

METODE KEMUNGKINAN MAKSIMUM EM PENDUGAAN PARAMETER MODEL NONLINEAR JERAPAN FOSFOR

Mohammad Masjkur

Departemen Statistika, FMIPA-IPB

Jln. Meranti Kampus IPB Darmaga Bogor email : masjkur@gmail.com

ABSTRAK

Model jerapan fosfor tanah umumnya dimodelkan dengan model non-linear dua parameter Langmuir. Pada kasus tertentu digunakan model tiga parameter Langmuir-Freundlich dan empat parameter Langmuir dua permukaan (*two surface Langmuir*). Prosedur alternatif dapat digunakan untuk menduga parameter model nonlinear jerapan fosfor adalah metode kemungkinan maksimum EM. Tujuan penelitian ini adalah membandingkan model non-linear dua parameter Langmuir, tiga parameter Langmuir-Freundlich dan empat parameter Langmuir dua permukaan jerapan fosfor menggunakan metode kemungkinan maksimum EM. Penelitian ini menggunakan data isoterm jerapan P pada tanah kaolinitik dan smektitik, masing-masing sebanyak tiga lokasi. Hasil penelitian menunjukkan bahwa penggunaan model non-linear tiga parameter Langmuir-Freundlich dan empat parameter Langmuir dua permukaan jerapan fosfor tidak nyata lebih baik daripada model dua parameter Langmuir, ditunjukkan oleh nilai AIC relatif sama.

Kata kunci: model nonlinear, kemungkinan maksimum EM, dua parameter Langmuir, tiga parameter Langmuir-Freundlich, empat parameter Langmuir dua permukaan.

PENDAHULUAN

Model hubungan antara jumlah P yang ditambahkan dengan jumlah P yang dijerap tanah umumnya dimodelkan dengan model non-linear dua parameter Langmuir. Namun demikian, pada beberapa kasus data jerapan fosfor tidak sesuai dengan plot Langmuir baku, sehingga dikembangkan modifikasi persamaan Langmuir antara lain model tiga parameter Langmuir-Freundlich dan empat parameter Langmuir dua permukaan (*two surface Langmuir*) (Sposito, 1982; Bolster dan Hornberger, 2007).

Pendugaan parameter model nonlinear jerapan fosfor (*P sorption*) biasanya menggunakan metode kuadrat terkecil linear dengan transformasi linear terhadap

model nonlinear ataupun metode kuadrat terkecil nonlinear. Namun kedua metode tersebut masih mempunyai permasalahan, antara lain asumsi kenormalan, kebebasan dan kehomogenan ragam galat jarang terpenuhi (Masjkur, 2009a; Masjkur, 2009b).

Prosedur alternatif dapat digunakan untuk mengatasi hal ini adalah menggunakan metode kemungkinan maksimum EM. Makowski *et al.* (2002) dalam Makowski dan Lavielle (2006) menunjukkan bahwa model pengaruh campuran (*mixed effects models*) dengan metode kemungkinan maksimum lebih akurat daripada metode kuadrat terkecil dalam pendugaan parameter model nonlinear respons pemupukan. Pendekatan ini secara otomatis mempertimbangkan korelasi di antara galat. Masjkur (2009a; 2009b) mendapatkan bahwa metode kemungkinan maksimum EM lebih baik daripada metode kuadrat terkecil linear dan nonlinear dalam pendugaan parameter model jerapan fosfor.

Tujuan penelitian ini adalah membandingkan model non-linear dua parameter Langmuir, tiga parameter Langmuir-Freundlich dan empat parameter Langmuir dua permukaan jerapan fosfor menggunakan metode kemungkinan maksimum EM.

TINJAUAN PUSTAKA

Model Nonlinear

Pemodelan linear berhubungan dengan fungsi-fungsi dengan linear dalam parameter-parameternya, walaupun model tersebut nonlinear dalam peubah-peubahnya. Namun demikian, beberapa fungsi dalam dunia nyata adalah nonlinear dalam parameter-parameternya. Misalnya, kurva eksponensial *decay* $y=a*Exp(-b*x)$, dimana b digandakan dalam fungsi eksponensial.

