos dados.

Um modelo completo deve ser especificado a priori e então testado com base na amostra das variáveis medidas. Deve-se saber o número de parâmetros a serem estimados, incluindo covariâncias, “coeficientes de caminho” e variâncias. Além disso, todas as relações especificadas no modelo devem ser conhecidas. Então, e somente então, se pode iniciar as análises. Com relação as suposições, pode-se citar (OLIVEIRA, 2016):

- a) distribuição normal multivariada para os termos de erro (existe a possibilidade de flexibilização desta suposição);
- b) independência dos termos de erro;
- c) linearidade entre as variáveis endógenas e exógenas;
- d) sequência, ou seja, deve haver uma relação de causa e efeito entre as variáveis endógenas e exógenas;
- e) Os dados devem ser livres de *outliers* pois estes afetam a significância do modelo;
- f) relacionamento não espúrio, ou seja, as covariâncias observadas devem ser verdadeiras (não devidas ao acaso);
- g) modelo deve estar devidamente identificado e
- h) tamanho amostral adequado ao número de variáveis.

Em relação a aplicabilidade, MEE é uma metodologia multivariada utilizada em diversas áreas de estudo, principalmente na área social aplicada, humanas e biológicas, destacando-se nas áreas de educação, *marketing*, administração, saúde, psicologia, comportamento entre outras. A aplicação mais expressiva nas áreas das ciências sociais aplicadas, comportamentais, humanas e biológicas se deve ao fato de que os métodos tradicionais de análise não permitem a avaliação de modelos teóricos flexíveis e, também ao

fato dos modelos incluírem variáveis que não são diretamente observáveis, variáveis essas chamadas de latentes que não são completamente mensuráveis, mas apresentam correlações entre si, pois partilham uma fonte de variação comum com outras variáveis. Escalas psicométricas e sociométricas são exemplos de instrumentos que operam com esse tipo de variável. Esses instrumentos possuem a propriedade de apresentar problemas significativos em relação à qualidade dos dados observados e, portanto, ter reduzida a confiabilidade nas conclusões sobre a significância das relações quando analisados por técnicas estatísticas clássicas. A MEE permite depurar os erros apresentados nas variáveis por intermédio de modelos de medida e modelos estruturais que ‘descontaminam’ as variáveis dos erros de medida (MARÔCO, 2014). Outro fator importante que fez com que essa técnica fosse generalizada principalmente entre os pesquisadores das áreas das ciências sociais aplicadas, humanas e da saúde, foi o desenvolvimento de *softwares* para resolução de modelos de MEE, tornando os cálculos para obtenção dos resultados algo menos complexo, com destaque para o *software* LISREL[®] desenvolvido por Jöreskog e Sörbom nos anos 70². Os estudiosos na área, Jöreskog e Sörbom (1982), citam três situações que basicamente exigem o emprego da técnica de modelagem de equações estruturais:

- a) quando as variáveis observadas contêm erros de medida e quando os interesses estão centrados nos relacionamentos entre as variáveis verdadeiras;
- b) quando existe interdependência ou causas simultâneas entre as variáveis de respostas observadas e
- c) quando variáveis explicativas importantes não foram observadas ou omitidas.

2.1.2 Variáveis em Modelagem de Equações Estruturais

Uma característica dos modelos de equações estruturais é poder considerar vários tipos de variáveis. Dentro da teoria de MEE existem dois tipos básicos de variáveis:

- a) as variáveis manifestas ou variáveis observadas que são as variáveis medidas, manipuladas ou observadas diretamente, como por exemplo, número de vezes por semana que um cliente utiliza os serviços de uma empresa e
- b) as variáveis latentes, fatores ou construtos que são as variáveis não diretamente observáveis, sendo sua existência indicada pela sua manifestação em variáveis indicadoras ou manifestas, por exemplo temos a satisfação dos clientes, estado

² Disponível em < <http://www.ssicentral.com/index.php/product/lisrel>>, acesso em 01 Ago. 2019.

depressivo de um paciente ou o clima organizacional em uma empresa.

Relativamente a sua função no modelo, as variáveis podem ser classificadas em variáveis independentes ou exógenas e em variáveis dependentes ou endógenas. As variáveis exógenas são aquelas cujas causas residem fora do modelo e não são influenciadas por nenhuma outra variável no modelo. Já as variáveis endógenas são aquelas cujas causas de sua variação são explicadas por variáveis presentes no modelo. Em relação as variáveis manifestas, deve-se avaliar a forma como essas são consideradas no modelo. Elas podem ser usadas na sua forma não padronizada (na medida original), ou podem ser padronizadas. Os parâmetros associados as variáveis padronizadas são, em geral, diretamente comparáveis já que sua estimação não é contaminada pela grandeza da medida e pelas eventuais diferenças de magnitude.

De uma forma geral as variáveis em MEE são quantitativas (contínuas ou discretas) sendo irrelevante se são do tipo intervalar ou de razão. É comum também termos variáveis ordinais incluindo-se nesse tipo a escala de Likert. Escalas ordinais violam alguns pressupostos de MEE como por exemplo a normalidade (PEREIRA, 2013).

A associação entre duas variáveis X_1 e X_2 pode ser avaliada pela covariância entre elas, ou seja, pela variância comum estimada. A covariância mede a extensão para a qual as duas variáveis “variam juntas” e é estimada por

$$\widehat{Cov}(X_1, X_2) = \frac{\sum_{j=1}^n (X_{1j} - \bar{X}_1) \cdot (X_{2j} - \bar{X}_2)}{n-1} \quad (1)$$

onde:

\bar{X}_1 representa a média da variável X_1 e \bar{X}_2 representa a média da variável X_2
 n a dimensão da amostra.

A magnitude da covariância é determinada pela magnitude das variáveis, assim, as covariâncias entre variáveis com diferentes magnitudes não são diretamente comparáveis. Para resolver este problema é usual padronizar as covariâncias. A covariância padronizada entre duas variáveis é chamada de Coeficiente de Correlação Linear de Pearson e é estimado da seguinte forma

$$r(X_1, X_2) = \frac{\sum_{j=1}^n (X_{1j} - \bar{X}_1) \cdot (X_{2j} - \bar{X}_2)}{\sqrt{\sum_{j=1}^n (X_{1j} - \bar{X}_1)^2} \cdot \sqrt{\sum_{j=1}^n (X_{2j} - \bar{X}_2)^2}} = \frac{\widehat{Cov}(X_1, X_2)}{S_{X_1} \cdot S_{X_2}} \quad (2)$$

onde:

\bar{X}_1 representa a média da variável X_1 e \bar{X}_2 representa a média da variável X_2
 n a dimensão das amostras.

As covariâncias (ou correlações) entre as variáveis manifestas são os dados que permitem avaliar a viabilidade do modelo de equações estruturais sob estudo.

O tipo de correlação usualmente aplicada em MEE é o coeficiente de correlação de Pearson, que é uma medida de associação linear para variáveis medidas numa escala pelo menos intervalar (que não apresentam um referencial ou zero absoluto). Quando a escala das variáveis não pode ser assumida como intervalar recomenda-se recorrer a outros coeficientes de correlação como o coeficiente de correlação policórica, tetracórica ou poliserial. Um dos principais coeficientes, usado com frequência em Ciências Sociais e Humanas, é o coeficiente de correlação policórica que é usado no caso de termos variáveis que são medidas numa escala ordinal, mas tem subjacentes variáveis contínuas com distribuição normal bivariada (MARÔCO, 2014). No quadro 1 são apresentados os tipos de coeficientes que podem ser usados em MEE em função do tipo de variável que se está analisando.

QUADRO 1 – COEFICIENTES DE CORRELAÇÃO APLICADOS EM MEE EM FUNÇÃO DO TIPO DE VARIÁVEL ANALISADA

TIPO DE COEFICIENTE	VARIÁVEL 1	VARIÁVEL 2
r de Pearson	Contínua	Contínua
Biserial	Contínua	Dicotomizada
Poliserial	Contínua	Politomizada
Tetracórica ³	Dicotomizada	Dicotomizada
Policórica	Politomizada	Politomizada
Rho de Spearman	Politômica	Politômica

FONTE: LITTLE (2013)

2.1.3 Representação Gráfica de um MEE

Para representar um modelo de equações estruturais na forma gráfica recorre-se ao uso de um diagrama de caminhos (*path diagram*), que representa um conjunto de relações hipotéticas entre as variáveis latentes, e entre cada variável latente e suas respectivas variáveis indicadoras. Como as relações entre as variáveis são muito complexas, muitos pesquisadores recorrem ao uso da representação gráfica para retratá-las. O diagrama de caminhos permite uma rápida visualização das relações de interdependência consideradas.

O modelo teórico analisado deve, primeiramente, ser explicitado por meio de um diagrama de caminhos. Por convenção, as variáveis latentes (letras gregas no modelo

³ Para um esclarecimento maior a respeito do uso das relações tetracóricas e policóricas em MEE recomenda-se acessar a página <https://www.john-uebersax.com/stat/sem.htm>, acesso em 01 Ago. 2019.

matemático) são representadas dentro de círculos ou elipses, as variáveis observadas ou manifestas (letras romanas no modelo matemático, x_i para as variáveis dos construtos exógenos e y_i para as variáveis dos construtos endógenos) são representadas dentro de retângulos, as relações causais são indicadas com uma flecha retilínea com uma seta de causa para efeito e as associações correlacionais são representadas por uma seta curva de duas extremidades.

O quadro 2 ilustra as convenções usadas para representação das relações entre as variáveis em MEE.

QUADRO 2 – ELEMENTOS UTILIZADOS NA CONSTRUÇÃO DE UM DIAGRAMA DE CAMINHOS

DESCRIÇÃO	ELEMENTO BÁSICO
Variável Latente ou construto	
Variável Observada ou Manifesta	
Relação causal direta entre duas variáveis	
Relação não recursiva entre duas variáveis	
Correlação entre duas variáveis	
Relação entre duas variáveis latentes	
Relação entre uma variável observada e uma variável latente	
Erro de mensuração na variável observada	
Erro de predição na variável latente	

FONTE: AMORIM *et al.* (2012)

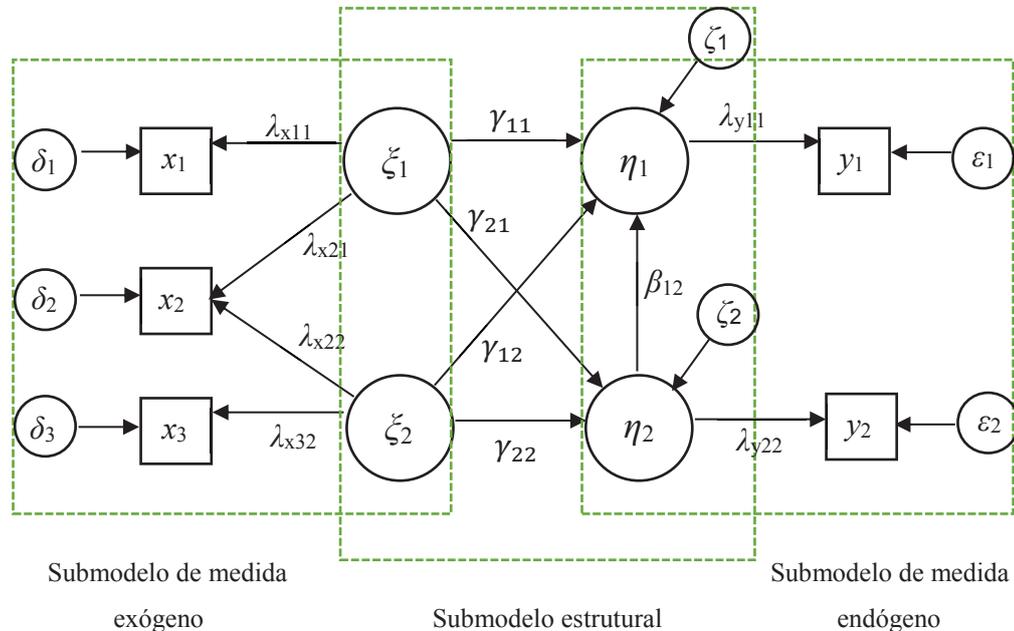
Na construção de um diagrama de caminhos duas suposições são assumidas (AMORIN *et al.*, 2012):

- que todas as relações causais são mostradas no diagrama, e a escolha dessas relações está de acordo com a teoria que dá suporte a construção do modelo a ser ajustado e
- a natureza das relações entre as variáveis, latentes ou observadas são assumidas como lineares ou podem ser linearizadas por transformações.

Na figura 1 apresenta-se um exemplo de um diagrama de caminhos, mostrando os modelos de medida (ou de mensuração) e o modelo estrutural, bem como as variáveis observadas e latentes e suas respectivas relações. Para se obter uma representação acurada da confiabilidade dos indicadores, o pesquisador deve estimar dois submodelos. O submodelo de medida ou de mensuração e o submodelo estrutural. O primeiro tem por finalidade verificar se os itens operacionais utilizados para medir os construtos têm confiabilidade suficiente e realmente medem aquilo que se espera. O submodelo estrutural define as relações causais ou

de associação entre as variáveis e os construtos não observáveis (variáveis latentes), especificando se uma variável latente causa mudanças em outras variáveis latentes no modelo, direta ou indiretamente (PEREIRA, 2013).

FIGURA 1 – DIAGRAMA DE CAMINHOS



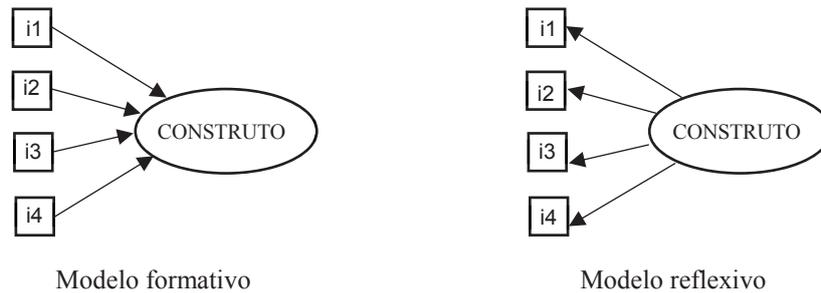
FONTE: Adaptado de LOESCH (2012)

Um ponto importante a ser analisado são as características do fenômeno em estudo e isso impacta na decisão de utilizar construtos formativos e/ou construtos reflexivos.

A característica de um modelo reflexivo é que a variável latente causa as variáveis observadas, portanto uma mudança na variável latente será refletida em uma mudança em todos os seus indicadores. A relação entre essas variáveis é sempre positiva. No modelo formativo, as variáveis observadas causam a variável latente, sendo assim, uma mudança nela não é acompanhada por uma mudança em todos os seus indicadores (TABORGA, 2013).

As variáveis manifestas podem estar positivamente ou negativamente correlacionadas e a diferença entre as duas abordagens está na prioridade causal entre a variável latente e seus indicadores. Os modelos reflexivos são geralmente mais fáceis de se trabalhar e são tradicionalmente mais usados nas ciências sociais (HAIR *et al.*, 2010). O modelo de equações estruturais apresentado na figura 1 se subdivide em dois submodelos definidos por submodelos de medida (endógeno e exógeno, cada um deles correspondendo a uma análise fatorial confirmatória) e submodelo estrutural.

FIGURA 2 – REPRESENTAÇÃO DE MODELOS FORMATIVOS E REFLEXIVOS



FONTE: O autor (2019)

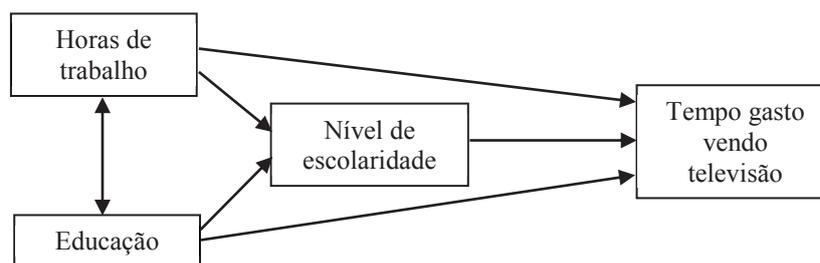
2.1.4 Tipos de Modelos de Equações Estruturais

Os seguintes modelos são comumente utilizados no estudo de MEE.

– Modelo de Análise de Caminhos (*Path Analysis*): Os modelos de análise de trajetória (ou de caminho) são geralmente concebidos apenas em termos de variáveis observadas (sem variáveis latentes). Por esse motivo, alguns pesquisadores não os consideram modelos típicos de MEE.

Uma das vantagens da análise de caminhos é a inclusão de relações entre variáveis que servem como preditores em um único modelo. A figura 3 apresenta um modelo de análise de caminho que examina os efeitos de várias variáveis em relação as horas que uma pessoa gasta vendo televisão.

FIGURA 3 – MODELO DE ANÁLISE DE CAMINHOS



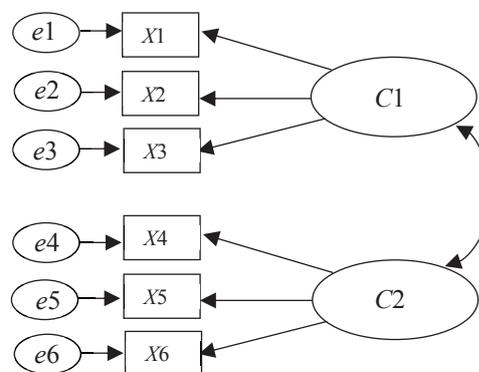
FONTE: Adaptado de RAYKOV (2006)

– Modelos de Análise Fatorial Confirmatória (CFA - *Confirmatory Factor Analysis*): Modelos de análise fatorial confirmatória são frequentemente empregados para examinar padrões de inter-relações entre vários construtos latentes. Cada construto incluído em um modelo é geralmente medido por um conjunto de indicadores observados. Assim, em um modelo de análise fatorial confirmatória não se assume relações direcionais específicas entre os construtos,

apenas que estão correlacionados entre si (RAYKOV, 2006). Em modelos de CFA nada impede que um indicador carregue sobre mais de um fator, ou que os erros de medição sejam correlacionados, ocasião em que reflete a suposição de que os dois indicadores correspondentes medem algo em comum que não está explicitamente representado no modelo, e como essas correlações são associações não analisadas, esse ‘algo’ pode ser desconhecido (MELO, 2013).

A figura 4 representa um modelo de análise fatorial confirmatória com dois construtos C1 e C2 correlacionados. Uma perspectiva adicional sobre a estrutura fatorial pode ser dada com a introdução de modelos fatoriais de ordem superior ou de segunda ordem.

FIGURA 4 – MODELO DE ANÁLISE FATORIAL CONFIRMATÓRIA



FONTE: RAYKOV (2006)

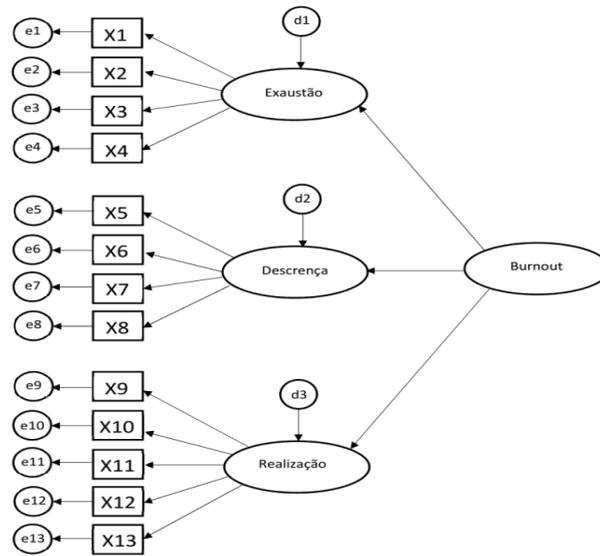
Segundo Hair *et al.* (2010) duas características marcam um modelo de segunda ordem:

- a) o fator de segunda ordem se torna um construto exógeno, ao passo que os fatores de primeira ordem são endógenos: com isso, o fator de segunda ordem é a causa dos fatores de primeira ordem e
- b) não há indicadores para o fator de segunda ordem, de modo a ser completamente latente, não observável e não mensurável.

A figura 5 representa um modelo de análise fatorial de segunda ordem.

Observa-se que os fatores de primeira ordem não covariam e em vez disso, presume-se que o fator de segunda ordem explica as correlações entre eles (KLINE, 2005).

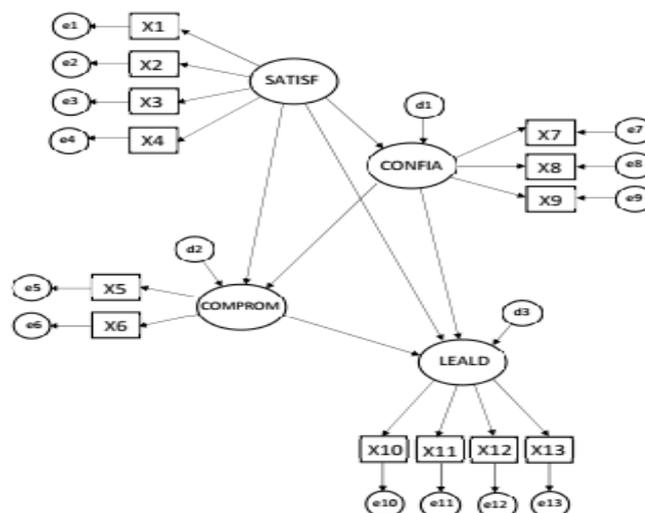
FIGURA 5 – MODELO DE ANÁLISE FATORIAL CONFIRMATÓRIA DE SEGUNDA ORDEM



FONTE: O autor (2019)

– Modelos Estrutural de Regressão (SR – *Structural Regression*): Modelos estruturais de regressão se assemelham a modelos de análise fatorial confirmatória, exceto que eles apresentam relações explicativas particulares entre construtos em vez de essas variáveis estarem apenas inter-relacionadas. Os modelos podem ser usados para testar teorias sobre relações explicativas entre várias variáveis latentes sob investigação. A figura 6 representa um modelo estrutural de regressão desenvolvido por Prado (2004) para estudo dos processos relativos ao marketing de relacionamento, analisando os resultados destes entre bancos e usuários (pessoas físicas).

FIGURA 6 – MODELO ESTRUTURAL DE REGRESSÃO



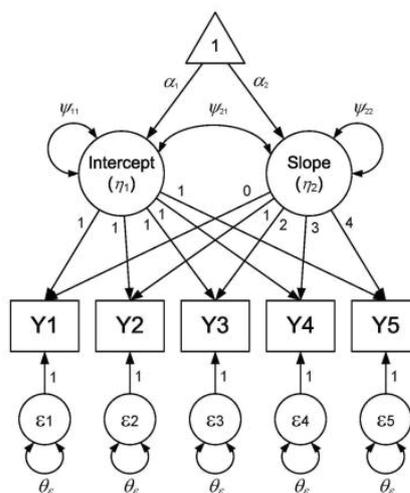
FONTE: PRADO (2004)

– Modelos de Curva de Crescimento (*Growth Curve Modeling*): Também chamados de modelos de mudança latentes (*Latent Change Models*) ou modelos de análise de curva latente (*Latent Curve Analysis Models*) são modelos onde a modelagem da curva de crescimento é uma extensão do processo de regressão usado para incorporar variáveis latentes e coeficientes aleatórios. É um dos últimos marcos na modelagem de equações estruturais. A análise baseia-se em medidas repetidas, nas quais as variáveis são conceituadas como aspectos da mudança e as cargas fatoriais são interpretadas como parâmetros que representam a dependência das medidas repetidas sobre esses aspectos não observáveis da mudança (TARKA, 2018). O objetivo não é apenas representar um modelo de grupo, mas também a variabilidade ou aleatoriedade individual das diferenças individuais. Os modelos concentram-se principalmente nos padrões de crescimento, declínio ou ambos em dados longitudinais. Podem ser usados para avaliar as relações entre padrões de mudança e outras características pessoais.

O interesse em encontrar padrões distintos em conjunto de dados heterogêneos vem sendo observado em diversas áreas de estudos e, para isso, o modelo de equações estruturais dispõe dos Modelos de Mistura (*Mixture Modeling*) que trabalham com dados longitudinais.

Trata-se de uma abordagem estatística que trabalha dados heterogêneos nos quais os indivíduos são classificados no grupo pelas características semelhantes. Na figura 7 temos a representação de um modelo de curva de crescimento. Se assume que os indivíduos vêm de uma mesma população e que a trajetória pode ser extrapolada para uma população inteira, assim como as covariáveis que afetam a trajetória irão influenciar cada indivíduo da mesma forma (JUNG; WICKRAMA, 2008 *apud* DINIZ, 2016).

FIGURA 7 – MODELO DE CURVA DE CRESCIMENTO (*Growth Curve Modeling*)



FONTE: PREACHER *et al.* (2008)

Além da estrutura de covariância, apresenta uma estrutura média que é representado pelo símbolo \triangle que representa uma constante que, em MEE é tratada como uma variável exógena, mesmo que sua variância seja zero, que tem direta ou indiretamente efeitos sobre outras variáveis no modelo, exceto para termos residuais. As variáveis Y_1, Y_2, Y_3, Y_4 e Y_5 são indicadores de dois fatores de crescimento latente.

As cargas no fator *Slope* são fixadas em constantes que correspondem aos tempos de medição, começando com 0 para a primeira medição e terminando com 4 para a última. Essas constantes (0, 1, 2, 3, 4) especificam uma tendência linear, mas que é ajustado para erro de medição quando o modelo é estimado (KLINE, 2011).

2.1.5 Modelo Matemático

2.1.5.1 Submodelo de medida

Conforme Marôco (2014) o submodelo de medida define a forma como as variáveis latentes são operacionalizadas pelas variáveis observadas ou manifestas.

O submodelo de medida das variáveis dependentes ou endógenas é definido pela expressão:

$$\mathbf{y} = \Lambda_y \boldsymbol{\eta} + \boldsymbol{\varepsilon} \quad (3)$$

onde:

$\mathbf{y} = (y_1 \ y_2 \ \dots \ y_p)^t$ é o vetor $1 \times p$ das p variáveis endógenas observadas;

$\Lambda_y = \begin{bmatrix} \lambda_{y11} & \dots & \lambda_{y1r} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \lambda_{yp1} & \dots & \lambda_{ypr} \end{bmatrix}$ é a matriz $p \times r$ dos pesos (cargas) fatoriais de $\boldsymbol{\eta}$ em \mathbf{y} ;

$\boldsymbol{\eta} = (\eta_1 \ \eta_2 \ \dots \ \eta_r)^t$ é o vetor $1 \times r$ das variáveis latentes dependentes e

$\boldsymbol{\varepsilon} = (\varepsilon_1 \ \varepsilon_2 \ \dots \ \varepsilon_p)^t$ é o vetor $1 \times p$ dos erros de medida de \mathbf{y} .

O submodelo de medida para as variáveis independentes ou exógenas é escrito da forma:

$$\mathbf{x} = \Lambda_x \boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\delta} \quad (4)$$

onde:

$\mathbf{x} = (x_1 \ x_2 \ \dots \ x_q)^t$ é o vetor $1 \times q$ das q variáveis independentes ou exógenas observadas;

$\Lambda_x = \begin{bmatrix} \lambda_{x11} & \cdots & \lambda_{x1s} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \lambda_{xq1} & \cdots & \lambda_{xqs} \end{bmatrix}$ é a matriz $q \times s$ dos pesos (cargas) fatoriais de ξ em \mathbf{x} ;

$\xi = (\xi_1 \ \xi_2 \ \dots \ \xi_s)^t$ é o vetor $1 \times s$ das variáveis latentes independentes e

$\delta = (\delta_1 \ \delta_2 \ \dots \ \delta_q)^t$ é o vetor $1 \times q$ dos erros de medida de \mathbf{x} .

2.1.5.2 Submodelo estrutural

Conforme Marôco (2014) o submodelo estrutural define as relações de associação entre as variáveis latentes e é expresso por um conjunto de equações estruturais lineares semelhantes a equações de regressão. O submodelo estrutural é escrito da forma:

$$\boldsymbol{\eta} = \mathbf{B}\boldsymbol{\eta} + \Gamma\xi + \zeta \quad (5)$$

onde:

$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} 0 & \beta_{12} & \cdots & \beta_{1r} \\ \beta_{21} & 0 & \cdots & \beta_{2r} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \beta_{r1} & \beta_{r2} & \cdots & 0 \end{bmatrix}$ é a matriz quadrada $r \times r$ dos coeficientes de $\boldsymbol{\eta}$ no modelo

estrutural e que representa as relações entre os construtos endógenos $\boldsymbol{\eta}$, com $\beta_{ii} = 0$;

$\boldsymbol{\eta} = (\eta_1 \ \eta_2 \ \dots \ \eta_r)^t$ é o vetor $1 \times r$ das variáveis latentes dependentes;

$\Gamma = \begin{bmatrix} \gamma_{11} & \gamma_{12} & \cdots & \gamma_{1s} \\ \gamma_{21} & \gamma_{22} & \cdots & \beta_{2s} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \gamma_{r1} & \gamma_{r2} & \cdots & \gamma_{rs} \end{bmatrix}$ é a matriz $r \times s$ dos coeficientes de \mathbf{x} no modelo estrutural, que

representa as relações de construtos exógenos ξ com endógenos $\boldsymbol{\eta}$;

$\xi = (\xi_1 \ \xi_2 \ \dots \ \xi_s)^t$ é o vetor $1 \times s$ das variáveis latentes independentes e

$\zeta = (\zeta_1 \ \zeta_2 \ \dots \ \zeta_r)^t$ é o vetor $1 \times r$ dos r resíduos ou erros do modelo estrutural (*disturbance*).

O modelo de equações estruturais conjunto é escrito da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\eta}_{rx1} &= \mathbf{B}_{rxr} \boldsymbol{\eta}_{rx1} + \Gamma_{rxs} \xi_{sx1} + \zeta_{rx1} \\ \mathbf{y}_{px1} &= \Lambda_{y\ pxr} \boldsymbol{\eta}_{rx1} + \boldsymbol{\epsilon}_{px1} \\ \mathbf{x}_{qx1} &= \Lambda_{x\ qxs} \xi_{sx1} + \boldsymbol{\delta}_{qx1} \end{aligned} \quad (6)$$

É possível reescrever o modelo estrutural escrito em (5) da forma

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\eta} = \mathbf{B}\boldsymbol{\eta} + \boldsymbol{\Gamma}\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\zeta} &\leftrightarrow \boldsymbol{\eta} - \mathbf{B}\boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{\Gamma}\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\zeta} \leftrightarrow (\mathbf{I} - \mathbf{B}). \boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{\Gamma}\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\zeta} \leftrightarrow \\ &\leftrightarrow \boldsymbol{\eta} = (\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1}. (\boldsymbol{\Gamma}\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\zeta}) \end{aligned} \quad (7)$$

No modelo descrito na figura 1, os submodelos de medida e o submodelo estrutural são definidos pelas seguintes equações lineares:

$$\begin{aligned} \text{I) Submodelo de medida para } \boldsymbol{\xi}: \quad x_1 &= \lambda_{x11} \xi_1 + \delta_1 \\ x_2 &= \lambda_{x21} \xi_1 + \lambda_{x22} \xi_2 + \delta_2 \\ x_3 &= \lambda_{x32} \xi_2 + \delta_3 \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \text{na forma matricial temos} \quad \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \lambda_{x11} & 0 \\ \lambda_{x21} & \lambda_{x22} \\ 0 & \lambda_{x32} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \delta_1 \\ \delta_2 \\ \delta_3 \end{bmatrix} \\ \mathbf{x} &= \Lambda_x \cdot \boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\delta} \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \text{II) Submodelo de medida para } \boldsymbol{\eta}: \quad y_1 &= \lambda_{y11} \eta_1 + \varepsilon_1 \\ y_2 &= \lambda_{y22} \eta_2 + \varepsilon_2 \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \text{na forma matricial temos} \quad \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \lambda_{y11} & 0 \\ 0 & \lambda_{y22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \end{bmatrix} \\ \mathbf{y} &= \Lambda_y \cdot \boldsymbol{\eta} + \boldsymbol{\varepsilon} \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \text{III) Submodelo estrutural:} \quad \eta_1 &= \beta_{12} \eta_2 + \gamma_{11} \xi_1 + \gamma_{12} \xi_2 + \zeta_1 \\ \eta_2 &= \gamma_{21} \xi_1 + \gamma_{22} \xi_2 + \zeta_2 \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \text{na forma matricial} \quad \begin{bmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 0 & \beta_{12} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \gamma_{11} & \gamma_{12} \\ \gamma_{21} & \gamma_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \zeta_1 \\ \zeta_2 \end{bmatrix} \\ \boldsymbol{\eta} &= \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\eta} + \boldsymbol{\Gamma} \cdot \boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\zeta} \end{aligned} \quad (13)$$

De acordo com Mingoti (2005) e Loesch e Hoeltgebaum (2012), os pressupostos do modelo são:

- os valores esperados dos erros são 0;
- os erros do modelo ζ_{rx1} , ε_{px1} e δ_{qx1} não são correlacionados entre si, ou seja, são mutuamente independentes;

- c) ϵ_{rx1} e η_{px1} não são correlacionados, ou seja, são independentes;
- d) ξ_{sx1} e δ_{qx1} não são correlacionados, ou seja, são independentes;
- e) ξ_{sx1} e ζ_{rx1} não são correlacionados, ou seja, são independentes e
- f) uma variável dependente não é causa e efeito dela mesma, ou seja, $\beta_{ii} = 0$ e $(I - B)$ é uma matriz invertível (não singular).

Os modelos especificados em MEE e representados graficamente podem ser classificados em dois tipos, conforme o sentido das relações representadas pelas setas nos diagramas de caminhos. Eles podem ser modelos recursivos ou modelos não recursivos.

Nos modelos recursivos as covariâncias são nulas entre os termos de perturbação do modelo e as relações causais entre as variáveis endógenas são propostas em uma única direção. Quando a relação causal apresenta mais de uma direção o modelo é denominado não recursivo. Nesses modelos existe um movimento de “ida e volta” entre duas variáveis endógenas especificadas e as covariâncias não são nulas entre os termos de perturbação das variáveis endógenas do modelo. Os modelos não recursivos são úteis na análise da maioria dos sistemas dinâmicos presentes nas ciências sociais (AMORIM, 2012).

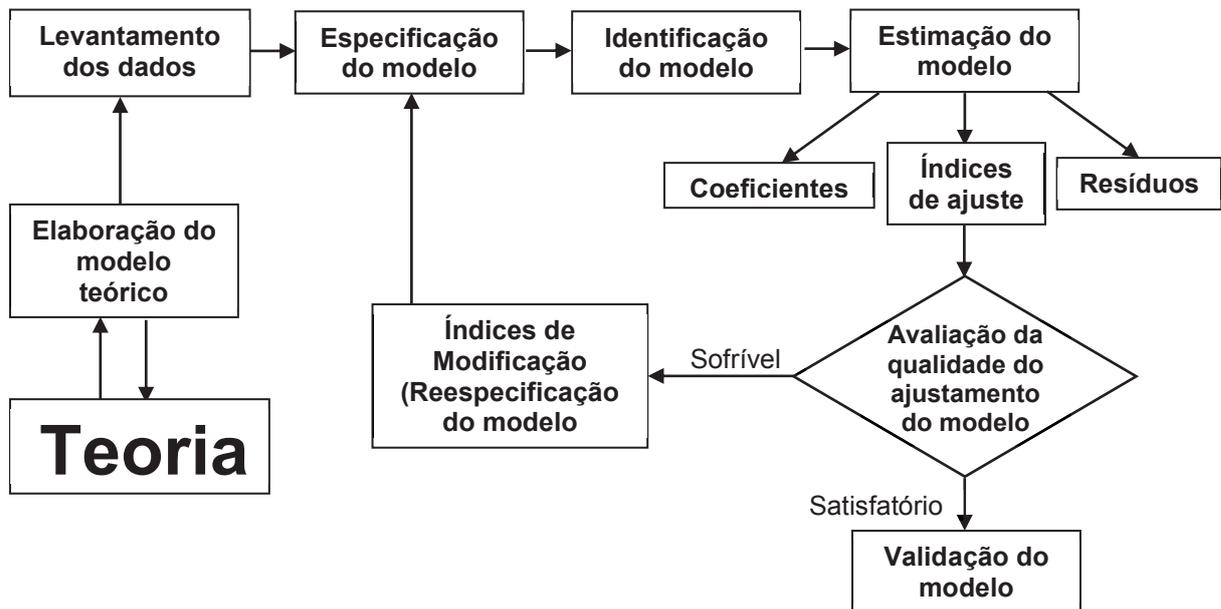
2.1.6 Estágios na Modelagem de Equações Estruturais

Os modelos de equações estruturais com variáveis latentes são problemas que envolvem dois tipos de equações lineares: as equações de medida, que descrevem as relações entre as variáveis observadas e as variáveis latentes e as equações estruturais, que descrevem as relações de dependência entre variáveis latentes (LATTIN *et al.*, 2011). A resolução possui um grau de complexidade elevado e por esse motivo, exige procedimentos pré-estabelecidos que devem ser obedecidos de forma criteriosa. Marôco (2014) destaca algumas etapas, de complexidade crescente e iterativas, dentro do processo de análise de equações estruturais.

Essas etapas são representadas no fluxograma da figura 8.

É importante levar em consideração o fato de que, em qualquer processo de modelagem, o modelo é uma simplificação da situação real e deve ser considerado apenas para a situação problema proposta, podendo ser substituído a qualquer momento dependendo da mudança de cenário e variáveis.

FIGURA 8 – FLUXOGRAMA DAS ETAPAS DE UM PROCESSO DE ANÁLISE POR EQUAÇÕES ESTRUTURAIS



FONTE: O autor (2019)

2.1.6.1 Elaboração do modelo teórico

O conhecimento teórico permite ao investigador fazer a elaboração do modelo teórico que supõe as relações entre as variáveis que os dados irão, ou não, confirmar. O levantamento e a descrição de aspectos teóricos permitem ao pesquisador o desenho de modelos a serem investigados por meio da MEE. Essa etapa do processo refere-se à formulação de hipóteses de relações entre variáveis. A escolha e a definição das relações mais procedentes entre variáveis são relativas à modelagem teórica de uma área do saber e dizem respeito a um aspecto essencial para a especificação e identificação de um modelo estrutural a ser testado (PILATI, 2007).

Todos os modelos considerados em pesquisa primeiro devem se conceituados de acordo com os conhecimentos mais recentes sobre o fenômeno em consideração. Este conhecimento é geralmente obtido via extenso estudo da literatura pertinente, de um estudo cuidadoso de pesquisas anteriores e conhecimento acumulado no respectivo domínio do assunto (RAYKOV, 2006). Embora não exista uma metodologia para provar que uma teoria seja correta e, embora múltiplas teorias possam igualmente descrever os dados, uma teoria incorreta pode ser rejeitada se os dados logicamente (teoricamente) fornecerem um teste razoável da teoria.

A MEE são métodos de modelagem causal que exigem especificações detalhadas de inter-relações entre dados observados e dados hipotéticos e que podem ser colocados em teste

se os pressupostos estatísticos dos métodos são atendidos. Na ausência de teoria ou hipóteses razoáveis, os métodos não podem ser utilizados de forma eficaz.

2.1.6.2 Levantamento dos dados (Tamanho da amostra)

Um dos pontos fortes da modelagem de equações estruturais é sua flexibilidade, que permite o exame de associações complexas, uso de vários tipos de dados e comparações entre modelos alternativos. No entanto, esses recursos da MEE também dificultam desenvolver diretrizes generalizadas sobre os requisitos de tamanho de amostra.

Muitos pesquisadores já desenvolveram o tema e diversos trabalhos já foram publicados sobre o número de observações, por exemplo, Barrett e Kline (1981), Bentler (1987), Jackson (2001), Winter *et al.* (2009) e Xing e Yuan (2017), cabendo ao pesquisador adequar ao seu modelo o melhor dimensionamento, levando em consideração o potencial de variabilidade suficiente para estimar cada parâmetro do modelo, independência das observações, índice de qualidade de ajustamento adequado, o número de parâmetros a estimar, a dimensão das relações esperadas entre as variáveis, entre outros.

Mas vale a pena lembrar que para os modelos de equações estruturais os dados não são as observações individuais de cada sujeito em cada variável, mas sim as variâncias e covariâncias entre as variáveis manifestas (MARÔCO, 2014). O requisito da dimensão da amostra não é equivalente a dimensão da matriz dos dados. A dimensão da matriz dos dados é dada pelo número de elementos não redundantes da matriz de covariância (matriz que, na diagonal principal, apresenta as variâncias das variáveis e fora dela as covariâncias entre as variáveis). Outro fator importante é que, em tamanhos de amostras finitas, observa-se efeitos de amostras finitas. Isso significa que, de uma maneira aproximada, uma amostra aleatória exibe propriedades que não deveriam estar evidenciadas. Então, quantas observações são necessárias para estimar uma matriz de covariância? Muitos responderiam que depende da distribuição dos dados. São muitas as tentativas de se determinar o tamanho adequado de observações (tamanho da amostra) para se obter boas estimativas em MEE. Uma dessas tentativas surge a partir de simulações de Monte Carlo feitas por Boomsma (1982) e Marsh *et al.* (1998), que considerando uma razão r obtida a partir do número de itens ou variáveis manifestas (ou observadas) (p) e de variáveis latentes (ou fatores) (f) do modelo, da forma $r = p/f$, observou-se que para $r = 2$ exigiria um tamanho de amostra de pelo menos 400

observações, para $r = 3$ seriam 200 observações, para $r = 4$, 100 observações e para $r = 12$ seriam adequadas 50 observações.

Assim, ajustando uma curva aos dados Westland (2010) propõe uma fórmula para determinar o tamanho (n) adequado para uma amostra. A fórmula é:

$$n \geq 50r^2 - 450r + 1100 \quad (14)$$

onde:

$$r = p/f .$$

Bentler & Chou (1987) observaram que o tamanho da amostra (n) deveria ser considerado relativo ao número de parâmetros a ser estimados (q), e a razão $n:q$ pode ser considerada 5:1 para dados normalmente distribuídos e de 10:1 para dados com distribuição arbitrária. No entanto, estudos recentes sugeriram que, a medida que aumentamos o número de variáveis, precisamos de fato de um n que seja muito maior que 200 para que a razão de verossimilhança tenha um desempenho esperado.

No campo das ciências sociais, comportamentais e da saúde, muitos atributos não podem ser observados diretamente. Escalas psicológicas, por exemplo, são conhecidas por conter muitos itens e a questão de não ter amostras suficientemente grandes também tem sido uma grande preocupação na Análise Fatorial Exploratória (AFE). No contexto da AFE, as recomendações são bastante variadas, atribuindo valores para n entre 100 e 1000. Considerando o número de observações (n) e o número de variáveis (t), em termos da relação $n:t$, para problemas de análise fatorial exploratória, foi sugerido que precisaria estar entre 1,2 e 10. No entanto, o número de observações depende de outras condições além da razão $n:t$, incluindo a comunalidade e o número de indicadores por fator (DENG *et al.*, 2018). Em resumo, as recomendações sobre os tamanhos de amostra necessários na literatura de MEE e AFE são simplesmente conjecturas *ad hoc*⁴. Embora possam ser baseados em pequenos estudos de simulação com número de observações variados, mas com valores limitados de variáveis, eles não são justificados estatisticamente, nem generalizáveis para condições gerais (YANG *et al.*, 2018). Mais adiante será visto que, conforme o método de estimação, é estipulado empiricamente um número crítico de observações por variável. Além disso, recomenda-se no mínimo entre 3 e 6 variáveis observáveis por construto, podendo o pesquisador selecionar um

⁴ *Ad hoc* é uma expressão latina cuja tradução literal é “para isto” ou “para esta finalidade”. É geralmente empregada sobretudo em contexto jurídico, também no sentido de “para um fim específico”. Disponível em https://pt.wikipedia.org/wiki/Ad_hoc, acesso em 20/01/2019.

número menor de indicadores por construto para controlar o custo de um estudo ou o comprimento de um instrumento de pesquisa.

Na sequência é apresentado um conjunto de suposições sobre os dados que devem ser validadas e sem as quais os resultados do modelo testado podem ficar comprometidos. Os pressupostos mais importantes são:

- a) verificação da normalidade multivariada;
- b) teste de esfericidade de Bartlett;
- c) critério de Kaiser – Meyer – Olkin (KMO);
- d) confiabilidade de uma medida;
- e) ausência de multicolinearidade e
- f) inexistência de *outliers*.

A violação dos pressupostos pode provocar resultados viesados (tendenciosos) no que diz respeito às estimativas dos parâmetros do modelo, bem como dos seus índices de ajuste associados (PEREIRA, 2013). Mesmo os modelos mais complexos e sofisticados são de nenhum uso se as variáveis incluídas no modelo forem mal avaliadas. Um modelo não pode fazer mais do que o que está contido nos próprios dados. Se os dados são pobres, no sentido de refletir substancial falta de confiabilidade na avaliação de aspectos de um fenômeno estudado, os resultados serão pobres, independentemente da particularidade dos modelos usados (RAYKOV, 2006). No Apêndice A é apresentado uma tabela com os pacotes e funções, para uso no software R[®] (R Core Team, 2019), que podem ser utilizados para o cálculo dos valores dos testes e critérios dos pressupostos citados.

2.1.6.2.1 Verificação da hipótese de normalidade multivariada

Segundo Hair *et al.* (2010) a suposição fundamental em análise multivariada é a normalidade, a qual se refere a forma da distribuição de dados para uma variável e sua correspondência com a distribuição normal que é o padrão de referência para vários métodos estatísticos. A normalidade univariada para uma única variável é facilmente testada.

A normalidade multivariada, que seria a combinação de duas ou mais variáveis, significa que as variáveis individuais são normais. No entanto a recíproca não é verdadeira.

A suposição da normalidade dos dados é uma das mais comuns nos métodos de inferência estatística e a que menos provavelmente é válida. É comum que as observações tenham uma distribuição aproximadamente normal. Os resultados dos métodos de inferência

estatística dependem do grau de afastamento da normalidade multivariada que a população apresenta. Apesar de ser mais difícil de verificar, existem testes específicos que podem ser usados para verificação dos dados que apresentam desvios da suposição de normalidade. Uma forma de verificação da normalidade multivariada é feita mediante o uso de testes baseados nos coeficientes de assimetria e curtose, como o teste de Mardia e o teste de Doornik e Hansen (HAIR *et al.*, 2010). Existem outros testes de normalidade multivariada na literatura especializada, no entanto apresentam limitações nas aplicações, isto é, são restritos quanto as dimensões das amostras multivariadas. Para esses testes, o número de variáveis não deve ser maior que o tamanho da amostra e a amostra não deve ultrapassar 5000 dados (BIASE, 2012).

O Teste Monte Carlo de Normalidade Multivariada baseado em Distâncias (TMCNMD) proposto por Biase e Ferreira (BIASE, 2012) não possui restrições quanto ao tamanho da amostra e apresenta-se como uma boa alternativa para testar a normalidade multivariada em um conjunto de valores. A ideia do teste é estimar a proporção de estimativas do coeficiente de determinação, obtidas na distribuição nula, que são iguais ou inferiores a estimativa obtida na amostra original. Se essa proporção (*p-value*) for menor que o valor nominal de significância α , a decisão deve ser de rejeição da hipótese nula H_0 na qual se admite que os dados amostrais seguem uma distribuição normal multivariada, uma vez que o valor original é atípico na distribuição nula obtida sob H_0 (BIASE, 2012). O código deste teste, para o software para o software R[®], desenvolvido por Biase (BIASE, 2011) encontra-se no anexo D.

O código retorna dois valores, o *p-value* e o coeficiente de determinação r^2 calculado a partir da amostra original.

Outro procedimento que pode ser adotado para análise da normalidade multivariada é a construção do gráfico *Q-Q plot* (ou gráfico de probabilidade qui-quadrado). Pela teoria da distribuição normal multivariada, tem-se que, quando o número de elementos amostrais n é grande, a variável dada pelo quadrado das distâncias generalizadas d_j^2 definida da forma

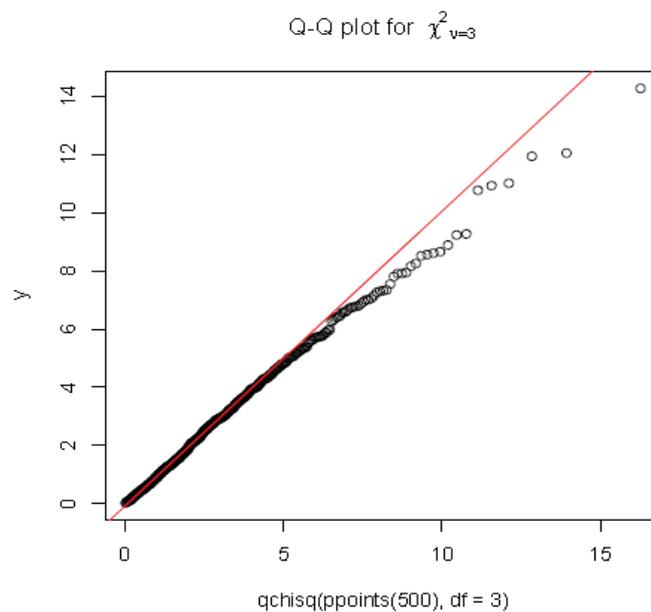
$$d_j^2 = (X_j - \bar{X})' S_{p \times p}^{-1} (X_j - \bar{X}) \quad (15)$$

com $j = 1, 2, \dots, n$

tem aproximadamente uma distribuição qui-quadrado com p graus de liberdade, onde X_j representa os valores observados das p -variáveis do j -ésimo elemento amostral, \bar{X} é o vetor das médias amostrais e $S_{p \times p}$ é a matriz de covariância amostral. Portanto, pode-se comparar os valores das distâncias d_j^2 com as respectivas ordenadas dos percentis da distribuição qui-

quadrado, o que dá origem ao chamado gráfico de probabilidade qui-quadrado (*Q-Q plot*) (MELO, 2013). Quando a normalidade *p*-variada é coerente com os dados amostrais, esse gráfico deve resultar em uma tendência linear. Tendências de não linearidade indicam falta de normalidade. Esse gráfico também é útil para a identificação de valores discrepantes multivariados. No gráfico 1 é apresentado um exemplo de um gráfico de probabilidade *Q-Q plot* para dados multivariados normalmente distribuídos obtido a partir da função *qqnorm* do software R® (R Core Team, 2019).

GRÁFICO 1 – GRÁFICO *Q-Q PLOT* PARA DADOS MULTIVARIADOS NORMALMENTE DISTRIBUIDOS



FONTE: O autor (2019)

Além da análise gráfica também é possível recorrer a alguns outros testes como os de Henze-Zirkler e Royston (KORKMAZ *et al.*, 2014).

Na modelagem de equações estruturais, quando os métodos de estimação do modelo são o de máxima verossimilhança (ML – *Maximum Likelihood*) ou o método dos mínimos quadrados generalizados (GLS – *Generalized Least Square*) é preferível que as variáveis manifestas apresentem distribuição normal multivariada. Esses e outros métodos de estimação serão discutidos posteriormente na seção 2.1.6.5.2. A validação do pressuposto da normalidade multivariada está, geralmente disponível na maioria dos *softwares* de MEE. Segundo Marôco (2014), apesar de existirem testes de normalidade multivariada e se poder assumir, ainda que abusivamente, que se um conjunto de variáveis apresentar distribuição normal univariada então a distribuição condicionada das variáveis é normal multivariada, os testes de ajustamento à

distribuição normal (Kolmogorov-Smirnov, Shapiro-Wilk, Jarque-Bera, por exemplo) não estão implementados na maioria dos *softwares*. Esta ausência é devido ao fato dos testes de ajustamento serem extremamente sensíveis a pequenos desvios à normalidade, apresentando elevadas probabilidades de cometer um erro tipo I (concluir que a variável não tem distribuição normal, quando de fato a distribuição da variável é normal) (MARÔCO, 2014).

2.1.6.2.2 Teste de esfericidade de Bartlett para a matriz de correlação

O ajuste de um modelo de análise fatorial aos dados pressupõe que as variáveis resposta sejam correlacionadas entre si. Desse modo, quando as variáveis são provenientes de uma distribuição normal p -variada, é possível construir testes de hipótese para verificar se a matriz de correlação populacional é próxima ou não da matriz identidade. Este teste é chamado de Teste de Esfericidade e foi proposto por Bartlett em 1954. O mesmo testa a hipótese nula $H_0 : \rho = I$ contra a hipótese $H_1 : \rho \neq I$, sendo ρ a matriz de correlação populacional. A estatística do teste é definida por:

$$T = - \left[n - \frac{1}{6} \cdot (2p + 11) \right] \sum_{j=1}^p \ln(\hat{\lambda}_j) \quad (16)$$

onde:

T é a estatística do teste com uma distribuição aproximadamente qui-quadrado com $gl = \frac{1}{2}p \cdot (p - 1)$ graus de liberdade;

$\hat{\lambda}_j$ são os autovalores da matriz de correlação amostral;

p é o número de variáveis e

n é o tamanho da amostra

Para que o modelo fatorial seja aceitável, é necessário que o teste rejeite a hipótese nula, caso em que o valor observado de T é maior ou igual ao valor crítico da distribuição qui-quadrado para o nível de significância escolhido para o teste, com gl graus de liberdade. Caso contrário, não haverá correlações entre as variáveis a ser modelada (MINGOTI, 2005).

2.1.6.2.3 Critério de Kaiser – Meyer – Olkin (KMO)

O critério de Kaiser-Meyer-Olkin (KMO) é uma estatística que indica a proporção da variância dos dados que pode ser considerada comum a todas as variáveis, ou seja, que pode ser atribuída a um fator comum. Então quanto mais próximo de um (1) melhor o resultado, ou seja, mais adequada é a amostra à aplicação da análise fatorial.

O coeficiente é definido por:

$$KMO = \frac{\sum_{i \neq j} R_{ij}^2}{\sum_{i \neq j} R_{ij}^2 + \sum_{i \neq j} Q_{ij}^2} \quad (17)$$

onde:

R_{ij} é a correlação amostral entre as variáveis X_i e X_j e

Q_{ij} é a correlação parcial entre X_i e X_j .

A correlação parcial entre duas variáveis é a correlação que existe entre elas quando todas as outras ($p - 2$) variáveis são consideradas como constantes. Quando as correlações parciais são próximas de zero, o coeficiente KMO se aproxima de 1, que é equivalente a matriz $R_{p \times p}^{-1}$ estar próxima da diagonal (MINGOTI, 2005). O quadro 3 apresenta uma sugestão de adequação amostral segundo o critério KMO conforme Friel (2009).

QUADRO 3 – ADEQUAÇÃO AMOSTRAL SEGUNDO O CRITÉRIO KMO

KMO	ADEQUAÇÃO AMOSTRAL
> 0,9	Excelente
] 0,8 ; 0,9]	Boa
] 0,7 ; 0,8]	Moderada
] 0,6 ; 0,7]	Medíocre
] 0,5 ; 0,6]	Miserável
< 0,5	Inaceitável

FONTE: FRIEL (2009)

2.1.6.2.4 Confiabilidade de uma medida – Alfa de Cronbach

Ao se efetuar uma mensuração, o chamado erro de medida sempre estará presente tendo em vista que, sua presença é devida a diversas fontes que variam desde a imprecisão dos instrumentos de medida até a falta de habilidade dos respondentes em fornecer informações precisas (HAIR *et al.*, 2010). Assim, erro de medida é o grau que os valores observados não

são representativos dos valores “reais”. A determinação desses erros torna-se um requisito indispensável para todas as investigações, pois a partir disso se pode determinar a consistência dos dados, ou seja, o grau de confiabilidade de uma medida. Consistência interna é uma avaliação da confiabilidade da medição e, um nível alto de consistência interna, indica que os itens projetados para avaliar fornecem pontuações similares.

Normalmente essas medidas envolvem determinar o grau de correlação desses itens e o quão bem eles predizem uns aos outros. McDaniel e Gates (2005) complementam dizendo que a confiabilidade por meio da consistência interna fundamenta-se no conceito de equivalência, que tem a ver com o nível de erro que pode ser introduzido pela utilização de diferentes amostras de itens para se mensurar um fenômeno. Uma das medidas de consistência interna usadas comumente é o alfa de Cronbach, descrito por Lee J. Cronbach (1951).

Seja x_{ij} o i -ésimo escore do j -ésimo respondente, com $i = 1, 2, \dots, p$ e $j = 1, 2, \dots, n$.

Considere um questionário com p itens, respondido por n pessoas, o coeficiente alfa de Cronbach é determinado por:

$$\alpha = \left(\frac{p}{p-1} \right) \left(1 - \frac{\sum_{i=1}^p s_i^2}{s_{soma}^2} \right) \quad (18)$$

onde:

p é o número de indicadores do construto (número de itens);

n é o número de respondentes;

s_i^2 é a variância dos n escores;

s_{soma}^2 é a variância dos totais de escores de cada item

Pode-se obter o valor de alfa padronizado, por meio das variáveis padronizadas da forma:

$$\bar{\alpha} = \frac{p\bar{\rho}}{1+(p-1)\bar{\rho}} \quad (19)$$

onde:

p é o número de itens (variáveis) e

$\bar{\rho}$ é a correlação média entre os p itens.

