**Universidade de São Paulo
Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”**

**Ajuste de modelos de degradabilidade ruminal por meio da técnica de
produção de gases utilizando as metodologias clássica e bayesiana**

Gabriel Batalini de Souza

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

Piracicaba
2013

Gabriel Batalini de Souza
Bacharel em Estatística

**Ajuste de modelos de degradabilidade ruminal por meio da técnica de produção de gases
utilizando as metodologias clássica e bayesiana**

versão revisada de acordo com a resolução CoPGr 6018 de 2011

Orientadora:
Prof.^a Dr.^a **TACIANA VILLELA SAVIAN**

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

Piracicaba
2013

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

Souza, Gabriel Batalini de

Ajuste de modelos de degradabilidade ruminal por meio da técnica de produção de gases utilizando as metodologias clássica e bayesiana / Gabriel Batalini de Souza.- - versão revisada de acordo com a resolução CoPGr 6018 de 2011. - - Piracicaba, 2013. 93 p: il.

Dissertação (Mestrado) - - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", 2013.

1. Degradação ruminal 2. Inferência bayesiana 3. Modelos não lineares
4. R (Software estatístico) I. Título

CDD 636.2085
S267a

"Permitida a cópia total ou parcial deste documento, desde que citada a fonte – O autor"

Dedico esta dissertação à minha família.

AGRADECIMENTOS

À CAPES pela concessão da bolsa de estudos e a todos que, direta ou indiretamente, ajudaram-me a concluir mais esta etapa da vida; e principalmente, aos que estiveram próximos de mim nos momentos mais difíceis. Muito Obrigado!

SUMÁRIO

RESUMO	9
ABSTRACT	11
LISTA DE FIGURAS	13
LISTA DE TABELAS	15
1 INTRODUÇÃO.....	17
2 REFERÊNCIAL TEÓRICO.....	21
2.1 Mensurando a degradabilidade ruminal	21
2.2 Modelos de produção de gás	22
2.3 Modelos não lineares	23
2.4 Método de estimação por mínimos quadrados	27
2.5 Método de estimação por mínimos quadrados generalizados	28
2.6 Métodos numéricos iterativos.....	29
2.7 Critérios de seleção de modelo	32
2.7.1 Teste da Razão de Verossimilhança (TRV)	32
2.7.2 Quadrado Médio do Residual (<i>QMR</i>).....	33
2.7.3 Coeficiente de Determinação Ajustado (R^2_{aj})	33
2.7.4 Critério de Informação de Akaike (<i>AIC</i>)	34
2.8 Inferência Bayesiana.....	36
2.8.1 Teorema de Bayes	37
2.8.2 Distribuição <i>a priori</i>	38
2.8.3 Obtenção das distribuições <i>posterioris</i> condicionais completas	38
2.8.4 Método de Monte Carlo via Cadeias de Markov (MCMC)	39
2.8.4.1 Gibbs-Sampler (Amostrador de Gibbs).....	39
2.8.4.2 Metropolis-Hastings	40
2.8.5 Intervalo de máxima densidade <i>a posteriori</i> (HPD).....	41
2.8.6 Diagnósticos de convergência	41
2.8.7 Erro de Monte Carlo	43
3 MATERIAL E MÉTODOS.....	45
3.1 Origem dos dados estudados	45
3.2 Modelos empíricos	46
3.3 Procedimentos de ajuste por meio da abordagem clássica	48

3.4 Procedimentos de ajuste por meio da abordagem bayesiana	50
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO	59
4.1 Ajuste pela metodologia clássica	59
4.2 Ajuste pela metodologia bayesiana.....	71
5 CONSIDERAÇÕES FINAIS.....	77
REFERÊNCIAS	79
APÊNDICES.....	85

RESUMO

Ajuste de modelos de degradabilidade ruminal por meio da técnica de produção de gases utilizando as metodologias clássica e bayesiana

Dado o poder agropecuário nacional e sabendo que a pastagem tem papel fundamental na nutrição animal, torna-se primordial o estudo dos mecanismos da digestão ruminal das forragens, para um aproveitamento mais racional das pastagens pelos animais, propiciando uma fermentação ruminal ótima e possibilitando o balanceamento de rações de forma mais adequada. Esta abordagem é possível por meio dos modelos de degradação ruminal, que são classificados como modelos de regressão não lineares. Neste trabalho são abordadas as metodologias clássica e bayesiana para ajustar os modelos que descrevem a cinética de degradação ruminal por meio da técnica de produção de gases. Na abordagem clássica foram considerados os modelos não sigmoidal proposto por Orskov&McDonald (1979), o Logístico proposto por Schofield (1994) e o Gompertz proposto por Lavrencic (1997), considerando a necessidade de fatores autorregressivos de primeira e segunda ordem mediante o teste de razão de verossimilhança (TRV); os modelos foram avaliados por meio dos critérios de Akaike (AIC), coeficiente de determinação ajustado (R^2_{aj}) e quadrado médio residual (QMR). Em uma segunda etapa realizou-se o ajuste do modelo não sigmoidal sem fator autorregressivo utilizando a abordagem bayesiana, em que a condição de convergência das cadeias foi analisada por meio dos critérios de Geweke (1992), Heidelberger&Welch (1993), Raftery& Lewis (1992) e o Erro de Monte Carlo (EMC). Dentre os modelos utilizados, o que melhor se ajustou aos dados analisados foi o modelo não sigmoidal proposto por Orskov e McDonald (1979), sem o fator autorregressivo, obtendo estimativas condizentes com a realidade do fenômeno. Os resultados obtidos por meio da abordagem bayesiana também foram satisfatórios, mostrando que a técnica, apesar de pouco difundida em estudos de degradação ruminal é uma metodologia bastante viável e tem muito a agregar em estudos da área.

Palavras-chave: Degradação ruminal; Modelos não lineares; Inferência Bayesiana; *Software*R

ABSTRACT

Adjustment of ruminal degradability models applying the technique of gas production by using classical and Bayesian methodologies

Given the national agricultural power and knowing that grazing plays an important role in animal nutrition, it becomes primordial to study the mechanisms of ruminal digestion of forages, for a more rational use of pastures by the animals, providing an optimal rumen fermentation and allowing a more adequate and balanced feed. This approach is possible by using the rumen degradation models, which are classified as non-linear regression models. This essay discusses the classical and Bayesian methods to adjust the models that describe the kinetics of degradation by rumen gas production technique. In the classical approach, the “Non Sigmoidal models”, proposed by Orskov & McDonald (1979), the “Logistic”, proposed by Schofield (1994), and “Gompertz”, proposed by Lavrencic (1997), were considered, taking into account the need for autoregressive factors of first and second order, by the “likelihood ratio test” (TRV). These models were evaluated using the Akaike criteria (AIC), the coefficient of determination adjusted (R²_{aj}) and “the residual average square” (QMR). In the following stage, the adjustment of the non sigmoidal model without the autoregressive factor were performed, using the Bayesian approach. For these matters, the condition of the convergence of chains was analyzed using Geweke (1992), Heidelberger & Welch (1993), Raftery & Lewis (1992) and Monte Carlo error (EMC) criteria. Among the models used, the one that best settle to the data analyzed was the non sigmoidal model without the autoregressive factor, proposed by Orskov and McDonald (1979), obtaining consistent estimates with the reality of the phenomenon. The results obtained through the Bayesian approach were also satisfactory, showing that the technique, although less diffused in studies of rumen methodology, is very viable and has a lot to add in these area studies.

Keywords: Ruminal degradation; Non-linear models; Bayesian inference; *R Software*

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Relacionamento entre a diferença no escore de AIC e a probabilidade que cada modelo é verdadeiro. Fonte: Motulsky e Chistopoulos (2003).....	35
Figura 2 - Valores observados e curva média para os dados de produção de gases, em ml, em função do tempo de incubação, para cada tratamento estudado	59
Figura 3 - (a) gráfico do ajuste em relação aos valores médios e (b) gráfico do resíduo versus valor ajustado para o modelo não sigmoidal sem AR, considerando o tratamento SCE7%	65
Figura 4 - (a) gráfico do ajuste em relação aos valores médios e (b) gráfico do resíduo versus valor ajustado para o modelo Não sigmoidal sem AR, considerando o tratamento SCE14%	70
Figura 5 - Gráficos dos traços das cadeias geradas pelo método MCMC, do modelo não sigmoidal de Orskov & McDonald (1979)	73
Figura 6 - Gráficos das distribuições marginais a posteriori, para os parâmetros do modelo não sigmoidal de Orskov & McDonald (1979)	74
Figura 7 - Gráfico do ajuste do modelo não sigmoidal no tratamento SCE7%, por meio da metodologia bayesiana.....	76

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Estimativas e Intervalo de Confiança de 95% para os parâmetros do modelo não sigmoidal em relação ao tratamento SCE7%	60
Tabela 2 - Valor p e estatística L para comparação entre ajuste com e sem AR para o modelo não sigmoidal, considerando o tratamento SCE7%	60
Tabela 3 - Estimativas e Intervalo de Confiança de 95% para os parâmetros do modelo de Schofield em relação ao tratamento SCE7%	61
Tabela 4 - Valor p e estatística L para comparação entre ajuste com e sem AR para o modelo de Schofield, considerando o tratamento SCE7%	62
Tabela 5 - Estimativas e Intervalo de Confiança de 95% para os parâmetros do modelo Gompertz em relação ao tratamento SCE7%	63
Tabela 6 - Valor p e estatística L para comparação entre ajuste com e sem AR para o modelo Gompertz, considerando o tratamento SCE7%	63
Tabela 7 - Avaliadores dos modelos selecionados para o tratamento SCE7%	64
Tabela 8 - Estimativas e Intervalo de Confiança de 95% para os parâmetros do modelo não sigmoidal em relação ao tratamento SCE14%	66
Tabela 9 - Valor p e estatística L para comparação entre ajuste com e sem AR para o modelo não sigmoidal, considerando o tratamento SCE14%	66
Tabela 10 - Estimativas e Intervalo de Confiança de 95% para os parâmetros do modelo de Schofield em relação ao tratamento SCE14%	67
Tabela 11 - Valor p e estatística L para comparação entre ajuste com e sem AR para o modelo de Schofield, considerando o tratamento SCE14%	68
Tabela 12 - Estimativas e Intervalo de Confiança de 95% para os parâmetros do modelo Gompertz em relação ao tratamento SCE14%	68
Tabela 13 - Valor p e estatística L para comparação entre ajuste com e sem AR para o modelo Gompertz, considerando o tratamento SCE14%	69
Tabela 14 - Avaliadores dos modelos selecionados para o tratamento SCE14%	69
Tabela 15 – Estimativas para os parâmetros do modelo não sigmoidal em relação aos tratamentos SCE7% e SCE14%	71
Tabela 16 - Critérios de Geweke (valor p) e Raftery Lewis (fator de dependência - FD), utilizados na detecção da convergência das cadeias amostradas	72

Tabela 17 - Valores estimados da média e moda a posteriori, e intervalo de máxima densidade a posteriori (HPD) para os parâmetros do modelo de Orskov e McDonald no ajuste aos dados do tratamento SCE7%	75
Tabela 18 - Valores estimados para os parâmetros do modelo não sigmoidal de Orskov e McDonald, segundo as metodologias clássica e bayesiana, no ajuste aos dados do tratamento SCE7%	76

1 INTRODUÇÃO

As regiões tropicais caracterizam-se pelo grande número de espécies forrageiras com potencial para serem usadas na alimentação de ruminantes. Assim, torna-se necessário o melhor entendimento dos mecanismos da digestão ruminal das forragens e demais alimentos, para que se possa fazer o aproveitamento mais racional das pastagens pelos animais e ainda controlar o processo de eliminação de gases gerados por estes, a fim de diminuindo/controlar a emissão destes gases. O conhecimento da digestibilidade das forragens é importante para se alcançar ótima fermentação ruminal e adequado balanceamento de rações.