Beberapa fungsi nonlinear dapat dilinearkan oleh transformasi peubah-peubah bebas dan/atau takbebas. Kurva eksponensial *decay*, sebagai contoh, dapat dilinearkan dengan mengambil bentuk logaritma : $Log(y)=a'-b*x$. Parameter a' dalam persamaan baru ini adalah logaritma dari a pada persamaan asal, sehingga setelah a' telah ditentukan oleh penyuaian kurva linear sederhana, maka kita dapat mengambil antilog nya untuk mendapatkan a .

Namun demikian, kita sering mendapatkan fungsi-fungsi yang tidak dapat dilinearkan oleh cara-cara tersebut, misalnya *exponensial decay* yang mendatar pada beberapa nilai tidak diketahui: $y=a*Exp(-b*x)+c$. Penerapan transformasi logaritma pada kasus ini menghasilkan $Log(y-c)=a'-b*x$. Hal ini melinearkan b , tetapi sekarang c terdapat dalam logaritma (StatSoft, 2008).

Model nonlinear adalah suatu model dimana nilai dugaan, $f(x, \beta)$, merupakan fungsi nonlinear pada parameternya, β . Umumnya tidak ada bentuk baku dalam pendugaan parameter terbaik seperti halnya model linear. Biasanya algoritma optimasi numerik digunakan untuk menentukan pendugaan parameter terbaik (*the best-fitting parameters*). Tidak seperti halnya model linear, mungkin terdapat beberapa minimum lokal (*local minima*) dari fungsi yang akan dioptimalkan. Pada prakteknya, nilai dugaan (*guess values*) dari parameter digunakan, bersamaan dengan algoritma optimasi untuk mendapatkan minimum global dari jumlah kuadrat.

Metode Kemungkinan Maksimum

Sebagai alternatif bagi metode kuadrat terkecil adalah memaksimumkan fungsi kemungkinan (*likelihood*) atau *log-likelihood*. Fungsi kemungkinan model nonlinear adalah,

$$L(\beta, \sigma^2) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{n/2}} \exp\left\{-\frac{\sum_{i=1}^n [y_i - f(\beta, x'_i)]^2}{2\sigma^2}\right\}$$

Metode kemungkinan maksimum menduga parameter β dan σ^2 dengan mendapatkan nilai parameter β dan σ^2 yang memaksimumkan $L(\beta, \sigma^2)$ (Samson *et al.*, 2000; Sharma dan Agarwal, 2003; Makowski dan Lavielle, 2006).

Algoritma Expectation-Maximization

Algoritma EM digunakan untuk mendapatkan dugaan kemungkinan maksimum parameter model-model peluang, dimana model tergantung pada peubah laten tidak teramati atau terdapat data hilang. Tiap iterasi dari algoritma EM terdiri dari dua proses : tahap-E dan tahap-M. Tahap pendugaan, tahap-E menghitung dugaan

kemungkinan dengan mempertimbangkan peubah laten jika peubah tersebut diamati. Tahap maksimisasi, tahap-M menghitung dugaan kemungkinan maksimum parameter dengan maksimisasi dugaan kemungkinan pada tahap-E. Parameter didapatkan pada tahap-M selanjutnya digunakan untuk tahap-E berikutnya, dan proses tersebut dilakukan secara berulang.

Misalkan \mathbf{Y} menunjukkan data tidaklengkap terdiri dari nilai peubah teramati, dan misalkan \mathbf{Z} menunjukkan data hilang. \mathbf{Y} dan \mathbf{Z} secara bersama membentuk data lengkap.