O limite inferior para o alfa de Cronbach geralmente aceito é 0,70, apesar de poder diminuir para 0,60 em pesquisas exploratórias (HAIR *et al.*, 2010). O quadro 4 apresenta uma sugestão de consistência interna conforme o valor do alfa de Cronbach segundo Landis (1977)

QUADRO 4 – CONSISTÊNCIA INTERNA SEGUNDO O ALFA DE CRONBACH

VALOR DO ALFA	CONSISTÊNCIA INTERNA
> 0,80	Quase perfeito
]0,60 ; 0,80]	Substancial
]0,40 ; 0,60]	Moderado
]0,20 ; 0,40]	Razoável
[0 ; 0,20]	Pequeno

FONTE: LANDIS (1977)

Se o valor for alto, então existe evidência de que os itens medem a mesma construção.

Por outro lado, se o valor do alfa for baixo, os itens não têm muito em comum e não são boas medidas para uma construção. O alfa de Cronbach pode apresentar valores elevados quando afetados por diversos fatores: a variabilidade intra e inter-itens, a homogeneidade de variâncias inter-itens e a dimensão da amostra. Alguns desses aspectos exigem que antes de calcular o valor do alfa, padronizem-se as observações usando as correlações médias entre itens para corrigir a sobre-estimação do alfa provocada pelas covariâncias heterogêneas inter-itens (CURADO *et al.*, 2014). Além do alfa de Cronbach se pode utilizar, para mensurar a consistência interna entre os valores medidos dos itens de um construto, a Confiabilidade Composta e a Variância Média Extraída (HAIR *et al.*, 2010).

2.1.6.2.5 Ausência de multicolinearidade

Na parte estrutural do modelo é importante que as variáveis independentes (exógenas) não se encontrem fortemente correlacionadas (multicolinearidade). Na presença de multicolinearidade, pelo menos uma das variáveis independentes é redundante, inflacionando a estimativa das variâncias dos parâmetros, produzindo coeficientes padronizados superiores a um (1) ou inferiores a um negativo (-1) e podendo ainda causar estimativas de variâncias negativas (MARÔCO, 2014). A avaliação da multicolinearidade pode ser feita por meio do teste de Farrar-Glauber (F-G Test) ou pela estatística do fator de inflação de variância VIF (*Variance Inflation Factor*) que fornece um índice que mede o quanto a variância de um coeficiente de regressão estimado é aumentada por causa de colinearidade.

Para cada variável X_i efetua-se uma nova análise de regressão tomando essa variável como dependente e as demais variáveis X como independentes. Daí resultam correspondentes coeficientes de determinação denotados por r_i^2 e um correspondente VIF dado por

$$VIF_i = \frac{1}{1-r_i^2}. \quad (20)$$

Vários valores para níveis aceitáveis de VIF foram publicados na literatura. Um valor comumente aceitável como nível máximo seja de dez (10) (HAIR et al., 2010; KUTNER et al., 2004; MARQUARDT, 1970; KENNEDY, 2008). No entanto, um valor máximo recomendado de cinco (5) (ROGERSON, 2014) e até quatro (4) (PAN, 2008) podem ser encontrados.

No que diz respeito à multicolinearidade, normalmente não há a necessidade de muita preocupação, até que fique tão extrema que a matriz de covariância observada seja (quase) singular, um problema que deve gerar mensagens de aviso pelo software utilizado para estimar os parâmetros. Nesse caso, uma solução é considerar uma abordagem usando regressão “Ridge” para se obter uma estimativa mais estável dos parâmetros do modelo.

2.1.6.2.6 Inexistência de *outliers*

Segundo Barnett (1994), *outlier* é uma observação que desvia muito de outras observações despertando suspeitas de que são geradas por um mecanismo diferente. Estas observações são também designadas por anormais, discrepantes, extremas ou aberrantes. Em se tratando do espaço multivariado, uma observação é considerada anormal se está muito distante das outras no espaço p-dimensional definido pelas variáveis (BARBOSA *et al.*, 2018).

Segundo Aggarwal (2016), na maioria das aplicações, os dados são criados por um ou mais processos de produção. Quando o processo de geração se comporta de uma maneira incomum resulta na criação de *outliers*. Portanto, um *outlier* muitas vezes contém informações úteis sobre as características anormais dos sistemas e entidades, que impactam no processo de geração de dados. A presença de *outliers* pode inflacionar ou reduzir as covariâncias entre as variáveis e isto pode alterar as expectativas das médias, desvios padrão e covariâncias, comprometendo a qualidade do ajustamento do modelo (MARÔCO, 2014).

No caso de medidas multivariadas geralmente se utiliza a distância de Mahalanobis que é uma estatística que mede a distância de uma observação x_i à média de todas as observações de todas as variáveis \bar{x} . A distância de Mahalanobis entre um grupo de valores com média $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1, \mu_2, \mu_3, \dots, \mu_n)^T$ e a matriz de covariância S para um vetor multivariado $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)^T$ é definida da seguinte forma (JOHNSON, 2007):

$$D_M(x) = \sqrt{(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu})^T S^{-1} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu})} . \quad (21)$$

Além da distância de Mahalanobis existem outras técnicas para detecção de *outliers* em dados multivariados. Barbosa *et al.* (2018) propõe uma técnica de detecção de *outliers* baseada em análise de agrupamento, com resultados superiores ao método utilizando distâncias tanto para sensibilidade quanto para especificidade. Mas se deve ter cuidado ao eliminar observações ou até mesmo variáveis com um comportamento *outlier*, principalmente na modelagem causal, pois o viés causado pela ‘perda’ das informações pode ser mais prejudicial do que o resultado de uma estratégia de ajuste alternativo.

2.1.6.3 Especificação do modelo

A especificação do modelo consiste no desenho formal do modelo teórico sob estudo.

Utiliza-se para isso um diagrama de caminhos, onde são indicadas as relações entre as variáveis presentes no modelo (Ver figura 1, p. 32). Convém observar que, dependendo do modelo adotado (modelo de medida ou modelos estruturais) existem regras para a especificação, como por exemplo, é necessário decidir quais variáveis manifestas operacionalizam variáveis latentes, que relações causais entre variáveis latentes e/ou manifestas devem ser incluídas ou excluídas, e em relação aos erros (ou resíduos), quais devem ser correlacionados. Dois erros importantes podem ser cometidos nessa fase e que são críticos para o processo. O modelo pode ter mais variáveis ou relações entre variáveis do que se pode estimar pelos dados (matriz de covariância das variáveis manifestas) ou o modelo tem menos variáveis do que aquelas necessárias para explicar a variabilidade das variáveis endógenas. Tais erros podem impedir a obtenção das estimativas dos parâmetros ou podem produzir estimativas erradas.

2.1.6.4 Identificação do modelo

Antes de estimar os parâmetros do modelo deve-se verificar a capacidade do modelo para estimar a estrutura correlacional observada nas variáveis sob estudo. Um modelo estatístico é identificado quando os seus parâmetros podem ser expressos como funções independentes das informações conhecidas e que estão disponíveis (MENDES, 2006).

Relativamente ao grau de identificação, os modelos de equações estruturais podem ser classificados em 3 tipos conforme seu (s) grau (s) de liberdade, depois que todos os parâmetros a serem estimados são especificados:

- a) modelos indeterminados ou subidentificados (grau de liberdade negativo),
- b) modelos determinados ou saturados (grau de liberdade igual a zero) e
- c) modelos sobreidentificados ou sobresaturados (grau de liberdade superior a zero).

Graus de liberdade (gl) são a quantidade de informações que seus dados fornecem que você pode “gastar” para estimar os valores de parâmetros desconhecidos, e calcular a variabilidade dessas estimativas. Lembrando que grau de liberdade é igual a informação presente nas variáveis manifestas (variância e covariâncias) menos o número de parâmetros a estimar, dado pela fórmula (MARÔCO, 2014)

$$gl = \left[\frac{(p+q)(p+q+1)}{2} \right] - t = \frac{n^2+n}{2} - t \quad (22)$$

onde:

p é o número de variáveis dependentes observadas;

q é o número de variáveis independentes observadas;

$n = p + q$ e

t é o número de parâmetros a estimar

– Modelos indeterminados ou subidentificados (*under-identified*): Quando se tem o número de parâmetros a estimar superior a informação presente nas variáveis manifestas, tendo um grau de liberdade negativo. O problema tem infinitas soluções e, portanto, não é ajustável.

A solução para esse problema seria fixar ou restringir um ou mais parâmetros livres ou adicionar mais informações (variáveis manifestas).

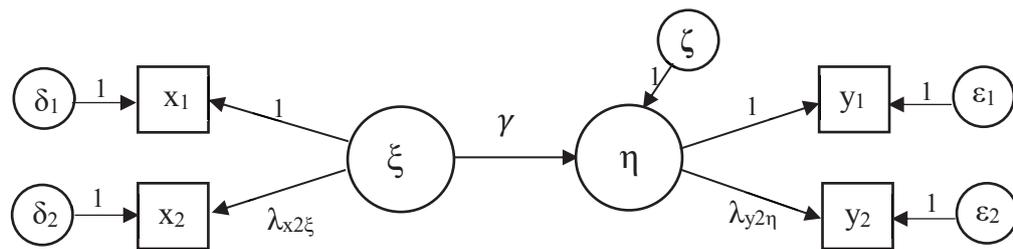
– Modelos determinados, identificados ou saturados (*just-identified*): Quando se tem o número de parâmetros a estimar igual ao número de elementos não redundantes da matriz de covariância (ou correlação), tendo um grau de liberdade igual a zero. Um problema nos modelos identificados é que, ao se calcular as estimativas usa-se toda a informação disponível e, portanto, não será possível avaliar a significância do modelo. Esses modelos podem apresentar problemas de convergência numérica durante o ajustamento. Uma solução seria restringir ou fixar mais um parâmetro livre ou adicionar uma variável manifesta.

– Modelos sobre-determinados, sobre-identificados ou sobresaturados (*over-identified*): Quando se tem o número de parâmetros a estimar menor que o número de elementos não

redundantes da matriz de covariância (ou correlação), tendo um grau de liberdade maior que zero. Apesar da solução não ser perfeita nos modelos sobreidentificados, a imposição de restrições aos parâmetros permite testar hipóteses sobre o modelo.

Por exemplo, considerando o modelo da figura 9 com duas variáveis latentes e duas variáveis manifestas para cada variável latente, o grau de liberdade fica assim determinado.

FIGURA 9 – MODELO DE EQUAÇÕES ESTRUTURAIS



FONTE: MARÔCO (2014)

Tem-se 4 variáveis observáveis, sendo assim as variâncias e covariâncias conhecidas são: $Var(x_1)$, $Var(x_2)$, $Var(y_1)$, $Var(y_2)$, $Cov(x_1, x_2)$, $Cov(y_1, y_2)$, $Cov(x_1, y_1)$, $Cov(x_1, y_2)$, $Cov(x_2, y_1)$ e $Cov(x_2, y_2)$, ou seja, 10 informações conhecidas.

Já o vetor de parâmetros a estimar é

$$\hat{\theta}' = [\lambda_{x_2\xi} \quad \lambda_{y_2\eta} \quad \gamma \quad V(\xi) \quad V(\varepsilon_1) \quad V(\varepsilon_2) \quad V(\delta_1) \quad V(\delta_2) \quad V(\zeta)] \quad (9 \text{ parâmetros do modelo})$$

Nesse caso temos que o grau de liberdade é $gl = 10 - 9 = 1$. O modelo é sobreidentificado. Marôco (2014) destaca o problema de subidentificação empírica que pode ocorrer quando um parâmetro tem um valor próximo de zero e o processo iterativo da estimação do modelo pode eliminar esse parâmetro ou quando duas variáveis manifestas são fortemente colineares fazendo com que as estimativas dos parâmetros se tornem instáveis. Além disso destaca algumas dicas para lidar com a indeterminação e/ou saturação do modelo a saber:

- fixar pelo menos um dos coeficientes entre uma variável latente e os seus indicadores;
- fixar a variância de uma ou mais variáveis latentes;
- ter pelo menos 3 ou 4 indicadores por variável latente;
- simplificar o modelo igualando trajetórias entre si;
- reduzir o número de variáveis latentes, eliminar variáveis manifestas colineares;
- eliminar trajetórias de *feedback*;

- g) fixar parâmetros;
- h) aumentar o número da amostra e
- i) aumentar o número de iterações ou usar outro método de estimação.

O problema de identificação consiste em verificar se o vetor de parâmetros θ será exclusivamente determinado por $\Sigma = \Sigma(\theta)$, onde Σ é a matriz de covariância com $\delta_{ij} = \delta_{ij}(\theta)$ sendo um elemento dessa matriz que corresponde a covariância entre a variável da linha i com a variável da coluna j . O modelo é dito identificado se para quaisquer dois vetores θ_1 e θ_2 , com $\theta_1 \neq \theta_2$ implica em $\Sigma(\theta_1) \neq \Sigma(\theta_2)$. Caso o modelo não for completamente identificado, restrições poderão ser impostas à θ para garantir a identificação, podendo afetar a interpretação dos resultados do modelo. Existem ainda métodos de identificação baseados na Matriz de Informação de Fisher. Se a matriz é positiva-definida então o modelo é identificado, e se a matriz for singular, então o modelo será não identificado. Como a identificação pelo método algébrico resulta em muitos cálculos dispendiosos, criou-se um conjunto de regras para serem seguidas, a fim de garantir a identificação do modelo, como por exemplo a regra da contagem (*counting rule*), a regra recursiva (*recursive rule*), a regra dois-passos, a regra 3 indicadores, a regra 2 indicadores e a regra B-nula (MENDES, 2006)

2.1.6.5 Estimação dos modelos

2.1.6.5.1 Matrizes de Covariâncias

Dado que η e ξ são constituídos por variáveis latentes, o modelo de equações estruturais não pode ser verificado diretamente. Entretanto, como na análise fatorial, o modelo e seus pressupostos implicam certa estrutura de covariância que pode ser checada (LOESCH, 2012). Assim, seja Z o vetor aleatório das variáveis indicadoras de dimensão $(p + q) \times 1$, tem-se que $Z' = [y'_{p \times 1} : x'_{q \times 1}]$. Considerando ainda as equações que definem os submodelos de medida e estrutural e ainda as matrizes de covariância

$$Cov(\zeta) = E(\zeta\zeta') = \Psi \text{ de ordem } r \times r \text{ (covariância entre os erros } \zeta\text{'s),}$$

$$Cov(\epsilon) = E(\epsilon\epsilon') = \Theta_\epsilon \text{ de ordem } p \times p \text{ (covariância entre os erros } \epsilon\text{'s),}$$

$$Cov(\delta) = E(\delta\delta') = \Theta_\delta \text{ de ordem } q \times q \text{ (covariância entre os erros } \delta\text{'s) e}$$

$$Cov(\xi) = E(\xi\xi') = \Phi \text{ de ordem } s \times s \text{ (covariância entre os } \xi\text{'s)}$$

Então a matriz de covariância populacional Σ de ordem $(p + q) \times (p + q)$ é dada por

$$\Sigma(\boldsymbol{\theta}) = E(\mathbf{ZZ}') = \begin{bmatrix} V(\mathbf{y}) & Cov(\mathbf{yx}) \\ Cov(\mathbf{xy}) & V(\mathbf{x}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma_{yy} & \Sigma_{yx} \\ \Sigma_{xy} & \Sigma_{xx} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E(\mathbf{yy}') & E(\mathbf{yx}') \\ E(\mathbf{xy}') & E(\mathbf{xx}') \end{bmatrix} \quad (23)$$

Adotando $\boldsymbol{\eta} = (\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1} \cdot (\Gamma\xi + \zeta)$, sendo \mathbf{I} a matriz identidade, pode-se demonstrar que:

$$\begin{aligned} E(\boldsymbol{\eta}\boldsymbol{\eta}') &= E\{(\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1} (\Gamma\xi + \zeta) [(\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1} (\Gamma\xi + \zeta)]'\} \\ &= E\{(\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1} \cdot (\Gamma\xi + \zeta) (\xi'\Gamma' + \zeta') [(\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1}]\}' \\ &= E\{(\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1} (\Gamma\xi\xi'\Gamma' + \Gamma\xi\zeta' + \zeta\xi'\Gamma' + \zeta\zeta') [(\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1}]\}' \\ &= (\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1} E\{(\Gamma\xi\xi'\Gamma' + \Gamma\xi\zeta' + \zeta\xi'\Gamma' + \zeta\zeta')\} [(\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1}]' \\ &= (\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1} \{E(\Gamma\xi\xi'\Gamma') + E(\Gamma\xi\zeta') + E(\zeta\xi'\Gamma') + E(\zeta\zeta')\} [(\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1}]' \\ &= (\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1} \{\Gamma E(\xi\xi')\Gamma' + \Gamma E(\xi\zeta') + E(\zeta\xi')\Gamma' + E(\zeta\zeta')\} [(\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1}]' \end{aligned}$$

$$\text{assim tem-se que } E(\boldsymbol{\eta}\boldsymbol{\eta}') = (\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1} (\Gamma\Phi\Gamma' + \Psi) [(\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1}]' \quad (24)$$

De maneira análoga podemos demonstrar que

$$\begin{aligned} \Sigma_{yy} = E(\mathbf{yy}') &= E[(\Lambda_y\boldsymbol{\eta} + \boldsymbol{\varepsilon})(\Lambda_y\boldsymbol{\eta} + \boldsymbol{\varepsilon})] \\ &= \Lambda_y [(\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1} (\Gamma\Phi\Gamma' + \Psi) [(\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1}]'] \Lambda_y' + \Theta_\varepsilon; \end{aligned} \quad (25)$$

$$\Sigma_{yx} = E(\mathbf{yx}') = E[(\Lambda_y\boldsymbol{\eta} + \boldsymbol{\varepsilon})(\Lambda_x\xi + \boldsymbol{\delta})] = \Lambda_y (\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1} \Gamma\Phi\Lambda_x'; \quad (26)$$

$$\Sigma_{xy} = \Sigma'_{yx} \leftrightarrow \Sigma_{xy} = \Lambda_x \Phi \Gamma' (\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1} \Lambda_y' \quad e \quad (27)$$

$$\Sigma_{xx} = E(\mathbf{xx}') = E[(\Lambda_x\xi + \boldsymbol{\delta})(\Lambda_x\xi + \boldsymbol{\delta})] = \Lambda_x \Phi \Lambda_x' + \Theta_\delta \quad (28)$$

Dessa forma, vê-se que todas as matrizes de covariâncias são dependentes do vetor de parâmetros desconhecidos $\boldsymbol{\theta} = (\mathbf{B}, \Gamma, \Lambda_x, \Lambda_y, \Psi, \Theta_\varepsilon, \Theta_\delta, \Phi)$ e substituindo os resultados encontrados em (23) tem-se:

$$\Sigma(\boldsymbol{\theta}) = \begin{bmatrix} \Lambda_y (\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1} (\Gamma\Phi\Gamma' + \Psi) (\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1} \Lambda_y' + \Theta_\varepsilon & \Lambda_y (\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1} \Gamma\Phi\Lambda_x' \\ \Lambda_x \Phi \Gamma' (\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1} \Lambda_y' & \Lambda_x \Phi \Lambda_x' + \Theta_\delta \end{bmatrix} \quad (29)$$

que fornece a matriz de covariância das variáveis manifestas na população.

2.1.6.5.2 Estimação dos Parâmetros

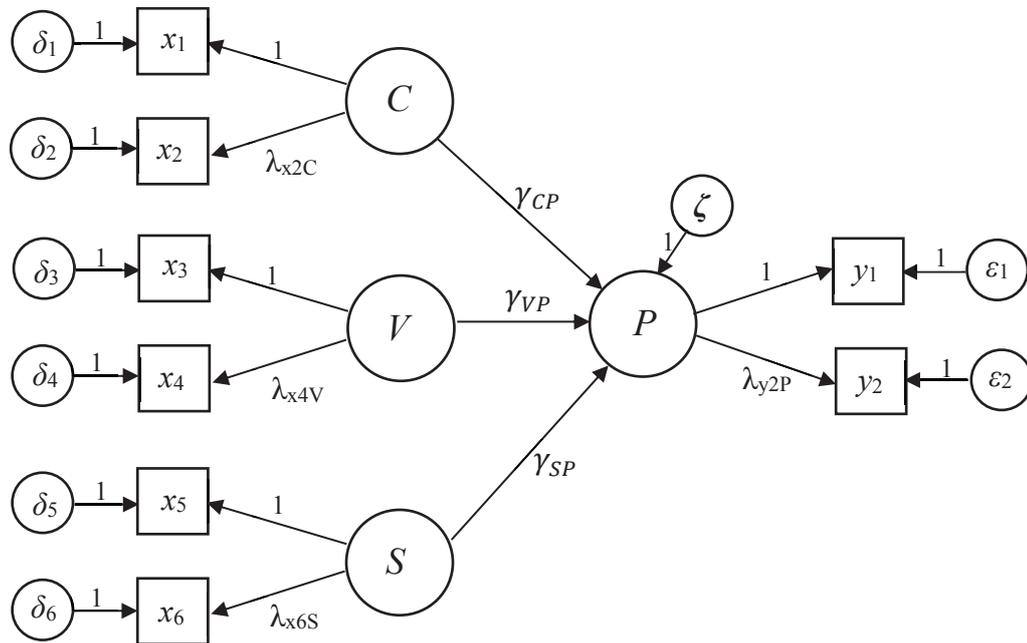
A forma mais frequente de estimar parâmetros em MEE é pela análise da estrutura de covariância, onde os parâmetros do modelo são estimados minimizando uma função de distância entre a covariância amostral e as covariâncias implícitas no modelo. Métodos tradicionais de análise de variância fazem forte suposição sobre homogeneidade de correlações e covariância a fim de fazer inferências sobre meios sem dificuldades indevidas (BENTLER, 1978). A estrutura definida em (29) é um modelo teórico para determinar os parâmetros do modelo. O objetivo desta etapa é encontrar um vetor $\hat{\theta}$ de estimativas dos parâmetros do modelo que produza uma matriz de covariâncias $\Sigma(\hat{\theta})$ que reproduza a matriz $\Sigma(\theta)$ das covariâncias das variáveis manifestas na população (MARÔCO, 2014). Como trabalhamos com amostras e não com populações, a matriz Σ é estimada pela matriz S de covariâncias amostrais.

Considerando a matriz S de covariâncias amostrais entre as variáveis indicadoras, das observações disponíveis, deve-se obter estimativas dos parâmetros no vetor θ de forma que a matriz $\Sigma(\hat{\theta})$ se aproxime o mais possível de S , ou seja

$$S = \Sigma(\hat{\theta}) \leftrightarrow \begin{bmatrix} S_{yy} & S_{yx} \\ S_{xy} & S_{xx} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma_{yy}(\hat{\theta}) & \Sigma_{yx}(\hat{\theta}) \\ \Sigma_{xy}(\hat{\theta}) & \Sigma_{xx}(\hat{\theta}) \end{bmatrix} \quad (30)$$

Esta aproximação é obtida mediante métodos numéricos exatos ou quase exatos de equações diferenciais e minimização de algumas funções de discrepância que serão mencionadas posteriormente (LOESCH, 2012). Para ilustrar a complexidade do processo de estimação consideremos o modelo de equações estruturais adaptado do estudo de Warren, White e Fuller (1974 *apud* MARÔCO 2014) que estabelece um modelo de Performance de Gestores (P) em função de três construtos: Conhecimento (C), Valor (V) e Satisfação (S) como ilustra a figura 10.

FIGURA 10 – MODELO DE PERFORMANCE DE GESTORES



FONTE: O AUTOR (2019)

As equações estruturais do modelo da figura 10 são:

$$\begin{cases} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ \lambda_{x2C} \end{bmatrix} C + \begin{bmatrix} \delta_1 \\ \delta_2 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ \lambda_{x4V} \end{bmatrix} V + \begin{bmatrix} \delta_3 \\ \delta_4 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} x_5 \\ x_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ \lambda_{x6S} \end{bmatrix} S + \begin{bmatrix} \delta_5 \\ \delta_6 \end{bmatrix} \end{cases} \quad \text{e} \quad \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ \lambda_{y2P} \end{bmatrix} P + \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \end{bmatrix} \quad (31)$$

Sendo as matrizes (diagonais) dos erros (não correlacionados), da forma:

$$\begin{aligned} \text{diag}(\Theta_\varepsilon) &= \{V(\varepsilon_1), V(\varepsilon_2)\} \text{ e} \\ \text{diag}(\Theta_\delta) &= \{V(\delta_1), V(\delta_2), V(\delta_3), V(\delta_4), V(\delta_5), V(\delta_6)\} \end{aligned} \quad (32)$$

O vetor $\hat{\theta}$ dos parâmetros a estimar é

$$\hat{\theta}' = [\lambda_{x2C} \ \lambda_{x4V} \ \lambda_{x6S} \ \lambda_{y2P} \ \gamma_{CP} \ \gamma_{VP} \ \gamma_{SP} \ V(C) \ V(V) \ V(S) \ V(\varepsilon_1) \ V(\varepsilon_2) \ V(\delta_1) \ V(\delta_2) \ V(\delta_3) \ V(\delta_4) \ V(\delta_5) \ V(\delta_6) \ V(\zeta)] \quad (33)$$

sendo $(p + q).(p + q + 1)/2 = (8.9)/2 = 36$ e $t = 19$, o modelo é sobreidentificado com grau de liberdade $gl = 36 - 19 = 17$.

a matriz $\Sigma(\hat{\theta})$ e S do tipo $F(S, \Sigma(\hat{\theta}))$, com $F \geq 0$ sendo chamada de função de discrepância (distância) entre $\Sigma(\hat{\theta})$ e S . A matriz $E = S - \Sigma(\hat{\theta})$ é denominada matriz residual.

Se o modelo de equações estruturais estiver ‘correto’, os dados ‘gerados’ pelo modelo são suficientemente próximos dos dados observados, e o erro do modelo será mínimo.

Tomando-se uma estimativa inicial para os parâmetros denotada por $\hat{\theta}^1$, e gerando sucessivamente novas estimativas denotadas por $\hat{\theta}^2, \hat{\theta}^3, \dots$ dentro do espaço paramétrico permitido de tal forma que $F(\hat{\theta}^{n+1}) < F(\hat{\theta}^n)$, este processo continua até que a convergência seja obtida. Quanto menor for o valor de F melhor será o ajustamento do modelo teórico aos dados observados. O ajuste perfeito se dá quando o valor de $F(S, \Sigma(\hat{\theta})) = 0$, ou seja, quando $S = \Sigma(\hat{\theta})$. Os métodos de estimação clássicos normalmente empregados em MEE para realizar os ajustes são: Mínimos Quadrados Não Ponderados (ULS – *Unweighted Least Squares*), Mínimos Quadrados Generalizados (GLS – *Generalized Least Square*) e Máxima Verossimilhança (ML – *Maximum Likelihood*), sendo esse último, o mais popular.

i) Mínimos Quadrados Não Ponderados (ULS – *Unweighted Least Squares*) é uma técnica de otimização Matemática que procura encontrar o melhor ajuste para um conjunto de dados tentando minimizar a soma dos quadrados dos resíduos que são os elementos da matriz $E = S - \Sigma(\hat{\theta})$. É um método consistente, mas não é assintoticamente eficiente, isto é, a variância das estimativas não diminui à medida que aumenta a dimensão da amostra (n). A função de discrepância (de distância, ou de ajuste) do método é dada por (MARÔCO, 2014)

$$F_{ULS} = \frac{1}{2} \text{tr} (S - \Sigma(\hat{\theta}))^2 \quad (38)$$

ii) Mínimos Quadrados Generalizados (GLS – *Generalized Least Square*) é uma técnica para estimar parâmetros desconhecidos num modelo de regressão linear. É aplicado quando a variância dos erros não é a mesma (heteroscedasticidade), ou quando há certa correlação entre os resíduos. É um método iterativo que estima os parâmetros ponderando os erros de estimação com pesos correspondentes ao inverso da matriz de covariância amostral. O método tem as mesmas propriedades assintóticas, do método de máxima verossimilhança (ML), de consistência e eficiência, porém pode ser usado com suposições menos restritivas quanto a normalidade dos dados. Entretanto não é mais utilizado que o método ML, pois tem maiores probabilidades do erro tipo I no teste qui-quadrado. A função de discrepância do método é dada por:

$$F_{GLS} = \frac{1}{2} \text{tr} (S - \Sigma(\hat{\theta})) \cdot W^{-1})^2 \quad (39)$$

Nota-se que a discrepância entre a matriz de covariância obtida e a matriz de covariância implícita pelo modelo ($S - \Sigma(\hat{\theta})$) é minimizada por W . Embora qualquer W possa ser escolhido para matriz de peso, mas comumente, o inverso da matriz de covariância S é usada em pacotes computacionais. Como a função é simples, outras matrizes de peso podem ser usadas na tentativa de corrigir as violações de suposição distributiva (MARÔCO, 2014).

iii) Máxima Verossimilhança (ML – *Maximum Likelihood*) é o método mais utilizado na prática, independentemente da distribuição dos dados. Isso ocorre porque não há muitas distribuições multivariadas para escolher e normalmente não conhecemos as distribuições de população. O método estima os parâmetros que maximizam a verossimilhança de observar a matriz de covariâncias amostrais. Ele produz estimativas dos parâmetros centradas e consistentes, à medida que a dimensão da amostra aumenta, aproximando-se do verdadeiro valor do parâmetro, com distribuição normal. Preferivelmente se exige normalidade multivariada das variáveis manifestas ou que $S \sim W_p(V, n)$ (distribuição Wishart), mas também pode ser usada em dados que não apresentam normalidade multivariada. Em relação a função de discrepância, o método de estimação por máxima verossimilhança possui duas abordagens.

Seja Σ^* a verdadeira matriz de covariância populacional, então temos, a função de discrepância populacional que é definida por:

$$F_{ML}(\Sigma^*, \Sigma(\hat{\theta})) = \log |\Sigma(\hat{\theta})| + \text{tr}(\Sigma^* \Sigma(\hat{\theta})^{-1}) - \log |\Sigma^*| - (p + q) \quad (40)$$

e a função de discrepância amostral dada por

$$F_{ML}(S, \Sigma(\hat{\theta})) = \log |\Sigma(\hat{\theta})| + \text{tr}(S \Sigma(\hat{\theta})^{-1}) - \log |S| - (p + q) \quad (41)$$

onde

q é o número de variáveis indicadoras exógenas e

p é o número de variáveis indicadoras endógenas.

Quando os dados são normais multivariados, as estimativas de parâmetros obtidas minimizando (41) são assintoticamente eficientes: têm a menor variabilidade de amostragem possível em grandes amostras.

Estudos mostraram que a metodologia ML não é muito afetada pela falta de normalidade multivariada, mas tem seus valores alterados com o aumento da curtose multivariada (BROSSEAU-LIAR, 2012). As funções de discrepâncias apresentadas são minimizadas em relação a $\hat{\theta}$ e na ausência de uma solução analítica, este processo pode ser realizado numericamente por meio de métodos computacionais tais como, o *Scoring* de Fisher, o Algoritmo de Newton-Raphson e também alguns procedimentos bayesianos podem ser aplicados com bastante frequência (ANDRADE, 2000). De um modo geral parte-se de uma solução inicial, que pode ser formada pelas cargas e variâncias dos erros da análise fatorial por componentes principais sobre os dois submodelos de mensuração; e recalculam-se os parâmetros, um por vez, mediante métodos iterativos até que uma precisão numérica pré-estabelecida seja alcançada (LOESCH, 2012).

Sob a hipótese de o vetor de observações apresentar distribuição normal multivariada e o tamanho da amostra ser “suficientemente grande”, os métodos GLS e ML produzirão estimativas não-viesadas e consistentes para os parâmetros, F_{ML} é assintoticamente equivalente a F_{GLS} , o que significa que, a medida que o tamanho da amostra aumenta, elas são aproximadamente iguais, no entanto, ambos os métodos requerem que a matriz de covariância S seja positiva-definida (MENDES, 2006). Mas devido a frequência de utilização de variáveis ordinais e de variáveis com diferentes graus de afastamento em relação a normalidade em aplicações de MEE, uma questão relevante é até que ponto a violação do pressuposto da normalidade afeta a qualidade dos resultados, quer ao nível da avaliação da qualidade do ajustamento do modelo, ponto de interesse desse trabalho, quer ao nível das estimativas e significância dos parâmetros do modelo. É frequente, quando não se verifica o pressuposto da normalidade, recomendar a utilização de métodos de estimação que não exigem a normalidade multivariada (ver quadro 5). Contudo, estudos de simulação tem demonstrados que estes métodos produzem resultados apropriados apenas para amostras muito grandes (maiores que 2000). Para as amostras de dimensão comum em MEE, as estimativas dos índices de qualidade do ajustamento e dos parâmetros, obtidas com o método WLS, são muito piores do que aquelas obtidas com o método ML. Em suma, se o pressuposto da normalidade multivariada for verificado, o método ML produz resultados eficientes e consistentes. Somente para condições de extrema violação da normalidade é que a qualidade dos índices de ajustamento e das estimativas dos parâmetros são questionáveis (MARÔCO, 2014). No quadro 5 é apresentada uma síntese dos principais métodos de estimação disponíveis na aplicação da técnica de modelagem de equações estruturais e sua premissa em relação a normalidade dos dados.

QUADRO 5 – PRINCIPAIS MÉTODOS DE ESTIMAÇÃO DISPONÍVEIS NA APLICAÇÃO DA TÉCNICA DE MEE.

Método	Sigla	Premissa de normalidade da distribuição	Tamanho da amostra
Máxima Verossimilhança	ML	Normalidade multivariada	200 a 400 casos
Mínimos Quadrados Elípticos	ERLS	Não exige normalidade multivariada	200 a 500 casos (distribuição normal) > 2500 casos (distribuição não normal)
Mínimos Quadrados Generalizados Arbitrários	AGLS	Não exige normalidade multivariada	> = 2000 casos
Mínimos Quadrados Balanceados Diagonalmente	DWLS	Não exige normalidade multivariada	> = 400 casos
Mínimos Quadrados Generalizados	GLS	Não exige normalidade multivariada	200 a 500 casos (distribuição normal) > 2500 casos (distribuição não normal)
Distribuição Assintoticamente Livre (ou Mínimos Quadrados Ponderados)	ADF	Não exige normalidade multivariada	200 a 500 casos
Máxima Verossimilhança Robusta	RML	Não exige normalidade multivariada	> = 400 casos
Mínimos Quadrados Balanceados	WLS	Não exige normalidade multivariada	> = 2000 casos
Mínimos Quadrados Ordinários	OLS	Não exige normalidade multivariada	Não definido

FONTE: Adaptado de PREARO *et al.* (2011)

2.1.6.5.3 Considerações sobre a não normalidade dos dados e a escolha do método de estimação dos parâmetros

Devido a utilização de variáveis que não apresentam normalidade multivariada em aplicações de MEE, algumas pesquisas, incluindo trabalhos de simulação, discutiram o desempenho dos métodos de estimação face a não normalidade dos dados e a especificação incorreta dos modelos. A escolha do método de estimação, para uso em dados não normalmente multivariados, pode afetar os índices de ajustamento do modelo e o viés dos parâmetros, para diferentes tamanhos de amostra, e dados com diferentes tipos de curtose.

Como já mencionado, se os dados observados não apresentarem normalidade multivariada sugere-se a utilização, para estimação dos parâmetros, de um método que não exija tal pressuposto, como no caso os métodos ADF, OLS ou WLS.

Também deve ser considerado o fato de que, a não normalidade dos dados, pode inflacionar o valor da estatística χ^2 comprometendo assim os índices de qualidade de ajustamento que dependem desse valor, como no caso o GFI e o RMSEA (MARÔCO, 2014).

Uma das alternativas para revolver esse problema é a aplicação da correção de Satorra-Bentler (SATORRA, 1994) para corrigir o teste, forçando a normalidade e melhorando as estimativas. O pacote SBSDiff (MANN, 2018) calcula um teste qui-quadrado de Satorra-

Bentler entre modelos aninhados⁵ que foram estimados usando a máxima verossimilhança (ML) com erros padrão robustos, que não podem ser calculados da maneira tradicional. Também é possível calcular a escala de correção de Satorra-Bentler usando o programa SBDIFF.exe (CRAWFORD, 2003) e uma calculadora on-line⁶, para usuários dos *softwares* EQS e *MPlus*.

No trabalho de Gronneberg e Foldnes (2016) os autores descrevem que o procedimento de Sattora-Bentler é inconsistente para pequenas amostras. No anexo B apresenta-se a definição da correção de escala de Satorra-Bentler usada no teste qui-quadrado. Outra alternativa para o uso de dados não mornalmente distribuídos no processo de estimação por ML é uma escala de correção proposta por Brosseau-Liar, Savalei e Li (2012) para o índice de ajustamento RMSEA e outra também proposta por Brosseau-Liar e Savalei (2014) para o índice de ajustamento comparativo CFI e o índice de Tucker-Lewis TLI.

Todos os procedimentos possuem alta complexidade para implementação computacional. Trabalhos futuros poderão explorar a implementação computacional dos ajustes citados e/ou seu uso em estimativas de parâmetros para dados não normalmente variados. No trabalho de Foss, Jöreskog e Olsson (2011), os autores avaliam o efeito da curtose sobre o teste qui-quadrado com correção de Satorra-Bentler, mostrando que, para um dado tamanho de amostra, a estatística tende a decrescer com o aumento da curtose. A consequência prática disso é que os modelos que não são aceitos, tendem a ser pelo teste qui-quadrado se a curtose é grande, principalmente em modelos mal especificados.

Estudos de simulação têm demonstrado que os métodos de estimação que não exigem normalidade, como por exemplo o WLS, produzem resultados apropriados apenas para amostras muito grandes (maiores que 2000) e modelos ligeiramente mal especificados. Já para amostras de dimensão comum em MEE, as estimativas dos índices de qualidade de ajustamento e dos parâmetros obtidas com o método WLS são muito piores do que aquelas obtidas com o método ML (OLSSON, 2000). Os resultados das simulações nos trabalhos de Olsson *et. al.* (2003) mostram que o método de estimação ML em comparação com o método WLS, sob condições de especificação indevida fornecem índices mais realistas de ajuste geral e que o método ADF é afetado pela curtose nos dados observados (quanto maior a curtose, menor a probabilidade de ajuste). Em geral, os efeitos da não normalidade no resultado baseado em ML dependem de sua extensão; quanto maior a não-normalidade, maior o impacto nos resultados.

⁵ Modelos aninhados concorrentes em MEE são comparados com base em uma estatística de diferença de qui-quadrados ($\Delta\chi^2$). Podem ser obtidos acrescentado ou eliminando um caminho estrutural, com o mesmo processo seguido no cálculo de diferenças em χ^2 e graus de liberdade (HAIR *et al.*, 2010)

⁶ Disponível em: <<http://www.uoguelph.ca/~scolwell/diffest.html>>, acesso em 01 Jun. 2018.

Sendo assim quatro índices são tipicamente utilizados para avaliar a distribuição: a assimetria univariada (sk), curtose univariada (ku), a assimetria multivariada (sk_M) e curtose multivariada (ku_M). Os índices univariados são definidos da seguinte forma:

$$sk = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^3}{ns^3} \quad \text{e} \quad ku = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^4}{ns^4} - 3 \quad (42)$$

onde

\bar{x} é a média das variáveis

s é o desvio padrão das variáveis

n é a dimensão da amostra.

Note que o desvio padrão é calculado usando n e não $(n - 1)$, mas para a dimensão das amostras usadas em MEE, a diferença computacional é irrelevante. No caso da curtose, para uma distribuição normal padrão o valor é três (3), por essa razão algumas fontes costumam usar a definição acima, muitas vezes referida como "excesso de curtose". Não há consenso claro sobre um grau aceitável de não-normalidade. Estudos examinando o impacto da normalidade univariada em resultados baseados em ML sugerem que os problemas podem ser precisos quando a assimetria univariada e a curtose univariada se aproximam dos valores de dois (2) e sete (7), respectivamente. Além disso, não existe um valor de corte geralmente aceito de curtose multivariada que indique não-normalidade (FINNEY, 2006).

Convém lembrar que a assimetria e a curtose não confirmam ou ratificam a normalidade. Em casos de amostras grandes poderia se usar o teorema do limite central multivariado como argumento para a normalidade dos dados de um modelo. Dada uma coleção de vetores aleatórios $\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \dots, \mathbf{X}_k$ que são independentes e distribuídos de forma idêntica, o vetor médio da amostra, $\bar{\mathbf{X}}$, se aproxima de uma distribuição multivariada normal para amostras suficientemente grandes. Se $\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \dots, \mathbf{X}_k$ são amostras independentes de uma população com vetor médio $\boldsymbol{\mu}$ e matriz de covariância Σ , o vetor médio $\bar{\mathbf{X}}$ da amostra é normalmente distribuído com vetor médio $\boldsymbol{\mu}$ e matriz de covariância Σ / n . Quanto maior a amostra, mais próxima a média se aproxima de $\boldsymbol{\mu}$. Esta é a versão multivariada da Lei dos Grandes Números (ZAIONTZ, 2015).

Nos casos multivariados, o teste de normalidade multivariada de Shapiro-Wilk, apresenta pior desempenho em relação aos testes de normalidade baseados nos desvios de assimetria e curtose. Com taxas de erro tipo I superiores ao valor nominal, independentemente

do tamanho da amostra ou do número de variáveis, o teste de normalidade de Shapiro-Wilk multivariado implementado no *software* R[®] (R Core Team, 2019), utilizando a função *mshapiro.test* do pacote MVN (KORKMAZ *et al.*, 2014) é extremamente liberal e a sua aplicação é desaconselhada (CANTELMO, 2007).

Sendo assim, em relação a assimetria e a curtose multivariada, os índices de Mardia (MARDIA, 1970) são amplamente utilizados, sendo definido, respectivamente, da forma:

$$sk_M = \frac{1}{n^2} \sum_{i,j=1}^n [(\mathbf{X}_i - \bar{\mathbf{X}})' S^{-1} (\mathbf{X}_j - \bar{\mathbf{X}})]^3 \quad \text{e} \quad ku_M = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [(\mathbf{X}_i - \bar{\mathbf{X}})' S^{-1} (\mathbf{X}_i - \bar{\mathbf{X}})]^2 \quad (43)$$

onde

$\bar{\mathbf{X}}$ é o vetor de médias da amostra

$S = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n [(\mathbf{X}_j - \bar{\mathbf{X}})(\mathbf{X}_j - \bar{\mathbf{X}})']$ é o estimador viesado de máxima verossimilhança da matriz de covariâncias amostrais.

n é a dimensão da amostra

Uma diretriz oferecida através do programa de software EQS sugere que os dados associados a um valor de curtose multivariada de Mardia normalizada maior que três (3), poderiam produzir resultados imprecisos quando usados com estimativa de ML (FINNEY, 2006). Essa diretriz é consistente com as discussões de muitos pesquisadores aplicados e metodológicos sobre esse assunto encontrados no *The Structural Equation Modeling Discussion Network – SEMNET*⁷. Contudo não existe consenso em relação a qual valor que indica um desvio da normalidade multivariada capaz de comprometer a confiabilidade das conclusões relativas a qualidade do modelo e as estimativas dos parâmetros.

Em suma, se o pressuposto da normalidade multivariada não for verificado, os métodos de estimação que não exigem normalidade devem ser usados com parcimônia e com cuidado a certos fatores, como tamanho da amostra e curtose excessiva. Mesmo com os dados não apresentando normalidade multivariada, o método ML é o que produz resultados mais eficientes e consistentes. Somente para condições de violação extrema de normalidade (curtose excessiva)

⁷ O SEMNET é um fórum aberto para ideias e questões sobre a metodologia que inclui análise de estruturas de covariância, análise de caminho e análise fatorial confirmatória. A SEMNET preenche as lacunas entre usuários, entre disciplinas e entre conferências. A SEMNET foi fundada em fevereiro de 1993. Em novembro de 1998, a SEMNET tinha mais de 1.500 assinantes em todo o mundo. O SEMNET é para compartilhar idéias sobre esta metodologia com outros pesquisadores interessados. O SEMNET é também para pesquisadores que estão apenas aprendendo (ou re-aprendendo) sobre modelagem de equações estruturais, ou que estão enfrentando problemas na aplicação dessas técnicas para suas próprias pesquisas.

Informação extraída de: <<http://www2.gsu.edu/~mkteer/semnet.html>>, acesso em 05 Mai. 2018.

é que a qualidade dos índices de ajustamento e das estimativas dos parâmetros são questionáveis. Sendo assim, dos pressupostos a serem analisados para a aplicação da MEE, a verificação da normalidade multivariada através da curtose é a mais importante, pois determinará qual método será adotado para estimação dos parâmetros de qualidade de ajustamento dos modelos avaliados.

2.1.6.5.4 Abordagem Bayesiana

O método Bayesiano criou uma perspectiva diferente para a modelagem de equações estruturais, particularmente no contexto dos procedimentos de estimativa dos parâmetros. No processo Bayesiano, o processo de estimação é menos exigente no que diz respeito a deduzir os valores dos parâmetros populacionais. Assim, com a abordagem Bayesiana, usa-se os conhecimentos a priori para auxiliar na estimativa do modelo. A análise Bayesiana trouxe muitos benefícios para a modelagem de equações estruturais, uma delas é a oportunidade de aprender com os dados e incorporar novos conhecimentos em investigações futuras.

Pesquisadores não dependem da noção de repetir um evento (ou experimento) infinitamente; em vez disso, eles podem combinar conhecimento a priori com julgamento pessoal, a fim de auxiliar a estimativa de parâmetros. A principal diferença entre a Estatística Bayesiana e a Estatística clássica frequentista (estimadores ML) é a natureza dos parâmetros desconhecidos no modelo. Na Estatística convencional é assumido que, para uma população, existe apenas um parâmetro populacional verdadeiro, por exemplo, um verdadeiro coeficiente de regressão que é fixo, mas desconhecido e não é aceitável colocar distribuições de probabilidade nos parâmetros. Na visão Bayesiana de probabilidade, todos os parâmetros desconhecidos podem incorporar uma (in) certeza que pode ser definida por uma distribuição de probabilidade. Qualquer quantidade para a qual o valor verdadeiro é incerto, incluindo os parâmetros do modelo, pode ser representada com distribuições de probabilidade, ou seja, acredita-se que cada parâmetro tenha uma distribuição que capture a (in) certeza sobre seu valor.

Essa incerteza é capturada por uma distribuição que é definida antes de observar os dados e é chamada de distribuição a priori. Em seguida, a evidência observada é expressa em termos da função de verossimilhança dos dados. A probabilidade dos dados é então usada para ponderar a priori e este produto produz a distribuição posterior, que é uma composição da distribuição prévia e da função de verossimilhança (VAN DE SCHOOT, 2013).

Existem três razões básicas pelas quais um pesquisador pode escolher usar a abordagem Bayesiana, a saber:

- a) modelos complexos demais não podem ser estimados por métodos tradicionais, por exemplo, modelos com cargas fatoriais de efeito aleatórios, modelos com variáveis latentes não-lineares ou modelos de fatores variáveis latentes multi-nível;
- b) conhecimentos prévios podem ser incorporados nas análises e
- c) pelo fato do método não depender de grandes amostras.

Além disso, com uma abordagem Bayesiana em modelagem de equações estruturais, os pesquisadores podem apresentar resultados empíricos por exemplo, na forma de intervalos de confiança. Mas a estimação de parâmetros pela análise Bayesiana tem alguns problemas, sendo que um deles é o fato de não fornecer ajustes locais, como por exemplo, resíduos de correlação ou índices de modificação.

Claro que se pode usar essas estatísticas de ajuste (quando disponíveis) para justificar a rejeição ou não de um modelo. Mas, com modelos complexos que exigem resspecificação, pode ser relativamente mais difícil ter confiança em rejeitar um modelo mal especificado, porque essa abordagem fornece pistas menos diretas sobre o que as novas especificações levariam a um ajuste aceitável.

2.1.6.6 Avaliação da qualidade do ajustamento do modelo

A fase de avaliação da qualidade de ajustamento do modelo tem como objetivo determinar o quão bem o modelo teórico é capaz de reproduzir a estrutura correlacional das variáveis manifestas na amostra sob estudo. A determinação da qualidade do ajuste na MEE não é tão direta quanto em outros procedimentos multivariados porque nesses métodos assume-se que as variáveis observadas são mensuradas sem erro e existem testes estatísticos com distribuições conhecidas. Os índices de ajuste da MEE, por sua vez, não têm um teste de significância estatística que identifique o modelo correto considerando-se os dados amostrais.

Para avaliação do modelo de mensuração é comum verificar as validades de construto convergente e discriminante. Na validade convergente, os itens indicadores de um construto específico devem possuir uma elevada proporção de variância em comum. Existem diversas maneiras de estimar a validade convergente, entre elas a avaliação das cargas fatoriais.

Cargas fatoriais altas são um indicativo de que convergem para um ponto comum. Outra medida é a avaliação da variância média extraída (*Average Variance Extracted – AVE*),

que verifica a proporção da variância dos itens que são explicados pelo construto ao qual pertencem. Assim como na avaliação das cargas fatoriais, quando os valores de AVE são iguais ou superiores a 0.5 assume-se que o modelo converge para um bom resultado. Por fim, para confirmação da validade convergente é usual avaliar a confiabilidade composta, que é uma estimativa de consistência interna, porém mais adequada a MEE porque prioriza as variáveis de acordo com suas confiabilidades, e não como o alfa de Cronbach, fortemente influenciado pelo número de variáveis nos construtos (SOUZA *et al.*, 2017).

Já a validade discriminante é o grau em que um construto se difere dos demais. Quanto à verificação da existência de validade discriminante, o pesquisador pode realizar a análise das cargas cruzadas. Para confirmar esse tipo de validade, os itens do instrumento avaliado devem apresentar cargas fatoriais mais elevadas nos construtos que foram previamente designados do que nos demais. Outro critério utilizado para avaliar a validade discriminante é a comparação das raízes quadradas das AVE com os valores de correlação entre os construtos.

Concluída a avaliação das validades convergentes e discriminantes, parte-se para a análise do modelo estrutural ou modelo teórico. Para testar a modelo estrutural, deve-se concentrar no ajuste geral do modelo e nas relações entre os construtos. Inicialmente, para verificar as relações entre construtos e itens do modelo, procede-se o teste qui-quadrado em que se verifica se os parâmetros são significativamente diferentes de zero (SOUZA *et al.*, 2017).

A avaliação do ajuste do modelo em MEE foi inicialmente enquadrada no processo decisório dicotômico do teste de hipóteses: o modelo foi aceito como um bom ajuste aos dados, ou o modelo foi rejeitado por ajustar os dados empíricos de forma deficiente. A decisão de aceitar ou rejeitar a hipótese de ajuste foi baseado na probabilidade associada ao valor do teste χ^2 , que avalia a discrepância entre a matriz de covariância da amostra original e a matriz de covariância reproduzida com base nas especificações do modelo (FAN *et al.*, 1999).

O teste qui-quadrado (χ^2) é o único teste estatístico usado para avaliação do modelo teórico (AMORIM *et al.*, 2012). Inicialmente apenas o *p-value* (valor de probabilidade) associado ao teste χ^2 era usado para avaliar o ajuste do modelo, sob a hipótese nula de que as covariâncias populacionais são idênticas aquelas previstas a partir das estimativas do modelo.

No entanto os pesquisadores logo perceberam que a interpretação desse valor era confundida pelo tamanho da amostra, pois o poder do teste aumenta com aumentos no tamanho da amostra usados na análise.

Como resultado, a avaliação do ajuste do modelo torna-se muito rigorosa quando o tamanho da amostra é grande, mas quando o tamanho da amostra é pequeno, o teste estatístico

é leniente e pode falhar. Outro problema com essa estatística é que um teste de significância estatística não fornece informações sobre o grau de ajuste do modelo.

Por estas razões, os pesquisadores começaram a procurar índices de ajuste alternativos.

O problema é que essa pesquisa resultou em muitos índices, nenhum dos quais considerado como o “melhor índice” pela maioria dos pesquisadores. Como resultado dessa proliferação de índices para determinar o ajuste de um modelo, a versão 6 do *software* SAS para modelagem de equações estruturais, apresentava quase 20 índices de ajuste. Para decidir qual índice utilizar em um ajuste, o pesquisador deve classificar e entender o significado dos valores calculados para os diversos índices. Para muitos pesquisadores o(s) índice(s) de ajuste ideal(ais) deve(m) ser tal(is) que:

- a) indique o grau de ajuste ao longo de um conjunto contínuo de valores entre zero (0) e um (1), onde zero (0) significa uma completa falta de ajuste e um (1) signifique um ajuste perfeito;
- b) seja independente do tamanho da amostra (Valores maiores ou menores não seriam obtidos simplesmente porque o tamanho da amostra é grande ou pequena) e
- c) tenha características conhecidas da distribuição de probabilidade para auxiliar a interpretação e permitir a construção de um intervalo de confiança.

Infelizmente nenhum índice definido até então satisfaz por completo essas condições, além disso nem todos os pesquisadores concordam com esses critérios. Dessa forma não se pode admitir um único índice para avaliar o ajustamento de um modelo de equações estruturais.

Um grande problema causado pela variedade de índices de ajuste é que eles criam confusão na pesquisa prática. Não são apenas as justificativas para diferentes índices que não está claro para muitos pesquisadores, mas diretrizes claras também estão faltando quanto a escolha entre esses índices. A razão óbvia para a falta de diretrizes claras para escolher entre diferentes índices é que simplesmente não se compreende as características de desempenho desses índices sob condições diferentes. Devido à natureza multifacetada dos índices de ajuste em MEE, e às diferentes razões para o desenvolvimento desses índices, não parece haver um critério direto contra o qual o desempenho de todos os índices de ajuste pode ser julgado (FAN *et al.*, 1999). Mas como escolher o (s) índice (s) de ajustamento? Diferentes índices de qualidade de ajustamento avaliam diferentes critérios? O índice deve levar em consideração a covariância explicada? Os graus de liberdade? Separar o modelo de medição do modelo estrutural?

Embora seja difícil responder esses questionamentos e determinar um critério simples para julgar o desempenho dos índices de ajuste, vários critérios relacionados podem ser

considerados para esse fim. Primeiro o fato de que, o desenvolvimento de muitos índices de ajuste foi motivado para superar as deficiências da estatística χ^2 , especialmente a sensibilidade ao tamanho da amostra, os índices de ajuste devem ser insensíveis ou independentes ao tamanho da amostra. Isso significa que a variação de um índice em relação ao tamanho da amostra deve ser tão pequena quanto possível.

Em segundo lugar os índices de ajuste devem ser invariantes, ou seja, diferentes teorias estatísticas não deve resultar em índices excessivamente variáveis para os mesmos dados. Esse raciocínio leva à expectativa de que, idealmente, procedimentos de estimativa devem contribuir relativamente pouco para a variação do índice.

Em terceiro lugar, os índices de ajuste são projetados para fornecer informações sobre o grau em que um modelo é especificado corretamente ou incorretamente para os dados fornecidos. Obviamente, a especificação incorreta do modelo deve afetar diretamente os índices de ajuste. Finalmente, como em qualquer outra estimativa estatística, dois critérios devem ser aplicados na avaliação do desempenho relativo de estimadores: imparcialidade e variação. Entre dois estimadores, o menos tendencioso é mais frequentemente preferido; entre dois estimadores igualmente não-viesados, aquele com menor variação aleatória é na maioria das vezes o preferido. Essa consideração leva a duas expectativas: um bom índice de ajuste deve ter pouco viés sistemático (para cima ou para baixo) quanto possível, e um índice de ajuste ideal deve ter a menor variação aleatória possível (FAN *et al.*, 1999). O critério de ajuste mais usado é o que considera o grau em que o modelo considera as covariâncias da amostra. Existem dois tipos de índices que avaliam a diferença entre as covariâncias previstas e observadas, são esses os índices absolutos e relativos (BOLLEN, 1993).

2.1.6.6.1 Teste do qui-quadrado

O teste do qui-quadrado (χ^2) é um teste do ajustamento da significância da função de discrepância minimizada durante o processo de ajustamento do modelo.

As hipóteses estatísticas do teste são

$$H_0 : \Sigma = \Sigma(\hat{\theta}) \quad \text{e} \quad H_1 : \Sigma \neq \Sigma(\hat{\theta})$$

onde

Σ é a matriz de covariância populacional e

$\Sigma(\hat{\theta})$ é a matriz de covariância estimada pelo modelo

Conforme Jöreskog e Sörbom (1996) a estatística do teste é definida por

$$T = (n - 1)F_{min} \sim \chi^2(gl) \quad (44)$$

onde

n é o tamanho da amostra

F_{min} é o valor mínimo de uma das funções de discrepância apresentadas anteriormente e gl são os graus de liberdade.