Em ruminantes, a fermentação de alimentos ingeridos tem como produto final ácidos graxos voláteis (AGVs), amônia, gases (dióxido de carbono e metano) e células microbianas. Para os ruminantes, os AGVs constituem a maior fonte de energia (65 a 75% da energia metabolizável ingerida). Entretanto, a produção de dióxido de carbono (CO₂) e metano (CH₄) pelas bactérias ruminais e intestinais (*Methanobrevibacter spp.* e *Methanococcus mobile*) corresponde a uma perda energética de até 13% em relação à energia do alimento ingerido. Em adição, segundo Gomide (1974) o gás metano, que é eliminado pelos ruminantes, por eructação, é um dos principais responsáveis pelo efeito estufa e pela destruição da camada de ozônio da atmosferasendo, portanto, uma preocupação para os pesquisadores em prol da conservação ambiental. Essa produção de gases no rúmen está intimamente relacionada com a produção de AGVs. A fermentação de carboidratos e proteínas, que resulta em produção de AGVs no rúmen, é acompanhada pela produção de hidrogênio e somente pequena parte deste hidrogênio é usada para crescimento microbiano sendo a maior parte utilizada por bactérias metanogênicas para produção de metano.

Os modelos estatísticos que descrevem a degradação ruminal são classificados como modelos de regressão não lineares e apresentam algumas peculiaridades quanto ao procedimento de ajuste. Na área zootécnica, diversos são os fenômenos descritos por modelos não lineares como, crescimento, produção de ovos e lactação. Esses fenômenos são amplamente discutidos na literatura por meio das abordagens clássicas e bayesiana encontrando-se excelentes resultados. Porém, não são encontrados artigos na área de nutrição animal, mais especificamente em estudos de cinética de degradação ruminal por meio da técnica de produção de gases, que são tratados com a abordagem bayesiana. Os atuais modelos que utilizam o método bayesiano têm tido grande sucesso, isto devido ao fato de que os conceitos probabilísticos envolvidos diminuem a dependência do ajuste do modelo em

relação ao número de dados utilizados e possibilitam a incorporação de conhecimento *a priori* com relação aos parâmetros por meio de experiências anteriores.

Existem vários métodos disponíveis para avaliar a qualidade dos alimentos, embora todos apresentem algumas limitações. Dentre eles está o método de produção de gás (MENKE et al., 1979; PELL e SCHOFIELD, 1993; THEODOROU et al., 1994), o qual quantifica a produção total de gás liberada a partir da fermentação de amostra em líquido ruminal tamponado. Dentre as técnicas disponíveis para coleta e estudo da degradação ruminal, as vantagens da utilização da técnica *in vitro* residem na rapidez, uniformidade físico-química do microambiente de fermentação e conveniência de não se manter animais fistulados. No entanto, esta técnica pode apresentar falhas por não se utilizar adequadamente o inóculo, os tampões e/ou os equipamentos que garantam as condições de pH, anaerobiose, número de microrganismos e nutrientes essenciais para os mesmos (VAN SOEST, 1994).

Em síntese, a intensificação de estudos metodológicos em relação aos modelos não lineares aplicados, não só na área zootécnica, bem como, nas demais áreas da Agronomia, possibilitam o desenvolvimento de pesquisas com maior embasamento teórico e com resultados mais precisos; conjuntamente, a metodologia de análise bayesiana é apresentada como uma técnica bastante viável, principalmente em situações em que a disponibilidade de material experimental é escassa, sendo às vezes inviável de se analisar com estatística clássica. Além disso, estes experimentos, com menor número de unidades experimentais, refletem experimentos mais econômicos sem perda de informação.

A proposta desta dissertação é utilizar a metodologia clássica para ajustar os modelos: não sigmoidal proposto por Orskov&McDonald (1979), o Logístico proposto por Schofield (1994) e o Gompertz proposto por Lavrencic (1997), que descrevem a cinética de degradação ruminal *in vitro*, bem como compará-los em relação à qualidade de ajuste. Em uma segunda etapa, o modelo com melhor ajuste, resultante da abordagem clássica, foi avaliado por meio da abordagem bayesiana. Com isso, têm-se os objetivos: (i) aprofundar os estudos sobre modelos não lineares utilizados na estimação dos parâmetros de degradação ruminal por meio das curvas de produção de gases; (ii) identificar, com o auxílio de testes estatísticos, o melhor modelo para a descrição do fenômeno; (iii) o estudo e compreensão da inferência bayesiana, como ferramenta para estimar os parâmetros do modelo melhor ajustado na abordagem clássica, uma vez que pouco se ouve falar da abordagem bayesiana na estimação paramétrica de modelos não lineares no estudo da degradabilidade ruminal.

Na seção 2 é feita uma revisão bibliográfica a respeito das técnicas de degradabilidade, sobre os modelos estatísticos utilizados nesse tipo de estudo, métodos de

estimação e algumas estatísticas utilizadas para validar a adequação dos modelos ajustados. Na seção 3 é descrita a origem dos dados utilizados na dissertação, bem como os procedimentos de ajuste clássico e bayesiano, utilizados para obter as estimativas dos parâmetros. Na seção 4 são apresentados os resultados das análises para as duas abordagens trabalhadas. E finalmente, na seção 5 são feitas as considerações finais sobre o trabalho realizado.

2 REFERÊNCIAL TEÓRICO

2.1 Mensurando a degradabilidade ruminal

Uma das importâncias de se conhecer a degradabilidade dos alimentos é formular dietas mais eficientes a serem fornecidas aos animais, e com isso atender às necessidades dos microrganismos ruminais que, por sua vez, são capazes de transformar compostos nitrogenados não proteicos em proteínas microbianas, proporcionando uma produção mais eficiente (VALADARES FILHO, 1994; AROEIRA et al., 1996). Desta forma, a necessidade de se conhecer a eficiência de utilização dos nutrientes por parte dos animais ruminantes, fez com que surgissem metodologias para avaliação de alimentos, conhecidos como provas biológicas.

A cinética de degradação dos alimentos pode ser determinada por meio dos produtos finais da fermentação (digestibilidade *in vivo*), ou pela mensuração do desaparecimento da massa de amostra incubada (gravimétricas). As técnicas gravimétricas podem ser realizadas através de incubações *in situ* ou *in vitro* (SCHOFIELD et al. 1994).

O principal local de absorção de nutrientes é o intestino delgado (TAMMINGA, 1983), por isso a técnica de digestibilidade *in vivo* consiste na avaliação do consumo e da produção fecal através de dois métodos: o convencional, com animais diretamente em gaiolas de metabolismo para coleta total de fezes; e pela estimativa da produção fecal com o uso de indicadores (BERCHIELLI et al., 2006). A aplicação deste método, digestibilidade *in vivo*, demanda de um considerável período de tempo no manejo dos animais em condições experimentais, resultando em custos elevados e ainda não possui a acuidade desejada.

A mensuração *in situ* é uma técnica confiável e muito utilizada na avaliação de alimentos. Seu principal objetivo é propiciar o conhecimento das taxas e extensões de degradação de seus nutrientes, fato relevante no momento da formulação das dietas (EZEQUIEL & GALATI, 2007). A acurácia dos resultados obtidos decorre do contato direto da amostra com o ambiente ruminal, apesar de não estar sujeita à mastigação e ruminação ou fluxo para o trato digestivo posterior. Um dos pontos favoráveis desta técnica é a redução de custos, a necessidade de pouco espaço físico e tempo para execução otimizado (BERCHIELLI et al., 2006; TEIXEIRA, 1997). A técnica *in situ* utiliza sacos de náilon ou outro material sintético, com porosidade e dimensões conhecidas, que são introduzidos no rúmen através de fístula (ORSKOV & MCDONALD, 1979; TEIXEIRA, 1997). Esta técnica

permite a avaliação rápida e simples da degradação do material contido nesses sacos em função do tempo de incubação neste segmento gástrico (ORSKOV, 1986).

E por fim, a incubação *in vitro* utiliza líquido ruminal ou enzimas digestivas visando reproduzir em laboratório as condições favoráveis à fermentação no rúmen-retículo, como o pH 6,9 aproximadamente, poder tampão, temperatura de 39°C, anaerobiose e presença de microrganismos (GOMIDE, 1974). Apresenta como aplicações e vantagens: a determinação da extensão de digestão e da taxa de digestão, que afeta a taxa de passagem e o consumo; e estimativa do consumo de forragem, que pode ser obtida pela produção fecal dividida pela fração não digestível do alimento (GOMIDE, 1974). Este método tem sido bastante utilizado e aperfeiçoado visando maior precisão com relação aos resultados *in vivo* e *in situ*. A grande vantagem dessa metodologia é a praticidade de se medir a produção de gases com o emprego de um transdutor e a pequena quantidade de material necessário para o ensaio (THEODOROU et al., 1994; MAURÍCIO et al., 1999).

A associação entre a fermentação de alimentos no rúmen e a produção de gases já é conhecida por mais de um século. Entretanto, apenas nos anos 40 é que foram desenvolvidas metodologias para a quantificação dos gases produzidos nessa fermentação. A técnica de produção de gases vem merecendo grande atenção por parte dos pesquisadores e entre suas vantagens estão o fato de possibilitar o estudo da cinética de fermentação, preservar a amostra a cada coleta de dados e permitir a detecção da contribuição das frações solúveis dos alimentos para a fermentação ruminal (GETACHEW et al., 1998).

2.2 Modelos de produção de gás

Um modelo estatístico nada mais é que uma equação, ou o conjunto de equações, que considera em sua estrutura um erro aleatório; e ainda, cuja resolução implica na predição de mudanças que podem ocorrer na realidade de determinado fenômeno. A utilização de modelos é fundamental no estudo da cinética de produção de gases, sendo que os modelos mais utilizados são os de Orskov&McDonald (1979); Mertens&Loften (1980); France et al. (1993); Beuvinck&Kogut (1993); logístico uni ou bicompartimental, proposto por Schofield et al. (1994); Groot et al. (1996); de Gompertz, proposto por Lavrencic et al. (1997); dentre outros.