Misalkan P adalah fungsi kepekatan peluang bersama dari data lengkap dengan parameter diberikan oleh vektor θ : $p(\mathbf{y}, \mathbf{z}|\theta)$. Selanjutnya sebaran bersyarat data hilang jika diketahui data amatan dapat dinyatakan sebagai :

$$p(\mathbf{z}|\mathbf{y}, \theta) = \frac{p(\mathbf{y}, \mathbf{z}|\theta)}{p(\mathbf{y}|\theta)} = \frac{p(\mathbf{y}|\mathbf{z}, \theta)p(\mathbf{z}|\theta)}{\int p(\mathbf{y}|\hat{\mathbf{z}}, \theta)p(\hat{\mathbf{z}}|\theta)d\hat{\mathbf{z}}}$$

Algoritma EM secara iteratif meningkatkan dugaan awal θ_0 dengan mencari dugaan baru θ_1, θ_2 , dan seterusnya. Tiap tahapan yang menurunkan θ_{n+1} dari θ_n mengambil bentuk berikut :

$$\theta_{n+1} = \operatorname{argmax}_{\theta} Q(\theta)$$

dimana $Q(\theta)$ adalah nilai harapan *log-likelihood*. Q diberikan oleh

$$Q(\theta) = \sum_z p(z | y, \theta_n) \log p(y, z | \theta)$$

atau secara umum

$$Q(\theta) = E_{\mathbf{z}}[\log p(\mathbf{y}, \mathbf{z} | \theta) | \mathbf{y}]$$

Dengan perkataan lain, θ_{n+1} adalah nilai yang memaksimumkan (M) dugaan bersyarat (E) dari *log-likelihood* data lengkap jika diketahui peubah teramati pada nilai parameter sebelumnya. Pendugaan $Q(\theta)$ pada kasus kontinyu diberikan oleh

$$Q(\theta) = E_z[\log p(\mathbf{y}, \mathbf{z} | \theta) | \mathbf{y}] = \int_{-\infty}^{\infty} p(\mathbf{z} | \mathbf{y}, \theta_n) \log p(\mathbf{y}, \mathbf{z} | \theta) dz$$

(Deylon *et al.* 1999, Makowski dan Lavielle, 2006; Borman, 2008).

DATA DAN METODE

Data

Penelitian ini menggunakan data isotherm jerapan P pada tanah kaolinitik dan smektitik. Konsentrasi P ditambahkan yaitu : 0, 25, 50, 75, 100, 150, 200, 250, 300, 400, dan 500 ppm P untuk tanah kaolinitik, sedangkan pada tanah smektitik digunakan konsentrasi P : 0, 50, 100, 150, 200, 250, 300, 350, 400, 450 dan 500 ppm P. Inkubasi dilakukan selama 6 hari sambil dikocok 2x30 menit/hari (pagi dan siang). Setelah ekuilibrasi selesai, suspensi disentrifusi untuk mendapatkan cairan jernih. Kadar P dalam supernatan ditetapkan dengan spektrofotometer. Perbedaan antara jumlah P yang tinggal dalam larutan dengan jumlah P yang diberikan adalah jumlah P yang dijerap oleh tanah.

Metode

Isotherm jerapan P dimodelkan dengan persamaan nonlinear dua parameter Langmuir, tiga parameter Langmuir-Freundlich dan empat parameter Langmuir dua permukaan (*two surface Langmuir*). Model dua parameter Langmuir adalah :

$$Q = \beta \kappa C / (1 + \kappa C)$$

dengan $Q = P$ dijerap tanah (mg kg^{-1}), $C =$ konsentrasi P dalam larutan keseimbangan (mg L^{-1}), $\beta =$ parameter jerapan maksimum (mg kg^{-1}), dan $\kappa =$ parameter energi ikatan (L mg^{-1}), sedangkan model tiga parameter Langmuir-Freundlich sebagai berikut :

$$Q = \beta \kappa C^\alpha / (1 + \kappa C^\alpha)$$

dengan $\alpha =$ parameter penyesuaian. Adapun model empat parameter Langmuir dua permukaan (*two surface Langmuir*) adalah :

$$Q = \beta_1 \kappa_1 C / (1 + \kappa_1 C) + \beta_2 \kappa_2 C / (1 + \kappa_2 C)$$

dengan subscript menunjukkan jerapan maksimum dan energi ikatan pada dua tipe permukaan.