O nome qui-quadrado deriva do fato de que, sob a suposição de normalidade e um modelo correto, à medida que o tamanho da amostra aumenta, a distribuição T se aproxima de uma distribuição qui-quadrado. No entanto, não sabemos quanto n deve ser ‘grande’ em relação ao número de variáveis para que a estatística T siga aproximadamente o $\chi^2(gl)$ (DENG *et al.*, 2018), muito menos um valor mágico para p (WASSERSTEIN, 2019). A estatística qui-quadrado é a razão de verossimilhança que se utiliza para avaliar a significância estatística de que todos os elementos da matriz dos resíduos $(S - \Sigma(\hat{\theta}))$ sejam nulos. Portanto, este indicador avalia quão significativa é a diferença entre a matriz observada e a estimada para o modelo apresentado.

É a estatística mais utilizada, principalmente porque é a estatística padrão nos *softwares* disponíveis. Os *softwares* de MEE reportam a probabilidade de significância (*p-value*) do teste, calculado como $p\text{-value} = 1 - \Phi(\chi^2, gl)$ onde Φ é a função de distribuição do qui-quadrado. Este valor pode ser comparado com um nível de significância estabelecido (geralmente 0,05) para testar a hipótese nula. Assim, conforme Raikov (2006), pode-se considerar a rejeição do modelo quando este valor p é menor do que um valor de significância pré-definido e a retenção do mesmo se esse valor for maior do que esse nível de significância.

Deve-se levar em consideração a sensibilidade dos testes de ajustamento ao tamanho da amostra. O teste do χ^2 é sensível a não normalidade dos dados, ao número de parâmetros e, principalmente ao tamanho da amostra (HAIR *et al.*, 2014).

Muitos pesquisadores ignoram esse índice se o tamanho da amostra exceder 200 ou mais observações. Em particular, essa abordagem surge porque o índice qui-quadrado apresenta alguns problemas, como por exemplo, se o tamanho da amostra for grande, a sensibilidade do teste aumenta de tal forma que, pequenas discrepâncias serão julgadas como evidência de desajuste e o modelo geralmente será rejeitado, as vezes injustamente. Matematicamente isso ocorre porque o tamanho da amostra é um multiplicador da função de discrepância no teste de ajuste exato (BARRETT, 2007). Outras discussões apontam que modelos corretamente

especificados se tornam mais consistentes em relação ao qui-quadrado, à medida que o tamanho da amostra aumenta. Modelos mal especificados são mais propensos a ‘falhar’ (ser detectado como problemático pelo qui-quadrado) quando o número de amostras aumenta.

Deve-se considerar também os graus de liberdade de um modelo, pois há uma preferência por lidar com modelos que possuem um grande número de graus de liberdade. Isso porque existe um significado intuitivo da noção de graus de liberdade como uma dimensão ao longo da qual o modelo pode ser rejeitado. Portanto, quanto mais graus de liberdade tiver, mais dimensões há ao longo do qual se pode rejeitar o modelo (RAIKOV, 2006).

É um fenômeno geral e bem conhecido que a estatística de razão de verossimilhança tende a rejeitar o modelo correto mais frequentemente do que o esperado quando n não é suficientemente grande. Como consequência, os estatísticos desenvolveram uma abordagem sistemática para corrigir a estatística da razão de verossimilhança, e é chamada de correção de Bartlett. No entanto, a estatística corrigida é complicada, mesmo para um modelo relativamente simples, e é impraticável implementar a correção de Bartlett para modelos de MEE gerais. No contexto da análise fatorial exploratória (AFE), Bartlett (1951) propôs uma fórmula simplificada para corrigir a estatística da razão de verossimilhança, que substitui $(n - 1)$ por $n - (2p + 11) / 6 - 2m / 3$, onde p é o número de variáveis e m é o número de fatores (DENG *et al.*, 2018). Outro problema está quando a suposição de normalidade multivariada é violada, pois o índice de ajuste qui-quadrado é impreciso.

De uma forma geral, a não normalidade das variáveis manifestas tende a inflacionar o valor da estatística χ^2 tanto mais quanto for o desvio a normalidade. Nesse cenário, o teste do χ^2 pode ser corrigido por uma medida de enviesamento multivariado, de forma a considerar a distribuição não-central da estatística de teste quando o pressuposto da normalidade não é válido. Esta correção ao teste do χ^2 , conhecida por “Correção de Satorra-Bentler” (ver ANEXO B), introduz na estatística de teste uma função da curtose multivariada amostral, o tipo de modelo e o método de estimação, reduzindo a probabilidade de erro tipo I quando o pressuposto da normalidade multivariada não é válido (MARÔCO, 2014), além disso esse procedimento não é confiável quando o número de variáveis é relativamente grande, uma vez que sua validade é justificada por assintóticos (DENG *et al.*, 2018). No entanto, a estatística corrigida é bastante complicada, mesmo para um modelo relativamente simples, e é impraticável implementar a correção de Satorra-Bentler para MEE. Por tudo isso, o teste é um indicador importante, mas não determinante na aceitação ou rejeição do modelo em teste (PRADO, 2004).

Pesquisadores em gestão, comportamento organizacional, psicologia aplicada e várias outras áreas, acabam ignorando o teste do qui-quadrado e usam outros índices de ajustamento por ser um teste muito poderoso e que, qualquer discrepância por mínima que seja, faz com que o modelo seja rejeitado. Um exemplo de uma estatística que minimiza o impacto do tamanho da amostra no valor do qui-quadrado é a razão do valor qui-quadrado com os graus de liberdade, conhecido como qui-quadrado relativo (HOOPER *et al.*, 2008).

Esse valor é definido da forma

$$Chisq_rel = \chi^2/gl \quad (45)$$

Se a hipótese H_0 do teste do χ^2 for verdadeira, o valor esperado dos graus de liberdade é igual ao valor esperado da estatística de teste. Assim, na situação de ajustamento perfeito $\chi^2/gl = 1$. De uma forma geral, considera-se um ajustamento bom, se χ^2/gl for igual ou inferior a três (3), aceitável se for igual ou inferior a cinco (5) e ruim para valores superiores a cinco (5).

2.1.6.6.2 Índices absolutos

São classificados como índices absolutos aqueles relativos à proporção de variância e covariância explicadas após o processo de estimação. Destaque para os índices *Standardized Root Mean Square Residual* (SRMR) e *Goodness of Fit Index* (GFI).

Esse último baseia-se no cálculo da proporção da variância explicada por meio da estimação. Além dos citados acima HU (1999) também destaca o *Adjusted Goodness of Fit Index* (AGFI), o *Gamma Hat* proposto por Steiger (1989), o índice de validação cruzada proposto por Browne e Cudeck (BROWNE, 1993) e o *Critical N* proposto por Hoelter (1983).

i) *Standardized Root Mean Square Residual* (SRMR): A Raiz do Resíduo Quadrático Médio RMR é a raiz quadrada da matriz dos erros dividida pelos graus de liberdade assumindo que o modelo ajustado é o correto. Conforme Hair *et al.* (2010) se pensarmos em cada termo de covariância ou variância como um valor individual que será previsto, então se pode imaginar o ajuste como o quão precisamente cada termo é previsto. O erro de previsão para cada termo de covariância cria um resíduo. O RMR é a raiz quadrada da média do quadrado dos resíduos. A raiz padronizada do índice RMR (SRMR) é mais útil para comparar ajustes ao longo do modelo e uma das razões de sua preferência é a independência relativa em relação ao tamanho da amostra. O índice SRMR é definido a forma

$$SRMR = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^i [(s_{ij} - \sigma_{ij}(\hat{\theta})) \cdot (s_{ii} \cdot s_{jj})]^2}{(p) \cdot (p+1) / 2}} \quad (46)$$

onde

s_{ij} indica a componente da matriz de covariância amostral;

$\sigma_{ij}(\hat{\theta})$ indica a componente da matriz estimada $\Sigma(\hat{\theta})$ pelo modelo e

p é o número de variáveis observadas.

O índice SRMR não fornece indicações sobre a direção de discrepância entre as matrizes S e $\Sigma(\hat{\theta})$ (CANGUR, 2015). Quanto menor for o SRMR melhor será o ajustamento. Um SRMR menor que 0,09 é geralmente tido como indicador de um ajustamento perfeito (HU, 1999).

ii) *Goodness of Fit Index* (GFI): Jöreskog e Sörbom (1984) propuseram um índice de qualidade de ajustamento, como alternativa ao teste qui-quadrado, baseado na porcentagem de variância explicada. O GFI foi uma primeira tentativa de produzir uma estatística de ajuste que fosse menos sensível ao tamanho da amostra. Este índice calcula a proporção de variância que é contabilizada pela covariância estimada da população. Observando as variâncias e covariâncias explicadas pelo modelo, mostra-se quão próximo o modelo chega de replicar a matriz de covariância observada (HOOPER *et al.*, 2008). O índice pode ser definido da forma:

$$GFI = 1 - \frac{\vartheta_{residual}}{\vartheta_{total}} \quad (47)$$

onde

$\vartheta_{residual}$ é a variância residual na matriz de covariância (variância que não pode ser explicada pelo modelo) e

ϑ_{total} é a variância total na matriz de covariância.

Outra forma de definir esse índice é

$$GFI = 1 - \frac{\chi_{modelo}^2}{\chi_{base}^2} \quad (48)$$

onde

χ_{modelo}^2 representa o qui-quadrado do modelo ajustado

χ_{base}^2 representa o qui-quadrado do modelo de base

O GFI é um coeficiente de ajustamento geral para MEE, e explica a proporção das covariâncias, observadas entre as variáveis manifestas, explicadas pelo modelo ajustado.

Esse índice varia de zero (0) a um (1), com amostras maiores aumentando seu valor.

Quando há um grande número de graus de liberdade em comparação com o tamanho da amostra, o GFI tem um viés de baixa. Além disso, também foi descoberto que o GFI aumenta à medida que o número de parâmetros aumenta e também tem viés de alta com amostras grandes (HOOPER *et al.*, 2008). Valores maiores que 0,9 são considerados como indicativos de elevada adequação ao modelo. De acordo com Mulaik *et al.* (1989) uma outra forma de definir o índice GFI, cujos parâmetros foram estimados por máxima verossimilhança (ML), é usando a seguinte fórmula:

$$GFI_{ML} = 1 - \frac{tr[(\Sigma(\hat{\theta})^{-1}S-I)^2]}{tr[(\Sigma(\hat{\theta})^{-1}S)^2]} \quad (49)$$

Também se pode definir o índice GFI, quando os parâmetros são estimados por mínimos quadrados não ponderados (ULS), pela fórmula:

$$GFI_{ULS} = 1 - \frac{tr[(S - \Sigma(\hat{\theta}))^2]}{tr[S^2]} \quad (50)$$

Quando a matriz ajustada Σ é exatamente igual a matriz observada S , o valor de GFI é igual a 1. Como o índice GFI capta a extensão com que as variâncias e covariâncias observadas em S são ajustadas por Σ , o GFI é análogo a um R^2 estatístico (LATTIN *et al.*, 2011).

Quando as variáveis manifestas não apresentam normalidade multivariada, o valor do teste χ^2 tende a inflacionar e, de forma semelhante o índice GFI, que é calculado a partir dessa estatística, também serão inflacionados. Resultados de simulações têm sugerido que para amostras pequenas ($n \leq 250$), com variáveis fortemente assimétricas e leptocúrticas (possui a curva da função de distribuição mais afunilada com um pico mais alto do que a distribuição normal) o GFI tende a rejeitar, com frequência, modelos corretos (SATORRA, 1994).

2.1.6.6.3 Índices relativos (ou comparativos)

Os índices relativos (ou comparativos) trabalham com a lógica de comparação do χ^2 de modelos independentes com o χ^2 do modelo em teste. Esses índices são descritos como sendo relativos, pois dependem de três fontes de informação para sua computação: a matriz de

covariância da amostra, a matriz de covariância reproduzida do modelo hipotético e um ponto de referência que serve como base para descrever o ajuste. Para estes modelos, a hipótese nula é que todas as variáveis são não correlacionadas. Destaca-se os índices *Normed Fit Index* (NFI), *Comparative Fit Index* (CFI) e *Relative Fit Index* (RFI).

i) *Normed Fit Index* (NFI): Também conhecido como *Bentler-Bonett Index*, o índice de ajuste ponderado (normado) e avalia a porcentagem de incremento da qualidade do ajustamento do modelo hipotético ($\chi_{hypmodel}^2$) relativamente ao modelo de independência total ou modelo de base (o pior modelo possível, um que assume que todas as variáveis observadas são não correlacionadas) (χ_b^2) da forma:

$$NFI = 1 - \frac{\chi_{hypmodel}^2}{\chi_b^2} \quad (51)$$

Valores para essa estatística variam entre zero (0) e um (1), mas de uma forma geral aceita-se que um NFI inferior a 0,8 é indicador de mau ajustamento, entre [0,8;0,9] indica um ajustamento sofrível e valores maiores ou iguais a 0,9 indicam um bom ajustamento. Um NFI de 0,9, por exemplo, indica que o modelo de interesse melhora o ajuste em 90% em relação ao modelo de independência ou modelo de base. O NFI é tanto mais elevado quanto maior for o número de parâmetros a estimar no modelo e maior for a dimensão da amostra. Uma grande desvantagem deste índice é que ele é sensível ao tamanho da amostra, subestimando o ajuste para amostras com menos de 200 observações e, portanto, não deve ser usado exclusivamente (HOOPER *et al.*, 2008)

ii) *Comparative Fit Index* (CFI): O índice de ajuste comparativo foi proposto por Bentler (1990) para corrigir problemas com o uso do NFI em pequenas amostras. O CFI compara o ajustamento do modelo em estudo (χ^2) com graus de liberdade (gl) com o ajustamento do modelo de base (χ_b^2) com graus de liberdade (gl_b) e é definido da seguinte forma:

$$CFI = 1 - \frac{\max(\chi^2 - gl, 0)}{\max(\chi_b^2 - gl_b, 0)} \quad (52)$$

Valores de CFI inferiores a 0,9 indicam um mau ajustamento, valores entre [0,9;0,95] indicam um bom ajustamento e valores maiores ou iguais a 0,95 indicam um ajustamento muito

bom. Hoje é um índice incluído em todos os *softwares* de MEE e é um dos índices de ajuste mais divulgados popularmente por ter suas medidas menos afetadas pelo tamanho da amostra e por possuir insensibilidade relativa, mas não completa, em relação a complexidade do modelo (HAIR *et al.*, 2010).

iii) *Relative Fit Index* (RFI): O índice de ajuste relativo avalia o ajustamento do modelo comparando o χ^2 normalizado, pelos graus de liberdade, com o modelo de base também normalizado pelos graus de liberdade. Assim define-se RFI como:

$$RFI = 1 - \frac{\chi^2/g_l}{\chi_b^2/g_l} \quad (53)$$

Valores próximos a 1 são indicadores de um bom ajustamento. Valores inferiores a 0,9 indicam um mau ajustamento.

2.1.6.6.4 Índices de parcimônia

Conforme Marôco (2014) os índices de parcimônia são obtidos corrigindo os índices relativos por um fator de penalização associado a complexidade do modelo. O objetivo dos índices de parcimônia é compensar a melhoria ‘artificial’ do modelo que se consegue, simplesmente, por inclusão de mais parâmetros livres aproximando o modelo sob estudo ao modelo saturado. Os índices de parcimônia penalizam os índices relativos por um fator de complexidade estimado como gl/gl_b onde gl são os graus de liberdade do modelo sob estudo e gl_b são os graus de liberdade do modelo de base. A expressão que define gl/gl_b é dada por:

$$\frac{gl}{gl_b} = \frac{p(p+1)}{2df} \quad (54)$$

onde

p é o número de variáveis observadas no modelo e

df é o número de graus de liberdade obtido pela diferença entre o número de observações independentes e o número estimado de parâmetros do modelo.

Quanto menos parcimonioso é o modelo, ou seja, quanto maior o número de parâmetros a serem estimados, maior o termo gl/gl_b e menor o valor dos índices de parcimônia em relação aos índices relativos e absoluto (LATTIN *et al.*, 2011).

Temos então os seguintes índices de parcimônia

$$\text{i) Parsimony CFI (PCFI):} \quad PCFI = CFI \cdot gl/gl_b \quad (55)$$

$$\text{ii) Parsimony GFI (PGFI):} \quad PGFI = GFI \cdot gl/gl_b \quad (56)$$

$$\text{iii) Parsimony NFI (PNFI):} \quad PNFI = NFI \cdot gl/gl_b \quad (57)$$

De um modo geral considera-se que valores menores que 0,6 indicam um mau ajustamento, valores entre $[0,6;0,8[$ indicam um ajustamento razoável e valores maiores ou iguais a 0,8 indicam um bom ajustamento.

2.1.6.6.5 Índices de discrepância populacional

Os índices de discrepância populacional comparam o ajustamento do modelo obtido com os momentos amostrais (médias e variâncias amostrais) relativamente ao ajustamento do modelo que se obteria com os momentos populacionais (médias e variâncias populacionais) (MARÔCO, 2014). Um índice amplamente utilizado é o RMSEA.

i) *Root Mean Square Error of Approximation* (RMSEA): Proposto por Steiger e Lind (1980), a raiz do erro quadrático médio de aproximação é estimado da seguinte forma:

$$RMSEA = \sqrt{\frac{F_0}{gl}} \quad (58)$$

onde

$$F_0 = \max[(\chi^2 - gl)/(n - 1), 0].$$

A estatística F_0 é penalizada pelo número de graus de liberdade (gl) de forma a compensar a melhoria do ajustamento do modelo pela simples adição de mais parâmetros.

Alguns autores classificam o índice RMSEA como um índice de qualidade absoluto por também não depender da comparação com um modelo de base. O RMSEA é amplamente utilizado na modelagem de equações estruturais por fornecer um mecanismo para ajustar o tamanho da amostra. É um indicador que procura corrigir a tendência que o teste de qui-quadrado tem em rejeitar modelos especificados a partir de amostras muito grandes

(HAIR *et al.*, 2010). Geralmente é considerado um ajustamento inapropriado quando o valor de RMSEA é superior ou igual a 0,10; bom para valores entre]0,05;0,10[e muito bom para valores de RMSEA inferiores ou iguais a 0,05. Estas são definições para a população, ou seja, um determinado modelo pode ter um valor populacional de 0,05, mas na amostra pode ser maior que 0,10. Uma vantagem do índice RMSEA é a possibilidade de se calcular um intervalo de confiança em torno de seu valor que pode ajudar a entender o erro de amostragem no RMSEA.

Há um maior erro de amostragem para modelos com *gl* pequenos e poucas observações. No artigo “CFI Versus RMSEA: A Comparison of Two Fit Indexes for SEM” de Edward Rigdon (1996), o autor afirma que “Os índices CFI e RMSEA que estão, ambos conceitualmente ligados ao valor de χ^2 , possuem características peculiares. Enquanto o índice CFI é mais apropriado em contextos exploratórios, o índice RMSEA é apropriado para contextos confirmatórios ” (RIGDON, 1996).

No quadro 6 são apresentados os valores de referência (pontos de corte) para diversos índices de qualidade de ajustamento. Os valores de referência ou pontos de corte são valores recomendados que geralmente foram obtidos por estudos ou experiências de simulações anteriores. A maioria dos pesquisadores “acreditam” nos valores de referência dos índices, mas o uso desses índices com pontos de corte fixos deve ser cauteloso pois pode levar a decisões precárias quanto ao ajuste do modelo.

Alguns pesquisadores argumentam que os pontos de corte dependem das especificações e complexidade do modelo, do número de variáveis, dos graus de liberdade e do tamanho da amostra (KIM, 2014). Outro problema no uso desses índices é o que alguns autores chamam de ‘*cherry pick*’⁸, ou seja, o pesquisador calcula vários índices de ajuste e escolhe um adequado para o que se pretende fazer.

Os índices de qualidade de ajustamento e seus respectivos pontos de corte apresentados são medidas de ajustamento global do modelo em relação aos dados. Como ponto final, deve-se notar que, embora os índices de ajuste sejam um guia útil, um modelo estrutural também deve ser examinado em relação à teoria substantiva.

⁸ A expressão *cherry-pick* é extremamente útil e muito comum na língua inglesa. A ideia da expressão é a de selecionar algo a dedo, escolher as melhores coisas de um grupo, as melhores pessoas, etc. Muitas vezes dizemos “escolher a dedo” em português. Disponível em: <http://www.maiovergara.com/cherry-pick-o-que-significa-esta-expressao>, acesso em 10 Nov. 2018.

QUADRO 6 – VALORES DE REFERÊNCIA (PONTOS DE CORTE) PARA ÍNDICES DE QUALIDADE DE AJUSTAMENTO DE UM MEE

Estatística (Índices de qualidade de ajustamento)	Valores de referência (Pontos de corte)
Teste do Qui-quadrado – χ^2 χ^2/gl	$\chi^2/gl = 1$ ajustamento perfeito $1 < \chi^2/gl \leq 3$ ajustamento bom $3 < \chi^2/gl \leq 5$ ajustamento aceitável $\chi^2/gl > 5$ mau ajustado
<i>Standardized Root Mean Square Residual</i> – SRMR (Raiz do Resíduo Quadrático Médio Padronizado)	$< 0,09$ ajustamento perfeito $\geq 0,09$ mau ajustado
<i>Goodness of Fit Index</i> – GFI (Índice de Qualidade de Ajuste)	$< 0,8$ mau ajustado [0,8;0,9[ajustamento razoável [0,9;0,95[ajustamento bom $\geq 0,95$ ajustamento muito bom
<i>Normed Fit Index</i> – NFI (Índice de Ajuste Normado)	$< 0,8$ mau ajustado [0,8;0,9[ajustamento razoável $\geq 0,90$ ajustamento bom
<i>Comparative Fit Index</i> – CFI (Índice de Ajuste Comparativo)	$< 0,9$ mau ajustado [0,9;0,95[ajustamento bom $\geq 0,95$ ajustamento muito bom
<i>Relative Fit Index</i> – RFI (Índice de Ajuste Relativo)	$< 0,9$ mau ajustado $\geq 0,90$ ajustamento bom
<i>Parsimony CFI</i> – PCFI (CFI Parcimonioso)	$< 0,6$ mau ajustado [0,6;0,8[ajustamento bom $\geq 0,8$ ajustamento muito bom
<i>Parsimony GFI</i> – PGFI (GFI Parcimonioso)	
<i>Parsimony NFI</i> – PNFI (NFI – Parcimonioso)	
<i>Root Mean Square Error of Approximation</i> – RMSEA (Raiz do Erro Quadrático Médio de Aproximação) Com IC 90%	$> 0,10$ mau ajustado [0,08; 0,10] ajuste razoável [0,05; 0,08] ajustamento bom $\leq 0,05$ ajustamento muito bom

FONTE: O autor (2019)

Ao permitir o ajuste do modelo para conduzir o processo de pesquisa, ele se afasta do propósito original de testar as teorias da modelagem de equações estruturais. Além disso, os índices de ajuste podem apontar para um modelo bem ajustado quando, na verdade, partes do modelo podem se encaixar mal. Além dos índices apresentados tem-se também os índices baseados na teoria da informação, que são baseados na estatística χ^2 e penalizam o modelo em função da sua complexidade, ou seja, do número de parâmetros estimados. Não apresentam valores de referência para classificar o ajustamento do modelo, e são apropriados apenas quando é necessário comparar vários modelos alternativos que foram estimados utilizando a estimativa de máxima verossimilhança.

Os índices mais utilizados são *Akaike Information Criterion* (AIC), *Bayes Information Criterion* (BIC), *Browne-Cudeck Criterion* (BCC) e *Expected Cross-Validation Index* (ECVI). Para maiores informações ver MARÔCO (2014, p.53-54) e WESTLAND (2015, p. 57-58).

2.1.6.6.6 Considerações sobre os índices de qualidade de ajustamento em modelos de equações estruturais

Sobre o uso dos índices de qualidade de ajustamento para avaliação de modelos em MEE, embora alguns pesquisadores na área discordem da utilidade desses índices como forma de avaliação da adequação de um modelo, discutindo inclusive a possibilidade de abandono completo do seu uso (BARRETT, 2007), limitando apenas ao uso do teste qui-quadrado, o que pode ser uma atitude radical e precipitada, muitos outros pesquisadores ainda descrevem os índices de qualidade como uma forma coerente de avaliação do ajustamento do modelo teórico proposto em relação aos dados observados. No entanto, vale ressaltar que, os índices de qualidade de ajustamento não avaliam todos os aspectos de adequação de um modelo em relação aos dados, o que levanta discussões sobre seu uso condicionado a um qui-quadrado significativo (MULAİK *et. al.*, 1989).

Todas essas linhas divergentes de pensamento tiveram início nos anos 80, quando alguns pesquisadores concentraram suas atenções na forma de avaliação do ajustamento de um modelo de equações estruturais. Antes de uma discussão sobre os índices de qualidade de ajustamento, deve-se atentar para a preocupação com os resíduos do modelo. Os dados para uma MEE são as covariâncias observadas, portanto, os resíduos são das covariâncias e não dos dados brutos. Os resultados do modelo combinam-se para criar as covariâncias previstas (também conhecidas como "covariâncias implícitas no modelo"). Os resíduos são as diferenças entre as covariâncias observadas e previstas. Resíduos grandes sugerem modelo desajustado.

Determinar que magnitude de resíduos que são pequenos o suficiente para aceitar o modelo é uma questão debatida em MEE. Alguns pesquisadores argumentam que os resíduos não devem ser significativamente diferentes de zero e devem apenas desviar de zero devido a um erro de amostragem aleatório. Os resíduos do modelo que não são significativamente diferentes de zero resultarão em um teste qui-quadrado não significativo.

A lógica aqui é que mesmo resíduos muito pequenos podem indicar um modelo muito incorreto (por exemplo, variáveis manifestas carregadas em fatores diferentes, número diferente de fatores, diferentes tipos de caminhos). Portanto, um modelo só deve ser aceito se tiver resíduos não significativamente diferentes de zero, o que permite ter confiança de que se tem um modelo razoavelmente correto. Isso é o que o teste do qui-quadrado avalia; os resíduos do modelo que não são significativamente diferentes de zero resultarão em um teste qui-quadrado não significativo (DISABATO, 2018). Até o início dos anos 80 se tinha o teste do qui-quadrado e seu *p-value* como referências para a avaliação do ajustamento, mas esse é um valor que possui

diversas limitações para seu uso. Primeiramente é um teste que assume normalidade multivariada, e desvios graves de normalidade podem resultar em rejeição do modelo, mesmo estando especificado corretamente. Também é sensível ao tamanho da amostra, o que significa que o teste quase sempre rejeita o modelo quando grandes amostras são usadas e, por último, quando pequenas amostras são usadas, o teste não tem poder e, por causa disso, não pode discriminar entre modelos adequados ou não (HOOPER *et al.*, 2008).

Assim, como já mencionado anteriormente, o teste é um indicador importante, mas não determinante na aceitação ou rejeição do modelo (PRADO, 2004). Por tudo isso, o uso do teste do qui-quadrado, apesar de ser o único teste estatístico aplicado em MEE para essa finalidade, passou a ser questionado e com isso, alguns pesquisadores principalmente a partir de meados dos anos 80, desenvolveram e/ou recorreram a índices que não sofressem fortes alterações principalmente em relação ao tamanho da amostra ou a normalidade dos dados. Com isso alguns índices foram desenvolvidos para complementar o teste qui-quadrado, os chamados índices absolutos, principalmente o GFI, o SRMR e o RMSEA (também classificado como índice de discrepância populacional) e os índices relativos, principalmente o CFI, NFI e o RFI, alguns trabalhos questionam o fato dos índices (absolutos e relativos) não sofrerem alterações em relação ao tamanho da amostra.

No artigo “*Goodness-of-fit indexes in confirmatory factor analysis: The effect of sample size*”, Marsh, Balla e McDonald (1988) discutem que, com exceção do índice TLI de Tucker-Lewis, todos os outros índices mencionados acima, sofrem alterações em relação ao tamanho da amostra em problemas de MEE que envolvem o uso de modelos de análise fatorial confirmatória. Mas mesmo esses índices apresentam variações que podem ser decorrentes de diversos fatores, como por exemplo, a especificação errada do modelo, viés para pequenas amostras, o método de estimação adotado, violação da normalidade e independência e complexidade do modelo. Por tudo isso, a temática do ‘comportamento dos índices de ajustamento’ e sua aplicabilidade e confiabilidade no uso da validação do ajustamento de um modelo tem sido discutida. Nos trabalhos sobre o tema tem-se, entre vários aspectos discutidos, levantada a necessidade de uso de novos índices para avaliação do ajustamento e adoção dos chamados ‘pontos de corte’, valores de referência para o ajustamento de modelos de MEE.

Esses valores servem de base para uma análise do ajustamento em relação aos dados e sua aceitação (ou rejeição) em relação ao ajuste dos mesmos aos dados observados. Vários artigos foram publicados sobre esses valores e, principalmente o trabalho de Hu e Bentler (1999) passaram a ser adotados como regra geral ou ‘regra de ouro’ por pesquisadores até os

dias atuais. Esses valores limitantes definidos através de intervalos, classificam um modelo entre mal ajustado e um ajuste “aceitável”.

Muitos desses valores foram definidos através de simulações e a falta de evidências empíricas e razões convincentes fizeram com que pesquisadores questionem o uso dessas regras adotadas como uma ‘regra de ouro’. Discussões sobre estes índices levantaram questões que poderiam comprometer seu uso, como por exemplo, o fato de pequenas distorções da estrutura do modelo levar a desajuste dos índices e levantaram o questionamento de, até quando se pode confiar nos valores desejáveis para os índices de ajustamento, na medida que, sob condições variáveis de medida e dados, os modelos podem ser incorretamente identificados como ajustados ou não (BARRETT, 2007). Ou seja, será que os valores limites estipulados para os mais diversos índices definem realmente até quando um modelo está bem ajustado? Quando foram adotados esses valores foram definidos para certas condições, mas o uso desses índices evoluiu como evoluíram os modelos e a complexidade dos mesmos.

Outro ponto a se destacar é que não se pode confiar em apenas um índice de ajustamento, pois para algumas condições, um índice pode identificar um modelo como plenamente ajustado, quando outro índice indica, nas mesmas condições, um mau ajustamento, levando o pesquisador a uma conclusão precipitada sobre o modelo adotado e acarretar em um erro do tipo I (a probabilidade de rejeitar a hipótese nula quando é verdade) ou do tipo II (a probabilidade de aceitar a hipótese nula quando é falsa).

Por esta questão levantada é quase necessário que se adote mais do que um índice de qualidade de ajustamento para compor uma posição a respeito do ajustamento, justificando em partes, a posição de que não se deve abandonar os índices para avaliação da qualidade de ajustamento de um modelo. No trabalho de Hu e Bentler (1999), os autores propõem, entre outras coisas, que os pesquisadores combinem índices que podem ser usados para avaliar a qualidade do ajuste. No geral os índices RMSEA, GFI, NFI, SRMR são os mais usados comparativamente por serem os mais insensíveis ao tamanho da amostra, erros de especificação e modo de estimativas de parâmetros,

Um ponto importante nessa discussão é o fato de que, dada a complexidade dos modelos, não é incomum encontrar problemas de adequação de um modelo proposto e, se torna um jogo perigoso, permitir que índices de modificação e índices de qualidade de ajustamento conduzam o processo de avaliação de um modelo, afastando o pesquisador do propósito de testar as teorias de MEE (HOOPER *et al.*, 2008). Ainda sobre a complexidade, como as teorias cresceram em complexidade os índices passaram a ser mais parcimoniosos com os modelos,

levando a um questionamento sobre a revisão dos valores limites de forma a se ter um critério mais apurado sobre o ajustamento dos modelos.

Outro ponto que pode interferir nos valores dos índices de qualidade de ajustamento é a qualidade e a quantidade dos dados observados e usados para a estimação dos parâmetros nos modelos de MEE. Os índices podem ser sensíveis a alterações em relação a distribuição dos dados (geralmente os dados devem ser normalmente distribuídos), a independência e a outros fatores (pressupostos) exigidos para a aplicação da MEE.

A quantidade de observações também é um ponto polêmico na discussão sobre os valores apropriados para os índices de ajustamento. Conforme Barrett (2007) análises de MEE com menos de 200 observações devem ser simplesmente rejeitadas, a menos que a população da qual a amostra foi extraída é em si pequena ou restrita em tamanho, sob pena dos valores obtidos apresentarem discordância e comprometerem o ajustamento. Mas alguns trabalhos mais específicos (SHEVLIN & MILESB, 1998 e IACOBUCCI, 2010) consideram valores de até 100 observações ou mais como razoável para aplicação da MEE.

Conforme a metodologia de estimação adotada, o número de observações mínima, como exige a literatura, pode variar. Pesquisas que não contemplam esses valores podem ter seus parâmetros ou cargas fatoriais comprometidos (viés acentuado) como também os índices de qualidade de ajustamento. Por exemplo, com pequenas amostras ($n = 50$) e baixas cargas fatoriais, o índice GFI (*Goodness of Fit Index*) pode apresentar desempenho ruim (SHEVLIN, 1998), o que acentua a discussão sobre a necessidade de uma análise mais ampla dos modelos no uso dos índices de qualidade de ajustamento, levando em consideração outros fatores além do próprio tamanho da amostra.

Ainda sobre a quantidade de observações, outro problema está na disponibilidade de se ter um número considerável (mínimo) de observações. Em algumas situações não se tem a possibilidade de levantar tantas observações quantas forem necessárias para contemplar o número que se tem como necessária. Isso poderia frustrar as pretensões de pesquisadores em aplicar MEE em seus trabalhos o que, em alguns casos, seria algo que não se pode descartar visto a necessidade de análise simultânea de fatores e trajetórias e ajustes de erro e, é claro fornecendo índices de qualidade de ajustamento para os modelos.

Então, quantas observações são necessárias para que se tenha um bom modelo de equações estruturais? É verdade que a resposta ‘quanto mais, melhor’ se encaixa bem a essa pergunta, mas existem situações onde, nem sempre, há a necessidade de se ter um número grande de informações. A regra geral que considera o tamanho da amostra adequada sendo

$n \geq 200$ pode ser conservadora e certamente simplista (IACOBUCCI, 2010). Os trabalhos de Bearden, Sharma e Teel (1982) e Bollen e Stine (1990) concluem que, se as variáveis são confiáveis, os efeitos são fortes e os modelos não são excessivamente complexos, um número pequeno de observações são suficientes. Pode-se obter resultados satisfatórios com amostras pequenas de até 50 observações, na medida que algumas condições são contempladas, como por exemplo, complexidade do modelo, cargas fatoriais, quantidade de variáveis observadas por fator e confiabilidade dos fatores.

O pesquisador particularmente preocupado com o tamanho da amostra pode calcular o valor de n (número de observações) desejado necessário para um dado modelo (por exemplo, determinado número de variáveis, construtos e, portanto, graus de liberdade) e nível desejado de poder, ou, inversamente, uma estimativa de poder para um determinado n (MAcCALLUM *et al.*, 2006).

2.1.6.6.7 Análise dos resíduos, erro padrão e confiabilidade individual dos parâmetros

Todos os índices apresentados anteriormente devem ser vistos como medida de ajuste global do modelo e nenhum deles fornece informação sobre o ajuste de partes individuais do modelo, ou do chamado ajuste local. Com isso é possível que um modelo seja não especificado em alguma parte, ou seja, incorreto em relação a uma ou mais variáveis e suas relações, mas muito bem em outras, de modo que uma avaliação dos índices de ajuste sugira um ajuste plausível. Considere um modelo que está substancialmente errado com relação a um importante relacionamento entre duas variáveis observadas em particular (por exemplo, o modelo omite essa relação). Nesse caso, a diferença entre a covariância da amostra e a covariância reproduzida pelo modelo na solução final, chamado de resíduo para esse par de variáveis, pode ser elevado.

No entanto, ao mesmo tempo, o modelo pode explicar de forma excelente todas as covariâncias e variâncias remanescentes na matriz de covariâncias da amostra, e resultar num valor de qui-quadrado não significativo e índices de qualidade de ajustamento favoráveis.

Assim, tudo que é fornecido por medidas gerais de ajuste de modelo é um resumo de quão bem um modelo se encaixa em toda a matriz analisada, mas não contém informações sobre quão bem o modelo reproduz os elementos individuais dessa matriz. Para diminuir essa possibilidade os resíduos de covariância ou resíduos do modelo podem ser examinados. Eles resultam de uma comparação elementar de cada variância e covariância da amostra com o valor de seu elemento correspondente na matriz de covariância obtida com as estimativas dos

parâmetros quando o modelo é ajustado (RAYKOV, 2006). Existem dois tipos de resíduos que podem ser examinados na maioria dos modelos. Os resíduos não padronizados e os resíduos padronizados. Os resíduos não padronizados indexam a quantidade de covariância variável não explicada em termos da métrica original dos dados brutos. No entanto, se essa métrica é muito diferente é impossível examinar a significância desse resíduo. Padronizando esses resíduos para uma métrica comum, essa comparação se torna mais fácil.

Os resíduos padronizados r_{ij} são estimados pela fórmula

$$r_{ij} = \frac{e_{ij}}{\hat{\sigma}_{\varepsilon_{ij}}} \quad (59)$$

onde

e_{ij} é o elemento da linha i e coluna j da matriz dos resíduos $S - \Sigma(\hat{\theta})$ e

$\hat{\sigma}_{\varepsilon_{ij}}$ é a estimativa do desvio padrão de e_{ij}

$$\text{A estimativa do desvio padrão de } e_{ij} \text{ é dada por } \hat{\sigma}_{\varepsilon_{ij}} = \sqrt{\frac{(\hat{\sigma}_{ii}^2 \hat{\sigma}_{jj}^2 + \hat{\sigma}_{ij}^2)}{n}} \quad (60)$$

onde

$\hat{\sigma}_{ii}^2$, $\hat{\sigma}_{jj}^2$ e $\hat{\sigma}_{ij}^2$ são os elementos da matriz $\Sigma(\hat{\theta})$ que representa, respectivamente as variâncias da variável i , da variável j e a covariância entre i e j .

Para amostras grandes, resíduos com valor absoluto superior a dois (2) indicam *outliers* (com 95% de confiabilidade) e problemas locais de ajustamento (MARÔCO, 2014).

Além dos resíduos padronizados, os erros padrões dos parâmetros estimados e a confiabilidade individual das variáveis nos modelos de medida também podem ser usados para uma análise do ajuste do modelo. Sobre os erros padrões dos parâmetros do modelo e sua significância pode-se afirmar que, erro padrão superior a estimativa do parâmetro indica problemas com a estimativa desse parâmetro. Parâmetros não significativos sugerem a existência de problemas de especificação do modelo. A confiabilidade individual de uma variável manifesta é estimada pela fração de variância dessa variável que é explicada pelo fator latente. Este conceito é idêntico ao R^2 da regressão linear. Os *softwares* de MEE calculam o R^2 de cada variável manifesta endógena (que é igual ou aproximadamente igual ao peso fatorial dessa variável ao quadrado: $R_{x_i}^2 \cong (\lambda_{ij}^x)^2$). O estimador $R_{x_i}^2$ é definido da forma

$$R_{x_i}^2 = 1 - \frac{var(\delta_i)}{var(x_i)} \cong (\lambda_{ij}^x)^2 \quad (61)$$

Frequentemente referimo-nos a $R_{x_i}^2$ como a quantidade de variabilidade nos dados explicada ou considerada pelo modelo. Valores de $R_{x_i}^2$ menores que 0,25 (o fator explica menos de 25% da variância da variável manifesta) indicam possíveis problemas com a confiabilidade individual da variável. Pode-se obter também valores sobre a qualidade do ajustamento referente ao modelo de medida e ao modelo estrutural (MARÔCO, 2014).

2.1.6.7 Reespecificação do modelo

Se o modelo não apresentar um ‘bom’ ajustamento aos dados não significa que o modelo esteja completamente errado. É possível, com um número de alterações reduzidas, reespecificar o modelo para que o ajustamento melhore significativamente.

Conforme Marôco (2014) uma prática corrente de reespecificação consiste na modificação do modelo eliminando relações não significativas, liberando parâmetros anteriormente fixos, fixando parâmetros anteriormente livres e/ou correlacionando erros e medida. Para iniciar sua procura por melhoramentos no modelo, o pesquisador pode avaliar os resíduos da matriz de correlação ou de covariância prevista. Valores residuais acima de 2,58 são considerados estatisticamente significantes, num intervalo de confiança de 95%. A existência de resíduos significantes indica erro na previsão para um par de indicadores, que poderão ser revistos na reespecificação do modelo. A maioria dos *softwares* calculam índices de modificação (*Modification Index*) que estimam a redução da estatística χ^2 do modelo. Os índices de modificação (valores calculados para cada relação não estimada possível em um modelo) são a segunda fonte para o pesquisador identificar fontes de melhoramento no modelo.

Os índices de modificação correspondem à redução provocada pela estimação de um coeficiente, em qui-quadrado. Valores iguais ou acima de 3,84 sugerem uma redução estatisticamente significativa no qui-quadrado, caso aquele determinado parâmetro seja estimado (CAMPANA, 2009). No entanto deve ser enfatizado, que qualquer modificação do modelo deve ser justificada por razões teóricas e ser coerente com as já disponíveis teorias ou resultados de pesquisa anteriores no domínio sob consideração. O uso ‘cego’ de índices de modificação pode se tornar um caminho para os pesquisadores se desviarem de seus objetivos originais. Portanto é importante considerar a alteração apenas de parâmetros que têm uma interpretação clara. Estatísticas adicionais devem ser levadas em consideração quando da

mudança estimada para cada parâmetro antes de se chegar a uma decisão sobre modificações no modelo. Por esse motivo, qualquer modelo resultante de pesquisas de especificações deve ser validado de forma cruzada antes que a validade real possa ser determinada (RAYKOV, 2006).

2.1.6.8 Validação do modelo

O modelo ajustado na etapa anterior requer a validação numa amostra independente daquela onde o modelo foi ajustado. Uma solução recomendada é usar $\frac{3}{4}$ da amostra, selecionada aleatoriamente para ajustar o modelo e os outros $\frac{1}{4}$ restante é utilizado para avaliar a invariância do modelo. A avaliação da significância da diferença da qualidade do ajustamento do modelo nas duas amostras pode ser feita por meio do teste da razão de verossimilhança. Esta razão segue uma distribuição χ^2 com $d = \frac{1}{2} p \cdot (p + 1) - 1$ graus de liberdade (MARÔCO, 2014).

2.2 REGRESSÃO NÃO LINEAR

2.2.1 Introdução

A análise de regressão é uma metodologia estatística que utiliza a relação entre duas ou mais variáveis quantitativas para que uma variável possa ser prevista a partir da outra, ou de outras. Esta metodologia é amplamente utilizada nos negócios, nas ciências sociais e comportamentais e nas ciências biológicas. A análise de regressão serve três propósitos principais: descrição, controle e predição. Frequentemente usam-se equações para resumir ou descrever um conjunto de dados. A análise de regressão é útil no desenvolvimento de tais equações. Além da previsão, modelos de regressão podem ser usados para fins de controle.

Uma relação funcional entre duas variáveis é expressa por uma fórmula matemática. Se X denota a variável independente e Y a variável dependente, uma relação funcional é do tipo $Y = f(x)$. Dado um valor particular de $x \in X$, a função f indica o valor correspondente de Y . Uma relação estatística, ao contrário de uma função não é perfeita.

Dependendo da natureza das relações entre x e Y , a abordagem de regressão pode ser classificada em duas grandes categorias que são, modelos de regressão linear e modelos de regressão não-linear. Modelos lineares são geralmente aproximações satisfatórias para a

maioria das aplicações de regressão. Há ocasiões, no entanto, que um modelo não linear empiricamente indicado ou justificado teoricamente é mais apropriado.

2.2.2 Modelos de Regressão

Modelos de regressão são usados para descrever o comportamento de uma variável aleatória (v.a.) Y como uma função de condicionantes $x \in X$ chamadas de variáveis explicativas, covariáveis ou estímulos. Com tais modelos busca-se encontrar e descrever padrões de homogeneidade dentre a heterogeneidade observada em um conjunto de observações de Y .

Tal procedimento permite entre outros aspectos:

- a) explicar, ao menos parcialmente, o comportamento de Y ;
- b) quantificar a influência das condicionantes em Y ;
- c) selecionar, mediante algum critério, as condicionantes relevantes;
- d) prever o comportamento de Y para estados observados e também não observados das condicionantes x e
- e) avaliar a incerteza associada a esse processo.

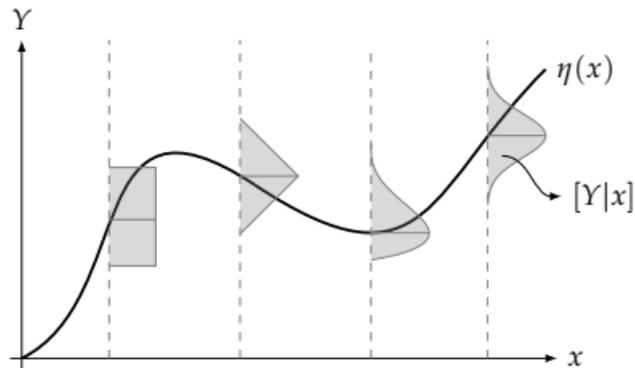
O objetivo na adoção de modelos de regressão é associar de alguma forma a distribuição (de probabilidades ou densidade de probabilidades) da v.a. Y a valores de $x \in X$ que denotamos por $[Y | x]$. A Figura 11 ilustra a ideia de regressão de forma genérica mostrando diferentes distribuições para Y para cada um dos valores de x . Entretanto, tal descrição genérica é de pouca valia na prática por ser de difícil interpretação e estimação a partir de dados reais.

As diversas especificações de modelos de regressão definem restrições e condições sobre esta especificação genérica (ZEVIANI *et al.*, 2013).

Conforme as restrições e condições iniciais impostas sobre a especificação genérica anteriormente mencionada, alguns modelos de regressão são frequentemente utilizados na literatura. A primeira e mais comum restrição é assumir que todos os Y 's pertencem a uma mesma família de distribuição.

Nessa condição, assume-se alguma família paramétrica conhecida definida para a função de probabilidade ou densidade de probabilidade $[Y | x, \theta]$ que depende do valor de x e é indexada por θ , um vetor de parâmetros, usualmente desconhecido, a ser estimado a partir de dados disponíveis. A especificação do modelo se completa com uma segunda restrição sobre o relacionamento de alguma característica da distribuição de Y com a covariável x . Tipicamente relaciona-se o parâmetro que indexa a distribuição, ou alguma função desse parâmetro a x .

FIGURA 11 – REPRESENTAÇÃO ESQUEMÁTICA GENÉRICA DE UM MODELO DE REGRESSÃO



FONTE: ZEVIANI *et al.* (2013)

Acrescenta-se também a condição de que tal relação é descrita por uma função com expressão fechada, que é a mesma para qualquer valor de x . Admitindo as restrições de que, qualquer Y_i possui distribuição gaussiana e que os Y_i possuem a mesma variância e média que depende do respectivo x_i , podendo o modelo de regressão ser expresso da forma

$$Y_i | x_i = g(\beta, x_i) = \beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon \quad (62)$$

$$\varepsilon \sim N(0, \sigma^2)$$

onde

ε são os erros aleatórios, sobre os quais são assumidos os pressupostos usuais.

Tal modelo é chamado de modelo de regressão linear simples, sendo linear por impor que a função $g(\beta, x_i)$ é uma função linear dos coeficientes β_0 e β_1 , que são os elementos do vetor de parâmetros θ , e simples por tal função envolver apenas uma variável explicativa x .

A distribuição de probabilidade de Y , correspondente ao valor prefixado de x é dada por $Y \sim N(\beta_0 + \beta_1 x_i, \sigma^2)$. Cada uma das restrições descritas para o modelo linear simples pode ser alterada ou relaxada na definição de modelos alternativos. Por exemplo, a forma linear na relação entre Y e x pode ser inadequada ou restritiva em um particular contexto. Possíveis alternativas incluem assumir uma regressão polinomial, como por exemplo uma forma quadrática $\mu_i = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2$; uma ligação não identidade, como por exemplo $\mu_i = \exp(\beta_0 + \beta_1 x)$ ou algum modelo intrinsecamente não-linear, por exemplo dado por algum sistema de equações diferenciais. Com todas as suas suposições, o modelo linear pode aparentar ser bastante restritivo impondo uma estrutura talvez arbitrariamente simples na relação entre Y e x sendo razoável que extensões com formas mais flexíveis sejam consideradas.

Extensões do modelo linear devem considerar, entre outros aspectos, relações não lineares entre Y e x , heterogeneidade de variâncias e não normalidade, possivelmente nessa ordem de relevância (ZEVIANI *et al.*, 2013).

Enquanto que os modelos lineares são compostos por uma relação linear da variável dependente com as preditoras, os modelos não lineares são caracterizados por funções $\varphi(\boldsymbol{\theta}, x_i)$ não lineares em pelo menos um dos parâmetros de $\boldsymbol{\theta}$. Para modelos de regressão não linear, pelo menos uma das derivadas parciais de $\varphi(\boldsymbol{\theta}, x_i)$ com relação a $\boldsymbol{\theta}$ depende de ao menos um dos parâmetros θ_i do modelo, ou seja, pode-se dizer que um modelo é não linear quando ele é não linear nos parâmetros. Conforme Greene (2018), estas são as suposições para um modelo de regressão não linear:

- a) forma funcional: A função esperança é dada por $E(y_i | x_i) = \varphi(\boldsymbol{\theta}, x_i)$, com $i = 1, \dots, n$ onde $\varphi(\boldsymbol{\theta}, x_i)$ é uma função duas vezes continuamente diferenciável.
- b) identificabilidade dos parâmetros do modelo: O vetor de parâmetros no modelo é identificado (estimado) se não houver nenhum parâmetro diferente de zero $\boldsymbol{\theta}^o \neq \boldsymbol{\theta}$ tal que $\varphi(\boldsymbol{\theta}^o, x_i) = \varphi(\boldsymbol{\theta}, x_i)$ para todo x_i .
- c) média zero nos erros (perturbações): Da primeira suposição decorre que $Y_i = \varphi(\boldsymbol{\theta}, x_i) + \varepsilon_i$, onde $E[\varepsilon_i | \varphi(\boldsymbol{\theta}, x_i)] = 0$. Isso indica que a perturbação na observação i não é correlacionada com a função média condicional para todas as observações na amostra.
- d) homoscedasticidade e não autocorrelação: Como num modelo linear, assume-se a homoscedasticidade condicional como sendo $E[\varepsilon_i^2 | \varphi(\boldsymbol{\theta}, x_j), j = 1, \dots, n] = \sigma^2$ uma constante finita. E a não auto correlação como $E[\varepsilon_i \varepsilon_j | \varphi(\boldsymbol{\theta}, x_i) \varphi(\boldsymbol{\theta}, x_j), j = 1, \dots, n] = 0$, para todo $j \neq i$.
- e) processo de geração de dados: O processo de geração de dados para x_i é considerado uma população ‘bem comportada’, de modo que os primeiros e segundos momentos dos dados possam ser considerados como convergentes para contrapartes populacionais fixas e finitas, e
- f) modelo de probabilidade subjacente: Existe uma distribuição de probabilidade bem definida gerando ε_i . Neste ponto, assumimos apenas que este processo produz uma amostra de variáveis aleatórias não correlacionadas, identicamente (marginalmente) distribuídas ε_i com média 0 e variância σ^2 condicionada em $\varphi(\boldsymbol{\theta}, x_i)$.

Os modelos não lineares são divididos em classes. Temos os modelos de crescimento, com uso expressivo na biologia; de rendimento, usados principalmente na agricultura; e os modelos compartimentados, usados com êxito na medicina e farmacocinética, e empregados na

química em áreas específicas da agricultura como o uso de fertilizantes e no estudo dos movimentos da população e da propagação de epidemias (MATTOS, 2013).

Entre os exemplos de modelos não linear mais conhecidos, pode-se citar os seguintes:

$$\text{i) Modelo de Mitscherlich} \quad Y = \beta_0(1 - e^{-\beta_1 x}) + \varepsilon \quad (63)$$

$$\text{ii) Modelo Logístico} \quad Y = \frac{\beta_0}{1 + \beta_1 e^{-\beta_2 x}} + \varepsilon \quad (64)$$

$$\text{iii) Modelo de Gompertz} \quad Y = \beta_0 e^{-\beta_1 e^{-\beta_2 x}} + \varepsilon \quad (65)$$

$$\text{iv) Modelo de Michaelis-Mentel} \quad Y = \frac{\beta_0 x}{\beta_1 + x} + \varepsilon \quad (66)$$

$$\text{v) Modelo Exponencial de Sthanford \& Smith} \quad Y = \beta_0(1 - e^{-\beta_1 x}) \quad (67)$$

Uma das maneiras de se escolher as funções é a partir da observação do gráfico dos pontos tabelados ou baseando-se em fundamentação teórica do experimento. O gráfico aqui citado é chamado gráfico (ou diagrama) de dispersão. Por meio desse diagrama pode-se visualizar a curva que melhor se ajusta aos dados. De maneira resumida, os modelos não lineares têm as seguintes vantagens sobre os modelos lineares:

- a) sua escolha tem sustentação baseada em teoria ou princípios mecanísticos (físicos, químicos ou biológicos) ou qualquer outra informação prévia;
- b) certos parâmetros são quantidade de interesse para o pesquisador providos de interpretação;
- c) podem ser feitas predições fora do domínio observado de x ;
- d) são parcimoniosos pois tipicamente possuem menos parâmetros e
- e) partem do conhecimento do pesquisador sobre o fenômeno alvo.

Em contrapartida, as desvantagens são:

- a) requerem procedimentos iterativos de estimação baseados no fornecimento de valores iniciais para os parâmetros;
- b) métodos de inferência são aproximados e
- c) exigem conhecimento do pesquisador sobre o fenômeno alvo.

2.2.3 Regressão Linearizada

Um modelo de regressão não linear é dito “intrinsecamente linear” se este puder ser reduzido a um modelo linear através de uma reparametrização adequada ou linearizado através de uma transformação. Os modelos que não podem ser reduzidos à forma linear são chamados de “intrinsecamente não lineares”. O inconveniente de uma transformação é que se pode alterar a estrutura e distribuição do erro, ou seja, se os erros do modelo original satisfizerem as suposições usuais de normalidade, independência e homogeneidade de variância, os erros do novo modelo, em geral, não satisfarão tais suposições (UEDA, 2003).

Tomando como exemplo o modelo de Michaelis-Menten $Y = \frac{Ax}{B+x} + \varepsilon$ com $\varepsilon \sim N(0, \sigma^2)$, o mesmo pode ser linearizado aplicando a transformação recíproca, da forma:

$$\mu = \frac{Ax}{B+x} \rightarrow \mu^{-1} = \frac{B+x}{Ax} = \frac{1}{A} + \frac{B}{A} \frac{1}{x} \quad (68)$$

adotando $\beta_0 = \frac{1}{A}$, $\beta_1 = \frac{B}{A}$ e a covariável $x^* = \frac{1}{x}$ obtém-se a função

$$Y_i | x_i \sim N(\mu_i, \sigma^2) \quad (69)$$

$$\mu_i = g(\beta_0, \beta_1, x) = (\beta_0 + \beta_1 x^*)^{-1}$$

O modelo apresentado pode portanto ser dito um *modelo não-linear* gaussiano de Y como função de x ou, equivalentemente, um *modelo linear generalizado* com distribuição gaussiana, função de ligação inversa e covariável $1/x$. Dessa forma, algoritmos de uma ou outra metodologia podem ser usados para ajustar o modelo para um determinado conjunto de dados e devem fornecer resultados equivalentes retornando as mesmas estimativas (após reparametrizações) e valores preditos. O processo de linearização acima descrito é denominado Lineweaver-Burk, além desse existem outras formas de linearizar o modelo de Michaelis-Menten (ZEVIANI *et al.*, 2013). No software R[®] (R Core Team, 2019) pode-se fazer o ajuste usando as funções *nls()* (PADFIELD, 2018) ou *glm()*

2.2.4 Métodos de estimação

Existem duas classes de métodos para aproximação de dados, e a distinção entre elas está em considerar, ou não, a existência de erros nos dados. Se os dados são precisos pode-se exigir que a curva de ajuste passe pelos pontos dados, resolve-se este tipo de problema por interpolação. Como na maioria das vezes as funções escolhidas são polinômios, a interpolação é chamada de polinomial. Contudo a interpolação não é aconselhável quando é preciso obter um valor aproximado da função em algum ponto fora do intervalo de tabelamento, ou seja, quando se quer extrapolar e também quando os valores tabelados são resultados de algum experimento físico ou de alguma pesquisa, porque, nestes casos, estes valores poderão conter erros inerentes que, em geral, não são previsíveis.