Em pesquisas bibliográficas é possível encontrar trabalhos tais como o de Santos et al. (2003), que utilizaram o modelo proposto por Schofield na estimação da degradabilidade ruminal de diversos alimentos por meio da técnica de produção de gás em bovinos, ovinos e caprinos. Neste trabalho, os autores concluíram que a técnica se mostrou eficiente em estimar as taxas de digestão das frações insolúveis e, principalmente, das frações solúveis dos carboidratos totais, sendo este um dos entraves encontrados quando se utiliza o procedimento gravimétrico.

Maurício et al. (2003), utilizaram o modelo proposto por France et al. (1993) para estudar o potencial da técnica *in vitro* semiautomática de produção de gases para avaliação de silagens de sorgo. Os autores citam que as técnicas *in vitro*, para que tenham credibilidade, precisam ser validadas por meio de experimentos realizados *in vivo* e que, no experimento, comparando-se os dados obtidos no experimento *in vitro* (Produção Total de Gás) com os obtidos *in vivo*, estes se mostraram bastante próximos. Pereira et al. (2007), utilizaram os parâmetros de fermentação também obtidos pelo modelo proposto por France et al. (1993) na avaliação de espécies arbóreas pela técnica *in vitro* semiautomática de produção de gases.

Em suma, os modelos de degradação ruminal são classificados como modelos de regressão não linear e apresentam peculiaridades quanto ao procedimento de ajuste, sendo as propriedades dos estimadores dos parâmetros, tais como: não vício e variância mínima, válidas apenas assintoticamente. Em geral, em pequenas amostras essas propriedades são desconhecidas.

2.3 Modelos não lineares

Muito se vê na literatura atual o emprego da regressão como ferramenta principal no entendimento de fenômenos do cotidiano, sendo esta uma das técnicas mais usadas de estimação. Dentre as possibilidades existentes no estudo de modelos de regressão, destaca-se a utilização dos modelos não lineares, que são aplicados nas mais diversas áreas, tais como, econometria, agricultura, farmacologia, biologia, engenharia, educação, química e entre outras. Esse tipo de análise permite o estudo de relações mais complexas do que as lineares ou linearizáveis. Em muitos casos, tais modelos têm a sua forma funcional específica para o problema a ser tratado, relacionada a algum mecanismo (biológico, físico, etc.) inerente ao processo em questão. Na área zootécnica, diversos são os fenômenos descritos por modelos

não lineares, dos quais se pode citar: curvas de crescimento, curvas de produção de ovos e curvas de lactação.

Segundo Draper & Smith (1998), os modelos de regressão são classificados como:

a) Modelos lineares: aqueles que são lineares em relação aos parâmetros, ou seja,

$$\frac{\partial}{\partial \beta_i} g_j(x; \boldsymbol{\beta}) = h(x)$$

para $i = 1, 2, \dots, p$ e $j = 1, 2, \dots, n$; em que p é o número de parâmetros do modelo e n é o número de observações. Como exemplo, considere o seguinte modelo:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 + \varepsilon$$

em que ε é o erro de caráter aditivo; e β_0, β_1 e β_2 são os parâmetros a serem estimados. Calculando as derivadas parciais para esse modelo em relação aos parâmetros, tem-se:

$$\frac{\partial y}{\partial \beta_0} = 1, \quad \frac{\partial y}{\partial \beta_1} = x \quad \text{e} \quad \frac{\partial y}{\partial \beta_2} = x^2$$

Observa-se que nenhuma delas depende de algum parâmetro do modelo, portanto, o modelo é dito linear.

b) Modelos não lineares: são modelos em que pelo menos uma das derivadas parciais depende de algum parâmetro do modelo. Seja o modelo,

$$y = \beta_1 x + \beta_2^x + \varepsilon,$$

em que β_1 e β_2 são os parâmetros a serem estimados. Os cálculos das derivadas parciais ficam,

$$\frac{\partial y}{\partial \beta_1} = x \quad \text{e} \quad \frac{\partial y}{\partial \beta_2} = x \beta_2^{x-1}$$

Logo, a segunda delas depende do parâmetro β_2 , indicando que o modelo em questão é não linear.

c) **Modelos linearizáveis:** são modelos não lineares que, por meio de alguma transformação, se tornaram lineares. Tomando o modelo,

$$y = \beta^x \varepsilon,$$

em que: β é o parâmetro a ser estimado e ε é o erro de caráter multiplicativo. Utilizando a transformação logarítmica, ou seja, aplicando o logaritmo em ambos os lados da equação, têm-se:

$$\log(y) = \log(\beta^x \varepsilon)$$

$$\log(y) = x \log(\beta) + \log(\varepsilon).$$

Fazendo, $z = \log(y)$; $c = \log(\beta)$; $e = \log(\varepsilon)$, a equação pode ser reescrita como $z = cx + e$, sendo linear, uma vez que a derivada parcial não é função do parâmetro.

Os modelos não lineares são utilizados em situações em que não é desejável, ou mesmo possível, descrever um fenômeno por meio de um modelo de regressão linear. Geralmente, fornecem um bom ajuste necessitando de menos parâmetros, parâmetros estes, que na maioria dos casos possuem fácil interpretação prática. Os modelos não lineares podem ser escritos da seguinte forma:

$$y_j = f(x_j; \boldsymbol{\gamma}) + \varepsilon_j$$

em que: $f(x_j; \boldsymbol{\gamma})$ é uma função não linear; $\boldsymbol{\gamma}$ é o vetor de parâmetros do modelo e os erros (ε_j) têm média zero, variância constante, e não são correlacionados, assumindo uma distribuição normal.

Alguns exemplos de modelos não lineares presentes na literatura e utilizados no estudo de produção de gás são, o modelo não sigmoidal proposto Orskov&McDonald (1979), expresso como:

$$y_j = V\{1 - \exp[-k(x_j - l)]\} + \varepsilon_j,$$

que se trata de um modelo exponencial com três parâmetros que é utilizado com frequência na avaliação da degradação dos alimentos pela técnica *in situ* (ORSKOV & MCDONALD, 1979). Este modelo supõe que a taxa de produção de gás depende unicamente do substrato disponível para fermentação uma vez alcançado o tempo de colonização das bactérias. Sua parametrização é a seguinte: y_j é a produção acumulada de gás (ml), V é o potencial máximo de produção de gás (ml), k é uma taxa específica de produção de gases pela degradação da fração potencialmente degradável (ml/hora), x_j é o tempo de incubação da amostra (hora) e l representam o tempo de colonização das bactérias (hora).

O modelo proposto por France et al. (1993), dado por:

$$y_j = V\{1 - \exp[-b(x_j - l) - c(\sqrt{x_j} - \sqrt{l})]\} + \varepsilon_j,$$

sendo este um modelo com quatro parâmetros, muito semelhante ao modelo exponencial simples citado anteriormente. Este modelo conserva o conceito de tempo de colonização e a taxa de degradação varia com o tempo de incubação. Sua parametrização segue as nomenclaturas apresentada anteriormente além de c e b representarem taxas fracionais constantes, em que c ($\text{h}^{-0.5}$) e b (h^{-1}).

O modelo Logístico proposto por Schofield et al. (1994), que apresenta a seguinte fórmula:

$$y_j = \frac{V}{1 + \exp [2 - 4k(x_j - l)]} + \varepsilon_j,$$

um modelo também com três parâmetros que supõe que a produção de gás é proporcional ao tamanho da população microbiana e ao substrato digestível, seguindo a mesma parametrização apresentada anteriormente.

E por fim, o modelo Gompertz proposto por Lavrencic et al. (1997), dado por:

$$y_j = V \exp[-a \exp(-kx_j)] + \varepsilon_j,$$

que é um modelo com três parâmetros, o qual supõe que a taxa de produção de gás é proporcional à atividade microbiana, mas a proporcionalidade diminui com o tempo de incubação, o que pode ser interpretado como a perda de eficiência na taxa de fermentação com o tempo. Também seguindo a parametrização apresentada e tendo α como um fator de eficiência microbiana.

Nos modelos não lineares, semelhante ao caso linear, o processo de estimação de um parâmetro envolve a minimização da soma de quadrados dos erros, obtendo-se o sistema de equações normais não lineares (SEN). Entretanto, não é possível encontrar uma solução analítica para os estimadores, sendo necessária a utilização de métodos numéricos iterativos para obter as estimativas dos parâmetros. Dentre os métodos disponíveis, é possível citar o Método de Newton, o Método de Gauss-Newton, o Algoritmo EM e o Método de Newton-Raphson.

2.4 Método de estimação por mínimos quadrados

O método dos mínimos quadrados, também conhecido como mínimos quadrados ordinários é uma técnica de otimização matemática que objetiva encontrar o melhor ajuste para um conjunto de dados, por meio da minimização da soma dos quadrados dos resíduos. Gallant (1987) afirma que o método dos mínimos quadrados é utilizado na estimação dos parâmetros em modelos não lineares, da mesma forma que em modelos lineares. Seja uma equação de regressão não linear dada por:

$$y_j = f(x_j; \boldsymbol{\gamma}) + \varepsilon_j$$

para $j = 1, 2, \dots, n$.

Assumindo as premissas de que $E(\varepsilon_j) = 0$, $Var(\varepsilon_j) = \sigma^2$ e $\varepsilon_j \sim N(0; \sigma^2)$, esta função pode ser reescrita na forma matricial,

$$\mathbf{y} = \mathbf{f}(\boldsymbol{\gamma}) + \mathbf{e}$$

$$\text{Em que: } \mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}; \quad \mathbf{f}(\boldsymbol{\gamma}) = \begin{bmatrix} f(x_1; \boldsymbol{\gamma}) \\ f(x_2; \boldsymbol{\gamma}) \\ \vdots \\ f(x_n; \boldsymbol{\gamma}) \end{bmatrix} \text{ e } \mathbf{e} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix}.$$

Assim, a estimativa para $\boldsymbol{\gamma}$ é dada pelo vetor $\hat{\boldsymbol{\gamma}}$ que minimiza a soma de quadrados do resíduo, denotado por:

$$S(\hat{\boldsymbol{\gamma}}) = \sum_{j=1}^n [y_j - f(x_j; \hat{\boldsymbol{\gamma}})]^2$$

Escrevendo $S(\hat{\boldsymbol{\gamma}})$ na forma matricial, tem-se:

$$S(\hat{\boldsymbol{\gamma}}) = [\mathbf{y} - \mathbf{f}(\boldsymbol{\gamma})]'[\mathbf{y} - \mathbf{f}(\boldsymbol{\gamma})]$$

Derivando $S(\hat{\boldsymbol{\gamma}})$ em relação a $\boldsymbol{\gamma}$ e igualando a zero obtém-se o sistema de equações normais (SEN) não lineares. Como dito anteriormente, não é possível obter uma solução explícita para os parâmetros, desta forma, as estimativas dos parâmetros devem ser obtidas por meio da utilização de métodos iterativos.