Metode kemungkinan maksimum EM digunakan untuk menyuaikan data dengan model persamaan nonlinear dua parameter Langmuir, tiga parameter Langmuir-Freundlich dan empat parameter Langmuir dua permukaan (*two surface Langmuir*).

Keterandalan model dievaluasi menggunakan kriteria informasi Akaike (*Akaike Information Criterion (AIC)*) yaitu :

$$AIC = n \ln \left(\frac{SSE}{n} \right) + 2p$$

dengan:

AIC = Akaike's Information Criterion

SSE = jumlah kuadrat sisaan

n = banyaknya data

p = banyaknya parameter.

Model dengan nilai AIC terkecil dipilih sebagai model terbaik. Peluang bahwa model dengan nilai AIC terkecil adalah model terbaik dihitung sebagai berikut :

$$P = \exp(0.5\Delta) / (1 + \exp(0.5\Delta))$$

dengan Δ = perbedaan absolut AIC antara dua model.

HASIL DAN PEMBAHASAN

Pendugaan parameter model

Nilai dugaan parameter model nonlinier dua parameter Langmuir, tiga parameter Langmuir-Freundlich dan empat parameter Langmuir dua permukaan yang dihasilkan dengan menggunakan metode kemungkinan maksimum EM terdapat pada Tabel 1.

Tabel 1 Nilai dugaan parameter model nonlinier dua parameter Langmuir, tiga parameter Langmuir-Freundlich dan empat parameter Langmuir dua permukaan menggunakan EM

Lokasi	Langmuir		Langmuir-Freundlich			Langmuir dua permukaan			
	β	κ	β	κ	α	β_1	κ_1	β_2	κ_2
Smektitik									
Demangan	659.0	2.17	580.0	3.13	1.07	1.61	0.10	676.0	2.07
Tirtobinangun	1290.0	0.23	1860.0	0.15	0.86	700.0	0.05	939.0	0.28
Kedungrejo	671.0	3.56	529.0	15.0	1.5	119.0	0.04	682.0	3.74
Kaolinitik									
Purworejo 1	534.0	21.4	473.0	79.8	1.29	0.06	1.71	534.0	21.8
Purworejo 2	493.0	25.3	497.0	16.7	0.88	7.26	1.39	489.0	26.2
Simbarwaringin	798.0	20.5	750.0	35.8	1.11	0.07	0.26	747.0	23.6

Pada model nonlinier dua parameter Langmuir nilai dugaan parameter jerapan maksimum pada masing-masing lokasi tanah smektitik relatif lebih tinggi dibanding tanah kaolinitik, namun nilai dugaan parameter energi ikatan yang dihasilkan pada masing-masing lokasi tanah smektitik lebih rendah dibanding tanah kaolinitik.

Pada model nonlinier tiga parameter Langmuir-Freundlich nilai dugaan parameter jerapan maksimum pada masing-masing lokasi tanah smektitik relatif lebih tinggi dibanding tanah kaolinitik, sedangkan nilai dugaan parameter energi ikatan pada masing-masing lokasi tanah smektitik relatif lebih rendah dibanding tanah kaolinitik.

Adapun model empat parameter Langmuir dua permukaan, pada tapak energi ikatan rendah (tapak I) dan tapak energi ikatan tinggi (tapak II) nilai dugaan parameter jerapan maksimum pada masing-masing lokasi tanah smektitik relatif lebih tinggi dibanding tanah kaolinitik, sedangkan nilai dugaan parameter energi ikatan pada masing-masing lokasi tanah smektitik relatif lebih rendah dibanding tanah kaolinitik. Nampaknya ketiga model tersebut menunjukkan pola yang sama mengenai dugaan parameter jerapan maksimum dan energi ikatan fosfat.

Pemilihan Model Terbaik

Nilai AIC dan Peluang (P) model dua parameter Langmuir, tiga parameter Langmuir-Freundlich dan empat parameter Langmuir dua permukaan dapat dilihat pada Tabel 2.