Surge então a necessidade de se ajustar a estas funções tabeladas uma função que seja uma “boa aproximação” para os valores tabelados e que nos permita “extrapolar” com certa margem de segurança. Quando se leva em consideração possíveis erros introduzidos na obtenção dos dados, o método dos mínimos quadrados tem sido o mais usado (CUNHA, 2003).

2.2.4.1 Método dos mínimos quadrados

O método dos mínimos quadrados (ou quadrados mínimos) é a técnica de aproximação mais usada na análise numérica e em problemas práticos, devido a sua simplicidade e porque se busca aproximações para dados que são medidas obtidas experimentalmente com um certo grau de incerteza. O método foi publicado pela primeira vez por Adrien-Marie Legendre em 1805, mas ele já era usado por Carl-Friedrich Gauss, em seus cálculos de Astronomia, desde 1795. Seja a função $Y = f(x)$, $\varphi(\boldsymbol{\theta}, x_i)$ e $\varepsilon_i = y_i - \varphi(\boldsymbol{\theta}, x_i)$ os resíduos em x_i . O método dos mínimos quadrados tem por objetivo minimizar uma função definida a partir dos resíduos.

A escolha mais comum para essa função é a soma dos quadrados dos resíduos (SQR). Supondo que ε_i satisfaça pelo menos aproximadamente as seguintes condições:

$$E(\varepsilon_i) = 0, \text{ com } 1 \leq i \leq n$$

$$V(\varepsilon_i) = \sigma^2 > 0, \text{ com } 1 \leq i \leq n$$

$$Cov(\varepsilon_i, \varepsilon_j) = 0, \text{ com } 1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq n \text{ e } i \neq j$$

Deve-se escolher os coeficientes que minimizam a função

$$SQR(\boldsymbol{\theta}) = \sum_{i=1}^n [y_i - \varphi(\boldsymbol{\theta}, x_i)]^2 \quad (70)$$

Para encontrar os estimadores de mínimos quadrados, é preciso derivar a igualdade (70) com relação a cada elemento do vetor $\boldsymbol{\theta}$ e igualar a 0, obtendo-se um vetor de equações normais que se resume a

$$\frac{\partial}{\partial \theta_j} \sum_{i=1}^n [y_i - \varphi(\boldsymbol{\theta}, x_i)]^2 = 0 \quad \rightarrow \quad \sum_{i=1}^n [y_i - \varphi(\boldsymbol{\theta}, x_i)] \frac{\partial}{\partial \theta_j} \varphi_i(\boldsymbol{\theta}, x_i) = \mathbf{0} \quad (71)$$

com $j = 1, \dots, n$ sendo n o número de parâmetros a se determinar.

Procedendo desta forma, determina-se um sistema de n equações normais para o modelo não linear. Para modelos lineares esse sistema normalmente possui um vetor único de soluções para os parâmetros $\boldsymbol{\theta}$, em que cada parâmetro depende unicamente dos dados observados. Já para modelos não lineares, os estimadores em geral não apresentam forma analítica e as soluções precisam ser obtidas por algum método de aproximações iterativo (THOMAS, 2016).

2.2.4.2 Método dos mínimos quadrados generalizados

Esse método dos mínimos quadrados generalizados (GLS), descrito inicialmente por Alexander Aitken em 1934, é utilizado quando a variância dos erros não é a mesma (heteroscedasticidade), ou quando há certa correlação entre os resíduos. A soma de quadrados dos resíduos a ser minimizada é dada por:

$$SQR(\boldsymbol{\theta}) = \sum_i [y_i - \varphi(\boldsymbol{\theta}, x_i)]' V^{-1} [y_i - \varphi(\boldsymbol{\theta}, x_i)] \quad (72)$$

onde

V é uma matriz positiva definida.

Denota-se por $\widehat{\boldsymbol{\theta}}_G$ a estimativa de mínimos quadrados generalizados que minimiza (70). Seja $V = U'U$ uma decomposição de Cholesky de V onde U é uma matriz triangular superior. Multiplicando o modelo não linear $y_i = \varphi(\boldsymbol{\theta}, x_i) + \varepsilon_i$ por $R = (U')^{-1}$, obtemos

$$Ry_i = R\varphi(\boldsymbol{\theta}, x_i) + R\varepsilon_i \quad \rightarrow \quad z = k(\boldsymbol{\theta}) + \boldsymbol{\eta} \quad (73)$$

Logo, a soma dos quadrados descrita na equação (72) pode ser reescrita como

$$SQR(\boldsymbol{\theta}) = [z - k(\boldsymbol{\theta})]' [z - k(\boldsymbol{\theta})] \quad (74)$$

O vetor das estimativas $\widehat{\boldsymbol{\theta}}_G$ passa a ser um vetor de estimativas de mínimos quadrados para os dados transformados, pois esta transformação utilizando a decomposição de Cholesky, permite tratar os dados como de um caso de variâncias homogêneas com observações independentes (MATTOS, 2013).

2.2.4.3 Método da máxima verossimilhança

Se os resíduos ε_i são independentes e identicamente distribuídos (i.i.d.) com distribuição $N(0, \sigma^2)$, então a função de verossimilhança L é dada por

$$L(\boldsymbol{\theta}, \sigma^2) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{n/2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} \sum_i [y_i - \varphi(\boldsymbol{\theta}, x_i)]^2 \right\} \quad (75)$$

Ignorando as constantes, a função log-verossimilhança de (75) é dada por

$$\begin{aligned} l(\boldsymbol{\theta}, \sigma^2) &= -\frac{n}{2} \log \sigma^2 - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_i [y_i - \varphi(\boldsymbol{\theta}, x_i)]^2 \\ &= -\frac{n}{2} \log \sigma^2 - \frac{1}{2\sigma^2} SQR(\boldsymbol{\theta}) \end{aligned} \quad (76)$$

Na expressão acima σ^2 é minimizada com respeito a $\boldsymbol{\theta}$ quando $SQR(\boldsymbol{\theta})$ é minimizada, isto é, $\boldsymbol{\theta} = \widehat{\boldsymbol{\theta}}$ (estimativa de mínimos quadrados), além disso $\frac{\partial l}{\partial \sigma^2} = 0$ tem solução dada por $\sigma^2 = \frac{SQR(\widehat{\boldsymbol{\theta}})}{n}$, o que dá um valor máximo (para dado $\boldsymbol{\theta}$) quando a segunda derivada é negativa.

Isto sugere que $\widehat{\boldsymbol{\theta}}$ e $\sigma^2 = \frac{SQR(\widehat{\boldsymbol{\theta}})}{n}$ são estimativas de máxima verossimilhança (MATTOS, 2013)

2.2.4.4 Métodos iterativos

Para minimizar $SQR(\boldsymbol{\theta})$ na igualdade (70), quanto para minimizar $L(\boldsymbol{\theta}, \sigma^2)$ em (75) é necessário o uso de algum método numérico iterativo. Dentre os principais, pode-se citar o método de Gauss-Newton, método de Davidon-Fletcher-Powell, método da descida mais íngreme (*steepest descent*), método da procura pelo gradiente conjugado, método da procura de

Nelder-Mead, algoritmo de Golub-Pereyra, entre outros. Todos os processos iterativos dependem da escolha de boas estimativas iniciais e os métodos de ajuste de uma regressão não linear não são exceção. Um tamanho amostral pequeno ou a escolha de uma estimativa inicial ruim pode levar o algoritmo a convergir para um máximo local ao invés do máximo global ou mesmo divergir, além de se tornar mais demorado e custoso computacionalmente. Se existirem múltiplos mínimos ou se existem vários mínimos locais, além de um mínimo absoluto, os valores iniciais podem resultar em má convergência para um ponto estacionário indesejado da soma dos quadrados de superfície. Este(s) ponto(s) indesejado(s) pode(m) ter valores de parâmetros que são fisicamente impossíveis ou que não proporcionam o verdadeiro valor mínimo de $SQR(\boldsymbol{\theta})$. Existem técnicas de escolha de estimativas iniciais de um modelo não linear, entre as técnicas mais conhecidas podemos listar:

- a) linearização: Essa técnica consiste em realizar uma transformação da função esperança afim de torná-la linear nos parâmetros. Quando isso for possível, pode-se realizar uma regressão linear da variável transformada sobre os novos parâmetros e usar as estimativas (após aplicar a transformação inversa) dessa regressão como estimativas iniciais para o modelo não linear, ignorando o erro aleatório;
- b) através das propriedades do modelo: outra abordagem é a de estudar o comportamento limite da função esperança quando x_i tende para 0 ou infinito e substituir os parâmetros por valores iniciais que os representem nas condições na escala e contexto do problema, e
- c) análise gráfica: ainda, outra técnica muito usada é a simples análise visual dos dados para “chutar” valores iniciais para os parâmetros do modelo. Nesse caso, o conhecimento do pesquisador e a familiaridade com o modelo utilizado são de grande valia (THOMAS, 2016).

Um critério de convergência adotado é baseado na diferença entre valores consecutivos de $\boldsymbol{\theta}$, ou de $SQR(\boldsymbol{\theta})$, que quando for inferior a um valor $d > 0$ pré determinado, considera-se que houve convergência.

2.2.5 Coeficiente de determinação – R^2

Uma das formas de avaliar a qualidade do ajuste do modelo em uma regressão é através do coeficiente de determinação. Basicamente, este coeficiente indica quanto o modelo foi capaz de explicar os dados coletados. O coeficiente de determinação é dado pela expressão

$$R^2 = \frac{SQR}{SQT} = 1 - \frac{SQE}{SQT} = \frac{\hat{\beta} \sum_{i=1}^m (x_i - \bar{x}) Y_i}{\sum_{i=1}^m (Y_i - \bar{Y})^2} \quad (77)$$

onde

SQR é a soma de quadrados da regressão com $SQR = \sum_{i=1}^m (\hat{Y}_i - \bar{Y})$

SQT é a soma de quadrados totais com $SQT = \sum_{i=1}^m (Y_i - \bar{Y})^2$

ou seja, é a razão entre a soma de quadrados da regressão e a soma de quadrados total. No modelo com intercepto, podemos escrever

$$R^2 = \frac{(\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}) Y_i)^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2} \quad (78)$$

Notemos que $0 \leq R^2 \leq 1$.

O R^2 é portanto, uma medida descritiva da qualidade do ajuste obtido. Em geral referimo-nos ao R^2 como a quantidade de variabilidade nos dados que é explicada pelo modelo de regressão ajustado. Entretanto, o valor do coeficiente de determinação depende do número de observações, tendendo a crescer quando n diminui.

O R^2 deve ser usado com precaução, pois é sempre possível torná-lo maior pela adição de um número suficiente de termos ao modelo. Assim, se por exemplo, não há dados repetidos (mais do que um valor y para um mesmo x) um polinômio de grau $(n - 1)$ dará um ajuste perfeito ($R^2 = 1$) para n dados. Quando há valores repetidos, o R^2 não será nunca igual a um (1), pois o modelo não poderá explicar a variabilidade devido ao erro puro. Embora R^2 aumente com a adição de termos ao modelo, isto não significa necessariamente que o novo modelo é superior ao anterior. A menos que a soma de quadrados residual do novo modelo seja reduzida por uma quantidade igual ao quadrado médio residual original, o novo modelo terá um quadrado médio residual maior do que o original, devido a perda de um (1) grau de liberdade.

Na realidade esse novo modelo poderá ser pior do que o anterior. A magnitude de R^2 também depende da amplitude de variação da variável regressora (x). Geralmente, R^2 aumentará com maior amplitude de variação dos x 's e diminuirá em caso contrário. Assim, um valor grande de R^2 poderá ser grande simplesmente porque x variou em uma amplitude muito grande. Por outro lado, R^2 poderá ser pequeno porque a amplitude dos x 's foi muito pequena para permitir que uma relação com y fosse detectada (MONTGOMERY, 2012).

2.2.6 Medidas de não linearidade

Medidas de não linearidade tem como objetivo verificar se o grau de não linearidade de um problema de estimação não linear é suficientemente pequeno para que as técnicas usuais de estimação, desenvolvidas para a regressão linear, sejam utilizadas como uma boa aproximação para o modelo não linear. Diversos autores se preocupam em estudar a não linearidade e propuseram medidas para a sua quantificação. Na prática, as medidas de vício de Box e as medidas de curvatura de Bates e Watts são as ferramentas mais empregadas na avaliação da não linearidade de um modelo, podendo também ser usadas em problemas de discriminação, uma vez que o melhor modelo possível, dentre todos os propostos, seria aquele que apresenta um comportamento mais próximo do linear (MATTOS, 2013).

2.2.7 Considerações sobre ajustamento de curvas e seu uso em modelos de equações estruturais

Muita ênfase tem sido dada ao estudo de sistemas multivariados, nos quais se pode medir muitas variáveis, simultaneamente, ao se analisar uma amostra qualquer. Nesses sistemas são utilizadas técnicas de estatística multivariada, álgebra linear e análise numérica (CRUZ, 2003). No caso da MEE, a aplicação de regressão não linear tem ocupado pouco espaço ou até quase nenhum entre as pesquisas envolvendo as estimativas dos parâmetros e dos índices de qualidade de ajustamento.

É importante lembrar que quando se ajusta uma curva a um conjunto de dados, seja com o objetivo de entender a relação entre as variáveis ou para fazer previsões, precisa-se ficar atento ao intervalo ao qual os dados estão limitados. Isso porque o comportamento da relação entre as variáveis não foi estudado fora dos limites desse intervalo e, portanto, não se pode assumir que o mesmo modelo que se ajusta bem aos dados contidos no intervalo considerado, se ajustará para valores não contidos no intervalo. No entanto, há algumas situações em que a extrapolação pode ser utilizada, nos casos onde houver a possibilidade de que o comportamento dos dados seja conhecido fora do intervalo dos dados preditores.

Na metodologia proposta para esse trabalho, serão realizados alguns testes preliminares com os modelos disponíveis para verificação dessa premissa importante. Se os testes mostrarem que os dados se comportam de maneira uniforme, o que se pode esperar, visto que, para os índices de qualidade de ajustamento, os valores somente apresentam grande variação para amostras muito pequenas, se poderá fazer uso da técnica de ajustamento para

projetar estimativas para maiores quantidades de observações e ratificar o ajustamento adequado do modelo, mesmo para valores fora do intervalo dos dados. Em previsões obtidas com regressão deve-se estar atento a duas fontes de erros de variância. A primeira vem do fato de que o modelo ajustado reflete uma descrição imperfeita dos dados considerados, ainda que o modelo seja capaz de explicar mais de 80% da variância da variável dependente.

No caso de previsões fora da amostra, outro erro de variância precisa ser levado em consideração, o erro da amostra. Os parâmetros do modelo são estimados usando dados da amostra, os quais podem ou não ser perfeitamente representativos da população da qual a observação da previsão é tomada. Esses erros poderão afetar a precisão das estimativas e consequentemente das previsões realizadas.

Se o modelo desempenha bem sua capacidade de generalizar além da amostra pode-se dizer que ele mostra o que se chama de validade externa. Uma ameaça à validade externa é a possibilidade de ajuste exagerado do modelo de regressão, isto é, escolher os valores dos parâmetros do modelo para explicar não somente a variação que podemos observar na população como um todo, mas também a variação devida ao “ruído” da amostra. O ajuste do modelo melhora, mas sua capacidade de ajustar as observações fora da amostra torna-se pior porque os padrões captados na amostra não se generalizam para a população. Isto é o que a literatura refere como capitalizar sobre o acaso (ou sobre o ‘ruído’). Uma forma de saber se um problema com ajuste exagerado pode ter comprometido a validade externa é validar o modelo testando seu desempenho preditivo. Se o número de observações é suficiente, deve ser possível dividir a amostra aleatoriamente em dois conjuntos: um deles para calibrar o modelo e outro para validar. Quando o conjunto de dados é pequeno demais para dividir, como no caso dos modelos considerados nesse trabalho, pode-se usar algumas técnicas alternativas. (LATTIN *et al.*, 2011). Uma dessas técnicas, chamada validação *Jacknife* (ou validação de método-U) segue os mesmos passos adotados no trabalho de Crask e Perreault Jr. (CRASK, 1977).

Por causa desses possíveis erros, no ajuste por regressão não linear, pode-se determinar intervalos de confiança para os parâmetros determinados e, com isso também calcular intervalos de confiança para os valores preditos pelo modelo. Esses intervalos são chamados de “bandas de confiança” ou “faixas de confiança”. São linhas em um gráfico de linha ajustada que retratam os limites de confiança superior e inferior para todos os pontos em uma linha ajustada dentro do intervalo de dados, além de fornecer uma ideia sobre a variabilidade global do estimador.

Confiar em estimativas pontuais pode ser perigoso, portanto se geram essas faixas de confiança para afastar-se dessas estimativas que podem ser duvidosas.

2.2.8 Intervalos de confiança e intervalos de predição (Método Delta)

Vale a pena ressaltar que existem diferenças entre um intervalo de confiança e um intervalo de previsão. Um intervalo de previsão se refere à incerteza em torno de um único valor, devem considerar tanto a incerteza em saber o valor da média da população, quanto a dispersão de dados, enquanto um intervalo de confiança pertence a uma média ou outra estatística calculada a partir de vários valores. Há uma diferença sutil, mas grande, entre os intervalos de previsão e os intervalos de confiança. Com um intervalo de confiança, estamos tentando obter um limite superior e inferior para o parâmetro. Para um intervalo de previsão, estamos interessados nos limites superior e inferior de uma observação individual, o intervalo de previsão informa sobre a distribuição dos valores, não a incerteza na determinação da população média. Assim, um intervalo de previsão normalmente será muito mais amplo do que um intervalo de confiança para o mesmo valor. Os intervalos de predição ajudam a avaliar a significância prática de seus resultados. Se um intervalo de previsão se estende para fora dos limites aceitáveis, as previsões podem não ser suficientemente precisas para suas necessidades.

Qual se deve usar? Isso depende do contexto e do propósito da análise, mas, em geral, os cientistas de dados estão interessados em previsões individuais específicas, portanto um intervalo de previsão seria mais apropriado. Usar um intervalo de confiança quando você deve usar um intervalo de previsão irá subestimar muito a incerteza em um determinado valor previsto (BRUCE, 2019). Nesta pesquisa usaremos o intervalo de predição para validar o ajuste do modelo estrutural, observando se os limites desse intervalo estão entre valores considerados satisfatórios para um bom ajuste do modelo estrutural.

Caso o intervalo de predição para os valores extrapolados apresentar limites que representem baixo ou péssimo ajustamento, conforme valores de referência apresentados no quadro 6, não será possível determinar o bom ajuste do modelo estrutural por meio das observações consideradas para o ajuste por regressão. Neste caso, busca-se verificar usando mais de um índice analisado, ou incluir mais observações, que não seria apropriado para os objetivos dessa pesquisa. No caso da banda de confiança calculada sobre o ajuste, para um modelo de regressão não linear, a matriz de derivadas (gradiente) é desconhecida e dependente dos valores dos parâmetros. É por isso que se usa um procedimento iterativo para encontrar as estimativas que minimizam a soma de quadrados dos resíduos. Uma vez que se tem os valores dos parâmetros (estimativas), pode-se avaliar o gradiente com esses valores. Com isso se é capaz de calcular o intervalo de confiança para os valores preditos por um modelo de regressão

não linear. O método Delta é uma abordagem geral para calcular intervalos de confiança para funções de estimativas de máxima verossimilhança.

O método usa uma função que é muito complexa para calcular analiticamente a variância, então cria uma aproximação linear dessa função e, em seguida, calcula a variância da função linear mais simples que pode ser usada para inferência de amostra grande (XU, 2005). Dentre suas aplicações, uma das mais comuns é relacionada à inferência sobre funções de parâmetros em modelos de regressão, como a razão entre parâmetros, transformação de um parâmetro, ou valor predito pelo modelo (ZEVIANI, 2013). O método Delta pode ser aplicado para derivar uma distribuição de probabilidade aproximada para uma função de estimadores que são assintoticamente normalmente distribuídos. Conforme Lavielle (2019) para um dado valor x_0 da variável explicativa x , pode-se usar o modelo φ com o parâmetro estimado $\hat{\theta}$ e prever a resposta como $\varphi(\hat{\theta}, x_0)$. Como $\hat{\theta}$ é um vetor aleatório com matriz de variância $\text{Var}(\hat{\theta})$, $\varphi(\hat{\theta}, x_0)$ também é uma variável aleatória que pode ser aproximada por uma função linear de $\hat{\theta}$ da forma

$$\varphi(\theta, x_0) \simeq \varphi(\hat{\theta}, x_0) + \nabla\varphi(\hat{\theta}, x_0) \cdot (\theta - \hat{\theta}) \quad (79)$$

onde:

$\nabla\varphi(\hat{\theta}, x_0)$ é o gradiente de $\varphi(\hat{\theta}, x_0)$, isto é, o vetor linha das derivadas primeiras de $\varphi(\hat{\theta}, x_0)$ em relação aos componentes de $\hat{\theta}$.

Assim, o método Delta consiste em usar essa aproximação para estimar a variância de $\varphi(\hat{\theta}, x_0)$ por

$$\text{Var}[\varphi(\hat{\theta}, x_0)] \simeq \nabla\varphi(\hat{\theta}, x_0) \cdot \text{Var}(\hat{\theta}) \cdot \nabla\varphi(\hat{\theta}, x_0)' \quad (80)$$

e, usando essa aproximação, pode-se calcular um intervalo de confiança de $(1 - \alpha) \cdot 100\%$ para cada predição de $\varphi(\theta, x_i)$, escrito da forma

$$\text{IC}(1 - \alpha) \cdot 100\% = [\varphi(\hat{\theta}, x_0) + t_{\alpha/2, n-d} \cdot s(\varphi(\hat{\theta}, x_0)); \varphi(\hat{\theta}, x_0) + t_{1-\alpha/2, n-d} \cdot s(\varphi(\hat{\theta}, x_0))] \quad (81)$$

onde

$(n - d)$ representa os graus de liberdade do modelo

$s(\varphi(\hat{\theta}, x_0))$ é o erro padrão de $\varphi(\hat{\theta}, x_0)$ definido por

$$s(\varphi(\hat{\theta}, x_0)) = \sqrt{\nabla\varphi(\hat{\theta}, x_0) \cdot \text{Var}(\hat{\theta}) \cdot \nabla\varphi(\hat{\theta}, x_0)'} \quad (82)$$

onde

$\nabla\varphi(\hat{\theta}, x_0)$ é a matriz gradiente avaliada em x_0

$\text{Var}(\hat{\theta})$ é a matriz de covariância das estimativas dos parâmetros

Também é possível calcular um intervalo de previsão para uma observação futura $y_0 = \varphi(\theta, x_0) + e_0$. A previsão para y_0 é $\hat{y}_0 = \varphi(\hat{\theta}, x_0)$. Então, o erro padrão para esta predição deve levar em conta a incerteza em $\varphi(\theta, x_0)$ e a variabilidade do erro padrão residual e_0 que é dado por:

$$s(\hat{y}_0) = \sqrt{\nabla\varphi(\hat{\theta}, x_0) \cdot \text{Var}(\hat{\theta}) \cdot \nabla\varphi(\hat{\theta}, x_0)' + \sigma^2} \quad (83)$$

Assim o intervalo de previsão para os valores preditos pelo modelo será dado por:

$$\text{IC}(1 - \alpha).100\%(\hat{y}_0) = [\varphi(\hat{\theta}, x_0) + t_{\alpha/2, n-d} \cdot s(\hat{y}_0); \varphi(\hat{\theta}, x_0) + t_{1-\alpha/2, n-d} \cdot s(\hat{y}_0)] \quad (84)$$

O fato de usar a covariância das estimativas dos parâmetros e o erro padrão residual do ajuste, faz com que o intervalo de predição seja maior que o intervalo de confiança, e por essa razão que será admitido como referência para a banda de confiança que será adotada para os valores extrapolados. Melhores detalhes podem ser observados no trabalho de Xu e Long (2005) e BARBIERI (2016). O algoritmo para construção do gráfico com as estimativas, ajuste e banda de confiança, escrito pelo Zeviani (WALMES, 2011) está no anexo D.

3 MATERIAL e METODOLOGIA

Este capítulo contém duas seções. Na primeira seção (3.1) é feita uma descrição dos materiais utilizados neste trabalho, tais como os modelos e dados disponibilizados e *softwares* aplicados. Na seção 3.2 é apresentada a metodologia que será utilizada para a obtenção dos resultados e algoritmos de forma a contemplar os objetivos iniciais desse trabalho.

3.1 MATERIAL

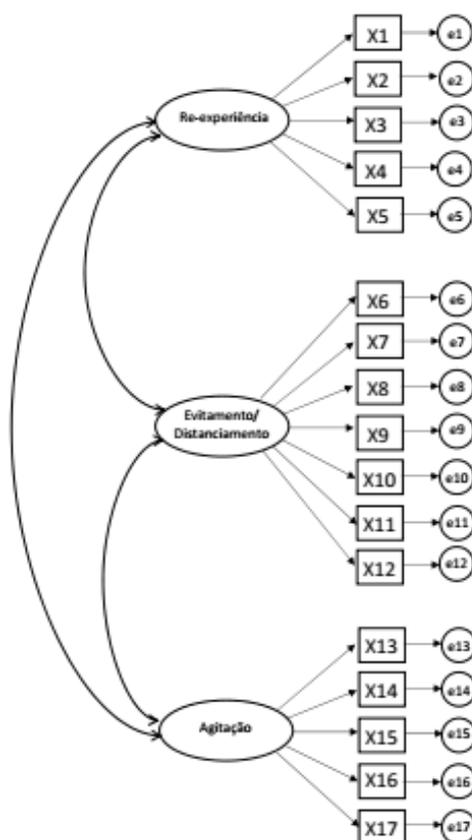
Para alcançar os objetivos traçados neste trabalho foram utilizados alguns modelos de equações estruturais com variáveis latentes, extraídos de algumas fontes literárias, com permissão e referências aos autores. A grande dificuldade encontrada nos trabalhos consultados foi ter acesso aos dados originais de MEE analisados. A maioria dos autores não disponibilizam os dados originais sob justificativa de sigilo acadêmico, ética ou outros motivos não expostos.

Houve a possibilidade de dispor de 5 modelos com seus respectivos bancos de dados, escolhidos entre alguns cedidos pelos autores, modelos estes escolhidos pela complexidade, número de variáveis e graus de liberdade. Os modelos utilizados complementam dois tipos básicos, os modelos de Análise Fatorial Confirmatória (AFC) e os modelos de regressão. As variáveis observadas em todos os modelos não foram detalhadas, para preservar os trabalhos originais e/ou por não serem descritas pelos autores.

i) Modelo 1 (Modelo_PTSD): Modelo de Análise Fatorial de 1^a ordem, adaptado do trabalho de Cordova *et al.* (2000 apud Marôco 2014, p.201) que avaliaram a estrutura fatorial da PTSD (*Post-Traumatic Stress Disorder*) em pacientes com câncer de mama. O banco de dados com 199 observações refere-se ao trabalho de Melo, Marôco e Leal (2006) que avaliaram a adequação da estrutura proposta numa amostra de mulheres portuguesas.

A representação gráfica do modelo com 17 variáveis observáveis, 3 fatores e 116 graus de liberdade está representada na figura 12.

FIGURA 12 – REPRESENTAÇÃO GRÁFICA DO MODELO 1 (Modelo_PTSD)

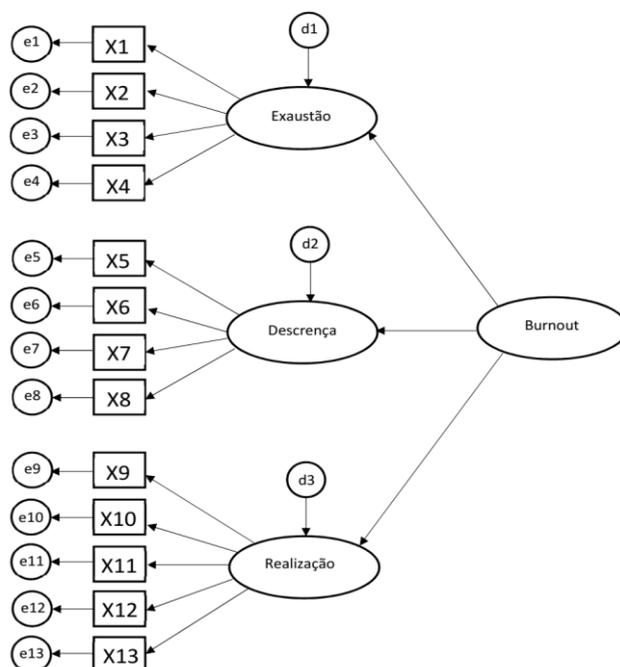


FONTE: O autor (2019)

ii) Modelo 2 (Modelo_Burnout): Modelo de Análise Fatorial de 2ª ordem adaptado de Marôco *et al.* (2008) onde os autores avaliam a validade fatorial e confiabilidade da escala MBI –HSS (*Maslach Burnout Inventory – Human Services Survey*) quando aplicada uma amostra de estudantes portugueses de Psicologia. A partir da estrutura de três (3) fatores original, os autores propuseram uma estrutura hierárquica de 2ª ordem que permite estimar uma pontuação total de *burnout*⁹. O banco de dados originais desse estudo é composto por 296 observações. O modelo é representado graficamente na figura 13, com 13 variáveis observáveis, 3 fatores de primeira ordem e 1 fator latente de segunda ordem, tendo 51 graus de liberdade.

⁹ A síndrome de burnout, ou síndrome do esgotamento profissional, é um distúrbio psíquico descrito em 1974 por Freudenberger, um médico americano. O Maslach Burnout Inventory (MBI) é o instrumento utilizado em mais de 90% dos trabalhos empíricos publicados sobre a síndrome. Trata-se de uma escala de autoavaliação de tipo Likert em que é pedido ao sujeito que avalie, em sete possibilidades que vão de “nunca” a “todos os dias”, com que frequência sente um conjunto de sentimentos (MARÔCO *et al.*, 2008)

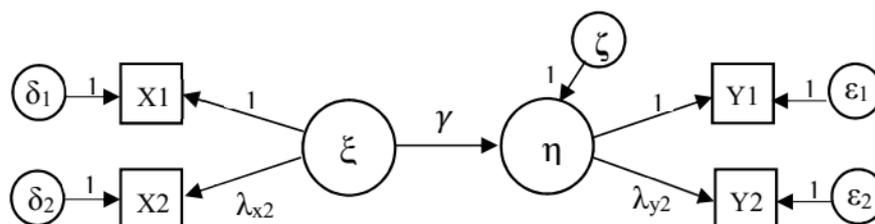
FIGURA 13 – REPRESENTAÇÃO GRÁFICA DO MODELO 2 (Modelo_Burnout)



FONTE: O autor (2019)

iii) Modelo 3 (Modelo_Exemplo): Modelo utilizado no corpo da fundamentação teórica desse trabalho na seção 2.1.6.4 (p. 54) extraído do livro de Marôco (2014). Este modelo é o único que representa uma situação hipotética não real, sendo criado para ilustrar a questão de identificação de um modelo. O banco de dados utilizado foi adaptado do banco de dados do trabalho de Melo, Marôco e Leal (2006) contendo 480 observações. As variáveis foram selecionadas de formas a cumprir com os pressupostos para aplicação de uma MEE, exceto o fato de apresentar normalidade multivariada, e de maneira que o modelo apresente uma adequação aos dados com baixo grau de liberdade. O modelo é representado graficamente na figura 14, o modelo possui 4 variáveis observáveis, com 2 fatores e 1 grau de liberdade.

FIGURA 14 – REPRESENTAÇÃO GRÁFICA DO MODELO 3 (Modelo_Exemplo)



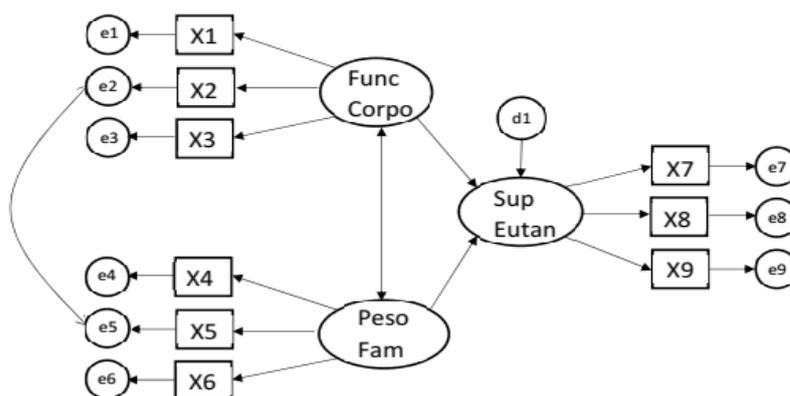
FONTE: MARÔCO (2014)

iv) Modelo 4 (Modelo_Eutanasia): Adaptado do trabalho de Ho (1999, apud Marôco, 2014) que conduziu um estudo onde avaliou a opinião pública australiana relativamente a eutanásia voluntária, Marôco (2014) sugere alterações no modelo originalmente proposto para análise dos efeitos diretos e indiretos relativa a opinião sobre a eutanásia voluntária. O modelo considerado é um dos propostos por Marôco (2014, p.269) em seus estudos, após análise das trajetórias no modelo original. Conforme o próprio Marôco cita em seu trabalho (2014, p. 263), “A utilização de um modelo de medida mal ajustado pode comprometer a interpretação e significância dos coeficientes de trajetória do modelo estrutural.”

O banco de dados com 352 observações contém os dados originais e a representação gráfica do modelo com 9 variáveis observáveis, 3 fatores e 23 graus de liberdade está apresentada na figura 15.

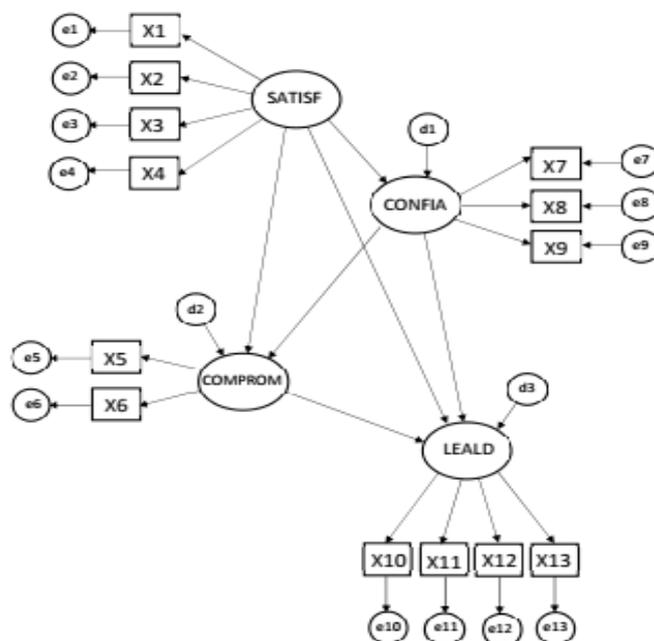
v) Modelo 5 (Modelo_Banco): Adaptado do trabalho de Prado (2004) que estudou os processos relativos ao Marketing de Relacionamento, analisando os resultados destes entre bancos e usuários (pessoas físicas), sob o ponto de vista destes últimos. Os dados utilizados na pesquisa foram adaptados do banco de dados fornecido. O banco de dados original é composto por 485 observações. A representação gráfica do modelo com 13 variáveis observáveis, 4 fatores e 59 graus de liberdade está representada na figura 16

FIGURA 15 – REPRESENTAÇÃO GRÁFICA DO MODELO 4 (Modelo_Eutanasia)



FONTE: O autor (2019)

FIGURA 16 – REPRESENTAÇÃO GRÁFICA DO MODELO 5 (Modelo_Banco)

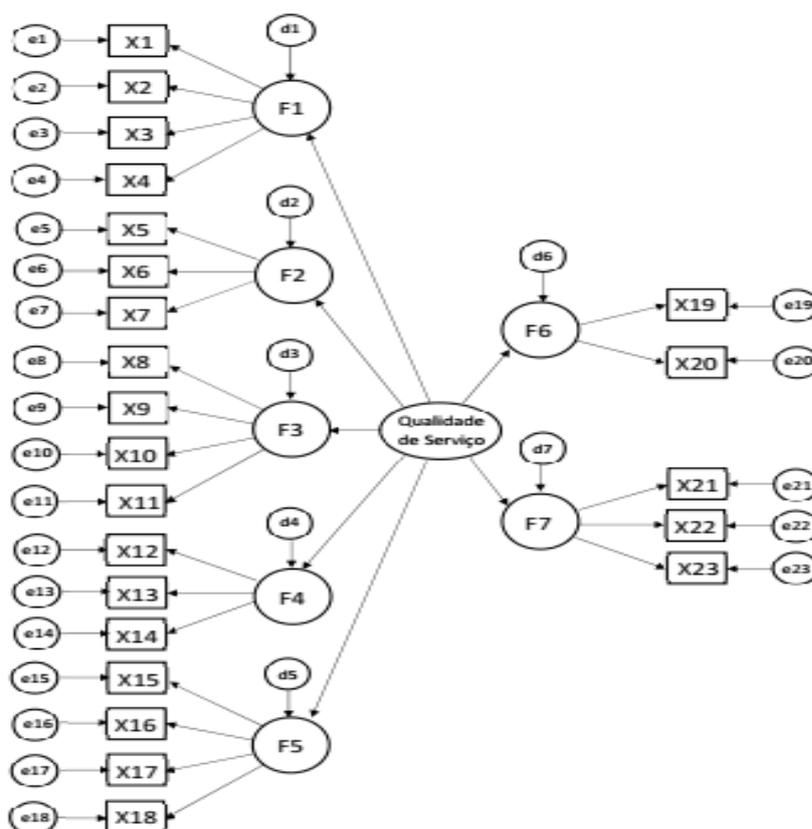


FONTE: O autor (2019)

vi) Modelo 6 (Modelo_Hotel): Adaptado do trabalho de Marôco (2013 apud MARÔCO, 2014) que avaliaram um modelo de satisfação e lealdade do cliente no setor hoteleiro português. O banco de dados disponibilizado é composto de 512 observações. A representação gráfica do modelo com 23 variáveis observáveis, 8 fatores e 222 graus de liberdade está representada na figura 17.

Também foi utilizado a planilha eletrônica EXCEL[®] para confecção de alguns gráficos e o *software* de linguagem estatístico R[®] (R Core Team, 2019) e seus ‘pacotes’ para os cálculos necessários para as estimativas e análises dos índices de qualidade de ajustamento e estimativa e análise de significância dos parâmetros. Todos os algoritmos utilizados estão disponibilizados no anexo desse trabalho.

FIGURA 17 – REPRESENTAÇÃO GRÁFICA DO MODELO 6 (Modelo_Hotel)



FONTE: O autor (2018)

3.2 METODOLOGIA

A metodologia proposta para realização dos trabalhos e obtenção dos objetivos traçados foi delineada nas seguintes etapas:

- Etapa 1: Análise dos dados disponíveis em relação aos pressupostos da MEE;
- Etapa 2: Determinação do tamanho mínimo de amostras necessários para realização dos testes propostos neste trabalho, por meio da análise da taxa de convergência dos modelos;
- Etapa 3: Avaliação da estabilidade das estimativas dos índices de qualidade de ajustamento considerados, em relação ao número de observações, por tipo de modelo;
- Etapa 4: Ajustamento de uma curva por regressão não linear, sobre as estimativas dos índices de qualidade de ajustamento, calculados para os valores de observações considerados; extrapolação para quantidade maiores de observações e estimação de

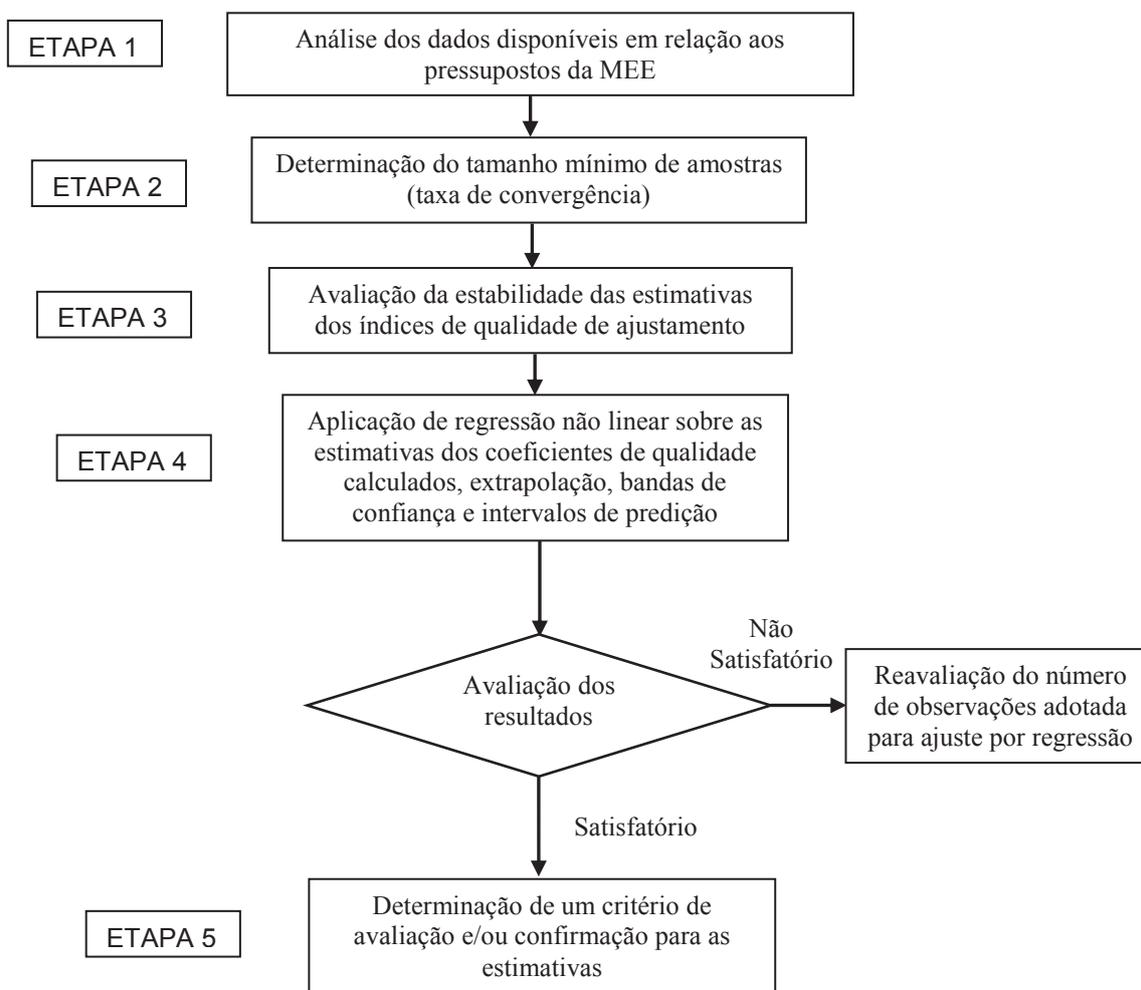
um intervalo de predição para perspectiva sobre valores futuros para os índices avaliados;

e) Etapa 5: Considerações e delineamentos teóricos sobre a metodologia proposta em relação a validação das estimativas calculadas dos índices de qualidade de ajustamento de um MEE, com a determinação de um critério avaliativo e confirmatório para as estimativas dos parâmetros pesquisados;

f) Etapa 6: Determinação de um critério de avaliação e/ou confirmação para as estimativas

Essas etapas serão contempladas conforme o fluxograma discriminado na figura 18.

FIGURA 18 – FLUXOGRAMA DAS ATIVIDADES DA PESQUISA



FONTE: O autor (2019)

As etapas apresentadas no fluxograma da figura 18 serão contempladas a partir da seguinte metodologia.

I) Etapa 1: Análise dos dados disponibilizados em relação aos pressupostos da MEE;

Primeiramente serão analisados, sobre os dados dos modelos, os pressupostos para aplicação da técnica de modelagem de equações estruturais descritos na revisão de literatura desse trabalho (seção 2.1.6.2). A normalidade, univariada e multivariada dos dados é um dos pontos importantes a ser analisado, pois, a partir dos resultados se pode escolher a técnica de estimação dos parâmetros que se deseja avaliar, no caso, os índices de qualidade de ajustamento. A normalidade univariada e multivariada será avaliada mediante a utilização do pacote (*packages*) MVN (KORKMAZ *et al.*, 2014) disponibilizado para uso no *software* R[®] (R Core Team, 2019) e do algoritmo para verificação do teste Monte Carlo de Normalidade Multivariada baseado em distâncias (TMCNMD), proposto e escrito por BIASE (2011).

A não normalidade dos dados não será considerada como critério necessário para a tomada de decisão de se descartar ou não a amostra, já que é possível estimar parâmetros sobre dados não normalmente distribuídos. Considerações sobre a normalidade dos dados e estimação de parâmetros foram discutidas anteriormente.

Outros pressupostos serão avaliados para uma tomada de decisão a respeito dos dados usados na pesquisa. Além da normalidade uni e multivariada, também serão avaliados o valor do Alfa de Cronbach através da função “alpha” do pacote PSYCH (REVELLE, 2018) disponibilizado para uso no *software* R[®] (R Core Team, 2019), o teste de Esfericidade de Bartlett e o Critério KMO, com algoritmos escritos para uso no *software* R[®] (R Core Team, 2019) por F. Gomes (GOMES, 2018). Todos os algoritmos estão disponibilizados no anexo D. Os valores obtidos nesses cálculos devem obedecer aos critérios expostos e serão considerados para avaliação das amostras utilizadas e testes futuros.

Resumidamente os pressupostos sobre os dados devem estar entre os valores de referência abaixo descritos:

- i) Normalidade Univariada – Assimetria: Não superior a 2
 - Curtose: Não superior a 7
 - Teste de Shapiro-Wilk: Rejeita-se a hipótese de normalidade se o *p-value* for menor que o nível de significância adotado α (5%).

ii) Normalidade Multivariada – Teste de Mardia: Rejeita-se a hipótese de normalidade se o valor-p for menor que o nível de significância adotado α (5%).

– Teste MCNMD: Rejeita-se a hipótese de normalidade se o valor-p for menor que o nível de significância adotado α (5%). (BIASE, 2012)

iii) Alfa de Cronbach – O limite inferior para o alfa de Cronbach geralmente aceito é 0,70. (HAIR *et al.*, 2010)

iv) Esfericidade de Bartlett – Rejeita-se a hipótese de que a matriz de correlações é igual a matriz identidade, o que significa podemos utilizar a análise fatorial, se o valor-p for menor que o nível de significância α (5%).

v) Adequação Amostral (Teste KMO) – O teste avalia a adequação da amostra quanto ao grau de correlação parcial entre os valores, que deve ser pequeno, quanto mais próximo de 1 o seu valor, mais adequada é a utilização da técnica.

II) Etapa 2: Determinação do tamanho mínimo de amostras necessários para realização

dos testes propostos neste trabalho, através da taxa de convergência dos modelos;

Uma próxima etapa é a definição do tamanho mínimo de amostras que serão adotadas em todos os testes subsequentes propostos neste trabalho. O tamanho da amostra pode depender de muitas condições, incluindo a complexidade e tipo de modelo, distribuição e confiabilidade das variáveis, e força das relações entre estas variáveis. Muitas pesquisas têm buscado determinar quão grande deve ser o tamanho de uma amostra de modo que se tenham boas estimativas, mas os resultados são inconclusivos e deixam margem a discussões sobre este valor. Nessa etapa do trabalho, busca-se determinar uma quantidade mínima de observações, que possa ser adotada para as análises que serão realizadas futuramente com as amostras disponibilizadas, de forma a se obter ajustes adequados e índices de qualidade confiáveis.

Algumas pesquisas avaliam o uso de amostras pequenas em trabalhos envolvendo MEE (BENTLER & YUAN, 1999; WOLF *et al.*, 2013; NEVITT & HANCOCK, 2004; TANAKA, 1987), e suas consequências na estimação de parâmetros e ajustamento do modelo, outras pesquisas objetivam determinar uma quantidade mínima através, principalmente, de técnicas de simulação e adequação. Nesse trabalho, será usada a convergência dos modelos em relação aos métodos de estimação como parâmetro para determinação da quantidade mínima de observações. Como serão calculadas as estimativas para os índices avaliados, é necessário

que o algoritmo usado apresente uma convergência e que essa convergência seja adequada. Para calcular a taxa de convergência dos modelos avaliados será adotada a seguinte relação:

$$TC = \left(\frac{\text{número de ajustes com sucesso}}{\text{total de tentativas}} \cdot 100 \right) \% \quad (85)$$

onde:

TC é a taxa de convergência por quantidade de observações consideradas.

Por meio da taxa de convergência definida, calculada sobre as estimativas dos modelos usados nesse trabalho, define-se a quantidade mínima de observações que serão consideradas.

Considera-se como uma taxa adequada, o valor de 50 %, de forma a se ter um critério menos rígido. Um critério mais rigoroso, poderia fazer com que a quantidade de observações fosse muito alta, prejudicando os objetivos dessa pesquisa.

Os dados originais podem não apresentar normalidade multivariada, e por isso, a taxa de convergência será calculada tanto para os valores originais disponibilizados quanto para dados com normalidade multivariada, pois não está descartada a possibilidade de alguns problemas em MEE apresentarem dados originais com normalidade multivariada. Se os dados disponibilizados dos modelos não apresentarem normalidade multivariada, será feita uma análise sobre dados normalmente distribuídos gerados a partir dos dados originais.

Os dados originais (*dados*) de cada modelo serão considerados na forma de uma matriz $r \times c$ em que cada coluna (c) representa uma variável observada e cada linha (r) uma única observação. Para a obtenção de dados com normalidade multivariada (*dados_normais_p*), calcula-se a média de cada variável observada (*mean_dados*) e a matriz de covariância dos dados originais (*Cov_dados*), e usando a função ‘*rmvnorm*’ do *software R*[®] (R Core Team, 2019) obtém-se uma matriz $r \times c$ de dados normais. Tanto para os dados originais, que podem não ser normalmente distribuídos, quanto para os dados com normalidade multivariada gerados a partir do procedimento acima descrito, será avaliada a convergência por meio dos métodos de estimação por máxima verossimilhança (ML) e mínimos quadrados generalizados (GLS), para que se possa determinar o método que será usado nas demais etapas do trabalho, bem como a quantidade mínima de observações adotada na pesquisa. Os métodos de estimação ML e GLS, além de serem os mais utilizados nos problemas de MEE, são os disponibilizados no pacote ‘*sem*’ do *software R*[®] (R Core Team, 2019).

III) Etapa 3: Avaliação do comportamento das estimativas dos índices de qualidade de ajustamento considerados, em relação ao número de observações, por tipo de modelo;

Essa etapa da metodologia consiste em analisar o comportamento das estimativas dos índices de qualidade de ajustamento em relação ao número de observações, por modelo analisado. Os índices de ajuste normados ou não normados são frequentemente usados para avaliar o ajuste de um modelo estrutural. O uso de tais índices se baseia no princípio de que os mesmos sejam capazes de discriminar modelos bem ajustados de modelos mal ajustados.

É certamente legítimo esperar que os índices de ajuste sejam confiáveis e atingem seu máximo valor quando o modelo estiver correto, mas também degradar substancialmente sob especificação errada (HU, 1999). A questão da especificação errada do modelo foi quase completamente negligenciada na avaliação da adequação dos índices de ajuste usados para avaliar os modelos de estrutura de covariância. Estudos sobre a adequação dos índices de ajustamento baseiam-se na avaliação do efeito do tamanho da amostra, ou no efeito do método de estimação. Sendo assim, tomando as observações originais de cada modelo, será analisado, não só a capacidade de avaliação do ajuste dos modelos como, principalmente, seu comportamento mediante a variação do tamanho da amostra.

A análise do comportamento dos índices de ajustamento é necessária para que se tenha uma visão mais ampla das estimativas a medida que o número de observações aumenta. Se os índices apresentarem uma estabilidade esperada, será possível, a partir do uso de regressão não linear estimar, mesmo com certo erro probabilístico, os valores futuros obtidos pela extrapolação do modelo de regressão para valores de observações além do que se dispõe, e também uma quantidade máxima (ou mínima) de observações que se pode considerar. Essa quantidade poderá ser determinada a partir dos resultados obtidos, considerando os valores, a partir dos quais, a diferença absoluta entre as estimativas dos índices passa a ser menor que 0,05. Esse valor foi estipulado pois diferenças menores que 0,05 pouco alteraria o status do ajustamento do modelo, conforme valores descritos no quadro 6.

Vários trabalhos realizados avaliaram os mais diferentes índices e seus comportamentos mediante diversos aspectos, tais como, tipo de estrutura de modelo, tamanho de amostra, normalidade dos dados entre outros (BENTLER, 1990; HU & BENTLER, 1999; FAN *et al.*, 1999; HOOPER *et al.*, 2008). Entre os diversos índices de qualidade de ajustamento definidos, por exemplo o programa LISREL[®] 8 relata valores para cerca de 20 índices de ajuste

(JÖRESKOG, 1996) e o programa EQS 6 relata valores para cerca de 10 índices (BENTLER, 2002), os índices escolhidos para serem avaliados nesse trabalho serão o RMSEA, o GFI, o NFI e o CFI. A escolha desses índices se deve a diversos fatores que foram descritos na revisão de literatura. Para avaliação dos índices de qualidade e, principalmente do seu “comportamento” em relação ao número de observações, serão utilizadas as observações originais de cada modelo, aplicando o valor mínimo de observações definido na etapa anterior do trabalho e, gradativamente aumentando 20 observações, calcula-se os valores dos índices indicados, até o limite das próprias observações originais. Repetindo esse processo simulam-se 100 vezes, calculando a média dos valores obtidos nas simulações, para cada índice.

Esses valores serão utilizados para a avaliação da estabilidade dos índices de qualidade de ajustamento. Também será construído um gráfico para cada modelo com os valores estimados, de modo a se ter uma visão mais ampla e geral dos valores estimados.

Se os valores apresentarem grande oscilação de valores, na medida que o número de observações aumenta, não será possível validar os resultados da extrapolação pois os resultados não representarão os reais valores futuros.

Tal qual foi discutido na etapa anterior, também será avaliada a estabilidade das estimativas dos índices de qualidade de ajustamento, para os dados originais e, para dados com normalidade multivariada gerados a partir dos dados originais, através da mesma função do *software R*[®]. Gráficos serão gerados usando a planilha eletrônica EXCEL[®] para uma análise visual da estabilidade das estimativas dos coeficientes. A etapa anterior também definirá o método de estimação usado no cálculo das estimativas. O que apresentar a melhor convergência entre os modelos será o método aplicado.

IV) Etapa 4: Aplicação de regressão não linear sobre as estimativas dos coeficientes de qualidade calculados, extrapolação e intervalos de predição

Executada as análises anteriores, dos pressupostos para aplicação de MEE, da quantidade mínima de observações que será adotada nesse trabalho e o comportamento das estimativas dos índices de qualidade de ajustamento em relação ao tamanho de amostra, os resultados obtidos serão usados para delinear a execução dessa próxima etapa, a mais importante da pesquisa, na qual será colocada em prática a proposta metodológica para análise dos índices de ajustamento dos modelos de equações estruturais. A metodologia que se pretende propor consiste em aplicar um modelo de regressão não linear sobre as médias das estimativas

dos índices de qualidade de ajustamento, calculadas sobre quantidades limitadas de observações, de modo que, realizado o ajuste, se possa calcular valores para quantidades maiores, extrapolando o modelo para além dos limites dos dados, e avaliar os resultados obtidos, em relação aos pontos de corte de cada índice, levando em consideração que esses valores apresentam certa variabilidade.

Isso cria o que se define como um “horizonte preditivo” no qual se pode avaliar os índices de ajustamento para quantidades de observações acima do valor estipulado como máximo para esse trabalho. Esse horizonte preditivo é composto pelos valores extrapolados pelo modelo de regressão e os intervalos de predição determinado pelo método Delta, detalhado anteriormente. Essa faixa de valores será usada para confirmar o ajustamento do modelo.

O critério para a validação da metodologia a partir desses resultados será discutido na etapa seguinte. Para os modelos analisados nessa pesquisa, serão usados os valores das observações até o limite estabelecido e, para validar os valores obtidos pela extrapolação, serão usados os demais valores disponibilizados avaliados em relação aos ‘pontos de corte’ apresentados na revisão de literatura. É claro que essa fase de validação não será possível de ser considerada num problema com poucas observações, daí a necessidade de verificar se a metodologia pode ser aplicada com sucesso nos modelos aqui avaliados. Serão aplicados os conceitos de regressão não linear sobre estimativas dos índices de ajustamento RMSEA, GFI, NFI e CFI, de modo a verificar os critérios, posteriormente definidos, para a validação dos resultados obtidos e confirmação do ajuste do modelo estrutural. Primeiramente serão estimados os valores dos índices de qualidade de ajustamento para cada modelo avaliado, considerando a quantidade mínima e máxima determinados. Como o objetivo da pesquisa é trabalhar com amostras pequenas, serão consideradas, para essas estimativas, amostras com tamanhos reduzidos, a partir do valor estipulado na etapa 2, até o máximo de 150 observações.