2.5 Método de estimação por mínimos quadrados generalizados

Conforme apresentado por Hoffmann e Vieira (1998), o método dos mínimos quadrados generalizados é mais eficiente do que o método dos mínimos quadrados ordinários, na presença de heterogeneidade de variâncias e autocorrelação residual.

Para o modelo linear matricial,

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{e}$$

Supondo que $\mathbf{e} \sim N(0; W\sigma^2)$ em que W é uma matriz simétrica, positiva definida, que representa as variâncias e covariâncias dos erros. Admitindo-se que os erros são autocorrelacionados na forma de um processo autorregressivo estacionário de primeira ordem $AR(1)$,

$$\varepsilon_j = \phi_1 \varepsilon_{j-1} + \xi_j$$

em que: ϕ_1 é o parâmetro autorregressivo de ordem 1, j é o tempo (horas, dias, semanas e etc.), e ainda assumindo $E(\xi_j) = 0, E(\xi_j^2) = \sigma_\xi^2$ e $E(\xi_j, \xi_{j-h}) = 0$ se $h \neq 0$. O modelo ε_j será estacionário se $-1 < \phi_1 < 1$ para $j = 1, 2, \dots, n$.

Segundo Draper e Smith (1998), o vetor de estimativas dos parâmetros é dado por:

$$\hat{\beta} = (X'W^{-1}X)^{-1}X'W^{-1}\mathbf{y}, \text{ em que}$$

$$W = \frac{\sigma_\xi^2}{1 - \phi_1^2} \begin{bmatrix} 1 & \phi_1 & \phi_1^2 & \dots & \phi_1^{n-1} \\ \phi_1 & 1 & \phi_1 & \dots & \phi_1^{n-2} \\ \phi_1^2 & \phi_1 & 1 & \dots & \phi_1^{n-3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_1^{n-1} & \phi_1^{n-2} & \phi_1^{n-3} & \dots & 1 \end{bmatrix}$$

Outros modelos possíveis para o erro são o de médias móveis (MA), o modelo misto, autorregressivo e médias móveis (ARMA).

2.6 Métodos numéricos iterativos

Todo conjunto de métodos/ferramentas utilizadas para se obter o resultado de problemas matemáticos de forma aproximada, quando o mesmo não apresenta solução analítica, é denominado Método Numérico.

Um método numérico iterativo caracteriza-se pela repetição de uma determinada operação. Sua ideia principal é repetir uma série de vezes um determinado cálculo, obtendo a cada iteração um resultado mais acurado que o anterior, utilizando como base para o cálculo futuro o valor atual, e repetir este processo até que um critério de parada estabelecido esteja satisfeito.

Os processos iterativos apresentam alguns aspectos fundamentais que devem ser obedecidos para que a metodologia aplicada apresente resultados satisfatórios. Dentre eles

é válido destacar a importância da estimativa inicial, pois ela contribui para o resultado final do processo, garantindo que o valor apresentado seja algo condizente e ainda possibilitando uma conversão mais rápida, algumas alternativas para a determinação desses valores podem ser encontradas em Gallant (1987) e Draper & Smith (1998). Outro fator de suma importância é a convergência do processo. É muito importante estar atento e verificar se há convergência do método utilizado, pois em conjunto com a estimativa inicial, ela possibilita afirmar que um processo de cálculos foi concluído e ainda permite inferir sobre a qualidade do processo, tendo o auxílio do critério de parada; esse último, sendo outro ponto fundamental no processo iterativo, o critério de parada está diretamente ligado à precisão que se deseja obter na solução. Existem na literatura diversos critérios que podem ser levados em consideração para estabelecer o critério de parada; sendo assim, ele tem papel fundamental no resultado do processo e permite em conjunto aos demais fatores, obter valores plausíveis para o problema em questão.

Dentre os métodos numéricos iterativos existentes, um bastante difundido na literatura é o método de Gauss-Newton. O primeiro passo do método Gauss-Newton consiste em atribuir valores iniciais para o vetor de parâmetros denotado por: $\boldsymbol{\gamma}^0 = (\gamma_1^0, \gamma_2^0, \dots, \gamma_p^0)$. Esses valores iniciais podem ser obtidos de estudos anteriores, conhecimentos teóricos ou por uma grade de valores que minimize a soma de quadrados residuais.

Após atribuir o valor inicial, aproxima-se a função esperada $f(X, \boldsymbol{\gamma})$ para os n casos, por termos lineares da expansão em série de Taylor, em uma vizinhança de $\boldsymbol{\gamma}^0 \in \Theta$, da seguinte forma:

$$f(X, \boldsymbol{\gamma}) \approx f(X, \boldsymbol{\gamma}^0) + \mathbf{Z}^0(\boldsymbol{\gamma} - \boldsymbol{\gamma}^0)$$

$$f(X, \boldsymbol{\gamma}) \approx f(X, \boldsymbol{\gamma}^0) + \mathbf{Z}^0\boldsymbol{\gamma} - \mathbf{Z}^0\boldsymbol{\gamma}^0$$

em que, $\mathbf{Z}^0$ é a matriz de derivadas parciais, $\frac{\partial f(X, \boldsymbol{\gamma}^0)}{\partial \boldsymbol{\gamma}^0}$, do modelo avaliada para $\boldsymbol{\gamma} = \boldsymbol{\gamma}^0$. Dessa

forma, o modelo não linear $\mathbf{y} = f(X, \boldsymbol{\gamma}) + \mathbf{e}$ pode ser reescrito como:

$$\mathbf{y} = f(X, \boldsymbol{\gamma}) + \mathbf{e}$$

$$\mathbf{y} = f(X, \boldsymbol{\gamma}^0) + \mathbf{Z}^0(\boldsymbol{\gamma} - \boldsymbol{\gamma}^0) + \mathbf{e}$$

Passando o termo $f(X, \gamma^0)$ para o lado esquerdo da expressão e denotando a diferença formada, $y - f(X, \gamma^0)$, por y^0 , e também, a diferença $\gamma - \gamma^0$ por θ^0 , o modelo pode ser reescrito como:

$$y^0 = Z^0 \theta^0 + e \quad (1)$$

Com isso, chega-se em uma aproximação do modelo não linear por um modelo de regressão linear. Cada coeficiente de regressão θ^0 representa a diferença entre os verdadeiros parâmetros e os valores iniciais atribuídos a eles. Assim, os coeficientes de regressão representam uma correção que deve ser feita nos coeficientes de regressão iniciais. O propósito de ajustar o modelo de regressão linear, como apresentado em (1) é estimar os coeficientes de regressão θ^0 pelo método de mínimos quadrados ordinários e usar essas estimativas para corrigir as estimativas iniciais dos parâmetros de regressão como se segue:

$$\hat{\theta}^0 = (Z^{0'} Z^0)^{-1} Z^{0'} y^0$$

Ao final da primeira iteração, a atualização do vetor de estimativas dos parâmetros é dada por: $\gamma^1 = \gamma^0 + \hat{\theta}^0$. Se o algoritmo de Gauss-Newton estiver na direção correta a soma de quadrados residual considerando γ^1 , denotada por $S(\gamma^1)$, deverá ser menor do que a soma de quadrados residual considerando γ^0 , denotada por $S(\gamma^0)$, pois os coeficientes de regressão no passo 1 deverão ser melhores.

O método de Gauss-Newton requer a repetição do procedimento, como foi descrito, com γ^1 no lugar dos valores iniciais resultando em um novo conjunto de estimativas corrigidas, representadas por γ^2 e obtendo uma nova soma de quadrados residual, denotada por $S(\gamma^2)$.

Em geral, diversos critérios de parada podem ser estabelecidos para o algoritmo de Gauss-Newton, dentre eles: Efetuar um número pré-determinado de iterações no processo; ou ainda quando a modificação $\gamma^m \rightarrow \gamma^{m+1}$ (em que m é a m -ésima iteração) for “pequena” – inferior a algum limiar estabelecido; quando a modificação na soma de quadrados residual for desprezível – abaixo de algum limiar estabelecido; ou mesmo verificar uma “quase ortogonalidade” entre o vetor de resíduos e as colunas da matriz de derivadas parciais Z^m – abaixo de algum limiar.

Mesmo estabelecendo esses critérios de parada, a convergência não é garantida e uma advertência que deve ser feita a respeito do método de Gauss-Newton é que a solução

inicial γ^0 pode estar demasiadamente distante do valor ótimo, caso haja uma má escolha dos valores iniciais, pode resultar num número muito grande de iterações até a convergência; podendo convergir num mínimo local, ou mesmo, não convergir. Entretanto, bons valores iniciais podem levar a um mínimo global, mesmo quando existir vários mínimos locais.

2.7 Critérios de seleção de modelo

2.7.1 Teste da Razão de Verossimilhança (TRV)

O Teste da Razão de Verossimilhança (TRV) é apropriado para comparar dois modelos, desde que um dos modelos seja um caso especial do outro (modelos aninhados). Entende-se por modelos aninhados, quando o espaço paramétrico de um modelo mais simples é um subespaço do modelo mais completo, dito modelo de referência. O TRV é um teste baseado na comparação dos valores da função de máxima verossimilhança (MV).

A hipótese a ser testada pelo TRV é:

H_0 : O modelo com menos parâmetros é mais adequado;

H_1 : O modelo com mais parâmetros (referência) é mais adequado.

A estatística do teste é dada por:

$$L = 2 \log \left(\frac{L_1}{L_2} \right) = -2 [\log L_2 - \log L_1]$$

em que L_1 e L_2 representam a verossimilhança do modelo com menos parâmetros e do modelo referência, respectivamente. Sob certas condições de regularidade, L segue assintoticamente χ_r^2 , sendo r o número de graus de liberdade obtido subtraindo o número de parâmetros do modelo com menos parâmetros do número de parâmetros do modelo de referência.