Tabel 2 Nilai AIC dan peluang (P) model Langmuir, LangmuirFreundlich dan Langmuir dua permukaan.

Lokasi	Langmuir	LangmuirFreundlich		Langmuir dua permukaan	
	AIC	AIC	P	AIC	P
Smektitik					
Demangan	432.46	435.43	0.815	436.43	0.879
Tirtobinangun	352.98	347.06	0.951	355.83	0.806
Kedungrejo	443.05	436.55	0.963	447.31	0.894
Kaolinitik					
Purworejo 1	429.28	425.19	0.885	432.98	0.864
Purworejo 2	408.67	411.56	0.809	412.25	0.857
Simbarwaringin	425.45	422.78	0.791	430.08	0.910

Pada masing-masing lokasi tanah smektitik dan kaolinitik, model tiga parameter Langmuir-Freundlich dan empat parameter Langmuir dua permukaan tidak nyata lebih baik menyuaikan data daripada persamaan dua parameter Langmuir. Hal ini ditunjukkan oleh nilai AIC yang dihasilkan relatif sama. Nilai peluang (P) yang dihasilkan lebih besar dari taraf nyata 5 persen. Hasil ini berbeda dengan temuan Bolster dan Hornberger (2007) bahwa model tiga parameter Langmuir-Freundlich dan empat parameter Langmuir dua permukaan nyata lebih baik menyuaikan data daripada persamaan dua parameter Langmuir. Berdasarkan pertimbangan kesederhanaan model, maka dapat dikatakan bahwa model Langmuir dua parameter lebih baik daripada model Langmuir-Freundlich tiga parameter dan Langmuir dua permukaan empat parameter.

KESIMPULAN

Model nonlinier yang lebih baik untuk jerapan P pada masing-masing lokasi tanah smektitik dan kaolinitik adalah model nonlinier Langmuir dua parameter.

DAFTAR PUSTAKA

Delyon, B., Lavielle, M., and Moulines, E. 1999. "Convergence of a stochastic approximation version of the EM algorithm. *Annals of Statistics*, 27, 94-128.

- Bolster, C. H. and G. M. Hornberger. 2007. On the Use of Linearized Langmuir Equations. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 71:1796–1806.
- Makowski, D., and Wallach, D. 2002. “It pays to base parameter estimation on a realistic description of model errors”. *Agronomie, Agriculture & Environment* 22:179-189.
- Makowski, D., and M. Lavielle. 2006. Using SAEM to Estimate Parameters of Models of Response to Applied Fertilizer. *Journal of Agricultural, Biological, and Environmental Statistics.* 11: 45–60.
- Masjkur, M. 2008. Korelasi Parameter Jerapan Fosfor Tanah Kaolinitik dan Smektitik dengan Serapan Fosfor Padi Sawah. Departemen Statistika, Institut Pertanian Bogor.
- Masjkur, M. 2009a. Perbandingan Metode Kuadrat Terkecil Linear dan Nonlinear Marquardt Levenberg Pendugaan Model Jerapan Fosfor. Makalah Seminar Nasional Sains, FMIPA IPB. Bogor.
- Masjkur, M. 2009b. Perbandingan Metode Kuadrat Terkecil Marquardt Levenberg dan Kemungkinan Maksimum EM Pendugaan Model Nonlinear Jerapan Fosfor. Makalah Seminar Nasional Sains, FMIPA IPB. Bogor.
- Samson, A., M. Lavielle, and F. Mentre. 2000. The SAEM algorithm for group comparison tests in longitudinal data analysis based on non-linear mixed-effects model *Statist. Med.* 00:1–6.
- Sharma, M. and R. Agarwal. 2003. Maximum likelihood method for parameter estimation in non-linear models with below detection data. *Environmental and Ecological Statistics* 10:445-454.
- Sposito, G. 1982. On the use of the Langmuir equation in the interpretation of “adsorption” phenomena: II. The “two-surface” Langmuir equation. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 46:1147–1152.
- StatSoft. 2008. Nonlinear Estimation. StatSoft Electronic Textbook. StatSoft, Inc.