Será adotado o valor máximo de 150 observações por ser o menor valor obtido, entre todos os modelos, para o cálculo do número mínimo de observações necessárias, usando a fórmula proposta por Westland apresentada na revisão de literatura. Essas estimativas serão calculadas 100 vezes para cada número de observações considerada e repetido o processo de simulação 10 vezes. Não será realizado um número maior de simulações devido ao tempo computacional necessário. Representando graficamente as médias das estimativas calculadas, e por observação direta sobre o gráfico de dispersão, pôde-se determinar o melhor modelo para o ajuste por regressão não linear.

Por observações em simulações preliminares, observou-se que um dos modelos que pode ser usado é o modelo de Michaelis-Menten que pode ser aplicado para o ajustamento de um modelo de regressão não linear. O modelo usado comumente em problemas na área das ciências biológicas e químicas, apresenta apenas uma fase e é definido da forma

$$\hat{y} = \frac{A \cdot x}{B + x} \quad (86)$$

Aplicando o conceito de limite temos que $\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{Ax}{B+x} = A$, assim A é o limite máximo das estimativas quando a quantidade de observações tende ao infinito, ou seja, uma assíntota horizontal. O valor de B pode ser entendido com uma assíntota vertical da curva ajustada.

Outro modelo que será adotado é uma reparametrização do modelo exponencial de Stanford-Smith proposta por Zeviani (2009), para que seu comportamento se compare ao modelo de Michaelis-Menten definido por $\hat{y} = A \cdot (1 - e^{-\ln 2 \cdot \frac{x}{B}})$, onde A também representa a assíntota horizontal da curva ajustada e B a assíntota vertical.

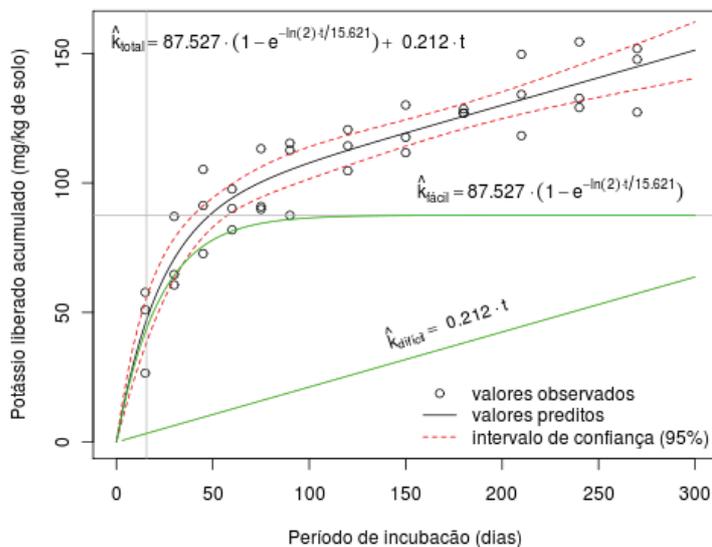
Algumas alterações podem ser necessárias aos modelos em virtude de se obter um melhor ajuste, conseqüentemente um melhor coeficiente de determinação, como por exemplo, a inclusão nos modelos de uma constante C ou de uma parcela Cx que acrescentaria uma segunda fase aos modelos. O valor de C pode ser entendido com o coeficiente angular da reta de crescimento das estimativas depois de um determinado número de observações.

O gráfico 2 representa o comportamento gráfico do modelo exponencial de regressão definido por $\hat{y} = 87,527 \cdot \left(1 - e^{\frac{-\ln 2 \cdot t}{15,621}}\right) + 0,212 \cdot t$, extraído de (ZEVIANI, 2011).

Se pode observar o ajuste do modelo sem a parcela Cx (curva em verde), o ajuste com a parcela e a respectiva banda de confiança (curva em preto e vermelho respectivamente) e logo abaixo a reta que representa a parcela somada ($C = 0,212 \cdot t$). Observa-se que, à medida que o valor de t aumenta, o modelo ajustado segue um crescimento paralelo ao da reta.

No gráfico 3 pode-se observar, a partir do modelo exponencial, a alteração gráfica na curva ajustada, e seu resultado no coeficiente de determinação. Observa-se que no ajuste onde houve a inclusão da parcela C.x, a curva tem um crescimento constante e isso pode interferir nos cálculos dos valores preditos, pois se sabe que os valores dos índices GFI, NFI e CFI não podem ultrapassar o limite máximo que é igual a 1. É certo que a inclusão de parcelas extras aos modelos alterará os parâmetros (coeficientes) do modelo, mas o importante é observar o ganho em relação ao ajuste dado pelo coeficiente de determinação.

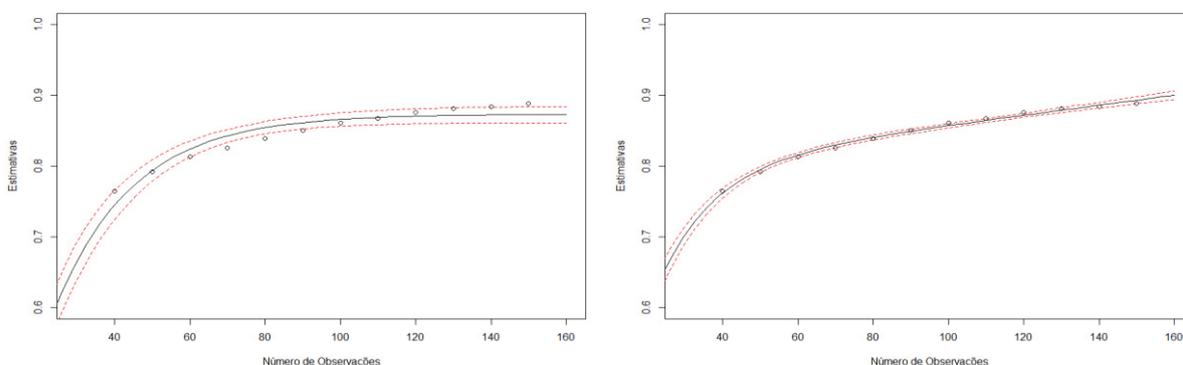
GRÁFICO 2 – REPRESENTAÇÃO GRÁFICA DE UM MODELO DE REGRESSÃO EXPONENCIAL ADAPTADO COM DUAS FASES



FONTE: ZEVIANI (2011)

Dependendo do comportamento das estimativas também poderá ser necessário uma inversão das curvas ajustadas, pois as estimativas podem diminuir a medida que o número de observações aumenta. Caso isso venha ocorrer, é necessária uma alteração nos modelos da forma $\hat{y} = 1 - \frac{A \cdot x}{B + x}$ e $\hat{y} = 1 - A \cdot (1 - e^{-\ln 2 \cdot \frac{x}{B}})$, já que as estimativas não podem ser maiores que um (1).

GRÁFICO 3 – COMPARATIVO ENTRE VARIAÇÕES NO AJUSTAMENTO DO MODELO EXPONENCIAL SOBRE OS MESMOS PONTOS COM RESPECTIVOS COEFICIENTES DE DETERMINAÇÃO.



a) Modelo Exponencial $y = 0,8732 \cdot (1 - e^{-\frac{\ln 2 \cdot x}{14,4793}})$

Coeficiente de determinação $R^2 = 0,9000301$

b) Modelo Exponencial $y = 0,7877 \cdot (1 - e^{-\frac{\ln 2 \cdot x}{10,37}}) + 0,0007$

Coeficiente de determinação $R^2 = 0,9931632$

FONTE: O autor (2019)

Escolhida a função adequada, primeiramente devem ser escolhidos os coeficientes iniciais para início do procedimento de ajuste da curva de regressão não linear. Esses primeiros coeficientes, no caso de se usar o modelo de Michaelis-Menten, são obtidos através de um ajuste por regressão linear sobre uma equação de linearização do modelo. Para o modelo de Michaelis-Menten, a partir das equações abaixo, os parâmetros iniciais podem ser facilmente obtidos

$$\text{i) } y = -B \frac{y}{x} + A \quad \text{Equação de Eadie – Hofstee} \quad (87)$$

$$\text{ii) } \frac{x}{y} = \frac{x}{A} + \frac{B}{A} \quad \text{Equação de Hanes – Woolf} \quad (88)$$

$$\text{iii) } \frac{1}{y} = \frac{B}{Ax} + \frac{1}{A} \quad \text{Equação de Lineweaver – Burk} \quad (89)$$

$$\text{iv) } x = \frac{Ax}{y} - B \quad \text{CARVALHO (2010)} \quad (90)$$

Alguns trabalhos como os de Carvalho *et al.* (2010) e Junior *et al.* (2015) analisam os métodos de linearização para o modelo de Michaelis-Menten e seu uso na determinação dos parâmetros. Nesse trabalho se dará preferência para uso da equação (iv) principalmente por ser de fácil uso computacional. Caso os valores iniciais determinados por essa equação não ajustem o modelo as estimativas, adota-se os coeficientes extraídos de qualquer uma das outras.

A equação de Eadie – Hofstee é a única que pode ser aplicada caso alguma estimativa seja nula, caso que pode acontecer nas simulações para o cálculo do RMSEA. Simulações realizadas previamente mostraram que os resultados finais para os coeficientes iniciais sofrem poucas alterações quando usadas qualquer uma das equações.

Para o modelo exponencial os valores iniciais para uso no processo de regressão não linear podem ser obtidos através de inspeção gráfica dos valores das estimativas calculadas em função da quantidade de observações. O valor para a constante A que representa a assíntota horizontal, pode ser tomado como o valor máximo estimado. Para o coeficiente B que corresponde a assíntota horizontal, propõe-se tomar um valor no eixo das abscissas correspondente ao valor A/2 no eixo das coordenadas. Caso seja necessária alguma alteração nos modelos com a inclusão de uma parcela C.x, o valor de C deve ser pequeno o suficiente para expressar o crescimento linear das estimativas a medida que o número de observações aumenta. Com os coeficientes (parâmetros) iniciais, aplica-se uma regressão não linear com procedimento iterativo de Gauss-Newton para obtenção das estimativas e demais estatísticas, definido como padrão da função *nls()* (PADFIELD, 2018) desenvolvida para o ajuste de

modelos não lineares. Esta função é bastante flexível e incorpora diversas opções para fazer ajustes incluindo características do modelo, tipo e controle dos algoritmos disponíveis.

O ajustamento será realizado sobre as médias das estimativas calculadas para cada quantidade de observação, tanto para o modelo de Michaelis-Menten quanto para o modelo exponencial. Juntamente com os valores previstos pelo modelo ajustado, determina-se uma banda de confiança para as respostas, com nível de confiança de 95%. Esses intervalos de confiança são faixas de valores que tendem a conter a resposta média para a população que tem os valores observados dos preditores ou fatores no modelo. O intervalo de confiança é composto pelas duas partes, a estimativa do ponto e a margem de erro. Usa-se o intervalo de confiança para avaliar a estimativa do valor ajustado para os valores observados das variáveis.

Na sequência, usando o modelo ajustado, calculam-se os valores previstos para uma quantidade de observações maiores daquelas que foram usadas anteriormente extrapolando o modelo. Como os modelos estruturais avaliados, possuem quantidades maiores que 150 observações se optou por escolher valores pontuais próximos de quantidade máxima de observações disponíveis a fim de verificar a diferença dos valores previstos em relação as estimativas calculadas sobre os dados originais. Além disso, será determinado os limites dos intervalos de predição, utilizando o método Delta, a fim de verificar se os mesmos estão em uma faixa satisfatória de ajuste, conforme valores de corte citados anteriormente.

V) Etapa 5: Determinação de um critério de avaliação e/ou confirmação para as estimativas;

Realizados os procedimentos anteriores deve-se, a partir dos resultados, determinar critérios que possam ser admitidos para que os resultados da aplicação de regressão não linear sobre as estimativas dos índices de qualidade de ajustamento possam ser validados, e que o pesquisador/usuário da metodologia proposta possa ratificar o ajuste do modelo de equações estruturais que está sendo analisado. O ajustamento do modelo de regressão é um ponto fundamental para que os resultados posteriores possam ser usados como referência.

Sendo assim o valor do coeficiente de determinação R^2 deve estar o mais próximo de um (1) garantindo bom ajuste do modelo de regressão aos dados (estimativas). Um mal ajuste do modelo pode resultar em valores extrapolados com muita diferença em relação aos reais valores, quando avaliados nos modelos da pesquisa. Nos modelos com poucas observações, que é o objetivo dessa pesquisa, um mal ajuste do modelo não linear provocará valores extrapolados com muito mais variabilidade, comprometendo a validação do ajuste pelos índices de qualidade

avaliados. Isso também comprometerá os resultados obtidos para a banda de confiança calculada pelo método Delta. Essa variabilidade deve ser mínima de maneira que o intervalo apresente pouca amplitude quando calculado para valores preditos. Sendo assim um critério fundamental para validação dos resultados será o ajuste do modelo de regressão as estimativas.

Outro ponto importante a ser analisado como critério são as próprias estimativas dos índices. Nada adianta um bom ajuste se os valores estimados para os índices de qualidade analisados não se mantiverem entre patamares aceitáveis em relação aos pontos de corte descritos na revisão de literatura (ver quadro 6). Valores muito abaixo dos considerados aceitáveis, ou com muita variabilidade, podem comprometer os resultados objetivados.

Os valores assim definidos como pontos de corte, servirão como ponto de partida para a elaboração do referido critério, pois o ajuste obtido e, principalmente, os valores extrapolados, devem estar em níveis considerados satisfatórios, dentro dos limites estipulados para os pontos de corte dos índices analisados.

3.3 LIMITAÇÕES DA PESQUISA

O estudo realizado apresentou limitações importantes quanto aos modelos e aos dados disponibilizados. Os modelos de equações estruturais utilizados contemplam apenas alguns tipos analisados na literatura sobre o tema, sendo assim, este trabalho se limita a avaliar a metodologia proposta e os resultados obtidos apenas sobre dois tipos de modelos, os modelos de AFC de primeira e segunda ordem e os modelos de regressão.

Outro fator limitante se refere ao número de observações disponibilizados para as análises. Mesmo que o objetivo principal deste trabalho seja determinar uma metodologia para uso em problemas de MEE com poucas observações, o número de observações disponibilizados foi pequeno, permitindo considerar os resultados encontrados apenas para a população em questão. Sobre os índices de qualidade de ajustamento, foram avaliados 4 índices (RMSEA, GFI, NFI e CFI) por serem os mais estudados e aplicados sobre modelos estruturais, sendo que outros índices também relevantes não foram considerados, tais como, o índice de Tukey-Lewis (TLI) e os índices parcimoniosos (PGFI, PNFI e PCFI). Índices baseados na teoria da informação também não foram considerados como os índices AIC, BIC, BCC e ECVI. Desta forma, os resultados obtidos ficam limitados aos índices considerados, podendo ser objeto de novas pesquisas, a implementação da metodologia sobre os índices desconsiderados.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 VERIFICAÇÃO DOS PRESSUPOSTOS PARA USO DE MEE NAS AMOSTRAS DISPONIBILIZADAS

Os dados utilizados nos testes preliminares serão analisados referentes aos pressupostos indicados para aplicação de MEE, sendo eles, normalidade univariada e multivariada, teste de esfericidade de Bartlett, critério KMO e confiabilidade de uma medida (alfa de Cronbach). Também será incluída a análise de assimetria (*skew*) e curtose (*kurtosis*) univariada para dados não normais para avaliação da condição de uso do método de estimação por ML nos modelos propostos.

Na sequência dos testes, será anexado o gráfico *Q-Q plot* dos dados analisados para ratificação dos resultados de não normalidade, caso os mesmos apresentem tal característica.

Todos os testes e gráficos pelo uso do software R[®] (R Core Team, 2019) e seus ‘pacotes’ e funções apropriadas. Ao final dos testes serão feitas as considerações sobre os resultados.

4.1.1 Avaliação dos Dados para o Modelo 1 – Modelo_PTSD

i) Normalidade univariada – Teste de Shapiro-Wilk

TABELA 1 – TESTE DA NORMALIDADE UNIVARIADA PARA AS VARIÁVEIS DO MODELO 1

Variável	Shapiro-Wilk	<i>p-value</i>	<i>Assimetria</i>	<i>Curtose</i>
X1	0.8454	<0.001	0.4693969	-1.10586950
X2	0.6466	<0.001	1.7411232	2.29499063
X3	0.7609	<0.001	1.2491645	0.76370348
X4	0.7992	<0.001	0.9971528	-0.04596737
X5	0.7235	<0.001	1.3708027	0.91779184
X6	0.8135	<0.001	0.7851935	-0.67057501
X7	0.7726	<0.001	1.1076243	0.11050921
X8	0.6434	<0.001	1.6190830	1.49836344
X9	0.7862	<0.001	0.8304170	-0.69885020
X10	0.7292	<0.001	1.2283970	0.21068339
X11	0.7092	<0.001	1.4992234	1.45202364
X12	0.8280	<0.001	0.7381905	-0.78319154
X13	0.8717	<0.001	0.4473021	-1.10093156
X14	0.7836	<0.001	1.0154729	-0.10123329
X15	0.8375	<0.001	0.7196231	-0.71333971
X16	0.8480	<0.001	0.6314693	-0.82455117
X17	0.8247	<0.001	0.6396223	-0.93423502

Fonte: O autor (2019)

ii) Normalidade multivariada

– Teste de Mardia

TABELA 2 – RESULTADOS DO TESTE DE MARDIA PARA OS DADOS DO MODELO 1

Teste	Estatística	<i>p-value</i>	Resultado
Assimetria	2976.60378918242	1.37892274143207e-202	Não
Curtose	33.6492839037824	0	Não
MVN	NA	NA	Não

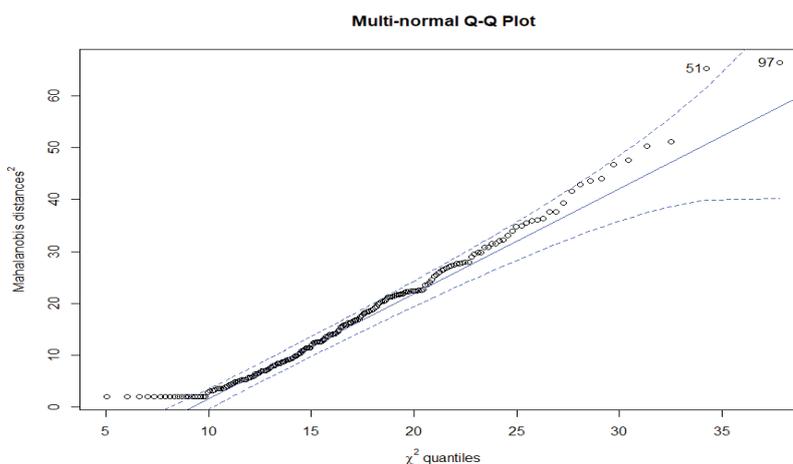
Fonte: O autor (2019)

– Teste MCNMD $p\text{-value} = 0,005997001$

iii) Alfa de Cronbach: 0,94

iv) Teste de esfericidade de Bartlett Estatística do teste: 2207,319 df : 136 $p\text{-value}$: 0

v) Critério KMO: 0,9352779

GRÁFICO 4 – GRÁFICO *Q-Q* PLOT PARA OS DADOS DO MODELO 1

FONTE: O autor (2019)

Os dados do modelo 1 não apresentam normalidade multivariada, com valor para a assimetria multivariada, calculada pelo teste de Mardia, bem acentuada, o que poderá influenciar os resultados obtidos por Maxima Verossimilhança para os estimadores. Os valores calculados para o $p\text{-value}$ por ambos os testes (Mardia e MCNMD) ficaram abaixo do nível de significância adotado (5%). O Alfa de Cronbach revela uma consistência interna quase perfeita e o critério KMO indica que a análise fatorial é apropriada.

4.1.2 Avaliação dos Dados para o Modelo 2 – Modelo_Burnout

i) Normalidade univariada – Teste de Shapiro-Wilk

TABELA 3 – TESTE DA NORMALIDADE UNIVARIADA PARA AS VARIÁVEIS DO MODELO 2

Variável	Shapiro-Wilk	<i>p-value</i>	<i>Assimetria</i>	<i>Curtose</i>
X1	0.9472	<0.001	0.13585067	-0.3457891
X2	0.9465	<0.001	0.06485974	-0.7849895
X3	0.9342	<0.001	0.39718513	-0.6551018
X4	0.9407	<0.001	0.35203531	-0.3781670
X5	0.7649	<0.001	1.36151940	1.2414646
X6	0.8439	<0.001	1.16467146	1.0664882
X7	0.7916	<0.001	1.30658315	1.1248828
X8	0.8090	<0.001	1.22998791	0.9749858
X9	0.9192	<0.001	-0.26672507	-0.4486997
X10	0.9453	<0.001	-0.23094142	-0.4338060
X11	0.9313	<0.001	-0.35058909	-0.2551852
X12	0.7963	<0.001	-1.20236651	1.2122828
X13	0.9053	<0.001	-0.40971094	-0.3915697

Fonte: O autor (2019)

ii) Normalidade multivariada

– Teste de Mardia

TABELA 4 – RESULTADOS DO TESTE DE MARDIA PARA OS DADOS DO MODELO 2

Teste	Estatística	p-value	Resultado
Assimetria	1184.8849411724	1.93347401272495e-66	Não
Curtose	13.2254384948325	0	Não
MVN	NA	NA	Não

Fonte: O autor (2019)

– Teste MCNMD $p\text{-value} = 0,0004997501$

iii) Alfa de Cronbach: 0,6

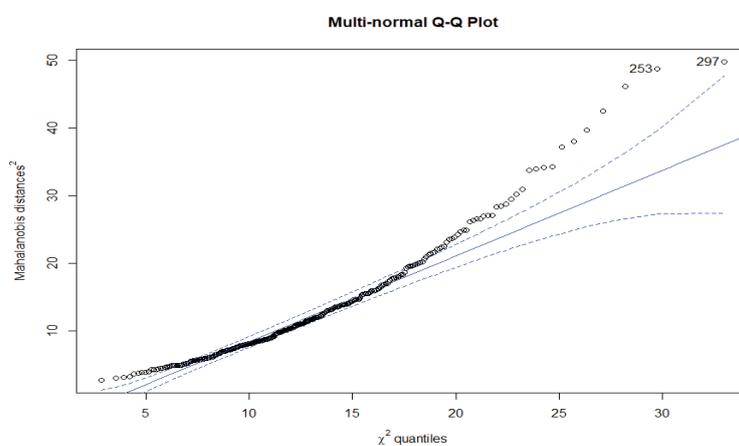
iv) Teste de esfericidade de Bartlett Estatística do teste:1446,7 *df*: 78 *p-value*: 0

v) Critério KMO: 0,8152595

Os dados do modelo 2 também não apresentam normalidade multivariada, tal qual os dados do modelo 1, com assimetria e curtose em valores aceitáveis. O alfa de Cronbach apresentou valor baixo (0,6), mas é sabido que o número de questões também pode afetar o valor do alfa de Cronbach. Questionários muito longos aumentam o valor de alfa, sem que isso signifique aumento de consistência interna; um valor baixo de alfa pode significar apenas um número pequeno de questões. Por tudo isso esse coeficiente nem sempre é bem interpretado (VIEIRA, 2009). Em alguns cenários de investigação das ciências sociais, um alfa de 0,60 é

considerado aceitável desde que os resultados obtidos com esse instrumento sejam interpretados com precaução e tenham em conta o contexto de computação do índice (DeVELLIS, 1991).

GRÁFICO 5 – GRÁFICO *Q-Q PLOT* PARA OS DADOS DO MODELO 2



FONTE: O autor (2019)

4.1.3 Avaliação dos Dados para o Modelo 3 – Modelo_Exemplo

i) Normalidade univariada – Teste de Shapiro-Wilk

TABELA 5 – TESTE DA NORMALIDADE UNIVARIADA PARA AS VARIÁVEIS DO MODELO 3

Variável	Shapiro-Wilk	<i>p-value</i>	Assimetria	Curtose
X1	0.8673	<0.001	-1.2694912	3.021362
X2	0.9136	<0.001	-0.2089014	1.134133
Y1	0.9197	<0.001	-0.8703120	1.790466
Y2	0.8932	<0.001	-1.1201399	2.122283

Fonte: O autor (2019)

ii) Normalidade multivariada

TABELA 6 – RESULTADOS DO TESTE DE MARDIA PARA OS DADOS DO MODELO 3

Teste	Estatística	<i>p-value</i>	Resultado
Assimetria	336.136310215342	3.17894684604926e-59	Não
Curtose	20.1895104363881	0	Não
MVN	NA	NA	Não

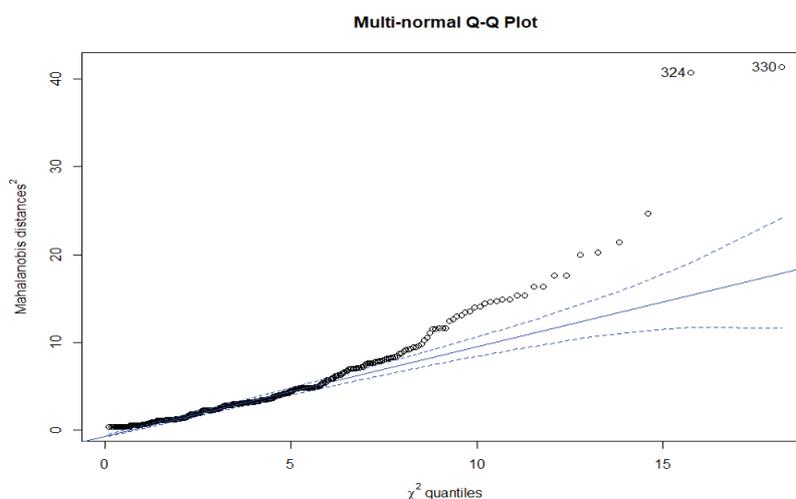
Fonte: O autor (2019)

– Teste MCNMD $p\text{-value} = 0,0004839154$

iii) Alfa de Cronbach: 0,93

iv) Teste de esfericidade de Bartlett Estatística do teste: 1510,838 $df: 6$ $p\text{-value}: 2,2 \text{ e-}16$

v) Critério KMO: 0,85477

GRÁFICO 6 – GRÁFICO *Q-Q* PLOT PARA OS DADOS DO MODELO 3

FONTE: O autor (2019)

Os dados do modelo 3 não apresentam normalidade multivariada e os valores para a estatística *p-value* ficaram abaixo do nível de significância. A curtose e assimetria univariada e multivariada não apresentaram valores acentuados. As estatísticas para o alfa de Cronbah, Teste KMO e Esfericidade de Bartlett estão em níveis satisfatórios conforme valores discutidos na revisão de literatura.

4.1.4 Avaliação dos Dados para o Modelo 4 – Modelo_Eutanasia

i) Normalidade univariada – Teste de Shapiro-Wilk

TABELA 7 – TESTE DA NORMALIDADE UNIVARIADA PARA AS VARIÁVEIS DO MODELO 4

Variável	Shapiro-Wilk	<i>p-value</i>	<i>Assimetria</i>	<i>Curtose</i>
X1	0.7673	<0.001	-1.29520967	0.8865862
X2	0.7170	<0.001	-1.57029553	3.0963334
X3	0.6922	<0.001	-1.76952592	3.1561515
X4	0.9010	<0.001	-0.34628299	-0.8434235
X5	0.9002	<0.001	-0.31829405	-0.7384597
X6	0.9166	<0.001	0.04383574	-0.6972650
X7	0.8984	<0.001	0.27578619	-0.1308180
X8	0.9131	<0.001	-0.20101349	-0.6790361
X9	0.9018	<0.001	0.15886589	-0.2046202

Fonte: O autor (2019)

ii) Normalidade multivariada

– Teste de Mardia

TABELA 8 – RESULTADOS DO TESTE DE MARDIA PARA OS DADOS DO MODELO 4

Teste	Estatística	<i>p-value</i>	Resultado
Assimetria	1111.58493607147	4.808746064695e-140	Não
Curtose	19.2766237361713	0	Não
MVN	NA	NA	Não

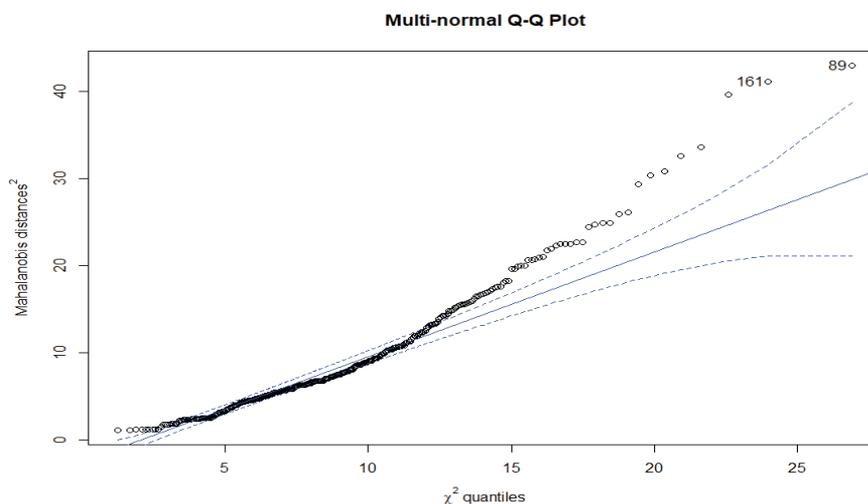
Fonte: O autor (2019)

– Teste MCNMD $p\text{-value} = 0,00149925$

iii) Alfa de Cronbach: 0,89

iv) Teste de esfericidade de Bartlett Estatística do teste: 2083,33 *df*: 36 *p-value*: 2,2 e-16

v) Critério KMO: 0,845362

GRÁFICO 7 – GRÁFICO *Q-Q* PLOT PARA OS DADOS DO MODELO 4

FONTE: O autor (2019)

Os dados do modelo 4 não apresentaram normalidade multivariada com acentuada assimetria multivariada. Os valores para o Alfa de Cronbach, o Teste de esfericidade de Bartlett e o Teste KMO estão em níveis considerados satisfatórios para aplicação das técnicas de Modelagem de Equações Estruturais.

4.1.5 Avaliação dos Dados para o Modelo 5 – Modelo_Banco

i) Normalidade univariada – Teste de Shapiro-Wilk

TABELA 9 – TESTE DA NORMALIDADE UNIVARIADA PARA AS VARIÁVEIS DO MODELO 5

Variável	Shapiro-Wilk	p-value	Assimetria	Curtose
X1	0.8673	<0.001	-1.2694912	3.0213623
X2	0.9136	<0.001	-0.2089014	1.1341327
X3	0.9197	<0.001	-0.8703120	1.7904658
X4	0.8932	<0.001	-1.1201399	2.1222830
X5	0.9861	1e-04	-0.2423100	0.2015560
X6	0.9781	<0.001	-0.4995578	0.7629344
X7	0.9717	<0.001	-0.5251002	0.3357330
X8	0.9832	<0.001	-0.4313475	0.8108305
X9	0.9905	0.0032	-0.2346580	-0.1371546
X10	0.9564	<0.001	-0.2025400	0.1886657
X11	0.9432	<0.001	-0.5647356	0.8107617
X12	0.9224	<0.001	-0.6500324	1.8097214
X13	0.9210	<0.001	-0.6386625	0.8179623

Fonte: O autor (2019)

ii) Normalidade multivariada

– Teste de Mardia

TABELA 10 – RESULTADOS DO TESTE DE MARDIA PARA OS DADOS DO MODELO 5

Teste	Estatística	p-value	Resultado
Assimetria	1735.45599018712	1.5613776508e-148	Não
Curtose	33.3922552590469	0	Não
MVN	NA	NA	Não

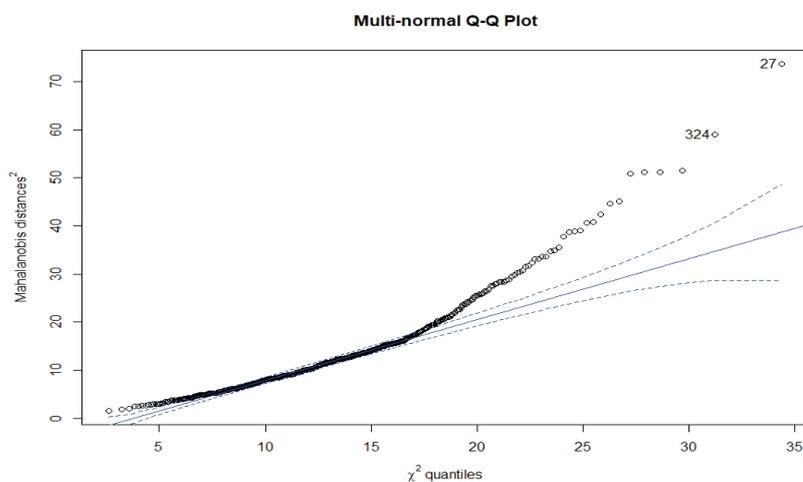
Fonte: O autor (2019)

– Teste MCNMD $p\text{-value} = 0,0004997501$

iii) Alfa de Cronbach: 0,94

iv) Teste de esfericidade de Bartlett Estatística do teste: 5028,304 $df: 78$ $p\text{-value}: 0$

v) Critério KMO: 0,9283471

GRÁFICO 8 – GRÁFICO $Q-Q$ PLOT PARA OS DADOS DO MODELO 5

FONTE: O autor (2019)

Os dados do modelo 5 também não apresentaram normalidade multivariada como os demais exemplos. A assimetria e curtose univariada, analisada pelo teste de Shapiro-Wilk, apresentaram valores abaixo dos limites de aceitação já discutidos anteriormente. O teste de Mardia apresentou uma acentuada assimetria entre os dados. É certo que, a ssimetria acentuada não confirma a falta de normalidade, o que ficou ratificado pelos valores obtidos pelo teste MCNMD. Os demais valores avaliados apresentaram níveis aceitáveis para seus resultados.

4.1.6 Avaliação dos Dados para o Modelo 6 – Modelo_Hotel

i) Normalidade univariada – Teste de Shapiro-Wilk

TABELA 11 – TESTE DA NORMALIDADE UNIVARIADA PARA AS VARIÁVEIS DO MODELO 6

Variável	Shapiro-Wilk	p-value	Assimetria	Curtose
X1	0.8683	<0.001	-0.9671896	0.6292958
X2	0.8111	<0.001	-1.4103181	1.7801247
X3	0.7629	<0.001	-2.0323391	5.3331277
X4	0.8655	<0.001	-1.2656475	2.0182908
X5	0.7644	<0.001	-1.7873191	4.5752982
X6	0.7989	<0.001	-1.5296512	2.7131410
X7	0.8084	<0.001	-1.5913291	3.5565730
X8	0.7562	<0.001	-1.6057364	2.7714522
X9	0.8479	<0.001	-1.3860230	3.3741912
X10	0.9268	<0.001	-0.8296387	1.3543728
X11	0.9165	<0.001	-0.9300188	1.7756726
X12	0.9260	<0.001	-0.8228651	0.7569600
X13	0.7829	<0.001	-1.7814334	4.3382927
X14	0.8496	<0.001	-1.2318603	1.9508595
X15	0.8072	<0.001	-1.4828691	2.9741361
X16	0.7593	<0.001	-2.0371399	5.9721985
X17	0.8372	<0.001	-1.4503958	3.7728345
X18	0.8462	<0.001	-1.3885223	3.7910810
X19	0.8111	<0.001	-1.5891729	4.0953548
X20	0.8078	<0.001	-1.5748161	3.6512117
X21	0.7978	<0.001	-1.7131945	4.7626083
X22	0.7957	<0.001	-1.7270138	4.0946260
X23	0.7618	<0.001	-1.9920269	5.7286950

Fonte: O autor (2019)

ii) Normalidade multivariada

– Teste de Mardia

TABELA 12 – RESULTADOS DO TESTE DE MARDIA PARA OS DADOS DO MODELO 6

Teste	Estatística	p-value	Resultado
Assimetria	17669.6776017389	0	Não
Curtose	172.415104880341	0	Não
MVN	NA	NA	Não

Fonte: O autor (2019)

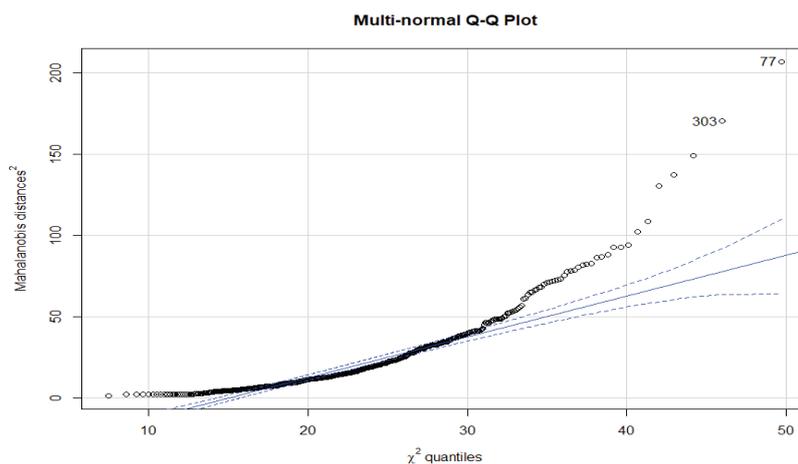
– Teste MCNMD $p\text{-value} = 0,0004997501$

iii) Alfa de Cronbach: 0,96

iv) Teste de esfericidade de Bartlett Estatística do teste: 10644,53 df : 253 $p\text{-value}$: 0

v) Critério KMO: 0,9523866

GRÁFICO 9 – GRÁFICO *Q-Q PLOT* PARA OS DADOS DO MODELO 6



FONTE: O autor (2019)

Observa-se forte assimetria multivariada nos resultados do teste de Mardia, como também pode ser observada no gráfico *Q-Q plot* dos dados do modelo.

Como já citado, não existe consenso entre os pesquisadores sobre o valor limite da curtose e da assimetria multivariada, obtidas por testes específicos, para aplicação da técnica de estimação por máxima verossimilhança sob dados não normais. Mesmo assim os valores obtidos na aplicação do teste de Mardia para os modelos 1 e 6 ficaram muito elevados em relação aos demais modelos. A aplicação do método de estimação por máxima verossimilhança pode ficar comprometida pela acentuada assimetria verificada.

A não normalidade dos dados não impede de se aplicar a técnica de estimação por Máxima Verossimilhança (ML), mas pelo fato de termos modelos com uma anormalidade multivariada acentuada, a aplicação da técnica de estimação por mínimos quadrados generalizados (GLS) é mais apropriada. Como todos os modelos apresentaram dados sem normalidade multivariada, para análises futuras serão geradas amostras com normalidade multivariada a partir dos dados originais.

4.2 DETERMINAÇÃO DO TAMANHO MÍNIMO DE AMOSTRAS (Taxa de convergência)

Usando a relação definida na expressão (85) determina-se a taxa de convergência dos dados em relação aos modelos, conforme o número de observações. Partindo de 150 observações e diminuindo gradativamente de 10 em 10 até o limite de 20 observações e, através de 1000 simulações (100 estimativas repetidas para quantidade de observações) por modelo, procura-se investigar o efeito do tamanho da amostra em cada modelo e calcula-se a taxa de convergência para cada quantidade de observações. Cada modelo poderá ter uma taxa de convergência diferente, visto que isso depende de vários fatores, como número de variáveis e complexidade do modelo entre outros. O valor mínimo de amostras a se considerar será dado pelo valor que apresentar taxa acima de 50% em todos os modelos. Esse procedimento será repetido 10 vezes e os valores expressos nas tabelas seguintes representam a média dos resultados obtidos nos cálculos das taxas de convergência calculadas por modelo, conforme a quantidade de observações. Esse valor será considerado para os testes de estabilidade que serão realizados na sequência dos trabalhos.

TABELA 13 – TAXA DE CONVERGÊNCIA POR MODELO USANDO OS DADOS ORIGINAIS (NÃO NORMAIS) ESTIMADOS POR ML

	Tamanho da Amostra													
	20	30	40	50	60	70	80	90	100	110	120	130	140	150
Modelo 1	51,5	63,9	61,8	57,3	53,5	51,3	51	48,8	48,7	46,9	46,6	40,8	40,3	37,2
Modelo 2	44,2	59,5	68,1	74,7	78,8	83,5	86,1	88,2	88,7	90	91,8	91,2	92,8	93,8
Modelo 3	64,3	70,8	72,8	76,7	76,1	78,8	78	78,9	78,7	79,2	81,2	77	81,7	81,6
Modelo 4	70,5	81,9	88,7	90,6	92	92,4	93,9	93,3	93,5	94	92,8	92,3	90,6	91,3
Modelo 5	71,6	88,9	94,2	96,4	97,4	99,1	99	99,6	99,6	99,6	99,9	99,9	100	99,9
Modelo 6	0	23,1	25,3	26,7	29,8	24,1	24,8	23,5	27,9	26,9	26,4	25,5	29	29,6

FONTE: O autor (2019)

TABELA 14 – TAXA DE CONVERGÊNCIA POR MODELO USANDO OS DADOS ORIGINAIS (NÃO NORMAIS) ESTIMADOS POR GLS

	Tamanho da Amostra													
	20	30	40	50	60	70	80	90	100	110	120	130	140	150
Modelo 1	41,4	47,6	50,2	59,5	71,4	81,8	90,2	94,5	96,4	98,8	99,8	99,7	100	100
Modelo 2	48,5	52,8	63,8	72,8	89,4	91,4	95,5	95,3	97,3	98,8	98,3	99,4	99,9	99,8
Modelo 3	96,9	98,3	98,4	99,3	99,8	99,9	100	100	100	100	100	100	100	100
Modelo 4	86,1	96,8	99,6	99,8	99,8	99,8	100	100	100	100	100	100	100	100
Modelo 5	51	64,8	76,1	78,4	84,4	85,8	86,2	87,9	90,6	92,1	91,7	94,1	94,3	95,1
Modelo 6	0	57,8	58,1	59,2	64,8	70,4	74,3	77,8	82,7	84,3	87,6	90,6	90,9	91,6

FONTE: O autor (2019)

TABELA 15 – TAXA DE CONVERGÊNCIA POR MODELO USANDO DADOS NORMAIS GERADOS A PARTIR DOS DADOS ORIGINAIS (NÃO NORMAIS) ESTIMADOS POR ML

	Tamanho da Amostra													
	20	30	40	50	60	70	80	90	100	110	120	130	140	150
Modelo 1	68,3	67,9	58,8	55,9	54,2	53,8	51,1	50	46	45,6	46	45,5	46,4	43,8
Modelo 2	45,1	57	65,2	73,6	74,4	77,3	80,8	82,9	85	87,2	87,4	90	92,4	92,8
Modelo 3	70,8	73,6	75,9	76,9	76,2	78,6	75,6	76,9	75,6	78,1	79,6	78,6	75,4	75,1
Modelo 4	79,3	89,1	90,7	89,8	93,8	92,3	91,6	91,5	91,6	91,7	92,3	91,6	92,2	91,3
Modelo 5	79,6	92,3	96,6	98,1	99,2	99	99,5	99,6	99,8	99,7	100	99,7	100	100
Modelo 6	0	22,3	23,2	27	26,9	27,3	30,5	28,5	30,3	30,9	33,5	32	35,1	35,3

FONTE: O autor (2019)

TABELA 16 – TAXA DE CONVERGÊNCIA POR MODELO USANDO DADOS NORMAIS GERADOS A PARTIR DOS DADOS ORIGINAIS (NÃO NORMAIS) ESTIMADOS POR GLS

	Tamanho da Amostra													
	20	30	40	50	60	70	80	90	100	110	120	130	140	150
Modelo 1	49,5	44,4	55,5	68,8	79,4	86,7	92,1	93,3	95,6	95,9	98,1	98,2	99,3	99
Modelo 2	48,7	62,2	73,9	84,4	86,3	92,1	93,1	95,2	95,5	97,4	96,2	98,2	98,1	97,4
Modelo 3	99,5	99,6	99,9	99,8	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100
Modelo 4	89,5	97,8	99,2	99,9	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100
Modelo 5	52,8	67,4	77,7	81,5	84	87,5	90	90,4	91,6	91,8	93,4	94	93,5	94,2
Modelo 6	0	61,2	59,9	66,9	72,5	78	85,4	86,3	89,8	92	92,8	93,9	95,6	96,3

FONTE: O autor (2019)

Conforme os valores apresentados nas tabelas 13, 14, 15 e 16, podem ser descritas algumas considerações. Como mencionado na seção 3.2.1, “ Em geral, os efeitos da não normalidade no resultado baseado em ML dependem de sua extensão; quanto maior a não-normalidade, maior o impacto nos resultados”. Isso pode ser percebido nos valores obtidos para a convergência dos modelos 1 e 6 para dados não normais usando o método da máxima verossimilhança (Tabela 13). Os dois modelos apresentaram, nos testes anteriores, não normalidade multivariada e, principalmente, curtose e assimetria acentuadas, o que prejudicou a estimativa da convergência.

Também se observa na tabela 14, um comportamento melhor da taxa de convergência para dados não normais em relação aos valores da tabela 7, o que indica que a técnica de GLS é a mais adequada para os dados não normais, como já se previa. O menor valor de observações que apresentou uma taxa de convergência superior a 50% em todos os modelos foi de 40. Assim definimos como sendo esse, o valor mínimo de observações que serão consideradas para as etapas seguintes da pesquisa. O modelo 6, quando da aplicação da técnica de ML, tanto para dados não normais quanto para dados normais, apresentou baixa convergência. A complexidade do modelo, a baixa quantidade de dados considerados e a curtose e assimetria multivariada acentuadas, interferem na convergência quando usada a estimação por ML, outros fatores que

podem influenciar no resultado podem estar associados a população, aos dados originais e também aos 222 graus de liberdade do modelo. Também pode surgir correlações entre os erros das variáveis e dos fatores que podem afetar a convergência. Nesses casos recomenda-se usar como medida de correlação a correlação policórica, entretanto Babakus et al. (1987) coloca que, apesar da correlação policórica produzir melhores resultados com relação a acurácia dos parâmetros e das estimativas, produz estatísticas de qualidade de ajuste ruins, podendo levar a rejeição de um modelo corretamente especificado. No caso da estimação por GLS, que é um método menos restritivo sobre a normalidade das variáveis do que o método ML, os resultados foram satisfatórios, para os dados com normalidade multivariada ou não. Sendo assim, na etapa seguinte, será verificada a estabilidade dos coeficientes de qualidade de ajustamento, conforme o número de observações, será usada em todas as estimativas calculadas a técnica de mínimos quadrados generalizados (GLS).

4.3 ESTABILIDADE DOS ÍNDICES DE QUALIDADE DE AJUSTAMENTO EM RELAÇÃO AO TAMANHO DA AMOSTRA POR TIPO DE MEE.

Uma questão que deve ser verificada nos modelos analisados é como os índices de qualidade de ajustamento se comportam em relação ao tamanho da amostra. Como já descrito na metodologia, serão calculadas as estimativas para os índices de qualidade de ajustamento avaliados nessa pesquisa (GFI, NFI, CFI e RMSEA) para valores a partir de 40 observações. O objetivo maior dessa etapa está em avaliar a estabilidade das médias das estimativas dos índices de qualidade de ajustamento para valores superiores a 150 observações para validação dos valores extrapolados que serão definidos na etapa seguinte. Mesmo assim para uma análise mais detalhada, serão estimados os valores a partir do número mínimo de observações definido na etapa anterior, aumentando gradativamente até o limite de observações originais disponibilizados em cada modelo. As tabelas e os gráficos na sequência, ilustram as estimativas calculadas para cada modelo, para os dados originais e para os dados normalmente distribuídos gerados a partir dos dados originais, nas quais pode-se avaliar a estabilidade das estimativas dos coeficientes de qualidade.

4.3.1 Avaliação da estabilidade das médias das estimativas dos índices de qualidade de ajustamento para o modelo 1 – Modelo_PTSD

TABELA 17 – ESTIMATIVAS PARA OS ÍNDICES DE QUALIDADE DE AJUSTAMENTO DO MODELO 1

Observações	RMSEA	GFI	NFI	CFI
40	0,022166	0,646335	0,994335	0,999853
60	0,053471	0,72558	0,986714	0,99808
80	0,065459	0,765529	0,982648	0,99555
100	0,065928	0,801505	0,980102	0,993914
120	0,064868	0,82671	0,979098	0,992923
140	0,065298	0,843	0,978953	0,992049
160	0,064131	0,857595	0,978378	0,991334
180	0,063609	0,8684	0,97851	0,990843
199	0,062637	0,877879	0,978749	0,990551

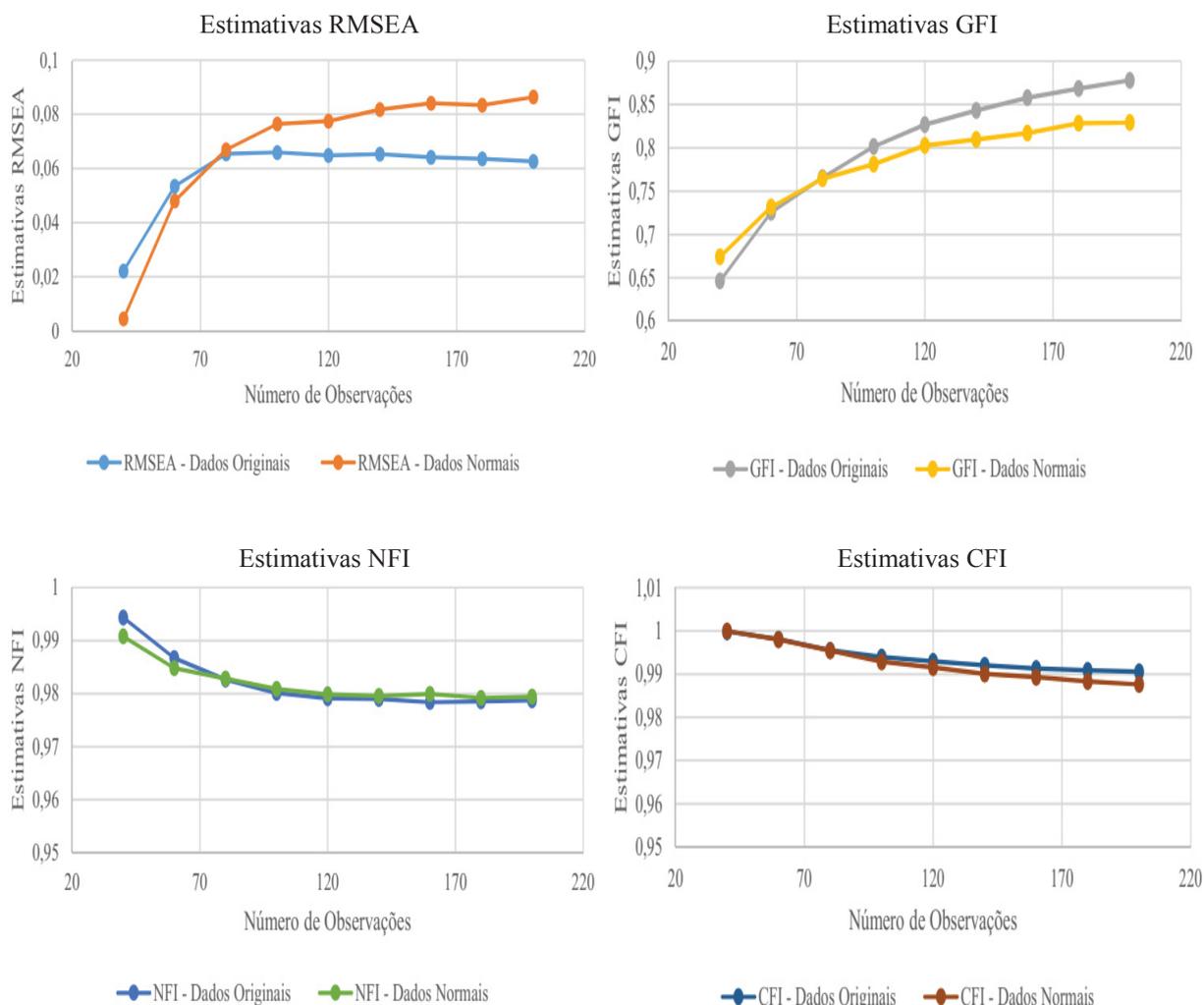
Observações	RMSEA	GFI	NFI	CFI
40	0,004483	0,6739989	0,99078	0,999953
60	0,047974	0,7318182	0,9848	0,997976
80	0,066951	0,7645192	0,982806	0,995404
100	0,07644	0,781191	0,980848	0,99289
120	0,07748	0,8025428	0,979854	0,991564
140	0,081837	0,8096737	0,979525	0,990036
160	0,08411	0,8169268	0,979937	0,989279
180	0,083457	0,828234	0,979189	0,988324
199	0,086397	0,8290362	0,97941	0,987629

(a) Dados Originais

(b) Dados Normais

FONTE: O autor (2019)

GRÁFICO 10 – ESTIMATIVAS DOS ÍNDICES DE QUALIDADE DE AJUSTAMENTO RMSEA, GFI, CFI E NFI PARA O MODELO 1



FONTE: O autor (2019)

4.3.2 Avaliação da estabilidade das médias das estimativas dos índices de qualidade de ajustamento para o modelo 2 – Modelo_Burnout

TABELA 18 – ESTIMATIVAS PARA OS ÍNDICES DE QUALIDADE DE AJUSTAMENTO DO MODELO 2

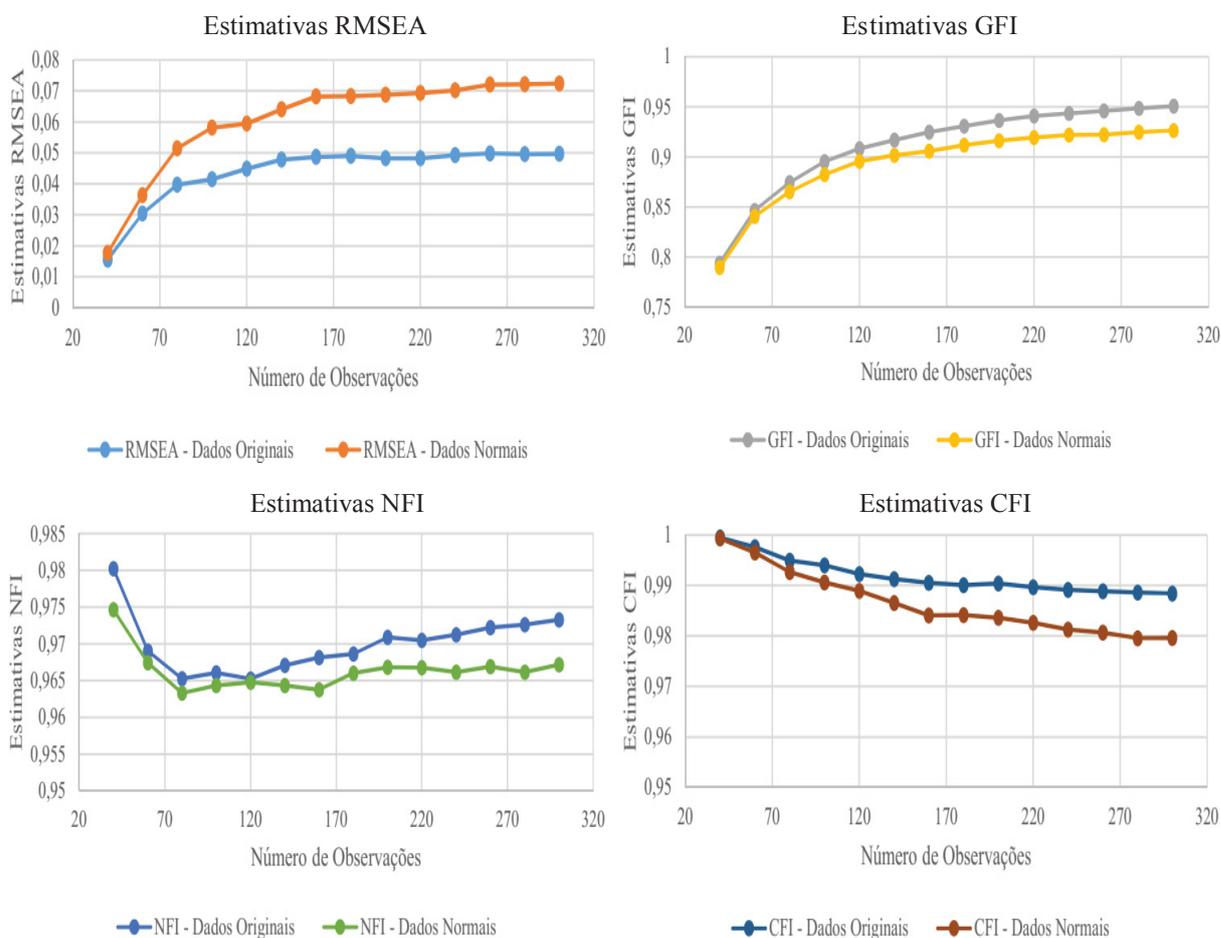
Observações	RMSEA	GFI	NFI	CFI
40	0,015508	0,794207	0,980224	0,999522
60	0,030401	0,846501	0,969016	0,997604
80	0,039722	0,874374	0,965266	0,99495
100	0,041476	0,895405	0,966061	0,993999
120	0,044883	0,90818	0,965236	0,992261
140	0,047782	0,916899	0,967087	0,991278
160	0,048625	0,924655	0,968156	0,990561
180	0,048949	0,930822	0,968629	0,990093
200	0,048251	0,936579	0,970896	0,990418
220	0,048284	0,940749	0,970462	0,989672
240	0,049237	0,943368	0,971235	0,989149
260	0,049811	0,945829	0,972219	0,988847
280	0,049498	0,948596	0,972625	0,988634
296	0,04964	0,950627	0,973275	0,988432