2.7.2 Quadrado Médio do Residual (QMR)

Um dos indicadores de qualidade de ajuste e que está diretamente ligado à variância do erro é dado pelo Quadrado Médio Residual (QMR). Por meio do QMR é possível analisar como se comporta o erro do ajuste sendo que, quanto maior seu valor maior é a variabilidade dos erros e com isso se pode questionar a qualidade do modelo utilizado. A fórmula do QMR é dada pela seguinte expressão:

$$QMR = \frac{SQR}{n - p}$$

em que: SQR é a soma de quadrado residual, n o número de observações e p o número de parâmetros do modelo;

2.7.3 Coeficiente de Determinação Ajustado (R^2_{aj})

O Coeficiente de Determinação é uma estatística largamente difundida e utilizada atualmente; porém, segundo Draper & Smith (1998), ele não faz ponderações sobre o número de parâmetros utilizados no modelo. Com isso, uma vez que se sabe que o coeficiente de determinação sofre influência direta devido à quantidade de parâmetros existentes no modelo, uma forma de contornar o possível viés, na comparação entre modelos com número de parâmetros diferente, é utilizando o Coeficiente de Determinação Ajustado (R^2_{aj}), que considera uma ponderação em relação ao número de parâmetros do modelo. Sua expressão é dada por:

$$R^2_{aj} = R^2 - \left[\frac{1 - R^2}{n - p} \right]$$

em que: R^2 é o coeficiente de determinação, n é o número de observações e p é o número de parâmetros do modelo.

É importante ressaltar que o R^2_{aj} não possui a mesma interpretação do R^2 , que explica o quanto da variação dos dados foi explicado pelo modelo; ele perde esta interpretação, sendo útil apenas para a seleção de modelos.

2.7.4 Critério de Informação de Akaike (AIC)

O critério de informação de Akaike, do inglês *Akaike Information Criterion* (AIC), foi criado no ano de 1974. Este critério tem como base a teoria da informação, a teoria da máxima verossimilhança e o conceito de entropia de informação. Não sendo ele dependente de testes de hipóteses, valor-p e do conceito de significância estatística. Sua estatística permite determinar qual o modelo é mais provável que esteja correto e quantificar quão mais provável ele o é. Sua expressão é dada da seguinte forma:

$$AIC = n \ln \left(\frac{SQR}{n} \right) + 2(p + 1)$$

em que: n é o número de observações, p é o número de parâmetros do ajuste pela regressão e SQR é a soma do quadrado dos resíduos.

Entretanto, se os valores de AIC estão muito próximos, não há evidência para a escolha do melhor modelo. Assim, faz sentido a seguinte pergunta: Dada a proximidade de AIC, quão mais provável escolher um modelo a outro?

Com isso, no intuito de estabelecer o quão um modelo é melhor quando comparado a outro, Motulsky e Chistopoulos (2003) desenvolveram uma função de probabilidade que permite quantificar essa diferença. Seja A um modelo mais simples e B um modelo mais completo (com mais parâmetros). A diferença de AIC é definida por:

$$\Delta AIC = AIC_B - AIC_A = n \ln \left(\frac{SQR_B}{SQR_A} \right) + 2(K_B - K_A)$$

Observe que:

- Se o resultado final for negativo, significa que a diferença na soma de quadrado residual é maior que o esperado com base na diferença do número de parâmetros, de modo a concluir que o modelo B é mais provável;
- Se a diferença é positiva, então a mudança na soma de quadrado não é tão grande como o esperado a partir da alteração no número de parâmetros, logo, os dados são mais susceptíveis de ter vindo do modelo A.

Desta maneira, a probabilidade de que se tenha escolhido o modelo correto pode ser calculada por:

$$p(\text{modelo correto}) = \frac{e^{-0,5\Delta AIC}}{1 + e^{-0,5\Delta AIC}}$$

em que: ΔAIC é a diferença entre os escores AIC dos modelos B e A. Essa probabilidade é também chamada de peso de Akaike. Portanto, dois modelos podem ser comparados com a taxa de probabilidade, que indica o quão mais propenso a estar correto um modelo está em relação ao outro. A Figura 1 mostra a relação entre a diferença no escore de AIC e a probabilidade que cada modelo ser o correto.

Figura 1 - Relacionamento entre a diferença no escore de AIC e a probabilidade que cada modelo é verdadeiro.

Fonte: Motulsky e Chistopoulos (2003)

Por exemplo:

- Se os dois valores AIC são os mesmos, então a diferença é zero, e cada modelo tem a mesma probabilidade de ser o correto. O gráfico mostra que há uma chance de 50% do modelo A ser o correto e 50% de chance do modelo B ser o correto;
- Se a diferença é de 2, o modelo A tem menor pontuação, então o modelo A tem uma probabilidade de 73% de ser o correto, e uma chance de 27% do modelo B ser o correto. Outra forma de interpretar isto é dizer que: o modelo A tem 73/27 ou 2,7 vezes mais probabilidade de estar correto do que o modelo B;

- Sea diferença entre os escores AIC_6 , então o modelo A tem 95% de chance de estar correto, ou seja, tem-se 19(95/5) vezes mais chance de ser o correto do que o modelo B.

2.8 Inferência Bayesiana

Muito se fala sobre a aplicação da inferência bayesiana no panorama estatístico atual e, sobretudo, da importância já consolidada que esta técnica agregou à análise estatística em si. Voltando aos primórdios da inferência bayesiana, sua teoria foi desenvolvida pelo Reverendo Thomas Bayes em meados do século XVIII, o qual propôs uma metodologia subjetiva de probabilidade, baseada principalmente, em um conhecimento *a priori* em relação às incertezas envolvidas no estudo. Na década de 30, a análise bayesiana ressurgiu com estudos teóricos, como o de Jeffreys (1939), que reagindo contra a predominante posição frequentista conseguiu ressuscitar o bayesianismo, apresentando-lhe aplicações lógicas para a resolução de problemas estatísticos em diversas áreas da ciência. No entanto, estes estudos exigiam resoluções de integrais complexas, o que fez com que os métodos bayesianos se sujeitassem a mais algumas décadas de adormecimento. Foi somente na década de 90 que o problema dos cálculos integrais foi solucionado de maneira alternativa com o trabalho de Gelfand & Smith (1990), que exploraram um recurso de simulação dinâmica, o algoritmo Gibbs Sampler, elaborado por Geman & Geman (1984), o qual faz uso da teoria das Cadeias de Markov. Logo, o paradigma bayesiano se tornou uma alternativa bastante atraente frente à metodologia clássica, adquirindo respeitabilidade na comunidade científica devido à sua grande versatilidade na resolução de problemas estatísticos, o que vem atraindo a atenção de pesquisadores em diversas áreas de aplicação, se pondo assim na fronteira do conhecimento.

A metodologia bayesiana é uma combinação entre as informações referentes aos dados amostrais (função de verossimilhança) e o conhecimento prévio a respeito dos parâmetros (distribuição *a priori*); compondo desta forma, o cálculo da densidade *a posteriori* dos parâmetros. A utilização de informação *a priori* em inferência bayesiana requer a especificação de uma distribuição *a priori*, devendo esta representar probabilisticamente o conhecimento que se tem sobre o parâmetro antes da realização do experimento. Gelman et al. (1997) relatam que a característica essencial da inferência bayesiana está no uso explícito de probabilidades para quantificar as incertezas que se tem sobre o parâmetro. Esta metodologia torna-se útil em situações que se utilizam experimentos pequenos, com poucas repetições, portanto mais econômicos, que seriam inviáveis de se analisar com a estatística clássica.

2.8.1 Teorema de Bayes

Segundo Paulino et al. (2003), a ideia de definir probabilidade como grau de confiança em uma dada proposição que não se sabia ser verdadeira ou falsa foi introduzida por Bernoulli (1713). A ideia de coerência em um sistema de graus de credibilidade parece ter sido introduzida por Ramsey (1926).

O teorema de Bayes, apresentado na expressão (2), é uma proposição sobre probabilidades condicionadas, dado por:

$$P(A_i|B) = \frac{P(B|A_i)P(A_i)}{\sum_i P(B|A_i)P(A_i)} \quad (2)$$

O teorema de Bayes é um dos resultados da matemática que se propõem a caracterizar a aprendizagem com a experiência, isto é, modificar a atitude inicial em relação aos “antecedentes”, depois de ter a informação adicional de que certo evento se realizou (PAULINO et al., 2003).

A informação de que dispomos sobre um parâmetro (θ), resumida probabilisticamente por meio da distribuição *a priori*, $p(\theta)$, pode ser aumentada observando-se uma variável aleatória Y relacionada com θ . Esta relação é definida pela distribuição amostral $p(y|\theta)$. Para um valor fixo de x , a função $L(\theta; y) = p(y|\theta)$ fornece a plausibilidade ou a verossimilhança de cada um dos possíveis valores de θ . O teorema de Bayes é a regra de atualização utilizada para quantificar o aumento de informação com respeito a θ , após observar $Y = y$, dada pela seguinte expressão (EHLERS, 2005):

$$p(\theta|y) = \frac{p(y|\theta)p(\theta)}{p(y)} = \frac{p(y|\theta)p(\theta)}{\int p(\theta; y)d\theta}$$

Note que $\frac{1}{p(y)}$, que não depende de θ , funciona como uma constante normalizadora de $p(\theta|y)$. Assim, as duas fontes de informação, distribuição *a priori* de θ , $p(\theta)$, e função de verossimilhança, $L(\theta; y) = p(y|\theta)$, são combinadas, levando à distribuição *a posteriori* de θ , $p(\theta|y)$. Uma forma usual do teorema de Bayes é dada por:

$$p(\theta|y) \propto L(\theta; y)p(\theta),$$

em que: $\propto$ é o símbolo de proporcionalidade.

2.8.2 Distribuição *a priori*

A principal função da distribuição *a priori* é modelar a incerteza relativa ao parâmetro θ antes da observação dos dados, sendo assim utilizada para representar o conhecimento prévio sobre a quantidade desconhecida θ antes dos dados serem obtidos (BOX; TIAO, 1992). A informação *a priori* que se pretende incorporar na análise pode ser fornecida por um especialista ou pesquisador, tendo sua origem de estudos prévios ou dados históricos do problema (PAULINO et al., 2003).

A distribuição *a priori* pode variar de pesquisador para pesquisador, possibilitando a escolha entre utilizar uma *priori* informativa, refletindo algum conhecimento prévio sobre o parâmetro desconhecido; ou uma *priori* não informativa, incumbindo aos dados do experimento o papel de “mostrarem” informações sobre θ . Segundo Box & Tiao (1992), a *priori* não informativa não representa, necessariamente, o desconhecimento do pesquisador sobre o experimento, sendo utilizada também de forma a viabilizar a inferência *a posteriori*. A primeira ideia de “não informação” que se pode ter é pensar em todos os possíveis valores do parâmetro θ como igualmente prováveis, isto é, com uma distribuição *a priori* uniforme (PAULINO et al., 2003).

2.8.3 Obtenção das distribuições *posteriores* condicionais completas

De acordo com Pereira (2006), cada uma das componentes θ_i pode ser uni ou multidimensional e tem sua distribuição condicional completa dada pela distribuição da i -ésima componente de θ condicionada a todas as demais componentes. Sua expressão pode ser obtida a partir da distribuição conjunta da seguinte forma:

$$p(\theta_i | \theta_{-i}) = \frac{p(\theta)}{\int p(\theta) d\theta_i}$$

em que $\theta_{-i} = (\theta_1, \dots, \theta_{i-1}, \theta_{i+1}, \dots, \theta_p)$, $\theta = (\theta_1, \dots, \theta_i, \dots, \theta_p)$ e $p(\theta)$ é a distribuição conjunta, sendo p o número de parâmetros do modelo. Com isso, para obter a distribuição condicional completa de θ_i , basta integrar a distribuição *a posteriori* conjunta em relação a todos os outros elementos que o constituem (ROSA, 1998).