(a) Dados Originais

(b) Dados Normais

FONTE: O autor (2019)

GRÁFICO 11 – ESTIMATIVAS DOS ÍNDICES DE QUALIDADE DE AJUSTAMENTO RMSEA, GFI, CFI E NFI PARA O MODELO 2



FONTE: O autor (2019)

4.3.3 Avaliação da estabilidade das médias das estimativas dos índices de qualidade de ajustamento para o modelo 3 – Modelo_Exemplo

TABELA 19 – ESTIMATIVAS PARA OS ÍNDICES DE QUALIDADE DE AJUSTAMENTO DO MODELO 3

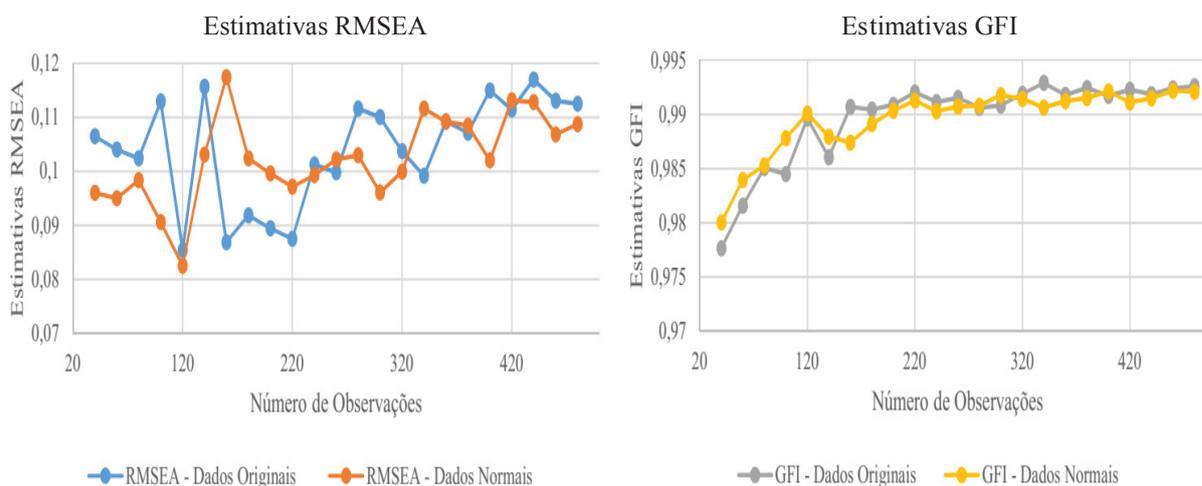
Observações	RMSEA	GFI	NFI	CFI	Observações	RMSEA	GFI	NFI	CFI
40	0,106461	0,977672	0,99801	0,998864	40	0,09601	0,980022	0,998416	0,999133
60	0,10401	0,981598	0,998736	0,9992	60	0,095001	0,983943	0,998641	0,999153
80	0,102366	0,985073	0,998453	0,998974	80	0,098343	0,985282	0,998607	0,999042
100	0,112961	0,984503	0,998635	0,999026	100	0,090535	0,987827	0,998828	0,999191
120	0,085348	0,989636	0,998818	0,999193	120	0,082476	0,990102	0,998965	0,999315
140	0,115691	0,98606	0,998673	0,998991	140	0,103054	0,987950	0,998788	0,999085
160	0,086829	0,99068	0,99905	0,999318	160	0,117443	0,987391	0,998713	0,999011
180	0,091821	0,990432	0,998986	0,999235	180	0,102403	0,989118	0,99885	0,999108
200	0,089444	0,990878	0,999057	0,999271	200	0,099581	0,990347	0,999001	0,999233
220	0,087432	0,992016	0,999169	0,999391	220	0,097104	0,991246	0,999023	0,999253
240	0,101263	0,991121	0,999051	0,99926	240	0,099303	0,990269	0,998983	0,999172
260	0,099814	0,991505	0,999079	0,999287	260	0,102163	0,990718	0,999019	0,999204
280	0,111618	0,990585	0,998958	0,999153	280	0,102977	0,990789	0,999002	0,999182
300	0,110048	0,990824	0,999005	0,999183	300	0,096066	0,991764	0,999094	0,999267
320	0,10371	0,991893	0,999109	0,999284	320	0,099937	0,991409	0,999086	0,999245
340	0,099178	0,992892	0,999189	0,999358	340	0,111597	0,990629	0,998985	0,999141
360	0,109237	0,991799	0,999081	0,999235	360	0,10921	0,991232	0,998995	0,999144
380	0,107116	0,992419	0,99914	0,999291	380	0,108474	0,991501	0,999081	0,999225
400	0,114936	0,991696	0,999066	0,999208	400	0,102013	0,992108	0,999125	0,999264
420	0,111428	0,992275	0,999143	0,999277	420	0,113126	0,991120	0,999027	0,999151
440	0,117004	0,991862	0,999094	0,999221	440	0,112835	0,991473	0,999028	0,999154
460	0,113087	0,992413	0,999135	0,999259	460	0,106789	0,992186	0,999091	0,999217
480	0,112528	0,9926	0,999157	0,999275	480	0,108706	0,992090	0,999059	0,999179

(a) Dados Originais

(b) Dados Normais

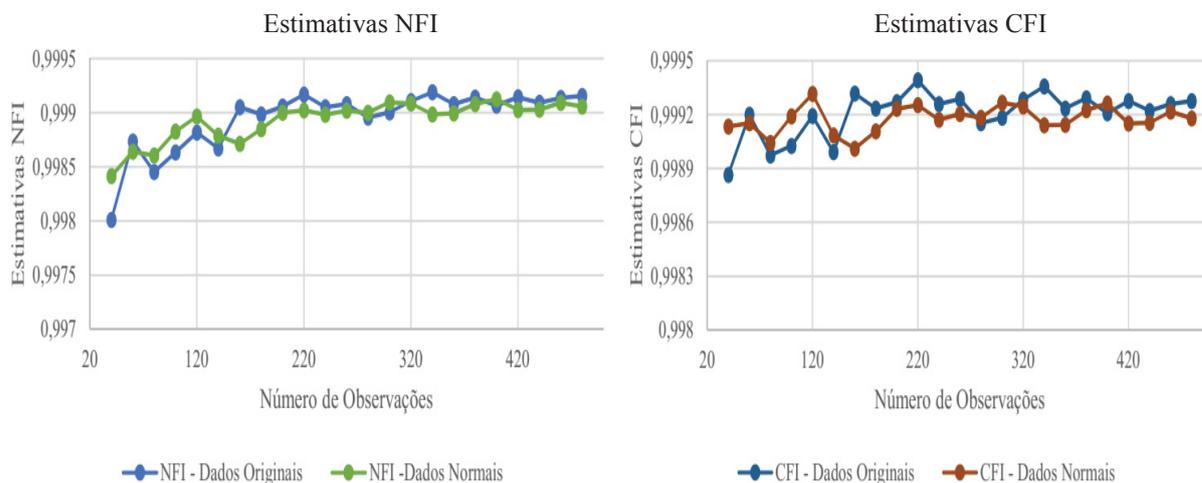
FONTE: O autor (2019)

GRÁFICO 12 – ESTIMATIVAS DOS ÍNDICES DE QUALIDADE DE AJUSTAMENTO RMSEA, GFI E NFI PARA O MODELO 3



(continua)

(conclusão)



FONTE: O autor (2019)

4.3.4 Avaliação da estabilidade das médias das estimativas dos índices de qualidade de ajustamento para o modelo 4 – Modelo_Eutanasia

TABELA 20 – ESTIMATIVAS PARA OS ÍNDICES DE QUALIDADE DE AJUSTAMENTO DO MODELO 4

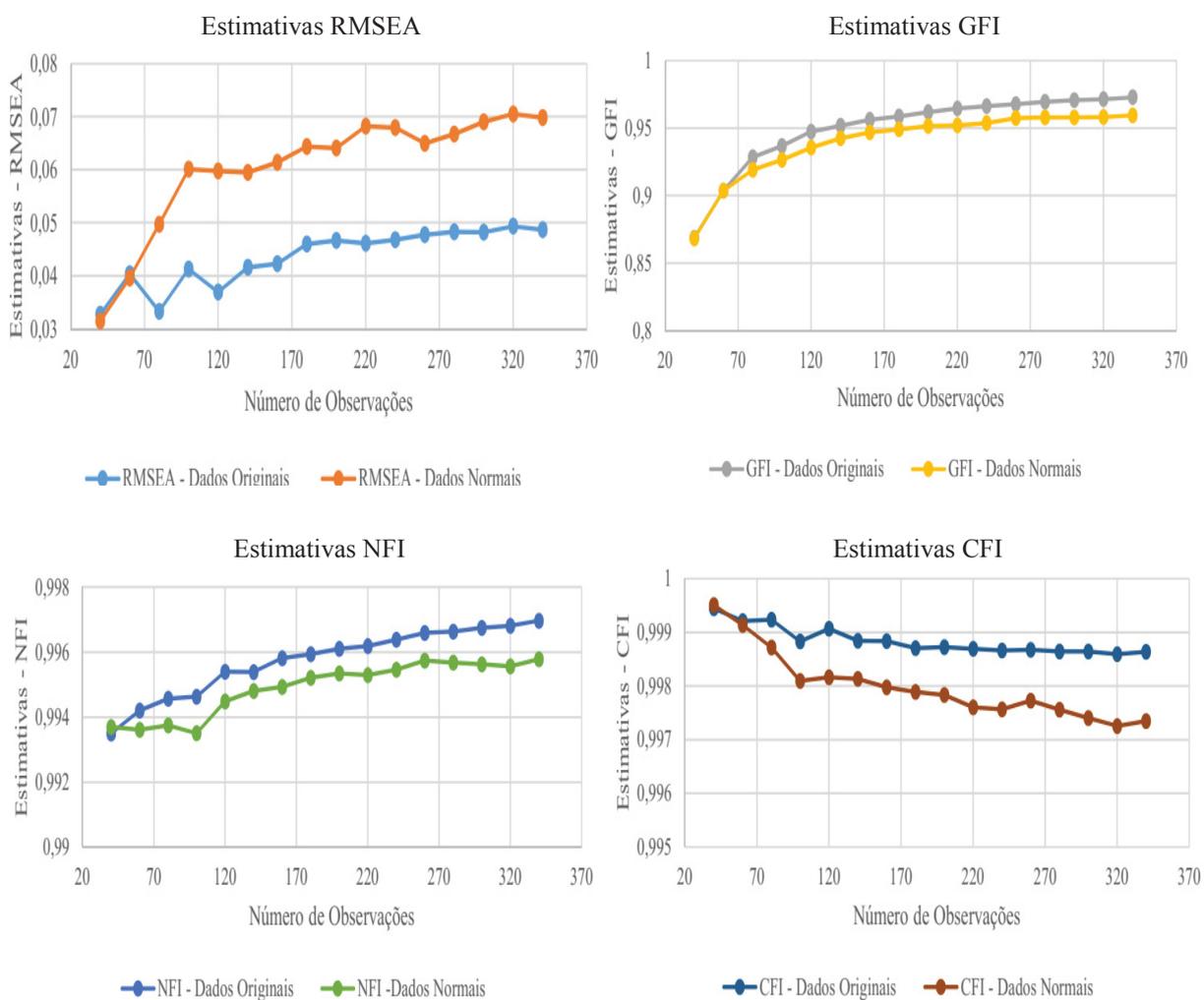
Observações	RMSEA	GFI	NFI	CFI
40	0,032722	0,868555	0,993501	0,999446
60	0,040362	0,903524	0,994203	0,999212
80	0,033287	0,928262	0,994572	0,999235
100	0,041228	0,93677	0,994627	0,998833
120	0,036941	0,947268	0,995402	0,999067
140	0,041601	0,951737	0,995384	0,998846
160	0,042238	0,95611	0,99581	0,998836
180	0,045983	0,958457	0,995932	0,99871
200	0,046626	0,96188	0,996102	0,998728
220	0,046083	0,964582	0,996184	0,998698
240	0,046792	0,966123	0,996379	0,998663
260	0,047702	0,967601	0,996589	0,998674
280	0,048274	0,969336	0,996632	0,998647
300	0,048232	0,970697	0,996744	0,998643
320	0,049333	0,971331	0,996812	0,998595
340	0,048709	0,972725	0,996968	0,998641

(a) Dados Originais

(b) Dados Normais

FONTE: O autor (2019)

GRÁFICO 13 – ESTIMATIVAS DOS ÍNDICES DE QUALIDADE DE AJUSTAMENTO RMSEA, GFI, CFI E NFI PARA O MODELO 4



FONTE: O autor (2019)

4.3.5 Avaliação da estabilidade das médias das estimativas dos índices de qualidade de ajustamento para o modelo 5 – Modelo_Banco

TABELA 21 – ESTIMATIVAS PARA OS ÍNDICES DE QUALIDADE DE AJUSTAMENTO DO MODELO 5

Observações	RMSEA	GFI	NFI	CFI
40	0,026813	0,7628620	0,993799	0,999725
60	0,055704	0,8119786	0,991172	0,998473
80	0,06566	0,8423477	0,989913	0,997379
100	0,074656	0,8550629	0,989271	0,996153
120	0,072586	0,8737009	0,989579	0,995981
140	0,073273	0,884695	0,989336	0,995391
160	0,075034	0,8909651	0,989851	0,995179
180	0,074907	0,8977160	0,989638	0,994785
200	0,074927	0,9028910	0,990196	0,994799
220	0,075593	0,9060269	0,990214	0,994529
240	0,076352	0,9084691	0,990193	0,994253
260	0,075375	0,9131207	0,990394	0,994251
280	0,07596	0,9148705	0,990559	0,994146
300	0,075335	0,9178605	0,99062	0,994077
320	0,074602	0,9208568	0,990764	0,994063
340	0,075906	0,9207686	0,990896	0,993957
360	0,075942	0,9222474	0,991036	0,993935
380	0,075338	0,9244303	0,991078	0,99389
400	0,075391	0,9255853	0,991101	0,993802
420	0,07584	0,9260774	0,991178	0,993745
440	0,075459	0,9276035	0,991108	0,993627
460	0,075756	0,9281145	0,991248	0,993636
480	0,075698	0,9290349	0,991296	0,993601

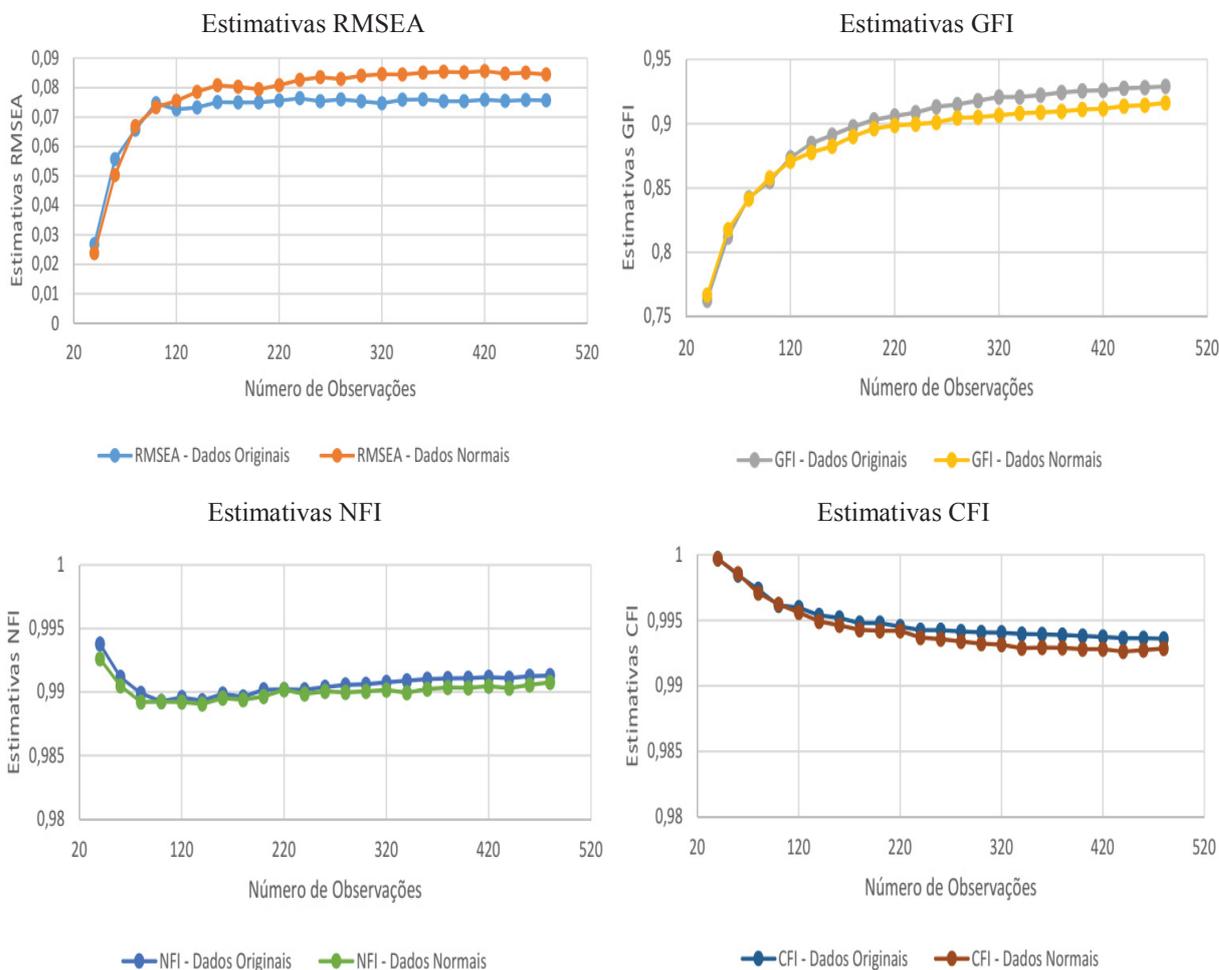
Observações	RMSEA	GFI	NFI	CFI
40	0,023758	0,7668153	0,992627	0,999702
60	0,050302	0,8176273	0,990493	0,998563
80	0,066942	0,8413217	0,989225	0,997084
100	0,073293	0,8578881	0,98924	0,996228
120	0,075509	0,8706851	0,989222	0,995599
140	0,078515	0,8775435	0,989072	0,994926
160	0,080782	0,8824835	0,989538	0,994634
180	0,080245	0,8900680	0,989408	0,994275
200	0,079483	0,8961769	0,989662	0,994198
220	0,080783	0,8988026	0,990181	0,994194
240	0,082573	0,8995887	0,989849	0,993687
260	0,083568	0,9010151	0,990057	0,993576
280	0,082926	0,9045208	0,989973	0,993395
300	0,084004	0,9051132	0,990063	0,993225
320	0,084499	0,9064454	0,990161	0,993137
340	0,084422	0,9080860	0,98995	0,99287
360	0,085034	0,9088264	0,990229	0,992925
380	0,085327	0,9096054	0,99037	0,99291
400	0,085121	0,9111532	0,990341	0,992803
420	0,085602	0,9116119	0,990473	0,992793
440	0,084781	0,9137608	0,990303	0,99262
460	0,085076	0,9143323	0,990573	0,99273
480	0,08439	0,9162240	0,990774	0,992845

(a) Dados Originais

(b) Dados Normais

FONTE: O autor (2019)

GRÁFICO 14 – ESTIMATIVAS DOS ÍNDICES DE QUALIDADE DE AJUSTAMENTO RMSEA, GFI, CFI E NFI PARA O MODELO 5



FONTE: O autor (2019)

4.3.6 Avaliação da estabilidade das médias das estimativas dos índices de qualidade de ajustamento para o modelo 6 – Modelo_Hotel

TABELA 22 – ESTIMATIVAS PARA OS ÍNDICES DE QUALIDADE DE AJUSTAMENTO DO MODELO 6

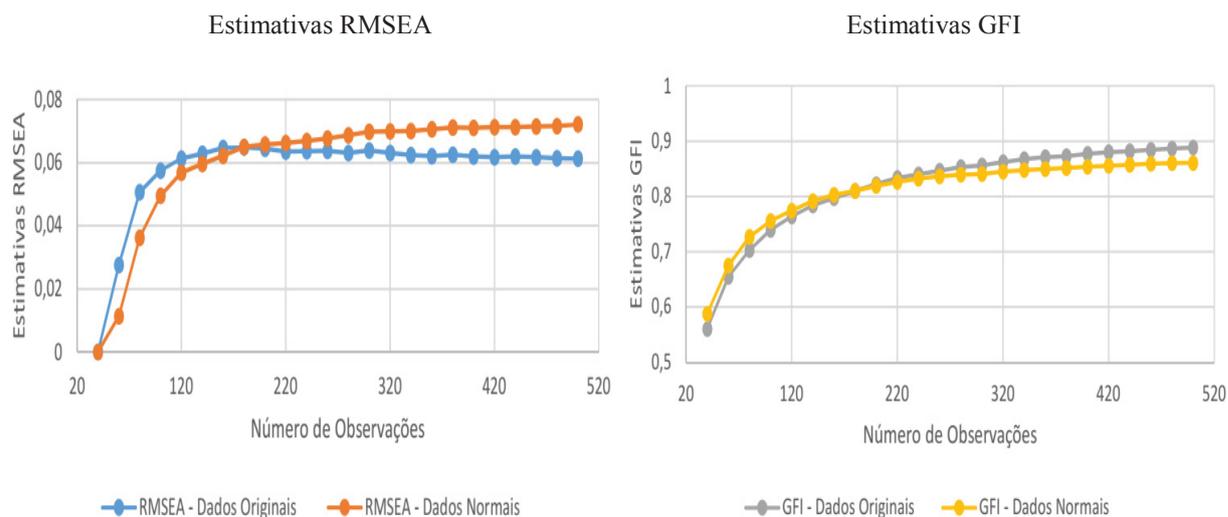
Observações	RMSEA	GFI	NFI	CFI	Observações	RMSEA	GFI	NFI	CFI
40	0	0,560298	0,999478	1	40	0	0,587671	0,998306	1
60	0,027594	0,654668	0,998074	0,999897	60	0,011367	0,675163	0,996258	0,999935
80	0,050707	0,702875	0,996526	0,999428	80	0,036171	0,726868	0,994819	0,99947
100	0,057538	0,739423	0,995725	0,998951	100	0,049522	0,755941	0,994281	0,99887
120	0,061348	0,76409	0,995126	0,99849	120	0,056844	0,774441	0,994072	0,998339
140	0,062869	0,783883	0,99471	0,998121	140	0,059617	0,791639	0,993432	0,997815
160	0,06465	0,797078	0,99448	0,997786	160	0,062209	0,803127	0,99376	0,997606
180	0,064832	0,810359	0,994281	0,997528	180	0,064999	0,809936	0,993424	0,997159
200	0,064436	0,822171	0,994071	0,997307	200	0,065773	0,818998	0,993371	0,99692
220	0,063564	0,833263	0,994036	0,997197	220	0,066274	0,8266	0,993461	0,996788
240	0,063664	0,840382	0,994012	0,997034	240	0,066861	0,832443	0,9936	0,99668
260	0,063733	0,846624	0,99407	0,996944	260	0,067734	0,836587	0,993694	0,99656
280	0,063137	0,853518	0,993976	0,996821	280	0,068645	0,839532	0,993601	0,996355
300	0,063839	0,856486	0,993994	0,996686	300	0,069801	0,840997	0,993626	0,996214
320	0,063099	0,862356	0,994001	0,996632	320	0,069938	0,84474	0,993667	0,996132
340	0,062452	0,867524	0,994075	0,996616	340	0,070016	0,848146	0,993622	0,996009
360	0,062089	0,871522	0,994181	0,996613	360	0,070617	0,849685	0,993705	0,995949
380	0,06259	0,873287	0,993928	0,996361	380	0,071116	0,851237	0,993642	0,995813
400	0,061991	0,877296	0,994138	0,996443	400	0,071054	0,853878	0,993763	0,995823
420	0,061708	0,880278	0,99429	0,996482	420	0,07126	0,855679	0,99366	0,995674
440	0,062006	0,88173	0,994278	0,996398	440	0,071323	0,85763	0,993882	0,995766
460	0,06177	0,88422	0,994275	0,996346	460	0,071462	0,859184	0,9938	0,995646
480	0,061443	0,88678	0,994275	0,996305	480	0,071567	0,860643	0,993853	0,995625
500	0,061318	0,88872	0,994328	0,996292	500	0,072112	0,860745	0,993923	0,995607

(a) Dados Originais

(b) Dados Normais

FONTE: O autor (2019)

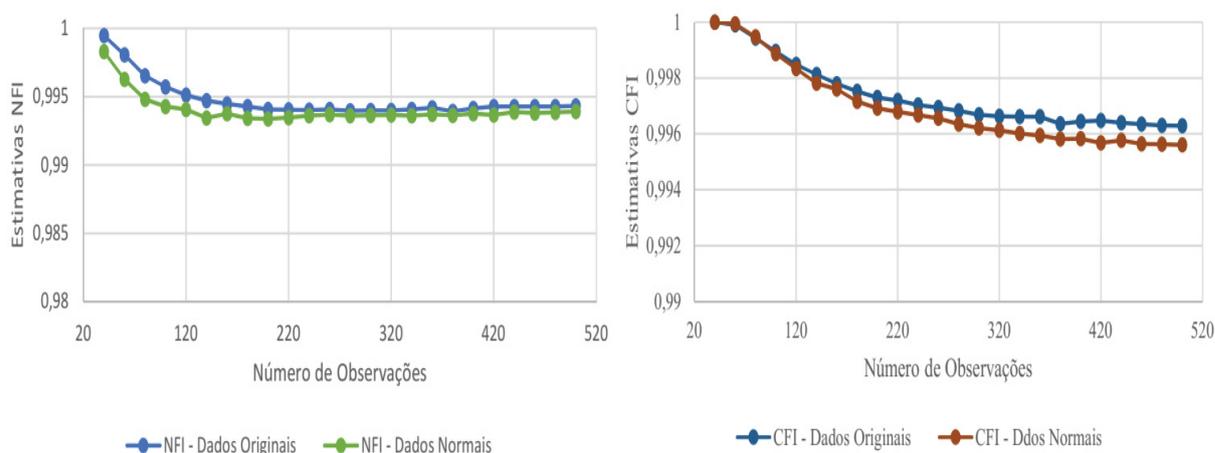
GRÁFICO 15 – ESTIMATIVAS DOS ÍNDICES DE QUALIDADE DE AJUSTAMENTO RMSEA, GFI, CFI E NFI PARA O MODELO 6



(continua)

Estimativas NFI

Estimativas CFI



FONTE: O autor (2019)

Em relação aos resultados obtidos, podemos destacar os seguintes pontos.

Primeiramente tem-se no modelo 6, o valor de RMSEA igual a zero (0) e de CFI igual a um (1). Os dois índices usam parâmetros estimados de não centralidade (NCP - *Non-Centrality Parameter*)¹⁰ e podem ser representados como tendo o valor máximo de $[(\chi^2 - gl), 0]$ em seu numerador, portanto quando o valor do teste qui-quadrado é menor que os graus de liberdade significa que $RMSEA = 0$ e $CFI = 1$ (por definição). O valor do qui-quadrado ser menor que os graus de liberdade pode ocorrer pelo fato de se ter um modelo muito bem ajustado, ou porque o modelo é saturado ou indicar baixa potência (baixo poder) nesses tamanhos de amostra para detectar qualquer erro de especificação presente neste caso.

É claro que se deve ter cautela nesses casos de ajuste perfeito. Testes auxiliares podem ser realizados na tentativa de verificar se o real ajuste do modelo é expresso pelos valores obtidos, mas tais testes devem estar embasados em fortes considerações sobre o modelo e não em suposições a respeito de um mal ajustamento. Na falta de evidências de um mal ajustamento, decide-se por acatar os valores obtidos.

Em alguns modelos os valores estimados de alguns índices apresentaram forte variação para amostras pequenas. Estudos de simulação, como o trabalho de Tanguma (2001), tem mostrado que, principalmente os índices GFI e NFI são sensíveis ao tamanho da amostra e que

¹⁰ As distribuições não centrais (t, F e qui-quadrado) podem ser derivadas de amostras de variáveis aleatórias normais com uma média diferente de zero. Essas distribuições não centrais são distinguidas das distribuições centrais por um parâmetro de não centralidade. O parâmetro de não centralidade é útil na descrição de estatísticas de teste comumente usadas, em que o parâmetro de não centralidade representa o grau em que a média da estatística de teste se afasta de sua média quando a hipótese nula é verdadeira. Extraído de <https://support.minitab.com/en-us/minitab/18/help-and-how-to/probability-distributions-and-random-data/supporting-topics/data/noncentrality-parameter/>, acesso em 01/06/2018.

o índice GFI tem maior poder estatístico. Conclui-se que, para a análise de ajustamento proposta nesse trabalho, não convém usar o índice GFI isoladamente, sob risco de se cometer erros do tipo I ou II. Já o valor de RMSEA mostrou uma certa estabilidade no que diz respeito ao grau de ajustamento do modelo. Apesar dos valores apresentarem oscilação em relação ao tamanho da amostra, não houve alteração do nível de ajustamento encontrado.

Alguns trabalhos de simulação (KENNY *et al.*, 2014) indicam que em modelos com pequenos graus de liberdade e pequenos tamanhos de amostra, o RMSEA frequentemente indica falsamente um modelo inadequadamente ajustado. Afirmam que, “Recomendamos não computar o RMSEA para modelos com gl pequenos, especialmente aqueles com tamanhos de amostra pequenos, mas sim estimar parâmetros que não foram originalmente especificados no modelo” (KENNY *et al.*, 2014). Pode-se verificar tal afirmação na análise feita para o modelo 3 (com 1 grau de liberdade). Tal qual foi definido para o índice GFI, o RMSEA também não poderá ser usado isoladamente na análise do ajustamento de um modelo, principalmente em casos com graus de liberdade pequenos.

Tais afirmações só ratificam o uso de mais de um índice de qualidade para análise do ajustamento de um modelo nas condições impostas nesse trabalho. Também podemos verificar que os índices apresentaram comportamento semelhante tanto para dados que não apresentam normalidade multivariada como para os dados normalmente distribuídos. As considerações tomadas para os dados não normais também serão válidas para os dados normais. Os testes realizados também alcançaram o objetivo principal dessa etapa dos trabalhos que era de avaliar a estabilidade das estimativas para os coeficientes de qualidade de ajustamento, em relação ao número de observações.

Pode-se concluir, para os modelos aqui avaliados, que os coeficientes apresentam estabilidade nos valores, principalmente para valores acima de 150 observações, valor este que foi definido como limite para aplicação da metodologia proposta e que será exposta na próxima etapa dos trabalhos. Alguns modelos inclusive, apresentaram estabilidade para valores abaixo desse limite, levando a considerar o fato de que o número de observações considerada para estimação dos parâmetros pode ser menor.

Esta estabilidade dos valores decorre, entre outros fatores, do fato da matriz de covariância sofrer pouca variabilidade pelo acréscimo de mais observações, o que colabora com a questão levantada anteriormente sobre a necessidade de um número elevado de observações quando se aplica a técnica de modelagem de equações estruturais. Em todos os modelos avaliados nessa pesquisa, a estabilidade dos valores dos índices sugere que, para valores

maiores de observações, a diferença entre seguidas estimativas calculadas é mínima o que garante que, a partir da aplicação da metodologia exposta na etapa 4 do item 3.2, com o uso de regressão não linear, a diferença entre os valores estimados pela extrapolação da curva que define os valores futuros e os reais valores calculados deverá ser mínima, validando assim a aplicação da mesma. Tal verificação será feita na etapa posterior. Também pode-se concluir que os índices GFI, NFI e CFI apresentaram melhores desempenhos pois, pelos resultados obtidos, foram os que mais mantiveram valores estáveis. O índice RMSEA apresentou pouca estabilidade, principalmente nos modelos que possuem menor grau de liberdade. Sendo assim sugere-se que, principalmente em modelos com baixo grau de liberdade, esse índice não seja considerado, ou seja considerado juntamente com outros índices quando da aplicação da metodologia proposta. Na etapa seguinte será aplicada a metodologia proposta neste trabalho nos modelos selecionados.

4.4 APLICAÇÃO DE REGRESSÃO NÃO LINEAR SOBRE AS MÉDIAS DAS ESTIMATIVAS DOS COEFICIENTES DE QUALIDADE DE AJUSTAMENTO (para pequenas amostras).

Nas etapas anteriores foram definidas a quantidade mínima de observações que serão consideradas para a aplicação da regressão sobre as estimativas estipulada, a quantidade máxima de observações, e analisada a estabilidade das estimativas em relação ao número de observações. De posse dessas informações, nessa etapa será aplicada sobre as médias das estimativas calculadas para os índices de qualidade de ajustamento, o conceito de regressão não linear para que, com a equação da curva ajustada, se possa realizar uma extrapolação para um número de observações maiores e assim obter os valores que poderão confirmar o ajuste do modelo estrutural mediante critérios que serão definidos posteriormente a esses testes.

Ajusta-se uma curva em relação as médias das estimativas calculadas e, extrapolamos para um número de observações maiores. Determina-se para a curva ajustada um intervalo ou banda de confiança tomando como valor de referência para o número de observações a quantidade original de observações disponibilizada em cada modelo. Como todos os modelos estruturais possuem um número maior que 150 observações, calculam-se as estimativas para uma quantidade maior de observações e compara-se com os valores extrapolados, de forma a se observar a diferença entre os valores. Essa diferença e, principalmente, os limites do intervalo de predição, irão determinar se os resultados obtidos pela regressão, podem ser usados com referência para avaliar a qualidade do ajustamento do modelo estrutural. Para esse primeiro

modelo analisado (Modelo 1), será feito um detalhamento dos passos descritos. Todos os procedimentos adotados aqui serão repetidos para os demais modelos de forma mais direta.

4.4.1 Modelo 1 – Modelo_PTSD

i) Cálculo das estimativas dos índices de qualidade de ajustamento

Em cada uma das 10 simulações, calculam-se 100 estimativas para cada quantidade de observações considerada, e para cada índice de ajustamento analisado, dentro do intervalo estipulado de 40 a 150. As estimativas são calculadas utilizando o pacote *sem* do *software* R[®] (R Core Team, 2019), com aplicação do método de estimação por Mínimos Quadrados Generalizados (*GLS*) sobre os dados originais.

Modelo 1 – Índice de qualidade de ajustamento RMSEA

ii) Coeficientes iniciais para aplicação da regressão não linear sobre os resultados anteriores utilizando o modelo de Michaelis-Menten, obtidos por processo de linearização e para o modelo exponencial por observação gráfica.

Neste ponto do processo, aplica-se uma regressão linear usando como modelo uma das equações apresentadas na etapa 4 da seção 3.2 (Metodologia) de forma a obter os valores iniciais, também chamados de “chutes iniciais”, para os parâmetros do modelo de Michaelis-Menten para ajuste, por regressão não linear do modelo sobre as estimativas já calculadas. A curva será ajustada sobre as médias das estimativas. Pode-se escolher entre uma das quatro opções de linearização apresentadas, mas como as estimativas para RMSEA podem conter valores nulos, a única opção de linearização adequada é a equação de Eadie-Hofstee.

Os coeficientes iniciais para o modelo exponencial devem ser considerados a partir da observação gráfica das médias das estimativas calculadas.

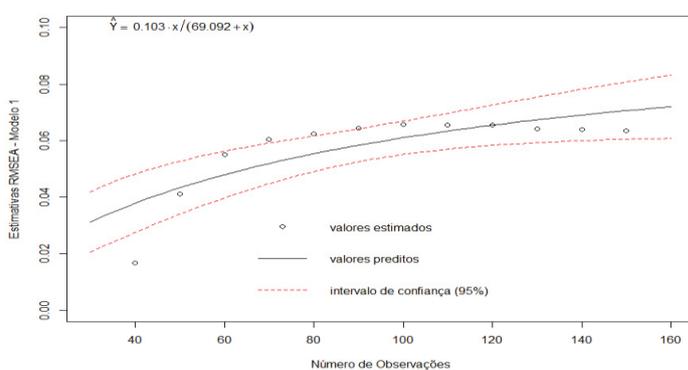
iii) Ajuste da curva por regressão não linear com respectivo intervalo de confiança para os valores preditos

Usando os coeficientes iniciais calculados anteriormente busca-se determinar os parâmetros para o ajuste dos modelos de Michaelis-Menten e Exponencial sobre as médias das estimativas.

O ajuste foi realizado sobre os resultados das dez simulações realizadas e foi considerado aquele que apresentou o melhor coeficiente de determinação R^2 . Como as 10 simulações apresentaram médias para as estimativas praticamente idênticas, os ajustes dos modelos de regressão apresentaram os mesmos coeficientes em todas elas e os mesmos coeficientes de determinação, para cada um dos modelos considerados.

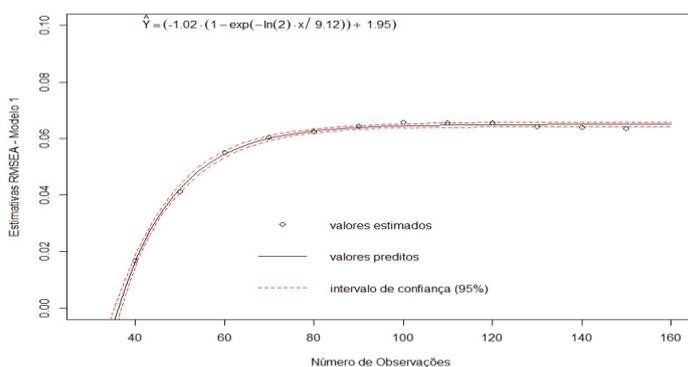
Tendo o ajuste determinado, aplicam-se os procedimentos para cálculo da banda de confiança, pelo método Delta apresentado, sobre os valores previstos pelo modelo. No gráfico 16, os ajustes, sobre as estimativas para o índice RMSEA para o Modelo_PTSD, para os dois modelos de regressão com respectivos coeficientes de determinação.

GRÁFICO 16 – AJUSTAMENTO SOBRE AS MÉDIAS DAS ESTIMATIVAS DO ÍNDICE DE QUALIDADE RMSEA DO MODELO 1 COM RESPECTIVA BANDA DE CONFIANÇA.



(a) Ajustamento pelo modelo de Michaelis-Menten

$$\hat{y} = \frac{0,103 \cdot x}{69,092 + x}, \quad R^2 = 0,6701$$



(b) Ajustamento pelo modelo exponencial

$$\hat{y} = -1,02 \cdot (1 - \exp(-\ln 2 \cdot \frac{x}{9,12})) + 1,95$$

$$R^2 = 0,9967$$

FONTE: O autor (2019)

O melhor ajuste, determinado pelo valor de $R^2 = 0,9967$ foi para o modelo exponencial com a inclusão de uma constante $C = 1,95$. Como esse modelo estrutural possui 199 observações no seu banco de dados original, escolheu-se os valores de 160,170,180,190 e 199 observações para calcular as estimativas para o índice RMSEA, bem como os valores previstos para os modelos ajustados, os limites do intervalo de de predição para análise posterior. Na tabela 23 apresenta-se os resultados para os valores obtidos pela curva de regressão, os valores estimados, a diferença entre eles e os limites para o intervalo de predição.

TABELA 23 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE RMSEA DO MODELO 1, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
160	0,063552	0,072025	-0,008473	0,049458	0,094593
170	0,062548	0,074523	-0,01197	0,5022	0,096432
180	0,062396	0,074523	-0,012127	0,050861	0,099853
190	0,061806	0,075627	-0,013821	0,0514	0,099853
199	0,061252	0,076649	-0,015397	0,051856	0,101441

(a) Modelo de Michaelis-Menten

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
160	0,063552	0,072025	0,001429	0,060423	0,083627
170	0,062548	0,073326	0,002442	0,060678	0,085974
180	0,062396	0,074523	0,002598	0,060856	0,088189
190	0,061806	0,061127	0,003190	0,060977	0,090277
199	0,061252	0,061194	0,003747	0,061052	0,092245

(b) Modelo Exponencial

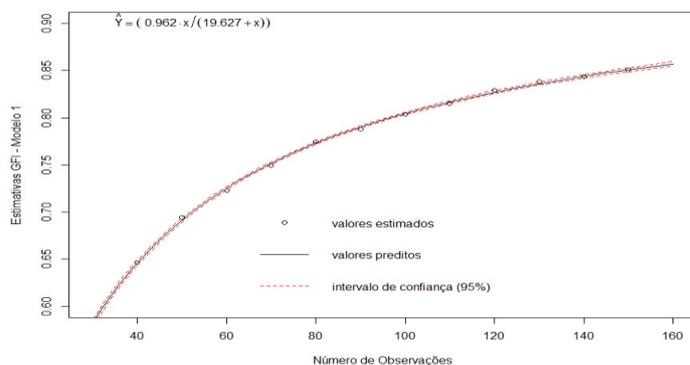
FONTE: O Autor (2019)

LEGENDA: Vlr. Est: Valor das estimativas calculadas sobre as observações originais
 Vlr. Predito: Valor das estimativas calculadas sobre os modelos ajustados
 Diferença: Vlr. Est – Vlr. Predito
 Lim. Inf.: Limite Inferior para Intervalo de Predição
 Lim. Sup.: Limite Superior para Intervalo de Predição

Observa-se que as diferenças entre os valores obtidos pela curva de regressão e as estimativas calculadas sobre as observações originais são mínimas, o que mostra que a aplicação do ajuste por regressão não linear sobre as estimativas resulta, neste caso, em um bom resultado. Em relação ao intervalo de predição, observa-se que o limite superior ultrapassa o patamar de 0,09 o que pode ser considerado um mau ajuste. Assim devemos considerar tais resultados com cautela. Mas, apesar desse detalhe, os resultados foram satisfatórios para o objetivo da pesquisa pois os valores extrapolados através do modelo de regressão ajustado ficaram muito próximos dos reais valores. Na sequência, repete-se os mesmos procedimentos para os demais coeficientes de ajustamento analisados (GFI, NFI e CFI). Serão apresentados os modelos de regressão ajustados para ambos os casos e as tabelas com diferenças e intervalos de predição.

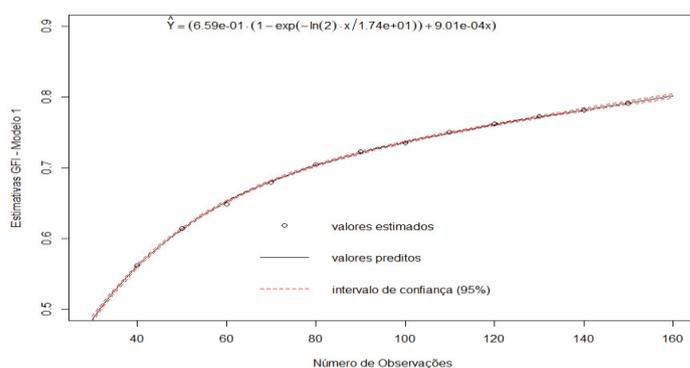
Modelo 1 – Índice de qualidade de ajustamento GFI

GRÁFICO 17 – AJUSTAMENTO SOBRE AS MÉDIAS DAS ESTIMATIVAS DO ÍNDICE DE QUALIDADE GFI DO MODELO 1 COM RESPECTIVA BANDA DE CONFIANÇA



(a) Ajustamento pelo modelo de Michaelis-Menten

$$\hat{y} = \frac{0,962x}{19,627+x}, \quad R^2 = 0,9991$$



(b) Ajustamento pelo modelo exponencial

$$\hat{y} = 0,659 \cdot (1 - \exp(-\ln 2 \cdot \frac{x}{17,4})) + 0,0009 \cdot x$$

$$R^2 = 0,9996$$

FONTE: O autor (2019)

TABELA 24 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE GFI DO MODELO 1, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
160	0,858679	0,797898	0,060781	0,793253	0,802543
170	0,865621	0,804406	0,061215	0,799703	0,809109
180	0,870470	0,810281	0,060189	0,805521	0,815041
190	0,875575	0,815611	0,059964	0,810796	0,820426
199	0,879875	0,820468	0,059407	0,8156	0,825337

(a) Modelo de Michaelis-Menten

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
160	0,858679	0,8016	0,05317	0,79682	0,806379
170	0,865621	0,810983	0,054638	0,80569	0,816275
180	0,870470	0,820243	0,050227	0,814355	0,82613
190	0,875575	0,82942	0,046155	0,822874	0,835967
199	0,879875	0,838543	0,041332	0,831289	0,845796

(b) Modelo Exponencial

FONTE: O Autor (2019)

LEGENDA: Vlr. Est: Valor das estimativas calculadas sobre as observações originais

Vlr. Predito: Valor das estimativas calculadas sobre os modelos ajustados

Diferença: Vlr. Est – Vlr. Predito

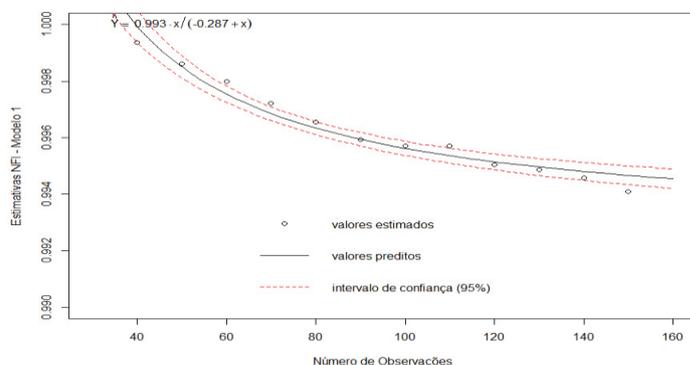
Lim. Inf.: Limite Inferior para Intervalo de Predição

Lim. Sup.: Limite Superior para Intervalo de Predição

Observa-se nos cálculos envolvendo as estimativas do índice GFI um bom ajustamento tanto do modelo de Michaelis-Menten quanto do modelo Exponencial. Os valores previstos apresentaram pequena diferença entre as estimativas futuras e os limites dos intervalos de predição ficaram bem próximos e na faixa de ajustamento considerável de bom a ótima. O índice de ajustamento GFI teve um resultado geral melhor que o índice RMSEA, principalmente no que diz respeito ao ajuste do modelo de regressão.

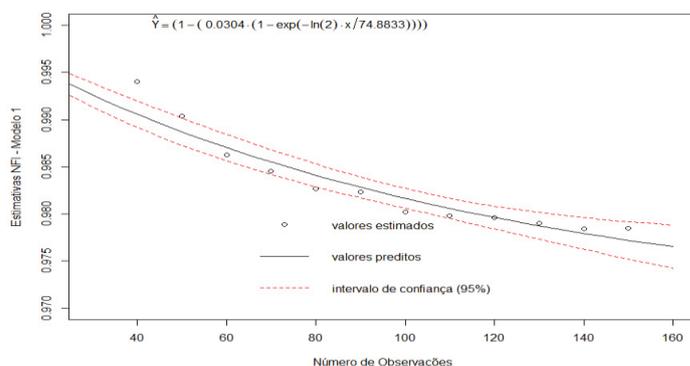
Modelo 1 – Índice de qualidade de ajustamento NFI

GRÁFICO 18 – AJUSTAMENTO SOBRE AS MÉDIAS DAS ESTIMATIVAS DO ÍNDICE DE QUALIDADE NFI DO MODELO 1 COM RESPECTIVA BANDA DE CONFIANÇA



(a) Ajustamento pelo modelo de Michaelis-Menten

$$\hat{y} = \frac{0,993 \cdot x}{-0,287 + x}, \quad R^2 = 0,959$$



(b) Ajustamento pelo modelo exponencial

$$\hat{y} = 1 - (0,0304 \cdot (1 - \exp(-\ln(2) \cdot \frac{x}{74,8833})))$$

$$R^2 = 0,9163$$

FONTE: O Autor (2019)

TABELA 25 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE NFI DO MODELO 1, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
160	0,978703	0,994547	-0,015844	0,993684	0,99541
170	0,978807	0,994441	-0,015634	0,993574	0,995309
180	0,978547	0,994348	-0,015801	0,993476	0,99522
190	0,978947	0,994264	-0,0015317	0,993388	0,99514
199	0,979109	0,994189	-0,01508	0,993309	0,995069

(a) Modelo de Michaelis-Menten

(continua)

(continuação)

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
160	0,978703	0,976513	-0,002190	0,97235	0,97789
170	0,978807	0,975902	-0,002905	0,972547	0,97951
180	0,978547	0,975345	-0,003202	0,971334	0,981437
190	0,978947	0,978947	-0,004110	0,972159	0,981749
199	0,979109	0,979109	-0,004691	0,967831	0,983213

(b) Modelo Exponencial

FONTE: O Autor (2019)

LEGENDA: Vlr. Est: Valor das estimativas calculadas sobre as observações originais

Vlr. Predito: Valor das estimativas calculadas sobre os modelos ajustados

Diferença: Vlr. Est – Vlr. Predito

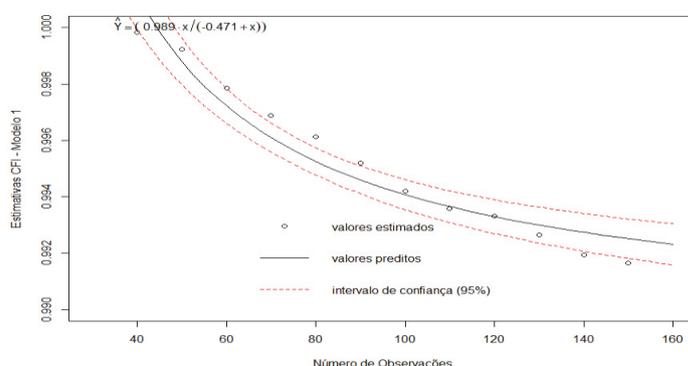
Lim. Inf.: Limite Inferior para Intervalo de Predição

Lim. Sup.: Limite Superior para Intervalo de Predição

Observa-se pelos valores calculadas que o índice NFI tem estimativas muito próximas de um (1) para todas as quantidades de observações. Esse comportamento pode tanto ser por um bom ajustamento dos dados quanto pelo fato de se estar considerando poucas observações e o valor do qui-quadrado se aproximar dos graus de liberdade. No entanto o “comportamento” das estimativas difere um pouco dos outros índices analisados pelo fato de que, a medida que a quantidade de observações considerada cresce, o valor do índice NFI decresce. Isso reflete no ajustamento dos modelos de regressão, que no caso do modelo de Michaelis-Menten teve um de seus coeficientes negativo e no modelo exponencial a necessidade de multiplicar o modelo por (-1) para alterar a curvatura da curva ajustada.

Modelo 1 – Índice de qualidade de ajustamento CFI

GRÁFICO 19 – AJUSTAMENTO SOBRE AS MÉDIAS DAS ESTIMATIVAS DO ÍNDICE DE QUALIDADE CFI DO MODELO 1 COM RESPECTIVA BANDA DE CONFIANÇA

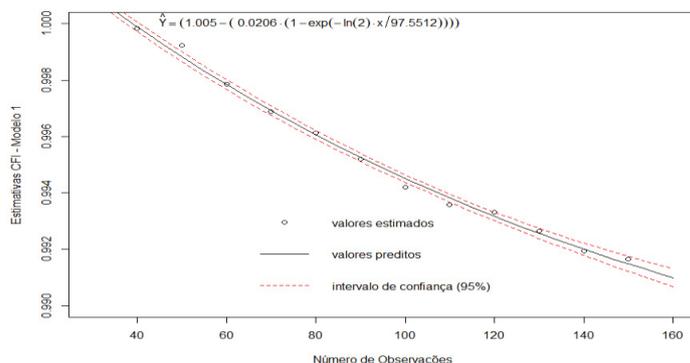


(a) Ajustamento pelo modelo de Michaelis-Menten

$$\hat{y} = \frac{0,989x}{-0,471+x}, \quad R^2 = 0,9335$$

(continua)

(continuação)



(b) Ajustamento pelo modelo exponencial

$$\hat{y} = 1,005 - (0,0206 \cdot (1 - \exp(-\ln 2, \frac{x}{97,5512})))$$

$$R^2 = 0,9163$$

FONTE: O Autor (2019)

TABELA 26 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE CFI DO MODELO 1, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
160	0,978703	0,99192	-0,013217	0,990705	0,993921
170	0,978807	0,991748	-0,012941	0,990525	0,993758
180	0,978547	0,991598	-0,013051	0,990365	0,993614
190	0,978947	0,991457	-0,01251	0,990222	0,993485
199	0,979109	0,991346	-0,012237	0,990092	0,993369

(a) Modelo de Michaelis-Menten

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
160	0,978703	0,991009	-0,012305	0,990479	0,991782
170	0,978807	0,990556	-0,011749	0,990021	0,991396
180	0,978547	0,990133	-0,011466	0,98959	0,991047
190	0,978947	0,989740	-0,010793	0,989185	0,99073
199	0,979109	0,989409	-0,0103	0,989804	0,990442

(b) Modelo Exponencial

FONTE: O Autor (2019)

LEGENDA: Vlr. Est: Valor das estimativas calculadas sobre as observações originais

Vlr. Predito: Valor das estimativas calculadas sobre os modelos ajustados

Diferença: Vlr. Est – Vlr. Predito

Lim. Inf.: Limite Inferior para Intervalo de Predição

Lim. Sup.: Limite Superior para Intervalo de Predição

Idênticas considerações feitas aos resultados obtidos na análise do índice NFI. No caso do ajustamento pelo modelo exponencial houve a necessidade de uma adequação ao modelo, incluindo uma constante C e multiplicando o modelo por (-1) devido ao comportamento decrescente das estimativas. Para os demais modelos seguem as mesmas metodologias aplicadas sobre as estimativas do modelo 1. Para fins de simplificar os resultados serão apresentados o modelo ajustado com respectivo coeficiente de determinação, e a tabela com os valores das estimativas futuras, os valores preditos e os limites para os intervalos de confiança e predição.

4.4.2 Modelo 2 – Modelo_Burnout

O modelo possui no seu banco dados original 296 observações. Serão consideradas para fins de verificação do ajustamento as quantidades de 220, 230, 240, 250, 270 e 296 observações para cada índice analisado. A partir desse modelo serão apresentados apenas os modelos ajustados, com respectivos coeficientes de determinação e tabelas com os valores das estimativas, valores obtidos pela extrapolação do modelo de regressão, diferenças e intervalo de predição, para todos os índices analisados.