Muitas vezes é impossível obter expressões explícitas para as integrais envolvidas na obtenção dessa distribuição, e a inferência exata somente será possível se estas integrais puderem ser calculadas analiticamente, caso contrário, os métodos aproximados deverão ser utilizados.

2.8.4 Método de Monte Carlo via Cadeias de Markov (MCMC)

Segundo Gamerman & Lopes (2006), uma Cadeia de Markov é um processo estocástico no qual o próximo estado da cadeia, ϕ_{t+1} , depende somente do estado atual, ϕ_t e dos dados, não havendo a necessidade da história passada da cadeia. O método de Monte Carlo via Cadeias de Markov (MCMC) consiste de simulações iterativas, baseadas em Cadeias de Markov, que tem por objetivo obter uma amostra da distribuição conjunta dos parâmetros de interesse. Quando se trabalha com MCMC dois pontos importantes a serem levados em consideração são o *burn-in* e o *thin*. As primeiras iterações sofrem influência do estado inicial, ϕ_t , desta forma o ideal é descartá-las, este processo é conhecido como aquecimento da cadeia (*burn-in*). Outro ponto a ser considerado é a dependência entre as observações subsequentes da cadeia e, para diminuir a alta correlação existente entre os valores amostrais, deve-se considerar um espaçamento entre as iterações armazenadas, a que se dá o nome de *thinning* (*thin*).

Os métodos MCMC mais utilizados são o amostrador de Gibbs e o algoritmo de Metropolis-Hastings.

2.8.4.1 Gibbs-Sampler (Amostrador de Gibbs)

O amostrador de Gibbs, inicialmente utilizado por Geman & Geman (1984), é um esquema iterativo de amostragem de uma Cadeia de Markov, cujo núcleo de transição é formado pelas distribuições condicionais completas, sendo esta uma técnica utilizada para

gerar valores aleatórios para a distribuição marginal de um parâmetro, uma vez que a distribuição condicional completa represente o núcleo de uma distribuição conhecida.

Por meio da amostragem Gibbs, é possível gerar amostras de uma distribuição conjunta *a posteriori* $p(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_p | \mathbf{y})$ a partir das distribuições de cada parâmetro condicionada aos demais parâmetros do modelo, que são denominadas distribuições condicionais completas *a posteriori* $p(\theta_i | \theta_1, \theta_2, \dots, \theta_p, \mathbf{y})$, desde que essas distribuições condicionais completas possuam formas conhecidas na literatura (CASELLA & GEORGE, 1992).

Gamerman e Lopes (2006) apresentam o procedimento para execução do amostrador de Gibbs da seguinte forma:

- (1) Definem-se os valores iniciais $\theta^{(0)} = (\theta_1^{(0)}, \theta_2^{(0)}, \dots, \theta_p^{(0)})$ para os parâmetros;
- (2) Amostra-se iterativamente $\theta_1^{(1)}$ de $p(\theta_1 | \theta_2^{(0)}, \theta_3^{(0)}, \dots, \theta_p^{(0)}, \mathbf{y})$, $\theta_2^{(1)}$ de $p(\theta_2 | \theta_1^{(1)}, \theta_3^{(0)}, \dots, \theta_p^{(0)}, \mathbf{y})$, e assim por diante até $\theta_p^{(1)}$ de $p(\theta_p | \theta_1^{(1)}, \theta_3^{(1)}, \dots, \theta_{p-1}^{(1)}, \mathbf{y})$, completando uma iteração do esquema e uma transição de $\theta^{(0)}$ para $\theta^{(1)} = (\theta_1^{(1)}, \theta_2^{(1)}, \dots, \theta_p^{(1)})$;
- (3) Repete-se o passo (2) m vezes (após um grande número de iterações), até obter $\theta^{(m)} = (\theta_1^{(m)}, \theta_2^{(m)}, \dots, \theta_p^{(m)})$.

Desta forma, o conjunto dos m valores amostrados representa amostras da distribuição conjunta *a posteriori* de $\boldsymbol{\theta}$. A partir dessa amostra, $\theta^{(m)}$, obtêm-se as estimativas pontuais, tais como média, mediana e moda; e as estimativas por região (intervalo de credibilidade e intervalo de máxima densidade *a posteriori*) para os parâmetros amostrados.

2.8.4.2 Metropolis-Hastings

O algoritmo de Metropolis-Hastings gera uma amostra da distribuição conjunta *a posteriori* $p(\boldsymbol{\theta} | \mathbf{y})$, a partir das distribuições condicionais completas com formas analíticas não conhecidas na literatura. Tal algoritmo usa a ideia de gerar um valor de uma distribuição auxiliar, o qual é aceito com uma dada probabilidade (METROPOLIS et al., 1953, HASTINGS, 1970). Este mecanismo de correção garante a convergência da cadeia para a

distribuição de equilíbrio que, neste caso, é a distribuição marginal *a posteriori* (EHLERS, 2007). O algoritmo de Metropolis-Hastings pode ser especificado pelos seguintes passos:

- (1) Inicialize o contador de iterações $m = 0$ e especifique um valor inicial $\theta^{(0)}$;
- (2) Gere um novo valor θ^c da distribuição $q(\cdot | \theta)$;
- (3) Calcule a probabilidade de aceitação $\alpha(\theta, \theta^c)$;

$$\alpha(\theta, \theta^c) = \min \left(1, \frac{p(\theta^c)q(\theta | \theta^c)}{p(\theta)q(\theta^c | \theta)} \right)$$

- (4) Gera um valor u , em que $u \sim U(0,1)$;
- (5) Se $u < \alpha(\theta, \theta^c)$, então aceite o valor candidato θ^c e faça $\theta^{(m+1)} = \theta^c$, caso contrário, rejeite e faça $\theta^{(m+1)} = \theta$;
- (6) Incremente o contador de m para $m + 1$ e volte ao passo 2.

Maiores detalhes sobre este algoritmo podem ser encontrados em Chib & Greenberg (1995), Gamerman (1997) e Hastings (1970), dentre outros.

2.8.5 Intervalo de máxima densidade *a posteriori* (HPD)

O intervalo HPD (Highest Posterior Density) é um meio de gerar intervalos posteriores bayesianos. Paulino et al. (2003) afirmam que existe uma infinidade de regiões de credibilidade com o mesmo grau de credibilidade. Desta forma, o intervalo HPD é um intervalo de credibilidade de comprimento mínimo, obtido a partir dos valores de θ com maior densidade *a posteriori*. No pacote BOA (*Bayesian Output Analysis*), executável no *software R*, o intervalo HPD é gerado através do algoritmo descrito por Chen & Shao (1999), sob a suposição de distribuições *posteriori* marginais unimodais.

2.8.6 Diagnósticos de convergência

Os métodos ou critérios utilizados para diagnosticar a convergência das cadeias podem ser classificados como informais e formais. Os métodos informais foram inicialmente propostos por Gelfand & Smith (1990); esses autores sugeriram técnicas gráficas para a

verificação da convergência como, por exemplo, a técnica que consiste em observar a trajetória da cadeia ao longo das iterações. Desta forma, se o gráfico, após um período inicial, apresenta certa estacionariedade, então é possível concluir pela convergência da cadeia. Entretanto, a utilização apenas da análise gráfica não é recomendada, sendo usual a utilização de alguns métodos formais existentes na literatura. Em relação aos métodos formais, podem ser citados os critérios de convergência de Geweke (1992), Heidelberger&Welch (1983) e Raftery& Lewis (1992).

O critério proposto por Geweke (1992) consiste em indicar a convergência da média *a posteriori* da quantidade amostrada, $g(\theta)$, em uma única cadeia, isto é, considerando a função $g(\theta)$, e sua trajetória $(g^{(1)}, g^{(2)}, \dots, g^{(n)})$ construída a partir de $g^{(i)} = g(\theta^{(i)})$, $i = 1, 2, \dots, n$, que define uma série temporal. Primeiramente, divide-se a cadeia de tamanho n em duas sequências. A primeira sequência possui as n_a primeiras iterações e a segunda as n_b restantes. O autor sugere que as médias devem ser estimadas após o descarte de algumas iterações iniciais e que sejam considerados $n_a = 0,1n$ e $n_b = 0,5n$. Em um segundo passo, estima-se as médias $\hat{g}_a$ e $\hat{g}_b$ e as variâncias assintóticas $\hat{S}_{g_a}^2(0)$ e $\hat{S}_{g_b}^2(0)$, respectivamente. As variâncias são determinadas pela estimação da densidade espectral. Se a diferença padronizada entre as médias for significativa, existe indicação de ausência de convergência. A regra de decisão do critério de Geweke é baseada na estimativa de um valor p . Se esse valor for menor que um nível de significância adotado pelo pesquisador, conclui-se que a cadeia não atingiu convergência.

O critério de Heidelberger&Welch (1993) se baseia em testes estatísticos para avaliar a hipótese nula de estacionariedade da amostra gerada. Em caso de rejeição da hipótese nula para um dado valor de descarte das observações iniciais, o teste é repetido após descartar os primeiros 10% das iterações. Se a hipótese é novamente rejeitada outros 10% são descartados. Desta forma, este processo é repetido até serem descartados os 50% valores iniciais. Caso a rejeição da hipótese nula permaneça, é um indício de que se faz necessário um número maior de iterações. Caso contrário, o número de iterações descartadas é indicado como o tamanho do *burn-in* a ser estabelecido.

O critério proposto por Raftery& Lewis (1992) é um método que estima quantas iterações são necessárias para que o amostrador de Gibbs apresente convergência à distribuição estacionária, propondo quantidades necessárias para isso. Este método disponibiliza estimativas de *burn-in* e *thin*, que são o número de iterações iniciais que devem ser descartadas e a distância mínima de uma iteração à outra, respectivamente. Outra saída

importante, disponibilizada por este critério, é o Fator de Dependência, responsável pelo acréscimo multiplicativo ao número de iterações necessárias para se alcançar a convergência. Segundo Raftery & Lewis (1992), se este fator for maior que 5,0 é possível dizer que a convergência ainda não foi obtida.

Nogueira et al. (2004) apresentam uma avaliação mais detalhada dos critérios de convergência para o método de Monte Carlo via Cadeias de Markov, permitindo uma análise mais profunda sobre a cerne dos processos utilizados para diagnosticar a convergência das cadeias através do MCMC.