Modelo 2 – Índice de qualidade de ajustamento RMSEA

(a) Ajustamento pelo modelo de Michaelis-Menten $\hat{y} = \frac{0,095 \cdot x}{136,62 + x}$, $R^2 = 0,7552$

(b) Ajustamento pelo modelo exponencial $\hat{y} = 0,17 \cdot \left(1 - \exp\left(-\ln 2 \cdot \frac{x}{17,88}\right)\right) - 0,12$, $R^2 = 0,911$

TABELA 27 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE RMSEA DO MODELO 2, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
220	0,049882	0,058725	-0,008843	0,038355	0,079096
230	0,048728	0,05972	-0,010992	0,038591	0,08085
240	0,050859	0,060662	-0,009803	0,038773	0,082551
250	0,049141	0,061555	-0,012414	0,38909	0,084201
270	0,049718	0,06321	-0,013492	0,039072	0,087347
296	0,049443	0,065407	-0,015964	0,039112	0,091703

(a) Modelo de Michaelis-Menten

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
220	0,049882	0,04677	0,003112	0,036466	0,057074
230	0,048728	0,046781	0,001947	0,03646	0,057101
240	0,050859	0,046788	0,004071	0,036455	0,057121
250	0,049141	0,046793	0,002348	0,036451	0,057135
270	0,049718	0,046799	0,002919	0,036446	0,057151
296	0,049443	0,046802	0,002641	0,036443	0,057162

(b) Modelo Exponencial

FONTE: O Autor (2019)

LEGENDA: Vlr. Est: Valor das estimativas calculadas sobre as observações originais
 Vlr. Predito: Valor das estimativas calculadas sobre os modelos ajustados
 Diferença: Vlr. Est – Vlr. Predito
 Lim. Inf.: Limite Inferior para Intervalo de Predição
 Lim. Sup.: Limite Superior para Intervalo de Predição

Modelo 2 – Índice de qualidade de ajustamento GFI

(a) Ajustamento pelo modelo de Michaelis-Menten $\hat{y} = \frac{0,975 \cdot x}{8,973 + x}$, $R^2 = 0,9899$

(b) Ajustamento pelo modelo exponencial $\hat{y} = 0,822 \cdot \left(1 - \exp\left(-\ln 2 \cdot \frac{x}{10,13}\right)\right) + 0,0006x$, $R^2 = 0,991$

TABELA 28 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE GFI DO MODELO 2, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
220	0,939448	0,937487	0,001961	0,927039	0,947936
230	0,942166	0,0939087	0,8482573	0,928582	0,949592
240	0,942022	0,940559	0,001463	0,93	0,951117
250	0,945072	0,941916	0,003156	0,931307	0,952526
270	0,947209	0,94434	0,002869	0,933638	0,955042
296	0,950387	0,947387	0,003	0,936563	0,958212

(a) Modelo de Michaelis-Menten

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
220	0,939448	0,976037	-0,036589	0,958973	0,9931
230	0,942166	0,983015	-0,040849	0,964829	1,001201
240	0,942022	0,989994	-0,047972	0,970658	1,01748
250	0,945072	0,996972	-0,0519	0,976463	1,01748
270	0,947209	1,010928	-0,063719	0,988019	1,033838
296	0,950387	1,031863	-0,081476	1,005253	1,058474

(b) Modelo Exponencial

FONTE: O Autor (2019)

LEGENDA: Vlr. Est: Valor das estimativas calculadas sobre as observações originais

Vlr. Predito: Valor das estimativas calculadas sobre os modelos ajustados

Diferença: Vlr. Est – Vlr. Predito

Lim. Inf.: Limite Inferior para Intervalo de Predição

Lim. Sup.: Limite Superior para Intervalo de Predição

Modelo 2 – Índice de qualidade de ajustamento NFI

(a) Ajustamento pelo modelo de Michaelis-Menten $\hat{y} = \frac{0,962 \cdot x}{-0,528 + x}$, $R^2 = 0,6781$

(a) Ajustamento pelo modelo exponencial $\hat{y} = 1 - (0,0342 \cdot \left(1 - \exp\left(-\ln 2 \cdot \frac{x}{20,19}\right)\right))$,

$$R^2 = 0,7271$$

TABELA 29 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE NFI DO MODELO 2, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
220	0,970448	0,964253	0,006195	0,958969	0,969538
230	0,971387	0,964152	0,007235	0,95885	0,969455
240	0,970622	0,96406	0,006562	0,958741	0,969379
250	0,971385	0,963975	0,00741	0,95864	0,96931
270	0,972165	0,963824	0,008341	0,958461	0,969187
296	0,973251	0,963635	0,009616	0,958235	0,969035

(a) Modelo de Michaelis-Menten

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
220	0,970448	0,965823	0,004625	0,960986	0,970659
230	0,971387	0,965818	0,005569	0,960977	0,970658
240	0,970622	0,965814	0,004808	0,960971	0,970657
250	0,971385	0,965811	0,005574	0,960966	0,970657
270	0,972165	0,965808	0,006357	0,96096	0,970657
296	0,973251	0,965806	0,007445	0,960956	0,970656

(b) Modelo Exponencial

FONTE: O Autor (2019)

LEGENDA: Vlr. Est: Valor das estimativas calculadas sobre as observações originais
 Vlr. Predito: Valor das estimativas calculadas sobre os modelos ajustados
 Diferença: Vlr. Est – Vlr. Predito
 Lim. Inf.: Limite Inferior para Intervalo de Predição
 Lim. Sup.: Limite Superior para Intervalo de Predição

Modelo 2 – Índice de qualidade de ajustamento CFI

(a) Ajustamento pelo modelo de Michaelis-Menten $\hat{y} = \frac{0,989 \cdot x}{-0,475 + x}$, $R^2 = 0,9434$ (b) Ajustamento pelo modelo exponencial $\hat{y} = 1,005 - (0,018 \cdot (1 - \exp(-\ln 2 \cdot \frac{x}{72,49})))$
 $R^2 = 0,9494$

TABELA 30 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE CFI DO MODELO 2, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
220	0,989196	0,990886	-0,00169	0,989137	0,992635
230	0,989587	0,990792	-0,001205	0,989037	0,992548
240	0,988438	0,990706	-0,002268	0,988946	0,992467
250	0,988968	0,990627	-0,001659	0,988861	0,992393
270	0,988616	0,990486	-0,00187	0,988711	0,992262
296	0,988560	0,990311	-0,001751	0,988523	0,992098

(a) Modelo de Michaelis-Menten

(continua)

(continuação)

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
220	0,989196	0,989105	9,1E-05	0,986732	0,991479
230	0,989587	0,988904	0,000683	0,986426	0,991382
240	0,988438	0,988721	-0,000283	0,98614	0,991302
250	0,988968	0,988554	0,000414	0,985873	0,991236
270	0,988616	0,988266	0,00035	0,985391	0,99114
296	0,988560	0,987924	0,000636	0,984787	0,991061

(b) Modelo Exponencial

FONTE: O Autor (2019)

LEGENDA: Vlr. Est: Valor das estimativas calculadas sobre as observações originais
Vlr. Predito: Valor das estimativas calculadas sobre os modelos ajustados
Diferença: Vlr. Est – Vlr. Predito
Lim. Inf.: Limite Inferior para Intervalo de Predição
Lim. Sup.: Limite Superior para Intervalo de Predição

4.4.3 Modelo 3 – Modelo_Exemplo

O modelo possui no seu banco dados original 480 observações. Serão consideradas para fins de verificação do ajustamento as quantidades de 410, 420, 430, 440, 460 e 480 observações para cada índice analisado.

Modelo 3 – Índice de qualidade de ajustamento RMSEA

O ajuste pelo modelo de Michaelis-Mentem usando as estimativas calculadas, conforme o número de observações estipulado, apresentou um valor para o coeficiente de determinação que representa um mau ajustamento (0,257).

A grande variabilidade nos valores estimados, como pode ser observado no gráfico 12, não permite um bom ajuste. Assim optou-se por admitir 23 valores estimados, obtidos no intervalo de 40 a 150 (iniciando com 40 observações e aumentando gradativamente de 5 em 5 até 150), para o ajuste do modelo não linear. Mesmo com uma quantidade maior de observações, o coeficiente de determinação ficou bem abaixo do valor considerado aceitável.

A inclusão de mais estimativas (56 estimativas, por exemplo) não alterou consideravelmente o coeficiente (0,394). O ajuste pelo modelo exponencial apresentou resultado pior que o de Michaelis-Menten nas mesmas circunstâncias. Os resultados obtidos pelo uso da metodologia proposta, usando regressão não linear, não devem ser considerados satisfatórios, como podem ser observados nas tabelas 31(a) e 31(b)

(a) Ajustamento pelo modelo de Michaelis-Menten $\hat{y} = \frac{0,0927 \cdot x}{-9,128 + x}$, $R^2 = 0,329$

(b) Ajustamento pelo modelo exponencial $\hat{y} = 1 - 0,907 \cdot \left(1 - \exp\left(-\ln 2 \cdot \frac{x}{6,488}\right)\right)$, $R^2 = 0,211$

TABELA 31 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE RMSEA DO MODELO 3, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
410	0,112522	0,094796	0,017726	0,075717	0,113875
420	0,111887	0,094745	0,017142	0,075658	0,113831
430	0,114013	0,094696	0,019317	0,075603	0,113789
440	0,112747	0,094649	0,018098	0,075549	0,113749
460	0,113840	0,094562	0,019278	0,07545	0,113674
480	0,113207	0,094482	0,018725	0,075403	0,113639

(a) Modelo de Michaelis-Menten

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
410	0,112522	0,092438	0,020084	0,07438	0,110496
420	0,111887	0,092438	0,019449	0,07438	0,110496
430	0,114013	0,092438	0,021575	0,07438	0,110496
440	0,112747	0,092438	0,020309	0,07438	0,110496
460	0,113840	0,092438	0,021402	0,07438	0,110496
480	0,113207	0,092438	0,020769	0,07438	0,110496

(b) Modelo Exponencial

FONTE: O Autor (2019)

LEGENDA: Vlr. Est: Valor das estimativas calculadas sobre as observações originais
 Vlr. Predito: Valor das estimativas calculadas sobre os modelos ajustados
 Diferença: Vlr. Est – Vlr. Predito
 Lim. Inf.: Limite Inferior para Intervalo de Predição
 Lim. Sup.: Limite Superior para Intervalo de Predição

Modelo 3 – Índice de qualidade de ajustamento GFI

(a) Ajustamento pelo modelo de Michaelis-Menten $\hat{y} = \frac{0,9936 \cdot x}{0,629 + x}$, $R^2 = 0,8778$

(b) Ajustamento pelo modelo exponencial $\hat{y} = 0,98 \cdot \left(1 - \exp\left(-\ln 2 \cdot \frac{x}{5,29}\right)\right) + 0,00006x$, $R^2 = 0,895$

TABELA 32 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE GFI DO MODELO 3, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
410	0,992094	0,992131	-3,7E-05	0,988573	0,99569
420	0,992262	0,992167	9,5E-05	0,988605	0,99573
430	0,992164	0,992202	-3,8E-05	0,988635	0,995769
440	0,992281	0,992235	4,6E-05	0,988664	0,995806
460	0,992334	0,992297	3,7E-05	0,988718	0,995875
480	0,992537	0,992353	0,000184	0,988718	0,995875

(a) Modelo de Michaelis-Menten

(continua)

(continuação)

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
410	0,992094	1,00751	-0,015416	0,996966	1,018054
420	0,992262	1,008174	-0,015912	0,997315	1,019033
430	0,992164	1,008839	-0,016675	0,998011	1,020995
440	0,992281	1,009503	-0,017222	0,998011	1,020995
460	0,992334	1,010832	-0,018498	0,998704	1,022959
480	0,992537	1,01216	-0,019623	0,999395	1,024926

(b) Modelo Exponencial

FONTE: O Autor (2019)

LEGENDA: Vlr. Est: Valor das estimativas calculadas sobre as observações originais
 Vlr. Predito: Valor das estimativas calculadas sobre os modelos ajustados
 Diferença: Vlr. Est – Vlr. Predito
 Lim. Inf.: Limite Inferior para Intervalo de Predição
 Lim. Sup.: Limite Superior para Intervalo de Predição

Modelo 3 – Índice de qualidade de ajustamento NFI

Para o índice de ajustamento NFI no modelo 3, as estimativas apresentaram valores muito próximos de 1 e com pouca variabilidade, o que dificultou o ajuste das curvas aos dados.

Assim o coeficiente de determinação ficou com valores muito baixos, mesmo utilizando mais estimativas, usando o mesmo recurso utilizado para o índice RMSEA. Os valores para o modelo de Michaelis-Menten podem ser observados abaixo.

$$(a) \text{ Ajustamento pelo modelo de Michaelis-Menten } \hat{y} = \frac{0,9992 \cdot x}{0,0473 + x}, \quad R^2 = 0,5833$$

$$(\text{Ajuste obtido com 23 estimativas}) \quad \hat{y} = \frac{0,9991 \cdot x}{0,0444 + x}, \quad R^2 = 0,6093$$

$$(\text{Ajuste obtido com 56 estimativas}) \quad \hat{y} = \frac{0,9991 \cdot x}{0,0527 + x}, \quad R^2 = 0,6656$$

$$(b) \text{ Ajustamento pelo modelo exponencial } \hat{y} = 0,998 \cdot \left(1 - \exp\left(-\ln 2 \cdot \frac{x}{3,63}\right) \right) + 0,000005x$$

$$R^2 = 0,8431$$

TABELA 33 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE NFI DO MODELO 3, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
410	0,999104	0,999131	-2,7E-05	0,998803	0,99946
420	0,999137	0,999134	3E-06	0,998805	0,999463
430	0,999131	0,999137	-6E-06	0,998807	0,999466
440	0,999128	0,999139	-1,1E-05	0,998809	0,999469
460	0,99913	0,999144	-1,4E-05	0,998813	0,999474
480	0,999151	0,999148	3E-06	0,998817	0,999479

(a) Modelo de Michaelis-Menten

(continua)

(continuação)

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
410	0,999104	1,00018	-0,001076	0,999219	1,001141
420	0,999137	1,000227	-0,00109	0,999238	1,001215
430	0,999131	1,000272	-0,001141	0,999256	1,00129
440	0,999128	1,00032	-0,001192	0,999275	1,001365
460	0,99913	1,000413	-0,001283	0,999311	1,001365
480	0,999151	1,000507	-0,001356	0,999348	1,001666

(b) Modelo Exponencial

FONTE: O Autor (2019)

LEGENDA: Vlr. Est: Valor das estimativas calculadas sobre as observações originais

Vlr. Predito: Valor das estimativas calculadas sobre os modelos ajustados

Diferença: Vlr. Est – Vlr. Predito

Lim. Inf.: Limite Inferior para Intervalo de Predição

Lim. Sup.: Limite Superior para Intervalo de Predição

Modelo 3 – Índice de qualidade de ajustamento CFI

(a) Ajustamento pelo modelo de Michaelis-Menten $\hat{y} = \frac{0,999 \cdot x}{0,0188 + x}$, $R^2 = 0,5058$ (b) Ajustamento pelo modelo exponencial $\hat{y} = 0,999 \cdot \left(1 - \exp\left(-\ln 2 \cdot \frac{x}{3,427}\right)\right) + 0,0000012x$
 $R^2 = 0,6135$

TABELA 34 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE CFI DO MODELO 3, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
410	0,999243	0,999303	-6E-05	0,999014	0,999591
420	0,99927	0,999304	-3,4E-05	0,999015	0,999593
430	0,999261	0,999305	-4,4E-05	0,999015	0,999594
440	0,999257	0,999306	-4,9E-05	0,999016	0,999596
460	0,999253	0,999308	-5,5E-05	0,999017	0,999598
480	0,99927	0,999309	-3,9E-05	0,999018	0,9996

(a) Modelo de Michaelis-Menten

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
410	0,999243	0,99953	-0,000287	0,998763	1,000297
420	0,99927	0,999542	-0,000272	0,998753	1,000331
430	0,999261	0,999554	-0,000293	0,998732	1,000401
440	0,999257	0,999567	-0,00031	0,998732	1,000401
460	0,999253	0,999591	-0,000338	0,998712	1,00047
480	0,99927	0,999615	-0,000345	0,998691	1,00054

(b) Modelo Exponencial

FONTE: O Autor (2019)

LEGENDA: Vlr. Est: Valor das estimativas calculadas sobre as observações originais

Vlr. Predito: Valor das estimativas calculadas sobre os modelos ajustados

Diferença: Vlr. Est – Vlr. Predito

Lim. Inf.: Limite Inferior para Intervalo de Predição

Lim. Sup.: Limite Superior para Intervalo de Predição

4.4.4 Modelo 4 – Modelo_Eutanasia

O modelo possui no seu banco dados original 352 observações. Serão consideradas para fins de verificação do ajustamento as quantidades de 280, 290, 300, 310, 330 e 350 observações para cada índice analisado.

Modelo 4 – Índice de qualidade de ajustamento RMSEA

(a) Ajustamento pelo modelo de Michaelis-Menten $\hat{y} = \frac{0,055 \cdot x}{41,832 + x}$, $R^2 = 0,8302$

(b) Ajustamento pelo modelo exponencial $\hat{y} = 0,0447 \cdot \left(1 - \exp\left(-\ln 2 \cdot \frac{x}{29,08}\right)\right) - 0,002$,

$$R^2 = 0,8003$$

TABELA 35 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE RMSEA DO MODELO 4, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
280	0,047195	0,0484	-0,001205	0,040905	0,055894
290	0,048226	0,048167	5,9E-05	0,041045	0,05619
300	0,048269	0,048823	-0,000554	0,041176	0,056469
310	0,048461	0,049016	-0,000555	0,041298	0,056734
330	0,048812	0,049372	-0,00056	0,041518	0,057226
350	0,049128	0,049691	-0,000563	0,041712	0,057671

(a) Modelo de Michaelis-Menten

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
280	0,047195	0,043928	0,003267	0,035186	0,05267
290	0,048226	0,04394	0,004286	0,035152	0,052729
300	0,048269	0,04395	0,004319	0,035152	0,052777
310	0,048461	0,043958	0,004503	0,035099	0,052817
330	0,048812	0,043969	0,004843	0,035061	0,052876
350	0,049128	0,043975	0,005153	0,035036	0,052915

(b) Modelo Exponencial

FONTE: O Autor (2019)

LEGENDA: Vlr. Est: Valor das estimativas calculadas sobre as observações originais
 Vlr. Predito: Valor das estimativas calculadas sobre os modelos ajustados
 Diferença: Vlr. Est – Vlr. Predito
 Lim. Inf.: Limite Inferior para Intervalo de Predição
 Lim. Sup.: Limite Superior para Intervalo de Predição

Modelo 4 – Índice de qualidade de ajustamento GFI

(a) Ajustamento pelo modelo de Michaelis-Menten $\hat{y} = \frac{0,985 \cdot x}{5,046 + x}$, $R^2 = 0,942$

(b) Ajustamento pelo modelo exponencial $\hat{y} = 0,89 \cdot \left(1 - \exp\left(-\ln 2 \cdot \frac{x}{8,768}\right)\right) + 0,000415x$
 $R^2 = 0,9891$

TABELA 36 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE GFI DO MODELO 4, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
280	0,969784	0,967735	0,002049	0,96394	0,971529
290	0,969917	0,968326	0,001591	0,96452	0,972132
300	0,971041	0,968878	0,002163	0,965061	0,972696
310	0,970917	0,969396	0,001521	0,965567	0,973224
330	0,972060	0,970338	0,001722	0,96649	0,974186
350	0,972750	0,971173	0,001577	0,967308	0,975039

(a) Modelo de Michaelis-Menten

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
280	0,969784	1,010541	-0,040757	0,994601	1,026481
290	0,969917	1,014697	-0,04478	0,997975	1,026481
300	0,971041	1,018854	-0,047813	1,004702	1,041318
310	0,970917	1,027166	-0,056249	1,008056	1,046276
330	0,972060	1,031322	-0,059262	1,011406	1,051238
350	0,972750	1,039635	-0,066885	1,018094	1,061176

(b) Modelo Exponencial

FONTE: O Autor (2019)

LEGENDA: Vlr. Est: Valor das estimativas calculadas sobre as observações originais
 Vlr. Predito: Valor das estimativas calculadas sobre os modelos ajustados
 Diferença: Vlr. Est – Vlr. Predito
 Lim. Inf.: Limite Inferior para Intervalo de Predição
 Lim. Sup.: Limite Superior para Intervalo de Predição

Modelo 4 – Índice de qualidade de ajustamento NFI

(a) Ajustamento pelo modelo de Michaelis-Menten $\hat{y} = \frac{0,99 \cdot x}{-0,114 + x} + 0,000033x$, $R^2 = 0,9249$

(b) Ajustamento pelo modelo exponencial $\hat{y} = 0,994 \cdot \left(1 - \exp\left(-\ln 2 \cdot \frac{x}{4,18}\right)\right)$

(ajustamento obtido com 23 estimativas) $R^2 = 0,6968$

TABELA 37 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE NFI DO MODELO 4, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
280	0,996706	0,999571	-0,002865	0,998131	1,001011
290	0,996629	0,999881	-0,003252	0,998573	1,001411
300	0,996801	1,000192	-0,003391	0,998573	1,001812
310	0,996767	1,000504	-0,003737	0,998793	1,002215
330	0,996835	1,00113	-0,004295	0,999235	1,003025
350	0,996949	1,001759	-0,00481	0,999676	1,003841

(a) Modelo de Michaelis-Menten

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
280	0,996706	0,994672	0,002034	0,993452	0,995893
290	0,996629	0,994672	0,001957	0,993452	0,995893
300	0,996801	0,994672	0,002129	0,993452	0,995893
310	0,996767	0,994672	0,002095	0,993452	0,995893
330	0,996835	0,994672	0,002163	0,993452	0,995893
350	0,996949	0,994672	0,002277	0,993452	0,995893

(b) Modelo Exponencial

FONTE: O Autor (2019)

LEGENDA: Vlr. Est: Valor das estimativas calculadas sobre as observações originais
 Vlr. Predito: Valor das estimativas calculadas sobre os modelos ajustados
 Diferença: Vlr. Est – Vlr. Predito
 Lim. Inf.: Limite Inferior para Intervalo de Predição
 Lim. Sup.: Limite Superior para Intervalo de Predição

Modelo 4 – Índice de qualidade de ajustamento CFI

(a) Ajustamento pelo modelo de Michaelis-Menten $\hat{y} = \frac{0,998 \cdot x}{-0,047 + x}$, $R^2 = 0,9392$ (b) Ajustamento pelo modelo exponencial $\hat{y} = 1 - 0,0016 \cdot \left(1 - \exp\left(-\ln 2 \cdot \frac{x}{71,07}\right)\right)$,
 $R^2 = 0,8772$

TABELA 38 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE CFI DO MODELO 4, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
280	0,998699	0,998637	6,2E-05	0,998454	0,99882
290	0,998609	0,998631	-2,2E-05	0,998448	0,998815
300	0,998690	0,998626	6,4E-05	0,998442	0,99881
310	0,998605	0,998621	-1,6E-05	0,998437	0,998805
330	0,998594	0,998612	-1,8E-05	0,998427	0,998796
350	0,998585	0,998603	-1,8E-05	0,998414	0,998789

(a) Modelo de Michaelis-Menten

(continua)

(continuação)

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
280	0,998699	0,998637	6,2E-05	0,998454	0,99882
290	0,998609	0,998631	-2,2E-05	0,998448	0,99881
300	0,998690	0,998626	6,4E-05	0,998442	0,99881
310	0,998605	0,998621	-1,6E-05	0,998437	0,998805
330	0,998594	0,998612	-1,8E-05	0,998427	0,998796
350	0,998585	0,998603	-1,8E-05	0,998414	0,998789

(b) Modelo Exponencial

FONTE: O Autor (2019)

LEGENDA: Vlr. Est: Valor das estimativas calculadas sobre as observações originais
 Vlr. Predito: Valor das estimativas calculadas sobre os modelos ajustados
 Diferença: Vlr. Est – Vlr. Predito
 Lim. Inf.: Limite Inferior para Intervalo de Predição
 Lim. Sup.: Limite Superior para Intervalo de Predição

4.4.5 Modelo 5 – Modelo_Banco

O modelo possui no seu banco dados original 485 observações. Serão consideradas para fins de verificação do ajustamento as quantidades de 410, 420, 430, 440, 460 e 480 observações para cada índice analisado.

Modelo 5 – Índice de qualidade de ajustamento RMSEA

(a) Ajustamento pelo modelo de Michaelis-Menten $\hat{y} = \frac{0,1265 \cdot x}{87,567 + x}$, $R^2 = 0,8435$

(b) Ajustamento pelo modelo exponencial $\hat{y} = 0,088 \cdot \left(1 - \exp\left(-\ln 2 \cdot \frac{x}{47,05}\right)\right)$, $R^2 = 0,8646$

TABELA 39 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE RMSEA DO MODELO 5, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
410	0,076149	0,096379	-0,02023	0,073941	0,118818
420	0,075854	0,097178	-0,021324	0,074291	0,120065
430	0,075787	0,097935	-0,022148	0,074611	0,121259
440	0,075865	0,098654	-0,022789	0,074904	0,122404
460	0,075739	0,099989	-0,02425	0,075424	0,124554
480	0,075765	0,101201	-0,025436	0,075867	0,126536

(a) Modelo de Michaelis-Menten

(continua)

(continuação)

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
410	0,076149	0,086879	-0,01073	0,066701	0,107057
420	0,075854	0,087074	-0,01122	0,066659	0,10749
430	0,075787	0,087243	-0,011456	0,066612	0,107874
440	0,075865	0,087389	-0,011524	0,066563	0,108214
460	0,075739	0,087623	-0,011884	0,066464	0,108782
480	0,075765	0,087797	-0,012032	0,066369	0,108782

(b) Modelo Exponencial

FONTE: O Autor (2019)

LEGENDA: Vlr. Est: Valor das estimativas calculadas sobre as observações originais
 Vlr. Predito: Valor das estimativas calculadas sobre os modelos ajustados
 Diferença: Vlr. Est – Vlr. Predito
 Lim. Inf.: Limite Inferior para Intervalo de Predição
 Lim. Sup.: Limite Superior para Intervalo de Predição

Modelo 5 – Índice de qualidade de ajustamento GFI

(a) Ajustamento pelo modelo de Michaelis-Menten $\hat{y} = \frac{0,94 \cdot x}{9,34 + x}$, $R^2 = 0,998$ (b) Ajustamento pelo modelo exponencial $\hat{y} = 1 - (0,0109 \cdot (1 - \exp(-\ln 2 \cdot \frac{x}{25,7149})))$
 $R^2 = 0,9119$

TABELA 40 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE GFI DO MODELO 5, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
410	0,925139	0,910634	0,014505	0,905916	0,915352
420	0,926023	0,911649	0,014374	0,906913	0,916385
430	0,926659	0,912598	0,014061	0,907845	0,917351
440	0,927059	0,913488	0,013571	0,908718	0,918257
460	0,928139	0,911511	0,016628	0,91031	0,919909
480	0,928942	0,916551	0,012391	0,911724	0,921378

(a) Modelo de Michaelis-Menten

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
410	0,925139	0,872488	0,052651	0,843697	0,901279
420	0,926023	0,872489	0,053534	0,843697	0,901278
430	0,926659	0,872489	0,05417	0,843698	0,901278
440	0,927059	0,872489	0,05457	0,843698	0,901278
460	0,928139	0,872489	0,05565	0,843698	0,901278
480	0,928942	0,872489	0,056453	0,843698	0,901278

b) Modelo Exponencial

FONTE: O Autor (2019)

LEGENDA: Vlr. Est: Valor das estimativas calculadas sobre as observações originais
 Vlr. Predito: Valor das estimativas calculadas sobre os modelos ajustados
 Diferença: Vlr. Est – Vlr. Predito
 Lim. Inf.: Limite Inferior para Intervalo de Predição
 Lim. Sup.: Limite Superior para Intervalo de Predição

Modelo 5 – Índice de qualidade de ajustamento NFI

(a) Ajustamento pelo modelo de Michaelis-Menten $\hat{y} = \frac{0,984 \cdot x}{-0,337+x}$, $R^2 = 0,9014$

(b) Ajustamento pelo modelo exponencial $\hat{y} = 1 - (0,01 \cdot (1 - \exp(-\ln 2 \cdot \frac{x}{23,49})))$,
 $R^2 = 0,9176$

TABELA 41 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE NFI DO MODELO 5, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
410	0,991956	0,988722	0,003234	0,987792	0,989652
420	0,991199	0,9887	0,002499	0,987767	0,989632
430	0,991172	0,988678	0,002494	0,987744	0,989613
440	0,991209	0,988659	0,00255	0,987722	0,989595
460	0,991231	0,988622	0,002609	0,987683	0,989562
480	0,991296	0,98859	0,002706	0,987648	0,989533

(a) Modelo de Michaelis-Menten

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
410	0,991956	0,98931	0,002646	0,988456	0,990164
420	0,991199	0,989309	0,00189	0,988454	0,990164
430	0,991172	0,989309	0,001863	0,988454	0,990164
440	0,991209	0,989308	0,001901	0,988453	0,990164
460	0,991231	0,989308	0,001923	0,988452	0,990163
480	0,991296	0,989308	0,001988	0,988452	0,990163

(b) Modelo Exponencial

FONTE: O Autor (2019)

LEGENDA: Vlr. Est: Valor das estimativas calculadas sobre as observações originais

Vlr. Predito: Valor das estimativas calculadas sobre os modelos ajustados

Diferença: Vlr. Est – Vlr. Predito

Lim. Inf.: Limite Inferior para Intervalo de Predição

Lim. Sup.: Limite Superior para Intervalo de Predição

Modelo 5 – Índice de qualidade de ajustamento CFI

(a) Ajustamento pelo modelo de Michaelis-Menten $\hat{y} = \frac{0,994 \cdot x}{-0,256+x}$, $R^2 = 0,9574$

(b) Ajustamento pelo modelo exponencial $\hat{y} = 1,005 - (0,0106 \cdot (1 - \exp(-\ln 2 \cdot \frac{x}{43,29})))$
 $R^2 = 0,9916$

TABELA 42 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE CFI DO MODELO 5, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
410	0,993688	0,994804	-0,001116	0,993982	0,995626
420	0,993759	0,994773	-0,001014	0,993949	0,995596
430	0,993699	0,994743	-0,001044	0,993918	0,995569
440	0,993681	0,994716	-0,001035	0,993889	0,995543
460	0,993624	0,994666	-0,001042	0,993836	0,995496
480	0,993598	0,994622	-0,001024	0,993789	0,995455

(a) Modelo de Michaelis-Menten

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
410	0,993688	0,994491	-0,000803	0,994024	0,994958
420	0,993759	0,994474	-0,000715	0,994002	0,994945
430	0,993699	0,994458	-0,000759	0,993983	0,994934
440	0,993681	0,994446	-0,000765	0,993967	0,994924
460	0,993624	0,994425	-0,000801	0,993941	0,994909
480	0,993598	0,99441	-0,000812	0,993922	0,994899

(b) Modelo Exponencial

FONTE: O Autor (2019)

LEGENDA: Vlr. Est: Valor das estimativas calculadas sobre as observações originais
 Vlr. Predito: Valor das estimativas calculadas sobre os modelos ajustados
 Diferença: Vlr. Est – Vlr. Predito
 Lim. Inf.: Limite Inferior para Intervalo de Predição
 Lim. Sup.: Limite Superior para Intervalo de Predição

4.4.6 Modelo 6 – Modelo_Hotel

O modelo possui no seu banco dados original 512 observações. Serão consideradas para fins de verificação do ajustamento as quantidades de 430, 440, 450, 460, 480 e 500 observações para cada índice analisado.

Modelo 6 – Índice de qualidade de ajustamento RMSEA

(a) Ajustamento pelo modelo de Michaelis-Menten $\hat{y} = \frac{0,447 \cdot x}{778,413 + x}$, $R^2 = 0,7844$

(b) Ajustamento pelo modelo exponencial $\hat{y} = 0,224 \cdot \left(1 - \exp\left(-\ln 2 \cdot \frac{x}{267,948}\right)\right)$, $R^2 = 0,7852$

TABELA 43 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE RMSEA DO MODELO 6, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
430	0,061483	0,159059	0,097576	-0,01219	0,330166
440	0,061674	0,161423	0,0997492	-0,01622	0,338917
450	0,062012	0,163747	0,101736	-0,02029	0,347642
460	0,061729	0,166035	0,104305	-0,02442	0,356339
480	0,061455	0,170500	0,109045	-0,03279	0,37364
500	0,061238	0,174826	0,113588	-0,04131	0,390804

(a) Modelo de Michaelis-Menten

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
430	0,061483	0,150352	0,088869	-0,03788	0,338029
440	0,061674	0,152233	0,090559	-0,0432	0,347101
450	0,062012	0,154066	0,092054	-0,04857	0,35613
460	0,061729	0,155852	0,094122	-0,05398	0,365113
480	0,061455	0,159288	0,097832	-0,06493	0,382923
500	0,061238	0,162551	0,101312	-0,076	0,400505

(b) Modelo Exponencial

FONTE: O Autor (2019)

LEGENDA: Vlr. Est: Valor das estimativas calculadas sobre as observações originais

Vlr. Predito: Valor das estimativas calculadas sobre os modelos ajustados

Diferença: Vlr. Est – Vlr. Predito

Lim. Inf.: Limite Inferior para Intervalo de Predição

Lim. Sup.: Limite Superior para Intervalo de Predição

Modelo 6 – Índice de qualidade de ajustamento GFI

(a) Ajustamento pelo modelo de Michaelis-Menten $\hat{y} = \frac{0,925 \cdot x}{25,517 + x}$, $R^2 = 0,999$ (b) Ajustamento pelo modelo exponencial $\hat{y} = 0,785 \cdot \left(1 - \exp\left(-\ln 2 \cdot \frac{x}{23,295}\right)\right)$, $R^2 = 0,9835$

TABELA 44 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE GFI DO MODELO 6, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
430	0,881934	0,873184	-0,008750	0,867692	0,878956
440	0,882509	0,874297	-0,008213	0,869834	0,881174
450	0,882699	0,875363	-0,007336	0,869834	0,881174
460	0,884316	0,876385	-0,007931	0,870838	0,882215
480	0,886752	0,878309	-0,008443	0,872727	0,884173
500	0,8889	0,880085	-0,008814	0,874472	0,885983

(a) Modelo de Michaelis-Menten

(continua)

(conclusão)

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
430	0,881934	0,784998	-0,096036	0,76062	0,809943
440	0,882509	0,784998	-0,097511	0,76062	0,809944
450	0,882699	0,784999	-0,0977	0,76062	0,809945
460	0,884316	0,784999	-0,099317	0,76062	0,809945
480	0,886752	0,784999	-0,101752	0,760621	0,809945
500	0,8889	0,784999	-0,1039	0,760621	0,809946

(b) Modelo Exponencial

FONTE: O Autor (2019)

LEGENDA: Vlr. Est: Valor das estimativas calculadas sobre as observações originais
 Vlr. Predito: Valor das estimativas calculadas sobre os modelos ajustados
 Diferença: Vlr. Est – Vlr. Predito
 Lim. Inf.: Limite Inferior para Intervalo de Predição
 Lim. Sup.: Limite Superior para Intervalo de Predição

Modelo 6 – Índice de qualidade de ajustamento NFI

(a) Ajustamento pelo modelo de Michaelis-Menten $\hat{y} = \frac{0,993.x}{-0,287+x}$, $R^2 = 0,9589$ (b) Ajustamento pelo modelo exponencial $\hat{y} = 1,2 - (0,204 \cdot (1 - \exp(-\ln 2 \cdot \frac{x}{7,384})))$
 $R^2 = 0,6155$

TABELA 45 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE NFI DO MODELO 6, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
430	0,994244	0,993424	0,00082	0,9925	0,994349
440	0,994184	0,993409	0,000775	0,994335	0,994335
450	0,994230	0,993395	0,000835	0,992469	0,994321
460	0,994179	0,993381	0,000798	0,992454	0,994308
480	0,994319	0,993355	0,000964	0,992426	0,994284
500	0,994292	0,993331	0,000961	0,992401	0,994262

(a) Modelo de Michaelis-Menten

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
430	0,994244	0,995652	-0,001408	0,993101	0,998202
440	0,994184	0,995652	-0,001468	0,993101	0,998202
450	0,994230	0,995652	-0,001422	0,993101	0,998202
460	0,994179	0,995652	-0,001473	0,993101	0,998202
480	0,994319	0,995652	0,001333	0,993101	0,998202
500	0,994292	0,995652	-0,00136	0,993101	0,998202

(b) Modelo Exponencial

FONTE: O Autor (2019)

LEGENDA: Vlr. Est: Valor das estimativas calculadas sobre as observações originais
 Vlr. Predito: Valor das estimativas calculadas sobre os modelos ajustados
 Diferença: Vlr. Est – Vlr. Predito
 Lim. Inf.: Limite Inferior para Intervalo de Predição
 Lim. Sup.: Limite Superior para Intervalo de Predição

Modelo 6 – Índice de qualidade de ajustamento CFI

(a) Ajustamento pelo modelo de Michaelis-Menten $\hat{y} = \frac{0,998.x}{-0,123+x}$, $R^2 = 0,9556$

(b) Ajustamento pelo modelo exponencial $\hat{y} = 1,2 - (0,201. (1 - \exp(-\ln 2. \frac{x}{5,722})))$
 $R^2 = 0,8439$

TABELA 46 – ESTIMATIVAS PARA O ÍNDICE CFI DO MODELO 6, VALORES PREDITOS E INTERVALO DE PREDIÇÃO

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
430	0,994244	0,997789	-0,003545	0,996827	0,998751
440	0,994184	0,997782	-0,003598	0,996819	0,998745
450	0,994230	0,997776	-0,003546	0,996812	0,99874
460	0,994179	0,997267	-0,003088	0,996805	0,998735
480	0,994319	0,997252	-0,002933	0,996792	0,998726
500	0,994292	0,997239	-0,002947	0,99678	0,998717

(a) Modelo de Michaelis-Menten

Observações	Vlr. Est.	Vlr. Predito	Diferença	Lim. Inf.	Lim. Sup.
430	0,994244	0,998837	-0,004593	0,997217	1,000457
440	0,994184	0,998837	-0,004653	0,997217	1,000457
450	0,994230	0,998837	-0,004607	0,997217	1,000457
460	0,994179	0,998837	-0,004658	0,997217	1,000457
480	0,994319	0,998837	-0,004518	0,997217	1,000457
500	0,994292	0,998837	-0,004545	0,997217	1,000457

(b) Modelo Exponencial

FONTE: O Autor (2019)

LEGENDA: Vlr. Est: Valor das estimativas calculadas sobre as observações originais
 Vlr. Predito: Valor das estimativas calculadas sobre os modelos ajustados
 Diferença: Vlr. Est – Vlr. Predito
 Lim. Inf.: Limite Inferior para Intervalo de Predição
 Lim. Sup.: Limite Superior para Intervalo de Predição

4.5 CONSIDERAÇÕES EM RELAÇÃO AOS AJUSTES OBTIDOS SOBRE AS MÉDIAS DAS ESTIMATIVAS DOS ÍNDICES DE QUALIDADE DE AJUSTAMENTO

Realizado os ajustamentos dos modelos, por regressão não linear sobre as médias das estimativas dos índices de qualidade de ajustamento dos modelos estruturais analisados, pode-se descrever as seguintes considerações sobre os resultados obtidos:

i) Quando foi necessário o acréscimo da parcela $C.x$, de forma a melhorar o ajuste dos modelos de regressão sobre as estimativas calculadas (o acréscimo dessa segunda fase altera o comportamento da curva ajustada como discutido na etapa 4 da metodologia e visualizado no gráfico 2), alguns dos resultados para os valores extrapolados em relação ao modelo de

regressão para os índices GFI, NFI e CFI se tornaram inviáveis pois superaram o limite máximo para esses resultados que é igual a um (1). A presença desses valores nos quadros de predição promove a discussão da viabilidade da metodologia para o fim proposto, mas pode também levar a conclusão de que, pela tendência dos valores que foram submetidos ao ajustamento, o índice pode apresentar um resultado ótimo. O mesmo deve ser discutido em relação aos limites dos intervalos de confiança, nos quais também se obteve resultados maiores que um (1).

Deve-se então avaliar se, um melhor ajuste, acrescentando uma segunda fase ao modelo, compensa a presença desses valores nos resultados finais do processo de ajustamento dos modelos regressivos. Por tudo isso, se recomenda cautela, nos modelos de Michaelis-Menten e Exponencial, o uso de uma segunda fase representada pela adição da parcela $C.x$, pois os resultados finais podem não conter valores admissíveis e, com isso, frustrar a intenção de validação do ajuste do modelo de equações estruturais pelo uso de regressão não linear.

ii) Observou-se também que os ajustes usando o modelo de Michaelis-Menten apresentaram melhores resultados que os ajustes usando o modelo exponencial. Um dos fatores de-se ao uso das funções de linearização que determinam os valores iniciais dos parâmetros, que é um bom recurso na hora de aplicar o ajustamento. No caso do modelo exponencial, esses valores são obtidos pelo método gráfico, ou seja, deve-se admitir valores que ‘podem ser’ os adequados e, representar graficamente as estimativas com a curva inicialmente ajustada pelos parâmetros escolhidos. Caso contrário, é necessária nova tentativa até se conseguir o ajuste esperado, requerendo mais habilidade do pesquisador e tempo para as escolhas dos coeficientes iniciais.

iii) Os ajustes promovidos sobre as médias das estimativas foram feitos usando 15 valores estimados entre os limites de 40 e 150 (considerando um incremento de 10 em 10), mas esses pontos nem sempre foram suficientes, houve a necessidade de, em alguns casos, se ter disponíveis mais pontos. Em alguns casos foram usados 23 pontos (considerando um incremento de 5 em 5) para buscar um melhor ajuste e com isso, houve um aumento no valor do coeficiente de determinação, mas deve-se considerar que esse aumento foi mínimo em relação ao trabalho de ‘buscar’ essas novas estimativas. Em alguns casos, principalmente nas estimativas calculadas para o índice RMSEA, o coeficiente de determinação diminuiu em relação ao ajuste feito com 15 estimativas. Isso ocorreu porque as novas estimativas tinham uma maior variabilidade, o que dificulta, ainda mais o ajuste pelos modelos de regressão considerados.

iv) Outro ponto observado foi que, em modelos que o coeficiente de determinação ficou acima de 0,9 os limites para o intervalo de predição ficaram bem próximos e as diferenças calculadas entre as estimativas para os valores e os valores preditos pelos modelos de regressão ajustados foram bem pequenas, na faixa de 10^{-2} até 10^{-5} , o que leva a concluir que a proposta de uso de regressão não linear para avaliação do ajustamento de modelos estruturais é válida e produz resultados confiáveis. Mas deve-se levar em consideração que não somente as diferenças devem ser levadas em consideração pois, se os limites dos intervalos de predição não estiverem em uma faixa de valores (pontos de corte) adequados, de nada vale esses valores serem próximos.

Na sequência será discutido quais critérios devem ser levados em consideração para que o uso de regressão não linear, da forma que foi aplicada, sobre estimativas de modelos estruturais, possa ter seus resultados validados.

v) As estimativas calculadas para os índices NFI e CFI mostraram valores acima de 0,95 para todos as quantidades de observações consideradas. Os índices NFI e CFI apresentaram suas estimativas muito próximas do valor máximo, com poucas alterações, devido ao fato do valor do qui-quadrado não estar muito acima dos graus de liberdade, independente do tamanho da amostra estabelecido. Isso indica que o ajuste do modelo está estritamente correto no nível da população, mas como já mencionado na revisão de literatura, os índices podem subestimar o ajuste para amostras com menos de 200 observações, como o caso do índice NFI. Devemos então usar as estimativas com cautela. Um outro ponto a se discutir sobre esses índices é o fato de que, com estimativas tão próximas de 1, o ajuste para os modelos de regressão sobre as estimativas desses índices foram o que apresentaram maior dificuldade pois, com valores tão próximos, qualquer perturbação nos valores, provoca um *outlier* nos pontos a serem ajustados, fazendo com que o ajuste final por regressão não linear apresente um coeficiente de determinação baixo. Nas estimativas calculadas para o índice RMSEA em alguns modelos também se observou comportamento idêntico. É possível discutir a necessidade de um tratamento adequado sobre esses *outliers*, sendo esse um ponto a ser recomendado para pesquisas futuras.

vi) Dos ajustes realizados sobre as estimativas dos índices de qualidade de ajustamento, o que apresentou melhores resultados foi o índice GFI. Em quase todos os modelos estruturais avaliados, as curvas ajustadas apresentaram ótimo coeficiente de determinação, diferenças pequenas entre as estimativas calculadas e os valores preditos e os limites dos intervalos de

predição próximos e numa faixa de valores adequados a um bom ajuste dos dados ao modelo estrutural. O objetivo delineado para a metodologia proposta pode ser plenamente alcançado, e com resultados acima do esperado. O chamado ‘horizonte preditivo’ mencionado na introdução do trabalho ficou bem definido nos casos onde se considerou as estimativas para o índice GFI.

Apesar dos outros índices também apresentarem bom ‘comportamento’, os ajustes por regressão não linear sobre as estimativas GFI foram as mais satisfatórias. Mesmo que não se possa confiar em apenas um índice, para análise do ajustamento de um modelo de equações estruturais, os resultados obtidos sobre essas estimativas poderiam ser usados isoladamente, sendo satisfatórios os resultados obtidos.

vii) Os intervalos de predição determinados pelo método Delta criaram uma banda de confiança, que juntamente com as estimativas projetadas pela extrapolação dos modelos de regressão, projetam resultados futuros que ratificam o ajustamento dos modelos classificados conforme os índices de qualidade calculados com as poucas observações consideradas, com exceção de alguns casos, para alguns índices, onde os limites superiores superam o valor máximo do índice, ou os limites ficaram num intervalo de valores tais que os modelos poderiam ser considerados com ajustamento insatisfatório. Os valores extrapolados indicam um bom ajustamento dos modelos e os intervalos de predição não distorcem essa conclusão, no sentido que não abandonam as faixas de ajustamento definido na literatura sobre os pontos de corte especificados para cada índice avaliado.

Desta maneira podemos entender que a metodologia aplicada nessa pesquisa se mostra conveniente e de grande aplicabilidade, já que permite avaliar o comportamento dos índices de qualidade de ajustamento para quantidades maiores de observações que muitas vezes não estão disponíveis em problemas envolvendo MEE, que era a motivação inicial, que determinou o escopo desse trabalho e seus objetivos.

Nos quadros 7 e 8 são feitos levantamentos de alguns critérios sobre os resultados obtidos nos ajustes determinados. A coluna ‘Coef.’ indica se o ajuste apresenta um coeficiente de determinação acima de 0,9. A coluna ‘Dif.’ indica a diferença calculada entre as estimativas e os valores preditos estar abaixo de 0,05 e a coluna ‘Intv.’ indica se o intervalo de confiança está entre valores considerados de bom ajustamento (acima de 0,8), tendo como referência os chamados ‘pontos de corte’ já descritos na revisão de literatura. Os itens marcados com ‘X’ apresentam tais características

QUADRO 7 – AVALIAÇÃO DOS AJUSTES POR REGRESSÃO NÃO LINEAR AS ESTIMATIVAS DOS ÍNDICES DE AJUSTAMENTO PARA UM MODELO ESTRUTURAL (Modelo de Michaelis-Menten)

Modelo Estrutural	Índices de ajustamento											
	RMSEA			GFI			NFI			CFI		
	Coef.	Dif.	Intv.	Coef.	Dif.	Intv.	Coef.	Dif.	Intv.	Coef.	Dif.	Intv.
1		X		X	X	X	X	X	X	X	X	X
2		X		X	X	X		X	X	X	X	X
3		X			X	X		X	X		X	X
4		X		X	X	X	X	X		X	X	X
5		X		X	X	X	X	X	X	X	X	X
6				X	X	X	X	X	X	X	X	X

FONTE: O autor (2019)

LEGENDA: Coef: Coeficiente de determinação maior que 0,9

Dif.: Diferença menor que 0,05

Intv.: Limites do intervalo de confiança acima de 0,8

QUADRO 8 – AVALIAÇÃO DOS AJUSTES POR REGRESSÃO NÃO LINEAR AS ESTIMATIVAS DOS ÍNDICES DE AJUSTAMENTO PARA UM MODELO ESTRUTURAL (Modelo Exponencial)

Modelo Estrutural	Índices de ajustamento											
	RMSEA			GFI			NFI			CFI		
	Coef.	Dif.	Intv.	Coef.	Dif.	Intv.	Coef.	Dif.	Intv.	Coef.	Dif.	Intv.
1	X	X		X	X	X	X	X	X	X	X	X
2	X	X		X	X			X	X	X	X	X
3		X			X			X			X	
4		X		X	X			X	X		X	X
5		X		X	X	X	X	X	X	X	X	X
6		X		X	X	X		X	X	X	X	

FONTE: O autor (2019)

LEGENDA: Coef: Coeficiente de determinação maior que 0,9

Dif.: Diferença menor que 0,05

Intv.: Limites do intervalo de confiança acima de 0,8

Observa-se pelas tabelas que o índice RMSEA foi o que menos contemplou os itens avaliados. Os intervalos determinados possuíam limites muito acima dos valores considerados para um bom ajuste. Também os ajustes resultaram em um coeficiente de determinação baixo, pois suas estimativas apresentaram grande variabilidade, principalmente para um número pequeno de observações. O índice RMSEA possui algumas restrições quanto ao uso em poucas observações e ele está conceitualmente ligado ao valor do qui-quadrado (χ^2) e dos graus de liberdade, tal qual o NFI, alterando assim seu valor.

4.6 DETERMINAÇÃO DE UM CRITÉRIO DE VALIDAÇÃO E/OU CONFIRMAÇÃO PARA OS ÍNDICES DE QUALIDADE DE AJUSTAMENTO DE UM MEE.

É certo que a aplicação das técnicas de regressão não linear sobre as estimativas resultou em bons valores e se mostra uma boa proposta metodológica para aqueles modelos com um número reduzido de observações. A proposta não é determinar um valor pontual para os índices de qualidade de ajustamento, mas sim poder ratificar o bom ajustamento do modelo de equações estruturais por meio dos limites dos intervalos de confiança determinado pelos valores preditos, ou como definimos nos testes, os intervalos de predição. Esses intervalos devem definir o ‘bom’ ajustamento do modelo em relação aos chamados pontos de corte dos índices de qualidade de ajustamento. Mas para que esses intervalos possam ser usados como referência, se faz necessário, a observância de alguns critérios que aqui serão definidos.

Primeiramente, é importante uma análise dos dados no que diz respeito a ausência ou não de normalidade multivariada. Os métodos de estimação ML e GLS são os mais usados e assintoticamente equivalentes e, pelos testes realizados, podemos afirmar que, para casos onde o número de observações é reduzido, o método GLS apresentou melhores resultados, principalmente no critério de convergência. Um outro ponto importante a ser observado está nas estimativas calculadas. Os valores devem apresentar um ‘bom comportamento’ em relação ao número de observações. Mas o que se entende por ‘bom comportamento’? Deve-se lembrar que os valores que serão usados para os ajustes das curvas de regressão são as médias das estimativas calculadas para cada quantidade de observações, e essa quantidade de observações é limitada. Sendo assim, essas estimativas podem sofrer influência de vários fatores, sendo que o mais importante é o valor do qui-quadrado. Principalmente o RMSEA e o CFI são os mais afetados pelo qui-quadrado e esses índices podem apresentar discrepância entre os valores populacionais e amostrais e, sendo assim, apresentar distorções em seus valores.

O índice RMSEA apresenta, para modelos com pequeno grau de liberdade e poucas observações, valores artificialmente grandes para o índice. Outro ponto importante está nas estimativas para CFI e NFI que apresentaram valores iguais, ou muito próximas a 1. Essas estimativas devem ser consideradas com cautela, pois podem ser de dupla interpretação. Ou o modelo está muito bem ajustado ao nível das observações, ou pode-se ter qui-quadrado menor ou próximo dos graus de liberdade.

E por fim, não menos importante está o ajuste da curva de regressão sobre as estimativas. Um bom ajuste fará com que o comportamento dos pontos seja explicado pelo modelo, e também será importante para os demais procedimentos de avaliação. O ajuste deve

resultar em um coeficiente de determinação elevado. Ajustes ruins resultam em respostas ruins, valores preditos com grande diferença para as reais estimativas, bem como em intervalos de predição com limitantes fora de valores aceitáveis. O coeficiente de determinação deve ser referência na escolha do ajuste, bem como o erro padrão residual. Coeficientes ruins, somados a erros residuais elevados, comprometem o ajuste e o cálculo do intervalo de predição, pois esse depende do valor do erro. Assim poderia se ter valores distorcidos e um horizonte preditivo com viés elevado e incertezas, somadas a própria incerteza da extrapolação, que comprometem a validação do ajustamento do modelo de equações estruturais. Algumas alternativas para melhorar o ajuste seriam a escolha de mais pontos para o ajuste, dentro do limite de observações possíveis, alterações no próprio modelo de regressão, ou a alteração do modelo de regressão.

Nessa pesquisa foram analisados dois modelos, mas podem existir outras alternativas não escolhidas. A inclusão de mais estimativas no ajuste do modelo de regressão irá gerar um tempo computacional maior e, em alguns casos, um ganho inversamente proporcional. Nos modelos avaliados nos testes realizados, a inclusão de mais estimativas não gerou um ganho considerável nos ajustes. Cabe ao pesquisador avaliar essa opção, não existindo uma forma de analisar o ganho, em relação ao coeficiente de determinação, a priori.

5 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

Os índices de qualidade de ajustamento foram desenvolvidos para avaliar o ajuste do modelo de equações estruturais em relação aos dados observados. Um dos pressupostos para utilização da técnica de MEE é se ter uma grande quantidade de observações. Mas muitas pesquisas tem limitações em relação a esse pressuposto. Pensando nessa questão e, de como o modelo poderia ter seu ajuste confirmado mesmo com poucas observações, foi proposta nesse trabalho uma metodologia que aplica regressão não linear sobre as estimativas dos índices de qualidade de ajustamento. Antes da aplicação da metodologia foi definido um valor mínimo de observações que são necessárias para obter as estimativas necessárias. Essa quantidade, que ficou limitada a 40 observações (para uma taxa de convergência de 50%), valor que pode ser utilizado para outros procedimentos envolvendo modelagem matemática, bem como referência para novas pesquisas na área.

Também foi verificada a estabilidade dos índices de ajustamento, em relação ao número de observações. Os resultados mostraram que os coeficientes possuem uma variabilidade acentuada em um cenário de poucas observações e alto grau de liberdade, mas que o valor de suas estimativas estabiliza a partir de determinado valor, em torno de 150 observações ou mais), não apresentando variações consideráveis nos valores estimados.

O índice RMSEA foi o que apresentou maior variabilidade principalmente em modelos com baixo grau de liberdade. Todos os índices em todos os modelos avaliados apresentaram pouca variabilidade nos valores para um número de observações maiores que 150. Esta estabilidade dos valores é fundamental para validar os resultados obtidos a partir da extrapolação dos modelos para além das estimativas calculadas.

Sobre a aplicação de regressão não linear sobre as estimativas, podemos afirmar que os resultados foram satisfatórios e que os modelos usados (Michaelis-Menten e exponencial) apresentaram um ajuste satisfatório às estimativas dos índices de qualidade. Os melhores ajustes foram registrados para os índices GFI, NFI e GFI e ambos os modelos apresentaram bom ajuste aos dados. Um critério definido nesse trabalho é que os ajustes devem apresentar coeficiente de determinação acima de 0.8 para que os modelos possam ‘explicar’ com bastante exatidão o comportamento das estimativas. Esse ajuste pode depender do número de estimativas calculadas, para os índices de qualidade de ajustamento, no intervalo determinado pelas observações disponíveis, portanto pode haver a necessidade de se calcular mais estimativas para se obter um melhor ajuste.

Usando o ajuste obtido foi possível determinar o comportamento dos índices de ajustamento quando considerado um número maior de observações. Isso foi possível pois, com a estabilidade dos coeficientes se pode realizar uma extrapolação dos modelos para valores além dos limites das estimativas. É muito discutível o uso de extrapolações em regressão, essa dúvida se deve ao fato de não se conhecer o comportamento dos dados além dos seus limites.

Os resultados foram comparados com as estimativas calculadas com as observações totais e concluiu-se que a extrapolação gerou bons resultados com diferenças entre as reais estimativas e os valores preditos sendo menores que 10^{-2} em muitos casos. Os erros de predição e o erro padrão residual também foram avaliados e ficaram bem pequenos. A respeito dos intervalos de predição e confiança recomenda-se seu uso dentro do intervalo de dados, para ratificar o bom ajuste. Ajustes precisos resultam em bandas de confiança com limites muito próximos. Já sobre seu uso fora dos limites do intervalo de dados, pode-se afirmar que não se recomenda para pontos muito afastados dos dados pois os mesmos apresentarão viés muito acentuado podendo acarretar dúvidas sobre os índices analisados. De novo levanta-se o fato de que se busca uma forma de ratificar o ajustamento e não valores pontuais, que poderia se usar os intervalos como uma referência, mas isso somente pode ser feito para valores muito próximos dos dados.

Pelo apresentado pode-se concluir que o uso de regressão sobre as estimativas, apesar do uso da extrapolação gerar incertezas, é válido e resulta em uma decisão que pode ajudar os pesquisadores na área e colocar em discussão a necessidade de um número elevado de observações necessárias em MEE. A metodologia pode ser utilizada em casos com um número reduzido de observações e que recorram ao uso de MEE com baixa complexidade e pequeno grau de liberdade. Em modelos com elevado grau de liberdade e complexidade elevada, os índices de ajustamento considerados podem apresentar inconsistência em seus valores e instabilidade, o que poderia comprometer os resultados finais obtidos pelo ajuste de um modelo de regressão sobre as estimativas calculadas. Para modelos com baixa complexidade e poucas observações disponíveis, recomenda-se a aplicação em casos onde o número de observações seja suficiente para um ajuste adequado do modelo de regressão, não existindo um valor mínimo adequado.

Mesmo com as limitações apresentadas acima, o presente trabalho vem a contribuir no estudo dos modelos de equações estruturais, trazendo uma nova forma de validação de modelos com poucas observações disponíveis, auxiliando pesquisadores nesse cenário.

Sugestões para trabalhos futuros poderiam incluir o ajustamento usando outros modelos de regressão, tais como os modelos de Brody, Richards, Gompertz, a análise dos mesmos procedimentos em outros tipos de modelos de equações estruturais, além disso pode ser realizada as mesmas análises em outros tipos de modelos não avaliados nesse trabalho e com tipos de dados. Sugere-se também uma investigação a respeito de metodologias que determinem o erro nas extrapolações como o caso do método SA (*Stochastic Approximation*) para regressões lineares e seu uso nas regressões não lineares. O estudo do impacto dos *outliers* sobre as estimativas e, principalmente, sobre os ajustamentos realizados, também pode ser sugerido em trabalhos futuros.

REFERÊNCIAS

- AGGARWAL, C. C. *Outlier Analysis* 2 ed. New York: Springer Publishing Company, 2016.
- AMORIM, L. D. A. F.; FIACCONE, R. L.; SANTOS, C. A. de S. T.; de MORAES, L. T. L. P.; de OLIVEIRA, N. F.; OLIVEIRA, S. B.; dos SANTOS, T. N. L. **Modelagem com Equações Estruturais: Princípios Básicos e Aplicações**. Salvador: 2012. Disponível em: https://repositorio.ufba.br/ri/bitstream/ri/17684/1/ebook_SEM_2012.pdf, acesso em 01 Ago. 2019.
- ANDRADE, D. F.; TAVARES, H. R.; VALLE, R. C. **Teoria da resposta ao item: conceitos e aplicações**. São Paulo: ABE – Associação Brasileira de Estatística, 2000.
- BABAKUS, E.; FERGUSON, C. E.Jr.; JÖRESKOG, K. G. *The Sensitivity of Confirmatory Maximum Likelihood Factor Analysis to Violations of Measurement Scale and Distributional Assumptions*. *Journal of Marketing Research*. v.24, p.222-228, 1987
- BARBIERI, Natália B. **Métodos para Estimar Prevalências Ajustadas**. Dissertação (Mestrado em Epidemiologia) UFRGS, Porto Alegre, 2016.
- BARBOSA, J. J.; PEREIRA, T. M.; de OLIVEIRA, F. L. P. Uma proposta para identificação de *outliers* multivariados. *Ciência e Natura*. v.40, n. 40, 2018.
- BARNETT, V.; LEWIS, T. *Outliers in Statistical Data*. New York: Wiley, 1994
- BARRETT, P. T.; KLINE, P. *The observation to Variable Ratio in Factor Analysis*. *Personality Study & Group Behaviour* v. 1, n.1, p.23-33, 1981
- BARRETT, P. T. *Structural Equation Modelling: Adjudging Model Fit*. *Personality and Individual Differences* n. 42, p. 815-824, 2007.
- BARTLETT, M. S. *The Effect of Standardization on χ^2 Approximation in Factor Analysis*. *Biometrika*, v. 38, n. 3-4, p. 337-344, 1951.
- BARTLETT, M. S. A Note of the Multiplying Factors for Various Chi Square Approximations. *Journal of The Royal Statistical Society*. v. 16, n.1, p.296-298, 1954
- BEARDEN, W.; SHARMA, S.; TEEL, J. E. *Sample Size Effects on Chi Square and Other Statistics Used in Evaluating Causal Models*. *Journal of Marketing Research* v. 19, n.4, p. 425-430, 1982
- BENTLER, P. M. *The interdependence of theory, methodology, and empirical data: Causal modeling as an approach to construct validation*. In KANDEL, D. B. (Ed.), *Longitudinal research on drug abuse: Empirical findings and methodological issues*. New York: Wiley, 1978. p.267-302
- BENTLER, P. M. *Comparative Fit Indexes in Structural Models*. *Psychological Bulletin*. n. 107, p. 238-246, 1990

BENTLER, P. M.; CHOU, C.-P. *Practical Issues in Structural Modeling*. ***Sociological Methods & Research***. v. 16, n.1, 1987.

BENTLER, P. M.; YUAN, K. H. *Structural Equation Modeling with Small Samples: Test Statistics*. ***Multivariate Behavioral Research***. v. 34 n.2 p.181-197, 1999

BENTLER, P. M.; WU, E. J. C. ***EQS 6 for Windows User's Guide***. Encino, CA: *Multivariate Software*, 2002

BIASE, A. G. **Proposição de Testes Computacionalmente Intensivo de Normalidade Multivariada**. Dissertação (Mestrado em Estatística e Experimentação Agropecuária). UFLA, Lavras, 2011.

BIASE, A. G.; FERREIRA, D. F. Teste Computacional Intensivo Baseado na Distância de Mahalanobis para Normalidade Multivariada. ***Revista Brasileira de Biometria***. São Paulo, v. 30, n.1, 2012

BOLLEN, K. A.; STINE, R. *Direct and Indirect Effects: Classical and Bootstrap Estimates of Variability*. ***Sociological Methodology***. v. 20, p. 115-140, 1990

_____. *Bootstrapping Goodness-of-Fit Measures in Structural Equation Models*. ***Sociological Methods & Research***. v. 21, n. 2, p. 205-229, 1992

BOLLEN, K. A.; LONG, J. S. ***Testing Structural Equation Models***. Sage Publications, Newbury, California. 1993

BOOMSMA, A. *Robustness of LISREL against small sample sizes in factor analysis models*, in JÖRESKOG, K.G.; WOLD, H (Eds) ***Systems under indirect observations, Causality, structure, prediction (part 1)***. Amsterdam: North Holland, 1982. pp 149-173

BREI, V. A.; LIBERALI NETO, G. O uso da técnica de modelagem em equações estruturais na área de marketing: um estudo comparativo entre publicações no Brasil e no exterior. ***Revista de Administração Contemporânea***. Curitiba, v.10, n.4, 2006

BROSSEAU-LIAR, P. E.; SAVALEI, V.; LI, L. *An Investigation of the Sample Performance of Two Nonnormality Corrections for RMSEA*. ***Multivariate Behavioral Research*** v. 47, n.6, p. 904-930, 2012.

BROSSEAU-LIAR, P. E.; SAVALEI, V. *Adjusting Incremental Fit Indices for Nonnormality*. ***Multivariate Behavioral Research*** v. 49, n.5, p. 460-470, 2014.

BROWNE, M. W.; CUDECK, R. *Alternative ways of assessing model fit*. In BOLLEN, K. A.; LONG, J. S. (Eds.), ***Testing structural equation models***. Londres: SAGE Publications. p. 136-162, 1993.

BRUCE, A; BRUCE, P. ***Estatística Prática para Cientistas de Dados***. Rio de Janeiro: Alta Books, 2019.

CAMPANA, A. N.; TAVARES, M. C.; SILVA, D. Modelagem de Equações Estruturais: Apresentação de uma abordagem estatística multivariada para pesquisas em Educação Física. **Revista Motricidade**. v.5, n.4, 2009.

CANGUR, S.; ERCAN, I. *Comparison of Model Fit Indices Used in Structural Equation Modeling Under Multivariate Normality*. **Journal of Modern Applied Statistical Methods** v. 14, n.1, 2015.

CANTELMO, N. F.; FERREIRA, D. F. Desempenho de Testes de Normalidade Multivariados avaliado por Simulação de Monte Carlo. **Ciências Agrotécnicas** v.31, n.6, p.1630-1636, 2007.

CARVALHO, N. M. F.; PIRES, B. M.; ANTUNES, O. A. C.; FARIA, R. B. OSÓRIO, R.E.H.B.; PIOVEZAN, C.; NEVES, A. Uso de Equações Lineares na Determinação dos parâmetros de Michaelis-Menten. **Química Nova** v.33 n.7, São Paulo, 2010.

CHOU, C.-P.; BENTLER, P. M. *Estimates and tests in structural equation modeling*. In HOYLE, R. H. (Ed.), **Structural equation modeling: Concepts, issues, and applications**. Thousand Oaks, US: Sage Publications, 1995. p. 37-55

CODES, Ana L. M. de Modelagem de Equações Estruturais: Um método para análise de fenômenos complexos. **Caderno CRH** v. 18, n. 45, p. 471-484, Salvador, 2005

CRASK, M. R.; PERREAULT Jr., W. D. *Validation of Discriminant Analysis in Marketing Research*. **Journal of Marketing Research** v.14, p. 60-68, 1977

CRAWFORD, J. R.; HENRY, J. D. **Computer program for Satorra-Bentler scaled difference chi square test**. 2003. Disponível em <http://homepages.abdn.ac.uk/j.crawford/pages/dept/sbdiff.htm> , acesso em 01 de Jun de 2019.

CRONBACH, L. J. *Coefficient Alpha and the Internal Structure of Tests*. **Psychometrika**. v.16, n.3, 1951.

CRUZ, J. F. M. **Caracterização de Gasolinas por Espectroscopia FT-Raman**. Tese (Doutorado em Química). PUC, Rio de Janeiro, 2003.

CUNHA, M. C. C. **Métodos Numéricos** 2ª ed. Campinas, SP: Editora da UNICAMP, 2003

CURADO, M. A. S.; TELES, J.; MARÔCO, J. Análise de variáveis não diretamente observáveis: influência na tomada de decisão durante o processo de investigação. **Revista da Escola de Enfermagem da USP**. São Paulo, v. 48, n. 1, 2014

DENG, L; YANG, M; MARCOULIDES, K. M. *Structural Equation Modeling With Many Variables: A Systematic Review of Issues and Developments*. **Frontiers in Psychology**. v.9, 2018.

DeVELLIS, R. F. **Scale Development: Theory and Applications**. Newbury Park: SAGE Publications, 1991

DINIZ, G. T. N. **O Uso de Modelos de Equações Estruturais na Análise dos Principais Mecanismos de Desenvolvimento de Lipodistrofia em Pessoas com HIV/AIDS**. Tese (Doutorado em Saúde Pública), Fundação Osvaldo Cruz, Recife, 2016

DISABATO, D. **Test of Model Fit** [mensagem pessoal] mensagem recebida por: *Structural Equation Modeling Discussion Group* <SEMNET@listserv.ua.edu> em 26 Jul. 2018

FAN, X.; WANG L.; THOMPSON, B. *The Effects of Sample Size, Estimation Methods, and Model Specification on SEM Fit Indices*. **Structural Equation Modeling**, v. 6, n. 1, p. 56-83, 1999.

FINNEY, S.J.; DiSTEFANO, C. *Non-normal and Categorical data in structural equation modeling*. In HANCOCK G. R.; MUELLER, R. O. (Org.). **Structural equation modeling: a second course**. IAP, 2006 p. 269-314

FOSS, T.; JÖRESKOG, K. G.; OLSSON, U. H. *Testing Structural Equation Models: The Effect of Kurtosis*. **Computational Statistics and Data Analysis**, v. 55, n. 7, p. 2263-2275, 2011.

FRIEL, C. M. **Notes on Factor Analysis**. Criminal Justice Center. Sam Houston State University, 2009.

GOMES, F. **Análise Multivariada com R**. Disponível em <https://gomesfeliipe.github.io/post/2018-01-01-analise-multivariada-em-r/an%C3%A1lise-multivariada-em-r/>, acesso em 02/7/2019.

GREENE, William H. **Econometric Analysis**. 8 ed. Pearson, New York, NY, 2018

GRONNEBERG, S.; FOLDNES, N. *New Testing Procedures for Structural Equation Modeling*, 2016. Disponível em <https://arxiv.org/abs/1610.02207>, acesso em 02 Jan. 2019

HAIR, J. F. Jr; BLACK, W. C; BABIN, B. J; ANDERSON R. E; TATHAM, R. L. **Análise Multivariada de Dados**. 6 ed., Porto Alegre: Bookman, 2010.

HAIR, J. F. Jr; GABRIEL, M. L. D. da S.; VIJAK, P. *Modelagem de Equações Estruturais Baseada em Covariância (CB-SEM) com o AMOS: Orientações sobre a sua Aplicação como uma Ferramenta de Pesquisa de Marketing*. **Revista Brasileira de Marketing**. São Paulo, v. 13, n.2, 2014.

HOELTER, J. W. *The Analysis of Covariance Structure*. **Sociological Methods & Research**. v. 11, n. 3, p. 325-344, 1983.

HOOPER, D.; COUGHLAN, J.; MULLEN, M. R. *Structural Equation Modelling: Guidelines for Determining Model Fit*. **Electronic Journal of Business Research Methods** v. 6, n. 1, p. 53-60, 2008. Disponível em: <www.ejbrm.com>, acesso em 20 Mar. 2019.

HU, L.; BENTLER, P. M. *Cutoff Criteria for Fit Indexes in Covariance Structure Analysis: Conventional Criteria Versus New Alternatives*. **Structural Equation Modeling: A Multidisciplinary Journal**. v. 6, n. 1, p. 1-55, 1999.

IACOBUCCI, D. *Structural equations modeling: Fit Indices, sample size, and advanced topics. Journal of Consumer Psychology* n. 20, p.90-98, 2010

JACKSON, D. L. *Sample size and number of parameter estimates in maximum likelihood confirmatory factor analysis: a Monte Carlo investigation. Structural Equation Modeling: A Multidisciplinary Journal.* v. 8, p. 205-223, 2001.

JOHNSON, R. A.; WICHERN, D. W. *Applied Multivariate Statistical Analysis.* 6 ed., NJ: Pearson Prentice Hall, 2007.

JÖRESKOG, K. G.; SÖRBOM, D. *Advances in Factor Analysis and Structural Equation Models.* Cambridge: Abt Books, 242 pp, 1979,

_____. *Recent Developments in Structural Equation Modeling. Journal of Marketing Research* v. 19, p. 404-416, 1982

_____. *LISREL 6: analysis of linear structural relationships by maximum likelihood, instrumental variables, and least squares methods.* Mooresville: Scientific Software International Inc., 1984

_____. *LISREL 8 user's reference guide.* Lincolnwood: Scientific Software International Inc., 1996

JUNIOR, L. A.; de SOUZA, A. L. F.; HOPNER V. N. Comparação de Métodos de Linearização da Equação de Michaelis-Menten da Invertase de *Sccharomyces Cerevisiae*. In: **Mostra Nacional de Iniciação Científica e Tecnológica Interdisciplinar.** Santa Rosa do Sul, 2015

KENNEDY, P. *A Guide to Econometrics.* Hoboken: Wiley-Blackwell, 2008

KENNY, D.A.; KANISKAN, B.; McCOACH, D. B. *The Performance of RMSEA in Models With Small Degrees of Freedom. Sociological Methods & Research* v. 44, n. 3, p. 486-507, 2014

KIM, H.; MILLSAP, R. *Using the Bollen-Stine Bootstrapping Method for Evaluating Approximate Fit Indices. Multivariate Behavioral Research.* v. 49, n. 6, 2014

KLINE, R. B. *Principles and Practice of Structural Equation Modeling.* New York: The Guilford Press, 2005.

KLINE, R. B. *Convergence of Structural Equation Modeling.* In: WILLIAMS, M.; VOGT, W. P. (Ed.) *The SAGE Handbook of Innovation in Social Research Methods.* Thousand Oaks: SAGE Publications Inc., 2011. p.562-589

KORKMAZ, S.; GOKSULUK, D.; ZARARSIZ, Gokmen. *MVN: An R Package for Assessing Multivariate Normality. The R Journal* v.6, n.2, p.151-162, 2014. Disponível em: <<https://cran.r-project.org/web/packages/MVN/vignettes/MVN.pdf>>, acesso em 30 Mai. 2017.

KUTNER, M. H.; NACHTSHEIM, C. J.; NETER, J.; LI, W. *Applied Linear Statistical Models* New York: McGraw-Hill/Irwin, 2004

LANDIS, J. R., KOCH, G. G. The measurement of observer agrément for categorical data. **Biometrics**. v. 33, n. 1, p. 159-174, 1977

LATTIN, J.; CARROLL, J. D.; GREEN, P. E. **Análise de Dados Multivariados**. São Paulo: Cengage Learning, 2011.

LAVIELLE, M. **Nonlinear Regression**. Disponível em <http://sia.webpopix.org/nonlinearRegression.html#confidence-intervals-and-prediction-intervals>, acesso em 20/02/2019.

LEVERS-LANDIS, C.; BURANT, C. J.; HAZEN, R. A. *Equation Models with Smaller Samples: An Illustration Using Mealtime Rituals in Diabetes Management*. **Journal of Developmental and Behavioral Pediatrics** v. 32, n. 8, p. 619-626, 2011

LITTLE, Todd D. **Longitudinal Structural Equation Modeling**. New York: The Guilford Press, 2013.

LOESCH, C.; HOELTGEBAUM, M. **Métodos Estatísticos Multivariados**. São Paulo: Saraiva, 2012.

MACCALLUM, R. C.; BROWNE, M. W.; SUGAWARA, H. M. *Power Analysis and Determination of Sample Size for Covariance Structure Modeling*. **Psychological Methods** v. 1, n. 2, p. 130-149, 1996

MACCALLUM, R. C.; BROWNE, M. W.; LI, C. *Testing differences between nested covariance structure models: Power analysis and null hypotheses*. **Psychological Methods** v. 11, n.1, p. 19-35, 2006.

McDANIEL, C. D.; GATES, R. **Fundamentos de Pesquisa de Marketing**. 2. Ed. Rio de Janeiro: LTC, 2005

MANN, F. D. **SBSDiff: Satorra-Bentler Scaled Chi-Squared Difference**. 2018. Disponível em <https://cran.r-project.org/web/packages/SBSDiff/index.html>, acesso em 12/05/2019.

MARDIA, K. V. *Measures of Multivariate Skewness and Kurtosis with Applications*. **Biometrika** v. 57, n. 3, p. 519-530, 1970

MARÔCO, J.; TECEDEIRO, M.; MARTINS, P; MEIRELES, A. O *Burnout* como fator hierárquico de 2ª ordem da Escala de *Burnout* de Maslach. **Análise Psicológica**. Lisboa, v. 26, n. 4, 2008

MARÔCO, J. **Análise de Equações Estruturais: Fundamentos teóricos, Software e Aplicações**. 2 ed. Lisboa: Report Number, 2014.

MARQUARDT, D. W. *Generalized inverses, ridge regression, biased linear estimation and nonlinear estimation*. **Technometrics**. v. 12, p. 591-612, 1970.

MARSH, H. W.; BALLA, J. R.; McDONALD R. P. *Goodness-of-Fit Indices in Confirmatory Factor Analysis: The Effect of Sample Size*. **Psychological Bulletin**. v. 103, n. 3, p. 391-410, 1988

MARSH, H. W.; HAU, K. -T., BALLA, J. R.; GRAYSON, D. *Is more ever too much? The number of indicators per factor in confirmatory factor analysis. **Multivariate Behavioral Research.*** v. 33, p. 181-220, 1998.

MATTOS, T. do B. **Modelos Não Lineares e suas Aplicações.** 58 f. Monografia (Curso de Estatística). UFJF, Juiz de Fora, 2013.

MELO, V.; LEAL, I.; MARÔCO, J. Estudo Preliminar de um Questionário de PTSD em Mulheres Sobreviventes de Cancro de Mama. In: **6º Congresso Nacional de Psicologia da Saúde**, Lisboa (2006)

MELO, A. R. de. **Modelagem de Equações Estruturais Aplicada ao Estudo de Causalidade entre Maturidade e Processos Organizacionais.** 160 f. Dissertação (Mestrado em Métodos Numéricos para Engenharia). UFPR, Curitiba, 2013

MENDES, E. L. **Uma Metodologia para Avaliação da Satisfação do Consumidor com os Serviços Prestados pelas Distribuidoras de Energia Elétrica.** 148 f. Tese (Doutorado em Engenharia Elétrica). PUC-Rio, Rio de Janeiro, 2006.

MINGOTI, S. A. **Análise de Dados Através de Métodos de Estatística Multivariada – Uma Abordagem Aplicada.** Belo Horizonte: Editora UFMG, 2005

MONTGOMERY, D. C.; RUNGER, G. C. **Estatística Aplicada e Probabilidade para Engenheiros.** Rio de Janeiro: LTC, 2012.

MULAIK S. A.; JAMES L. R.; ALSTINE, J. V.; BENNETT, N.; LIND, S.; STILWELL, C. D. *Evaluation of Goodness-of-Fit Indices for Structural Equation Models. **Psychological Bulletin.*** v. 105, n.3, p. 430-445, 1989.

NASCIMENTO, J. C. H. B. do; MACEDO, M. A. da S. Modelagem de Equações Estruturais com Mínimos Quadrados Parciais: Um Exemplo da Aplicação do SmartPLS[®] em Pesquisas em Contabilidade. **Revista de Educação e Pesquisa em Contabilidade.** Brasília, v. 10, n. 3, p. 289-313, 2016.

NEVITT, J.; HANCOCK, G. R. *Evaluating small sample approaches for model test statistics in SEM. **Multivariate Behavioral Research,*** v. 39, n. 3, p. 439-478, 2004.

OLIVEIRA, G. L. de. **Uma Introdução a Modelagem de Equações Estruturais.** Disponível em: <<https://stats4good.github.io/blog/2016/10/07/2016-10-07-ee/>>, acesso em 15 Jan. 2018.

OLSSON, U. H.; FOSS, T.; TROYE, S. V.; HOWELL, R. D. *The Performance of ML, GLS, and WLS Estimation in Structural Equation Modeling Under Conditions of Misspecification and Nonnormality. **Structural Equation Modeling: A Multidisciplinary Journal.*** v. 7, n. 4, p. 557-595, 2000.

OLSSON, U. H.; FOSS, T.; TROYE, S. V. *Does the ADF fit function decrease when the kurtosis increases? **British Journal of Mathematical and Statistical Psychology*** v. 56, n. 2, p. 289-303, 2003.

PADFIELD, D. ; MATHESON, G. **nls.multstart: Robust Non-Linear Regression using AIC Scores**. R package version 1.0.0., 2018

PAN, Y.; JACKSON, R. T. *Ethnic difference in the relationship between acute inflammation and sérum ferritin in US adult males*. *Epidemiology & Infection* v. 136, n. 3, p. 421-431, 2008

PEREIRA, S. dos S. **Modelagem de Equações Estruturais no Software R**. 89 f. Monografia (Bacharelado em Estatística). UFRGS, Porto Alegre, 2013

PILATI, R.; LAROS, J. A. Modelos de Equações Estruturais em Psicologia: Conceitos e Aplicações. *Psicologia: Teoria e Pesquisa*. v. 23, n. 2, p. 205-216, 2007.

PRADO, P. H. M. **A Avaliação do Relacionamento sob A Ótica do Cliente: Um estudo em Bancos de Varejo**. 497 f. Tese (Doutorado em Administração de Empresas) EAESP –FGV, São Paulo, 2004

PREACHER, K. J.; WICHMAN, A. L.; MACCALLUM, R.C.; BRIGGS, N. E. *Latent Growth Curve*. Thousand Oaks: SAGE Publications Inc. 2008.

PREARO, L. C.; GOUVÊA, M. A.; ROMEIRO, M. do C. Avaliação do emprego da técnica de modelagem de equações estruturais em teses e dissertações de universidades públicas de alta performance. *Revista FAE*. Curitiba, v. 14, n. 2, 2011

R Core Team (2019). *R: A language and environment for statistical computing*. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. URL <<https://www.R-project.org/>>

RAYKOV, T.; MARCOULIDES, G. A. *A First Course in Structural Equation Modeling*. 2nd Ed. New Jersey: Lawrence Erlbaum Associates, 2006.

REVELLE, W. *Psych: Procedures for Personality and Psychological Research*, Evanston, USA. 2018. Disponível em <https://CRAN.R-project.org/package=psych>, acesso em 11 de Nov. 2018

RIGDON, E. E. *CFI Versus RMSEA: A Comparison of Two Fit Indexes for SEM*. *Structural Equation Modeling. A Multidisciplinary Journal*. v. 3, p. 369-379, 1996

ROGERSON, P. A. *Statistical Methods for Geography*. London: SAGE Publications Ltd, 2014

SATORRA, A.; BENTLER, P. M. *Corrections to Test Statistic and Standard Errors in Covariance Structure Analysis*. In: von EYE, A.; CLOGG, C. C. (Ed.). *Latent Variables Analysis: Applications to Developmental Research*. Thousand Oaks, CA: SAGE Publications, 1994. p. 399-419.

SHEVLIN, M.; MILES, J. N. V. *Effects of sample size, model specification and factor loadings on the GFI in confirmatory factor analysis* *Personality and Individual Differences*. n. 25, p. 85-90, 1998.

SOUZA, A. C. de; ALEXANDRE, N. M. C.; GUIRARDELLO, E. de B. Propriedades psicométricas na avaliação de instrumentos: avaliação da confiabilidade e da validade. *Epidemiologia e Serviços de Saúde*. Brasília, v. 26, n. 3, p. 649-659, 2017.

STEIGER, J. H.; LIND, J. C. *Statistically Based Tests for the Number of Common Factors. Annual meeting of the Psychometric Society, Iowa City*, v. 758, 1980

_____. *Causal Modeling: a supplementary module for SYSTAT and SYSGRAPH*, SYSTAT, Evanston, IL: SYSTAT, 1989.

TABORGA, C. E. V. *Comparación de los modelos formativos, reflexivos y de antecedentes de evaluación estudiantil del servicio de docencia. Revista de Métodos Cuantitativos para la Economía Y la Empresa*. n. 16, p. 95-120, 2013.

TANAKA, J. S. "How big is big enough?": *Sample size and goodness off it in SEM with latente variables. Child Development*, v. 58, p. 134-146, 1987.

TANGUMA, J. "Effects of Sample Size on the Power of Selected Fit Indices: A Graphical Approach". *Annual Meeting of the Southwest Educational Research Association*. New Orleans, 2001

TARKA, P. *An overview of structural equation modeling: its beginnings, historical development, usefulness and controversies in the social sciences. Quality & Quantity* v. 52, n. 1 p. 313-354, 2018.

THOMAS, G. **Regressão Não Linear**. 17f. Relatório Final (Disciplina de Regressão e Covariância – Pós-Graduação em Estatística e Experimentação Agropecuária). ESALQ-USP, 2016.

THOMPSON, B. *Exploring the Replicability of a Study's Resuts: Bootstrap Statistics for the Multivariate Case. Educational and Psychological Measurement* v. 55 n. 1, 1995

UEDA, C. M. **Modelos Não Lineares com Diferentes Estruturas de Covariância em Curvas de Crescimento: Uma Aplicação no Estudo da Severidade da Doença Late Blight**. 111f. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Produção) UFSC, 2003

VAN DE SCHOOT, R.; KAPLAN, D.; DENISSEN, J.; ASENDORPF, J. B.; NEYER, F. J. VAN AKEN, M. A. G. *A Gentle Introduction to Bayesian Analysis: Applications to Developmental Research. Child Development* v. 85, n. 3, 2013.

VIEIRA, Sonia **Como Elaborar Questionários** São Paulo: Editora Atlas, 2009.

WASSERSTEIN, R. L.; SCHIRM, A. L.; LAZAR, N. A. *Moving to a World Beyond "p < 0.05". The American Statistician*. v. 73 (sup 1), p. 1-19, 2019.

WESTLAND, J. C. *Lower Bounds on Sample Size in Structural Equation Modeling. Electronic Commerce Research and Applications*. v. 9, n. 6, p. 476-487, 2010.

_____. *Structural Equation Models: From Paths to Networks*. Switzerland: Springer International Publishing, 2015.

WINTER, J. C. F.; DODOU, D.; WIERINGA, P. A. *Exploratory Factor Analysis With Small Sample Sizes. Multivariate Behavioral Research*. v. 44, n. 2, p. 147-181, 2009.

WRIGHT, S. *Correlation and Causation* *Journal of Agricultural Reserach* v. 20, n. 7, p. 557-585, 1921.

_____. *The Method of Path Coefficients* *The Annals of Mathematical Statistics* v. 5, n. 3, p. 161-215, 1934.

WOLF, E. J.; Kelly, K. M.; CLARK, S. L.; MILLER, M. W. *Sample Size Requirements for Structural Equation Models: An Evaluation of Power, Bias, and Solution Propriety. Educational and Psychological Measurement.* v. 73, n. 6, 2013.

XING, L; YUAN, K. H. *Model Evaluation With Small N and/or large p. Annual Meeting of the Psychometric Society*, Zurich: 2017.

XU, J.; LONG, J. S. *Using the Delta Method to Construct Confidemce Intervals for Predicted Probabilities, Rates, and Discrete Changes.* Data da publicação: 22/08/2005. Disponível em http://indiana.edu/~jslsoc/stata/ci_computations/spost_deltaci.pdf, acesso em 20/01/2019.

_____. *Confidence Intervals for Predicted Outcomes in Regression Models for Categorical Outcomes.* Data da publicação: 23/08/2005. Disponível em http://www.indiana.edu/~jslsoc/stata/ci_computations/xulong-prvalue-23aug2005.pdf, acesso em 01/03/2019.

YANG M.; JIANG G., YUAN, K. H. *The performance of ten modified rescaled statistics as the number of variables increases. Structural Equation Modeling: A Multidisciplinary Journal* v. 25, n. 3, p. 414-438, 2018

ZAIONTZ, C. **Statistics Using Excel Succinctly.** Morrisville: Syncfusion, 2015

ZEVIANI, W. M. **Avaliação de Modelos de Regressão Não Linear na Cinética de Liberação de Potássio de Resíduos Orgânicos.** 87 f. Dissertação (Mestrado em Estatística e Experimentação Agropecuária) UFL, 2009.

_____. *Bandas de Confiança para Modelo de Regressão Não Linear.* Disponível em <https://ridiculas.wordpress.com/2011/05/19/bandas-de-confianca-para-modelo-de-regressao-nao-linear/>, acesso em 03/02/2019.

_____. *Parametrizações Interpretáveis em Modelos não Lineares.* 146 f. Tese (Doutorado em Estatística e Experimentação Agropecuária) UFL, 2013

ZEVIANI, W. M.; RIBEIRO Jr., P. J.; BONAT, W. H. **Modelos de Regressão não Linear.** Laboratório de Estatística e Geoinformação. Departamento de Estatística. UFPR, 2013. Disponível em: <<http://leg.ufpr.br/~walmes/cursoR/mrnl2013/>>, acesso em 10 Jul. 2018.

APÊNCIDES

APÊNDICE A – PACOTES E FUNÇÕES PARA O SOTWARE R, PARA ANÁLISE DOS DADOS A SEREM UTILIZADOS EM UMA MEE.

QUADRO 9 – PACOTES E FUNÇÕES PARA O SOTWARE R, PARA ANÁLISE DOS DADOS A SEREM UTILIZADOS EM UMA MEE.

PRESSUPOSTO	ESTATÍSTICA ADOTADA	PACOTE	FUNÇÃO
Teste de Normalidade Multivariada	Teste de Mardia Teste de Henze-Zirkler Teste de Royston Teste de Doornik-Hansen	MVN	mvn(dados ¹ ,mvnTest=c("mardia")) mvn(dados,mvnTest=c("hz")) mvn(dados,mvnTest=c("royston")) mvn(dados,mvnTest=c("dh"))
	Teste Shapiro-Wilk	mvnormtest	mshapiro.test
	Teste TMCNMD ²		testNMMC (Anexo D)
	Gráfico QQ-Plot	graphics	qqnorm
Teste de Esfericidade de Bartlett	Qui-quadrado / p-value		Bartlett.sphericity.test (Anexo D)
Critério de Kaiser-Meyer-Olkin (KMO)	KMO		kmo
Confiabilidade de uma medida	Alfa de Cronbach	psych	Alpha(dados)
Ausência de multicolinearidade	<i>Variance Inflation Factor</i>	VIF	vif
Inexistência de outliers	Distância de Mahalanobis	StatMatch	mahalanobis

FONTE: O Autor (2018)

LEGENDA: ¹dados corresponde a uma matriz numérica do banco de dados

²Teste TMCNMD – Teste Monte Carlo de Normalidade Multivariada baseado em distâncias

As funções testNMMC, Bartlett.sphericity.test e kmo foram criadas para uso no software R[®] (R Core Team, 2019) para uso no teste TMCNMD, no teste de esfericidade de Bartle e no teste KMO, respectivamente. Salve as funções criadas em qualquer pasta de seu computador e acesse as funções para usar em diferentes códigos utilizando a função source(). Basta você ‘chamar’ o código que contém essas funções digitando o endereço e nome da função entre aspas. Por exemplo:

```
source("D:/Tese/Arquivos_R/ Teste_Esfericidade_Bartle.r")
```

Para buscar outros ‘pacotes’ basta digitar os comandos

```
library(sos)
```

```
??? “digite a estatística ou técnica desejada”
```

Por exemplo, ??? “KMO”.

ANEXOS

ANEXO A – ASPECTOS DAS TÉCNICAS CSM (*Covariance Structure Model*), PLS (*Partial Least Square*) e OLS (*Ordinary Least Squares*)

QUADRO 10 – ASPECTOS DAS TÉCNICAS CSM, PLS e OLS

CRITÉRIOS	CSM	PLS	OLS
Principais Softwares utilizados	LISREL, EQS, AMOS, Stata e MPlus	SmartPLS, PLSGraph, NEUSREL e WarpPLS	SPSS, SAS, Excel, Stata e Minitab
Objetivo da análise geral	Avaliar se a hipótese nula do modelo é plausível rejeitando hipóteses nulas de caminhos específicos sem efeito	Rejeitar a hipótese nula de um conjunto de caminhos especificados	Rejeitar a hipótese nula de um conjunto de relacionamentos especificados
Objetivo da análise de variância	Modelo de ajuste global de acordo com os dados, representado por vários índices de ajuste	Variância explicada (por exemplo, R ² alto)	Variância explicada (por exemplo, R ² alto)
Técnica de estimação	Máxima Verossimilhança (mais usado)	Mínimos Quadrados Ordinários	Mínimos Quadrados Ordinários
Tipo de maximização	Maximiza a reprodução da covariância entre variáveis	Maximiza a previsão dos escores brutos originais	Maximiza a previsão dos escores brutos originais
Especificação do construto	Suporta o uso de medidas reflexivas e formativas para os construtos	Suporta o uso de medidas reflexivas e formativas para os construtos	As medidas são agregadas usando uma escala, índice ou outros esquemas de ponderação
Variáveis dependentes	Suporta múltiplas variáveis dependentes	Suporta múltiplas variáveis dependentes	Apenas uma variável dependente pode ser avaliada
Teste de mediação	Variáveis mediadoras são testadas como parte do modelo abrangente	Variáveis mediadoras são testadas como parte do modelo abrangente	Processos multipassos separados para testar variáveis mediadoras
Pressupostos	Distribuição normal multivariada e observações independentes (paramétrico)	Não paramétrico	Distribuição normal multivariada e observações independentes (paramétrico)
Fonte de dados	Dados primários	Dados primários e secundários	Dados primários e secundários
Tamanho da amostra	Pequenas amostras podem não convergir, porém, grandes	Grandes amostras não acarretam em vieses nas estatísticas	Grandes amostras não acarretam em vieses nas estatísticas

FONTE: NASCIMENTO (2016)

ANEXO B – ESCALA DE CORREÇÃO DO TESTE QUI-QUADRADO DE SATORRA-BENTLER (BROSSEAU-LIAR, 2012)

Define-se assim a escala de correção para o teste qui-quadrado de Satorra-Bentler (SATORRA, 1994) usada em estimativas de máxima verossimilhança. Quando o modelo está correto mas os dados não apresentam normalidade multivariada, o teste estatístico padrão $T = (n - 1)F_{min}$ (ver equação (42)) não é muito assintoticamente distribuído por uma distribuição qui-quadrado $\chi^2(gl)$. Em vez disso, é distribuído assintoticamente como uma médiabponderada de variáveis qui-quadrado independentes, cada uma com um grau de liberdade. Os pesos da média são dados pelos autovalores do produto das matrizes $\hat{U} \cdot \hat{\Gamma}$, onde $\hat{U} = \hat{W} - \hat{W} \hat{\Delta} (\hat{\Delta}' \hat{W} \hat{\Delta})^{-1} \hat{\Delta}' \hat{W}$, sendo que $\hat{W} = \frac{1}{2} D_p' (\hat{E}^{-1} \otimes \hat{E}^{-1})$. D_p é a matriz dos pesos com D_p sendo uma matriz “duplicação” (ver Magnus e Neudecker, 1986 apud SATORRA, 1994) e $\hat{\Gamma}$ a matriz de curtose dos dados ou uma estimativa livre de distribuição da matriz de covariância da amostra. Os elementos de $\hat{\Gamma}$ são dados por $\{\hat{\Gamma}\}_{ij,kl} = s_{ijkl} - s_{ij} \cdot s_{kl}$, onde s_{ijkl} é o quarto momento central dos dados observados e s_{ij} e s_{kl} são covariâncias da amostra. A soma dos pesos da média ponderada é dada pela soma dos autovalores de $\hat{U} \cdot \hat{\Gamma}$ ou $tr\{\hat{U} \cdot \hat{\Gamma}\}$. O número total de autovalores diferentes de zero no produto $\hat{U} \cdot \hat{\Gamma}$ é igual a $df = p^* - q$ e, portanto o autovalor médio é $\hat{c} = \frac{tr\{\hat{U} \cdot \hat{\Gamma}\}}{df}$ que é a correção de escala usada na definição do qui-quadrado de Satorra-Bentler dada por $T_{SB} = \frac{T_{ML}}{\hat{c}}$. Considerando a população, $c = \frac{tr\{U \cdot \Gamma\}}{df}$, e quando os dados são normais temos $\Gamma = W^{-1}$, sendo assim $U \cdot \Gamma = U \cdot W^{-1} = I - W \Delta (\Delta' W \Delta)^{-1} \Delta'$ e $tr\{U \cdot \Gamma\} = tr\{I_{p^*} - W \Delta (\Delta' W \Delta)^{-1} \Delta'\} = p^* - tr\{W \Delta (\Delta' W \Delta)^{-1} \Delta'\} = p^* - tr\{I_q\} = p^* - q = df$

ANEXO C – COMO ESPECIFICAR AS RELAÇÕES HIPOTÉTICAS NO SOFTWARE R® PARA USO NO PACOTE ‘SEM’ (adaptado de (MELO, 2013))

O primeiro passo para se realizar uma análise em modelagem de equações estruturais (SEM) é estabelecer as relações entre as variáveis e construtos. Lembre-se que as relações são traduzidas nos diagramas de caminhos, conforme discutido na seção 2.1.3. Dessa forma, a fim de “entrar” com essas relações no *software R*®, cria-se um arquivo de texto (.txt) que contenha todas as relações e especificações do modelo.

Usando como referência o modelo descrito na figura 4 pode-se definir as especificações das relações da seguinte forma.

Sob a etiqueta **#FATOR 1 -- SAT**, **#FATOR 2 -- CONF** e assim sucessivamente são definidas as variáveis indicadoras (observadas) que fazem parte de cada fator latente. O símbolo # representa um comentário para a linguagem do R. É definido, por exemplo, o parâmetro *lam1S* para a variável X1 do primeiro fator, pois esse será um parâmetro livremente estimado.

Livremente, pois é acompanhado da sigla NA, por exemplo **SAT->X1, lam1S, NA**.

Por outro lado, quando o parâmetro é fixado em 1, devemos definir como **SAT->X4, NA, 1**, lembre-se de que esta é uma das formas para se criar uma escala para o construto. Espaços podem aparecer livremente em uma especificação de seta e pode haver qualquer número de hífen nas setas, incluindo zero: Assim, por exemplo, "A-> B", "A --> B" e "A> B" são todos legítimos e equivalentes. Essas relações correspondem aos coeficientes de regressão. Sob a etiqueta **#VARIÂNCIAS ESPECÍFICAS** são definidas as variâncias dos erros de medida θ_{δ} para cada variável indicadora. Esses erros são definidos pelos parâmetros e_i e a sigla NA significa que serão livremente estimados, por exemplo **X1<->X1, e1, NA**.

Sob a etiqueta **#FATOR DE ORDEM SUPERIOR** são definidos os fatores de primeira ordem (fatores latentes). Os parâmetros para estes carregamentos são definidos como γ_i e são, também, livremente estimados (NA), por exemplo **SAT->CONF, gamma1, NA**. Lembre-se de que o estabelecimento do construto de ordem superior supõe que as correlações entre os fatores de primeira ordem são todas explicadas pelo fator de segunda ordem. É por essa razão que não se tem uma etiqueta **#Correlações entre Fatores**. Por fim, a última etiqueta **#VARIÂNCIA DOS FATORES** define as variâncias dos fatores latentes. Como a escala para os construtos de primeira ordem já havia sido obtida pelo outro método, suas variâncias serão estimadas livremente (NA), de modo que seus parâmetros foram definidos como ϵ_i , por exemplo **SAT<->SAT, epsilon1, NA**. Caso seja necessário fixar algum fator latente escreve-se, por exemplo, **SAT<->SAT, NA, 1**

Para o modelo descrito na figura 4, a especificação das relações hipotéticas ficou assim definido (arquivo Modelo_Paulo_R.txt)

```

##Fator 1 -- SAT
SAT->X1 , lam1S, NA
SAT->X2 , lam2S, NA
SAT->X3 , lam3S, NA
SAT->X4 , NA, 1
##Fator 2 -- CONF
CONF->X5 , lam5C, NA
CONF->X6 , lam6C, NA
CONF->X7 , NA, 1
##Fator 3 -- COMPR
COMPR->X8 , lam8C, NA
COMPR->X9 , NA, 1
##Fator 4 -- LEAL
LEAL->X10 , lam10L, NA
LEAL->X11 , lam11L, NA
LEAL->X12 , lam12L, NA
LEAL->X13 , NA, 1
##Variâncias Específicas
X1<->X1 , e1, NA
X2<->X2 , e2, NA
X3<->X3 , e3, NA
X4<->X4 , e4, NA
X5<->X5 , e5, NA
X6<->X6 , e6, NA
X7<->X7 , e7, NA
X8<->X8 , e8, NA
X9<->X9 , e9, NA
X10<->X10 , e10, NA
X11<->X11 , e11, NA
X12<->X12 , e12, NA
X13<->X13 , e13, NA
##Fator de Ordem Superior
SAT->CONF, gamma1, NA
SAT->COMPR, gamma2, NA
SAT->LEAL, gamma3, 1
CONF->COMPR, gamma4, NA
CONF->LEAL, gamma5, NA
COMPR->LEAL, gamma6, NA
## Variância dos Fatores
SAT<->SAT, epsilon1, NA
COMPR<->COMPR, epsilon2, NA

```

CONF<->CONF, epsilon3, NA

LEAL<->LEAL, epsilon4, NA

Após a criação do arquivo .txt, carrega-se o pacote *sem* com a sintaxe *library(sem)* e o arquivo de texto *Modelo_Paulo_R.txt* poderá ser lido pelo R através da função:

```
cfa <- specifyModel( "especifique o caminho para o arquivo.txt")
```

Para entrada dos dados usa-se comandos distintos conforme o tipo de arquivo. Para arquivos do tipo .txt escreve-se

```
dados <- read.table("especifique o caminho para o arquivo.txt", h=T)
```

O próximo comando permitirá ajustar o modelo e salvar os resultados:

```
cfaOut<-sem(cfa,dataCor,N=número de observações, objective=objectiveML).
```

Observe que *cfa* é a variável que contém a especificação do modelo hipotetizado, a variável *dataCor* é a matriz de correlação de entrada, que pode ser obtida a partir do comando *dataCor* <- *cor* (*dados*), *N*= é o número de observações e *objective*=*objectiveML* é o método de estimação, neste caso, o método de máxima verossimilhança. Para ajustar o modelo pelo método de mínimos quadrados generalizados (GLS), basta modificar este parâmetro da função *sem* para *objective*=*objectiveGLS*.

O comando *summary(cfaOut)* solicita os índices de ajustes e as estimativas dos parâmetros para o modelo. O comando *modIndices(cfaOut)* proporciona os 5 índices de modificação mais importantes para uma possível reespecificação do modelo. O comando *effects(cfaOut)* fornece os efeitos diretos e indiretos, o comando *normalizedResiduals(cfaOut)* apresenta os resíduos normalizados e por fim, a sintaxe *standardizedResiduals(cfaOut)*, permite obter os resíduos padronizados do modelo.

Caso se queira avaliar os índices de qualidade do modelo, deve-se incluir no comando *summary(cfaOut)* a seguinte sintaxe

```
summary(cfaOut, fit.indices=c("GFI", "RMSEA", "NFI", "CFI", "SRMR"))
```

ANEXO D – ALGORITMOS UTILIZADOS NESSE TRABALHO PARA USO NO
SOFTWARE R® (R Core Team, 2019)

I) Teste de Normalidade Multivariada Baseado em Distâncias (BIASE, 2011)

```
##-----##
# Teste Monte Carlo de normalidade multivariada baseado em distâncias, proposto por#
# Biase(2011) entrar com: #
# X: matriz de dados n x p e com #
# NSM: número de simulações Monte Carlo #
##-----##

NSM <- 2000

testNMMC <- function (X, NSM)
{
  n <- nrow(X); p <- ncol(X)
  Xb <- apply(X, 2, mean)
  S <- var(X)
  SI <- solve(S)
  D2 <- function(x,med,SI)
  {
    return(t(x - med)%*%SI*%(x - med))
  }

  D2j <- apply(X, 1, D2, Xb, SI)
  D2j <- sort(D2j)
  bj <- n*D2j/(n - 1)^2
  a <- (p - 2)/(2*p)
  b <- (n - p - 3)/(2 * (n - p - 1))
  pj <- ((1:n) - a)/(n - a - b + 1)
  alpha <- p/2
  beta <- (n - p - 1)/2
  bjs <- qbeta(pj, alpha, beta)
  r2c <- cor(bj, bjs)^2
  r2MC <- r2c
  for (i in 1:NSM)
  {
    Z <- matrix(rnorm(n*p), n, p)
    Zb <- apply(Z, 2, mean)
    Sz <- var(Z)
    SIz <- solve(Sz)
    D2jz <- apply(Z, 1, D2, Zb, SIz)
    D2jz <- sort(D2jz)
    bjz <- n*D2jz/(n - 1)^2
    r2MC <- c(r2MC, cor(bjz, bjs)^2)
  }
  reg <- lm(bj ~ bjs)
  valor.p <- length (r2MC[r2MC <= r2c])/(NSM + 1)
  return(list(r2 = r2c, valor.p = valor.p))
}

testNMMC(dados, NSM)
```

II) Esfericidade de Bartlett (GOMES, 2018)

```
Bartlett.sphericity.test <- function(x)
{
  method <- "Teste de esfericidade de Bartlett"
  data.name <- deparse(substitute(x))
  x <- subset(x, complete.cases(x)) # Omitindo valores faltantes
  n <- nrow(x)
  p <- ncol(x)
  chisq <- (1-n+(2*p+5)/6)*log(det(cor(x)))
  df <- p*(p-1)/2
  p.value <- pchisq(chisq, df, lower.tail=FALSE)
  names(chisq) <- "X-squared"
  names(df) <- "df"
  return(structure(list(statistic=chisq, parameter=df, p.value=p.value,
                      method=method, data.name=data.name), class="htest"))
}
Bartlett.sphericity.test(dados)
```

III) Teste KMO (GOMES, 2018)

#Teste KMO

```
kmo <- function(x)
{
  x = subset(x, complete.cases(x))
  r = cor(x)
  r2 = r^2
  i = solve(r)
  d = diag(i)
  p2 = (-i/sqrt(outer(d, d)))^2
  diag(r2) <- diag(p2) <- 0
  KMO = sum(r2)/(sum(r2)+sum(p2))
  MSA = colSums(r2)/(colSums(r2)+colSums(p2))
  return(list(KMO=KMO, MSA=MSA))
}
kmo(dados)
```

IV) Função Para Cálculo das Estimativas Usando os Dados Originais e Para Dados Normais Gerados a Partir dos Dados Originais.

Função SEM (Dados não normais - Originais)

```
sem_smry <- function(dados, cfa, pp)
{
  inx <- sample(nrow(dados), pp, replace=FALSE)
  dados_p <- dados[inx, ]
  dataCor <- cov(dados_p)
  cfaOut <- try(sem(cfa, dataCor, N = pp, objective = objectiveGLS))
  if (any(class(cfaOut)=='try-error'))
    return(cfaOut)
  return(try(summary(cfaOut, conf.level = 0.95, fit.indices = c("GFI", "RMSEA", "NFI", "CFI"))))
}
```

```
# Função SEM (Dados Normais obtidos a partir dos Dados Originais)
```

```
sem_smry <- function(dados, cfa, pp)
{
  mean_dados<-apply(dados,2,mean)
  Cov_dados<-cov(dados)
  dados_normais_p<-rmvnorm(pp,mean_dados,Cov_dados)
  dataCor <- cov.wt(dados_normais_p, method = c("ML"), cor = TRUE)
  dataCor <- as.matrix(dataCor[[1]])
  cfaOut <- try(sem(cfa, dataCor, N = pp, objective = objectiveGLS))
  if (any(class(cfaOut)=='try-error'))
    return(cfaOut)
  return(try(summary(cfaOut, conf.level = 0.95, fit.indices = c("GFI", "RMSEA", "NFI", "CFI"))))
}
```

V) Looping Para Cálculo das Estimativas

```
# Looping (COM L VALORES)
```

```
for (i in 1:L) {
  n0 <- sem_smry(dados, cfa, pp[j])
  while (any(class(n0) == "try-error")||(n0[["RMSEA"]][1])<0||(n0[["NFI"]])<0||(n0[["GFI"]])<0||(n0[["CFI"]])<0)
  {
    nnc[j] <- nnc[j] + 1
    n0 <- sem_smry(dados, cfa, pp[j])
  }
```

```
  RMSEA[i]<- n0[["RMSEA"]][1]
  GFI[i]<-n0[["GFI"]]
  NFI[i]<-n0[["NFI"]]
  CFI[i]<-n0[["CFI"]]
```

```
#INDICES CALCULADOS
```

```
  Indices <- cbind(RMSEA, GFI, NFI, CFI)
}
```

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

```
#Looping (COM TAXA DE CONVERGÊNCIA)
```

```
for (i in 1:L) {
  n0 <- sem_smry(dados, cfa, pp[j])
  if (any(class(n0) == "try-error")||(n0[["RMSEA"]][1])<0||(n0[["NFI"]])<0||(n0[["GFI"]])<0||(n0[["CFI"]])<0) {
    nnc[j] <- nnc[j] + 1
  } else {
```

```
    RMSEA[i]<- n0[["RMSEA"]][1]
    GFI[i]<-n0[["GFI"]]
    NFI[i]<-n0[["NFI"]]
    CFI[i]<-n0[["CFI"]]
  }
```

```
# INDICES CALCULADOS
```

```
  Indices <- cbind(RMSEA, GFI, NFI, CFI)
}
```

VI) Modelos de Regressão Usados Para Ajustamento das Estimativas

```
# Definindo a função de Michaelis Menten
```

```
MM <- deriv3(~(A*x/(B+x)), c("A", "B"), function(x, A, B) NULL)
# A: assintota (lim f(x) para x -> infinito)
# B: tempo de meia vida (x para o qual f(x) = A/2)
str(MM)
```

```
# Definindo a função de Michaelis Menten (adaptada)
```

```
MM <- deriv3(~(A*x/(B+x)) + C*x, c("A", "B", "C"), function(x, A, B, C) NULL)
str(MM)
```

```
# Definindo a função Exponencial (ADAPTADA)
```

```
EXP <- deriv3(~(A*(1-exp(-log(2)*x/B))+C*x), c("A", "B", "C"), function(x, A, B, C) NULL)
str(EXP)
```

```
# Definindo a função Exponencial (ADAPTADA sem C)
```

```
EXP <- deriv3(~(A*(1-exp(-log(2)*x/B))), c("A", "B"), function(x, A, B) NULL)
str(EXP)
```

VII) Modelos de Michaelis-Menten Linearizados

```
# "Estimativas para "CHUTE"
```

```
ch <- (Escolha a função de linearização opções de 1 a 4)
```

```
# 1 para (Eadie-Hofstee  $y = -B(y/x) + A$ ) (Especialmente para RMSEA com valores nulos)
# 2 para ( $x = A(x/y) - B$ )
# 3 para (Hanes-Woolf  $x/y = x/A + B/A$ )
# 4 para (Lineweaver-Burk  $1/y = (B/Ax) + 1/A$ )
```

```
if(ch==1){
```

```
  #Alternativa 1 (Eadie-Hofstee  $y = -B(y/x) + A$ )
```

```
  dados_Chute <- data.frame(Y=c(Indice),x=c(Indice)/(rep(c(pp), each=100)))
  options(na.action=na.exclude)
  ajuste<-lm(Y~x,data=dados_Chute)
  A <- (ajuste[["coefficients"]][["(Intercept)"]])
  B <- (ajuste[["coefficients"]][["x"]])
  #C <- A
```

```
} else if(ch==2) {
```

```
  # Alternativa 2 ( $x = A(x/y) - B$ )
```

```
  dados_Chute <- data.frame(Y=(rep(c(pp), each=100)),x=(rep(c(pp), each=100))/(c(Indice)))
  options(na.action=na.exclude)
  ajuste<-lm(Y~x,data=dados_Chute)
  A <- ajuste[["coefficients"]][["x"]]
  B <- -(ajuste[["coefficients"]][["(Intercept)"]])
  C <- 1 - A
```

```
} else if(ch==3){
```

```
  # Alternativa 3 (Hanes-Woolf  $x/y = x/A + B/A$ )
```

```

dados_Chute <- data.frame(Y = (rep(c(pp), each=100))/c(Indice),x = (rep(c(pp), each=100)))
options(na.action=na.exclude)
ajuste<-lm(Y~x,data=dados_Chute)
A <- 1/(ajuste[["coefficients"]][["x"]])
B <- (ajuste[["coefficients"]][["(Intercept)"]])*A
C <- 1 - A
} else if(ch==4){

# Alternativa 4 (Lineweaver-Burk  $1/y = (B/Ax) + 1/A$ )

dados_Chute <- data.frame(Y = 1/c(Indice),x = 1/(rep(c(pp), each=100)))
options(na.action=na.exclude)
ajuste<-lm(Y~x,data=dados_Chute)
A <- 1/(ajuste[["coefficients"]][["(Intercept)"]])
B <- (ajuste[["coefficients"]][["x"]])*A
C <- 1 - A
} else {
print ("Erro!")
}

```

VIII) Coeficiente de Determinação

```
1-deviance(AJUSTE)/deviance(lm(Y~1, dados_Indice_RMSEA))
```

IX) Gráfico do Ajuste e Banda de Confiança (WALMES, 2011)

```
# Obtenção dos valores preditos
```

```

pred <- data.frame(x=seq(30,460,1=10))
der <- do.call(MM, args=c(list(x=pred$x), as.list(coef(AJUSTE))))
F <- attr(der, "gradient")
U <- chol(vcov(AJUSTE))
se <- sqrt(apply(F%*%t(U), 1, function(x) sum(x^2))) # erro padrão

```

```
# Gráficos dos observados, preditos com IC, legenda e equações
```

```

plot(Y~x, data=dados_Indice_NFI, xlab="Número de Observações",ylab="Estimativas GFI - Modelo 1",
xlim=c(30,460), ylim=c(0.98,1))
matlines(pred$x, c(der)+ outer(se, qt(c(.5, .025,.975), df=df.residual(AJUSTE))),type="l", col=c(1,2,2),
lty=c(1,2,2))

```

```

legend("bottomright",legend=c("valores estimados", "valores preditos","intervalo de confiança (95%)"),
lty=c(NA,1,2), col=c(1,1,2), pch=c(1,NA,NA), bty="n")
cf <- format(coef(AJUSTE), digits=3)
text(par("usr")[1], par("usr")[4], adj=c(-0.3,1),
label=substitute(hat(Y)==A%.%x/(B+x),list(A=cf[1], B=cf[2])))

```

X) Obtenção dos valores previstos e intervalo de predição (LAVIELLE, 2019)

```
x.new <- seq(40, 480, by=5)
cf <- coef(AJUSTE)
f.new <- MM(x.new,cf[1],cf[2])

g.new <- attr(f.new,"gradient")
V.beta2 <- vcov(AJUSTE)
GS=rowSums((g.new%*%V.beta2)*g.new)
head(GS)

df <- summary(AJUSTE)$df[2]

alpha <- 0.05
deltaf <- sqrt(GS)*qt(1-alpha/2,df)
df.delta <- data.frame(x=x.new, f=f.new, lwr.conf=f.new-deltaf, upr.conf=f.new+deltaf)

sigma2.est <- summary(AJUSTE)$sigma
deltay <- sqrt(GS + sigma2.est^2)*qt(1-alpha/2,df)
df.delta[c("lwr.pred", "upr.pred")] <- cbind(f.new - deltay, f.new + deltay)

df.delta
```