2.8.7 Erro de Monte Carlo

O método de Monte Carlo utiliza aproximações para calcular integrais definidas. Paulino et al. (2003) sugerem considerar o problema de aproximar uma integral da forma:

$$\int g(\boldsymbol{\theta})h(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y})d\boldsymbol{\theta} = E[g(\boldsymbol{\theta})|\mathbf{y}]$$

em que: $\boldsymbol{\theta}$ e $\mathbf{y}$ podem ser vetores, cuja existência se admite. Valores *a posteriori* de interesse podem ser expressos pela equação acima, para algum tipo de função $g(\boldsymbol{\theta})$ integrável. É o caso de médias *a posteriori*, $\boldsymbol{\theta}_i$, de componentes de um vetor de parâmetros $\boldsymbol{\theta}$. Se for possível simular uma amostra aleatória $(\boldsymbol{\theta}_1, \boldsymbol{\theta}_2, \dots, \boldsymbol{\theta}_m)$ da densidade *a posteriori* $h(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y})$, o Método de Monte Carlo aproxima a integral apresentada acima pela média empírica, dada por:

$$\hat{E}[g(\boldsymbol{\theta})|\mathbf{y}] = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m g(\boldsymbol{\theta}_i)$$

a qual pela Lei Forte dos Grandes Números, converge quase certamente para $E[g(\boldsymbol{\theta})|\mathbf{y}]$. Além disso, a precisão desta aproximação pode ser medida pelo erro padrão de Monte Carlo, dado por:

$$\frac{1}{\sqrt{m(m-1)}} \left\{ \sum_{i=1}^m \left[g(\boldsymbol{\theta}_i) - \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m g(\boldsymbol{\theta}_i) \right]^2 \right\}^{1/2}$$

isto é, a aproximação pode ser tão acurada quanto se deseja, bastando aumentar o tamanho da amostra, que também pode ser vista como o número de iterações do processo.

Este método consiste em gerar vários números aleatórios uniformemente distribuídos no intervalo de interesse, permitindo avaliar o valor da função a ser integrada em cada um destes pontos e, finalmente, calcular a média desses valores para se obter a aproximação da integral definida. Como o método de Monte Carlo é uma aproximação, não se pode afirmar que o valor encontrado por ele é o valor exato da integral. Entretanto, quanto mais pontos forem gerados, maior será a confiabilidade na aproximação obtida.

3 MATERIAL E MÉTODOS

3.1 Origem dos dados estudados

Os dados utilizados neste trabalho provêm de um experimento conduzido pelo Laboratório de Nutrição Animal do Centro de Energia Nuclear na Agricultura da Universidade de São Paulo (LANA/CENA/USP), Piracicaba – SP.

O experimento foi conduzido por meio da utilização da técnica de mensuração *in vitro* e em seu escopo foram utilizados como doadores de líquido ruminal dois ovinos da raça Santa Inês, machos, adultos, castrados e providos de cânula ruminal permanente. A alimentação dos doadores foi constituída de forragem de gramínea cultivada e uma suplementação ao final do dia com feno de Tifton, concentrado comercial e sal mineral à vontade, seguindo os requisitos mínimos para manutenção corporal de ovinos pesando em torno de 70 kg.

Para este trabalho foram considerados os seguintes substratos: a silagem de capim elefante acrescida de 7% de resíduo de batata, que recebeu a nomenclatura SCE7%, e a silagem de capim elefante com acréscimo e 14% de resíduo de batata (SCE14%), por apresentarem o comportamento não linear mais acentuado. Após o preparo dos substratos, os mesmos foram secos à 60°C, moídos em moinhos do tipo Willey, passados por peneiras com perfurações de 2 mm e finalmente armazenados em frascos plásticos com tampa vedante.

A coleta do líquido ruminal foi realizada por intermédio de uma sonda, através da cânula ruminal, e armazenado em garrafas térmicas, previamente preenchidas com CO₂ a uma temperatura de 39°C, segundo a técnica adaptada de Maurício et al. (1999). Em laboratório, a fim de recuperar os microorganismos celulolíticos que se aderem fortemente à fração sólida, o líquido ruminal obtido foi misturado com a fração sólida na mesma proporção (50% de material da fase sólida e 50% da fase líquida) e homogeneizado em liquidificador por 10 segundos. Após o processamento, esse inóculo foi filtrado em 3 fraldas de algodão, espremendo-se ao máximo e separando a parte sólida da líquida. As frações filtradas foram mantidas em banho-maria a 39°C, com dióxido de carbono insuflado sobre a solução continuamente, seguindo ainda a técnica de Maurício et al. (1999).

Foram selecionadas garrafas de vidro de 160 ml, previamente identificadas e nelas procedeu-se a incubação de 0,5 g de matéria seca do substrato a ser testado, 50 ml de um meio contendo minerais e tamponantes e por fim 25 ml de inóculo (líquido ruminal).

As leituras foram realizadas através de um transducer (medidor de pressão) nos seguintes tempos: 4, 8, 12, 24, 36, 48, 72 e 96 horas após incubação. Como a leitura de pressão do gás é dada em psi, essa medida foi transformada em uma medida de volume segundo sugestão de Maurício et al. (1999) dada pela seguinte expressão:

$$V = 0,0112psi^2 + 7,3358psi$$

em que: V é o volume de gás produzido (ml) e psi é a leitura de pressão. Nesta dissertação utilizou-se como valores para o ajuste dos modelos não lineares a média entre as repetições em cada instante observado (medido).

3.2 Modelos empíricos

A metodologia utilizada no desenvolvimento deste trabalho envolve o ajuste de três modelos não lineares bastante conhecidos no meio científico, principalmente em estudos de degradação ruminal por meio da técnica de produção de gases. O enfoque principal foi avaliar a qualidade dos ajustes e expor o modelo que melhor representa o comportamento dos dados, segundo os tratamentos aplicados.

Os modelos não lineares utilizados no estudo para estimar os parâmetros de degradação por meio das curvas de produção de gás foram: o modelo não sigmoidal proposto por Orskov&McDonald (1979), o modelo Logístico Unicompartimental proposto por Schofield et al. (1994) e o modelo Gompertz proposto por Lavrencic et al. (1997), cujas fórmulas são expressas, respectivamente, por:

$$y_j = V\{1 - \exp[-k(x_j - l)]\} + \varepsilon_j, \quad \text{Orskov\&McDonald (1979)}$$

$$y_j = \frac{V}{1 + \exp[2 - 4k(x_j - l)]} + \varepsilon_j, \quad \text{Schofield et al. (1994)}$$

$$y_j = V \exp[-a \exp(-kx_j)] + \varepsilon_j, \quad \text{Lavrencic et al. (1997)}$$

para $j = 1, 2, \dots, n$ e sendo: y_j é a produção acumulada de gás (ml), V é o potencial máximo de produção de gás (ml), k é uma taxa específica de produção de gases pela degradação da fração potencialmente degradável (ml/hora), x_j é o tempo de incubação da amostra (horas), l representa o tempo de colonização das bactérias (horas), a é um fator de eficiência microbiana e ε_j é o erro experimental que segue uma distribuição normal com médio zero e variância constante σ^2 .

Entretanto, quando se trabalha com modelos não lineares e, principalmente em estudos nos quais as medições são feitas em função do tempo, um importante fator a ser considerado é a possível existência de autocorrelação residual e heterocedasticidade de variância, fazendo com que as premissas de erros independentes e variância constante, como apresentado nas fórmulas acima, não sejam satisfeitas.

Para verificar a real necessidade de fatores autorregressivos, foram consideradas três situações diferentes para cada modelo estudado. No primeiro caso, os modelos foram ajustados sem considerar a necessidade de correção devido à autocorrelação residual; posteriormente, os ajustes foram realizados considerando um fator autorregressivo de primeira ordem, AR(1); e finalmente, em uma terceira etapa, foram considerados para os resíduos um fator autorregressivo de segunda ordem AR(2).

Nas equações (3) e (4) são apresentadas as fórmulas dos fatores autorregressivos de primeira e segunda ordem, respectivamente.

$$\varepsilon_j = \phi_1 \varepsilon_{j-1} + \xi_j \quad (3)$$

$$\varepsilon_j = \phi_1 \varepsilon_{j-1} + \phi_2 \varepsilon_{j-2} + \xi_j \quad (4)$$

em que: ϕ_1 corresponde ao parâmetro autorregressivo de primeira ordem, ϕ_2 corresponde ao parâmetro autorregressivo de segunda ordem e ξ_j é o ruído branco, para $j = 1, 2, \dots, n$. Com isso, os parâmetros ϕ_1 e ϕ_2 são incorporados nos modelos não lineares para avaliar a presença de autocorrelação residual.

Estes modelos foram aplicados aos dados, por meio da abordagem clássica; para o desenvolvimento destes ajustes e obtenção das estimativas dos parâmetros, intervalos de confiança, testes de hipóteses e demais indicadores necessários para validar as análises foi utilizado o software R, por meio da função *gnls*. Posteriormente, após a escolha do modelo

que melhor se ajustou aos dados de volume de gases, em função dos tratamentos analisados, procedeu-se o ajuste por meio da abordagem bayesiana.

3.3 Procedimentos de ajuste por meio da abordagem clássica

Conforme descrito anteriormente, o sistema de equações normais (SEN) não linear não apresenta solução explícita, sendo necessário para estimação dos parâmetros o uso de métodos iterativos. Para o presente caso será utilizado o método de Gauss-Newton, que se baseia no desenvolvimento em série de Taylor até o termo de primeira ordem da função, $f(X_j, \theta)$ em torno do ponto θ^0 . Considerando o modelo não linear:

$$Y_j = f(X_j, \theta) + e_j,$$

a expansão em série de Taylor pode ser expressa por:

$$f(\theta) = f(\theta^0) + F(\theta^0)(\theta - \theta^0).$$

Com isso, o SEN não linear, $X'f(\hat{\theta}) = X'Y$ pode ser escrito como:

$$X'[f(\theta^0) + F(\theta^0)(\theta - \theta^0)] = X'Y,$$

em que, $F(\theta^0)$ é a matriz de derivadas parciais X do modelo. Logo, substituindo-se no SEN, obtém-se:

$$X'[f(\theta^0) + F(\theta^0)(\theta - \theta^0)] = X'Y$$

Fazendo o produto matricial e reagrupando os termos semelhantes, encontra-se a seguinte expressão:

$$\theta - \theta^0 = (X'X)^{-1}X'e$$

Assim sendo, a fórmula iterativa do Método de Gauss-Newton é dada por:

$$\theta^1 = \theta^0 + (X'X)^{-1}X'e$$

Este processo é repetido colocando θ^1 no lugar de θ^0 (vetor de estimativas iniciais) até que algum critério de convergência seja aceito, isto é, $\theta^m \rightarrow \hat{\theta}$ onde m é o número de vezes que o processo foi repetido. Estes cálculos foram realizados utilizando o software R, via função *gnls*.

Depois de obtidos os ajustes dos modelos foram verificadas a significância dos fatores autorregressivos por meio do teste de razão de verossimilhança (TRV), no qual se estabeleceram os seguintes testes:

- Em um primeiro teste, houve a comparação entre o modelo sem fator autorregressivo versus o modelo com fator autorregressivo de primeira ordem AR(1), considerando as seguintes hipóteses:

$H_0^{(1)}$: O modelo com erros independentes (sem fator autorregressivo) é melhor;

$H_1^{(1)}$: O modelo com AR(1) é melhor.

- Na sequência, houve a comparação entre o modelo sem AR versus o modelo com fator autorregressivo de segunda ordem, AR(2), que testou as hipóteses:

$H_0^{(2)}$: O modelo com erros independentes (sem fator autorregressivo) é melhor;

$H_1^{(2)}$: O modelo com AR(2) é melhor.

Em caso de rejeição da hipótese nula para ambos os casos citados anteriormente, seria realizado um terceiro teste, considerando o ajuste com AR(1) versus o AR(2) para estabelecer qual o melhor ajuste entre eles.

Outro ponto considerado no procedimento de análise foi verificar a adequação dos modelos, e comparar a qualidade entre os ajustes realizados. Para tal, foram analisadas as seguintes estatísticas: Quadrado médio residual (QMR), Coeficiente de Determinação Ajustado (R_{aj}^2), Critério de Informação de Akaike (AIC) e a função de probabilidade proposta por Motulsky e Chistopoulos (2003), como ferramenta para quantificar o quão um modelo é melhor que os demais modelos.

Os intervalos de 95% de confiança para os parâmetros dos modelos foram construídos, de acordo com Draper e Smith (1998), em que as estimativas da matriz assintótica de variâncias e covariâncias estruturam-se da seguinte forma:

$$\hat{V}(\hat{\theta}) = (X'X)^{-1}\hat{\sigma}^2 = (X'X)^{-1}QMR$$

em que: X é a matriz de derivadas parciais do modelo e QMR é o quadrado médio residual. O erro padrão da estimativa de determinado parâmetro do modelo, θ_j , é dado por:

$$s(\hat{\theta}_i) = \sqrt{\hat{V}(\hat{\theta}_i)}$$

em que: $\hat{V}(\hat{\theta}_i)$ é o i -ésimo elemento da diagonal principal da matriz assintótica de variâncias e covariâncias. Desta forma, define-se o intervalo de confiança para o parâmetro, θ_i , como:

$$IC(\theta_i) = \hat{\theta}_i \pm t_{(gl_erro, \alpha/2)} \sqrt{\hat{V}(\hat{\theta}_i)}$$

em que: $t_{(gl_erro, \alpha/2)}$ é o percentil superior $\alpha/2$ da distribuição t de Student com gl_erro graus de liberdade residual. A normalidade dos erros foi verificada utilizando o *qq-plot* e o teste de Shapiro-Wilk.

3.4 Procedimentos de ajuste por meio da abordagem bayesiana

Dentre os modelos estatísticos utilizados, na abordagem clássica, para estimar os parâmetros de degradação por meio das curvas de produção de gás, na abordagem bayesiana de ajuste, considerou-se apenas o modelo não sigmoidal com erros independentes, dado por:

$$y_j = V\{1 - \exp[-k(x_j - l)]\} + \varepsilon_j, \text{ com } j=1, \dots, n$$

em que: y_j é a produção acumulada de gás (ml); V é o potencial máximo de produção de gás (ml); exp é a base do logaritmo neperiano; k é uma taxa específica de produção de gases pela degradação da fração potencialmente degradável (ml/hora); x_j é o tempo de incubação das amostras (hora); l é o tempo de colonização das bactérias (hora); ε_j é o erro considerado independente e identicamente distribuído de uma Normal com média zero e variância constante σ^2 , ou seja, $\varepsilon_j \sim N(0, \sigma^2)$.

Uma amostra aleatória $y_1, y_2, \dots, y_n$ obtida de uma população com função de densidade de probabilidade $f(y|\theta)$, a qual depende do vetor de parâmetros θ , tem função de densidade de probabilidade conjunta dada por:

$$\prod_{j=1}^n f(y_j|\theta) = f(y_1|\theta)f(y_2|\theta) \dots f(y_n|\theta)$$

Antes da obtenção da amostra, cada observação é uma variável aleatória cuja função de densidade de probabilidade é igual a função de densidade de probabilidade da população. A média e a variância de cada observação a ser obtida são iguais à média e variância da população em questão. É neste sentido que dizemos que na função de densidade conjunta, antes da obtenção da amostra, θ é fixo e y_j é variável. Contudo, uma vez que tenha sido obtida uma amostra específica, y_j torna-se fixo e a função de densidade de probabilidade conjunta pode então ser reinterpretada como sendo uma função do vetor de parâmetros.

Para uma dada amostra $y_1, y_2, \dots, y_n$ a função de densidade de probabilidade conjunta vista como função do vetor de parâmetros desconhecidos θ , é denominada de função de verossimilhança e é dada por:

$$L(\theta|y_1, y_2, \dots, y_n) = \prod_{j=1}^n f(y_j|\theta) = f(y_1|\theta)f(y_2|\theta) \dots f(y_n|\theta).$$

Para o modelo não sigmoidal com erros independentes, $\varepsilon_j \sim N(0, \sigma^2)$, adotando τ como sendo o parâmetro de precisão, denotado por $\tau = 1/\sigma^2$ e $\theta = (V, k, l)^T$ o vetor de parâmetros, a função de verossimilhança é dada por:

$$\begin{aligned}
L(\boldsymbol{\theta}, \tau | y_1, y_2, \dots, y_n) &= \prod_{j=1}^n f(y_j | \boldsymbol{\theta}) = \\
&= \prod_{j=1}^n \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp \left[-\frac{1}{2\sigma^2} (y_j - \mu)^2 \right] = \\
&= \left(\frac{1}{2\pi\sigma^2} \right)^{n/2} \exp \left[-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{j=1}^n (y_j - \mu)^2 \right] = \\
&= \left(\frac{\tau}{2\pi} \right)^{n/2} \exp \left[-\frac{\tau}{2} \sum_{j=1}^n \left(y_j - V \left(1 - \exp(-k(x_j - l)) \right) \right)^2 \right],
\end{aligned}$$

logo,

$$L(\boldsymbol{\theta}, \tau | y_1, y_2, \dots, y_n) \propto (\tau)^{n/2} \exp \left[-\frac{\tau}{2} \sum_{j=1}^n \left(y_j - V \left(1 - \exp(-k(x_j - l)) \right) \right)^2 \right].$$

Para a obtenção da distribuição *a posteriori* conjunta dos parâmetros do modelo não sigmoidal é necessário combinar a informação proveniente dos dados, por meio da função de verossimilhança, com a informação *a priori* sobre os parâmetros, traduzida por meio de uma distribuição, denominada distribuição *a priori*.

Para o parâmetro V que representa o potencial máximo de produção de gás, em ml, foi atribuída uma distribuição *a priori* Normal com parâmetros μ_v e σ_v^2 , em que: $\sigma_v^2 = 1/\tau_v$, ou seja,

$$p(V | \mu_v, \tau_v) \propto (\tau_v)^{1/2} \exp \left\{ -\frac{\tau_v}{2} (V - \mu_v)^2 \right\}.$$

Para o parâmetro k , que representa uma taxa específica de degradação (ml/hora), assumiu-se uma distribuição *a priori* do tipo Beta com parâmetros a_k e b_k , dada por:

$$p(k | a_k, b_k) \propto k^{a_k-1} (1-k)^{b_k-1}.$$

Para o parâmetro l , que expressa o tempo de colonização das amostras de alimentos pelas bactérias (horas), utilizou-se como distribuição *a priori* uma distribuição Gama com parâmetros α_l e β_l , dada por:

$$p(l|\alpha_l, \beta_l) \propto l^{\alpha_l} \exp(-\beta_l l).$$

Como na função de verossimilhança trabalhou-se, por uma facilidade computacional e algébrica, com o parâmetro de precisão (τ), ao invés da variância residual (σ^2), foi assumido para esse parâmetro, uma distribuição *a priori* do tipo Gama, porém com parâmetros α_τ e β_τ , como se segue:

$$p(\tau|\alpha_\tau, \beta_\tau) \propto \tau^{\alpha_\tau} \exp(-\beta_\tau \tau).$$

Conforme dito anteriormente, de posse da função de verossimilhança dos parâmetros e das distribuições *apriori* consideradas, por intermédio do teorema de Bayes, foi obtida a distribuição *a posteriori* conjunta dos parâmetros do modelo, que pode ser representada da seguinte forma:

$$p(V, k, l, \tau | \mathbf{y}, H) \propto L(\boldsymbol{\theta}, \tau | y_1, y_2, \dots, y_n) p(V | \mu_v, \tau_v) p(k | a_k, b_k) p(l | \alpha_l, \beta_l) p(\tau | \alpha_\tau, \beta_\tau)$$

em que: $H = \{\mu_v, \tau_v, a_k, b_k, \alpha_l, \beta_l, \alpha_\tau, \beta_\tau\}$ é o conjunto dos hiperparâmetros, ou seja, os parâmetros indexadores das distribuições *a priori* e $\mathbf{y} = \{y_1, \dots, y_n\}$.

A partir da distribuição *a posteriori* conjunta dos parâmetros foram obtidas as distribuições condicionais completas para cada parâmetro, nas quais foi aplicada a amostragem Gibbs e o algoritmo Metropolis-Hastings, com o intuito de obter aproximações das distribuições marginais dos parâmetros.

A distribuição condicional completa para o parâmetro V do modelo Não sigmoidal segundo a distribuição *a posteriori* conjunta dos parâmetros, é dada por:

$$p(V | k, l, \tau, \mathbf{y}, \mu_v, \tau_v) = \frac{p(V, k, l, \tau | \mathbf{y}, \mu_v, \tau_v)}{\int p(V, k, l, \tau | \mathbf{y}, \mu_v, \tau_v) dV} \quad (5)$$

A expressão (5) pode ser reescrita como:

$$p(V|k, l, \tau, \mathbf{y}, \mu_v, \tau_v) \propto \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{j=1}^n [y_j - V(1 - \exp(-k(x_j - l)))]^2 \right\} \exp \left\{ -\frac{\tau_v}{2} [V - \mu_v]^2 \right\}$$

Fazendo $x_j^* = 1 - \exp(-k(x_j - l))$, obtém-se:

$$p(V|k, l, \tau, \mathbf{y}, \mu_v, \tau_v) \propto \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{j=1}^n [y_j - Vx_j^*]^2 \right\} \exp \left\{ -\frac{\tau_v}{2} [V - \mu_v]^2 \right\} \quad (6)$$

Desenvolvendo-se o quadrado em (6), tem-se:

$$p(V|k, l, \tau, \mathbf{y}, \mu_v, \tau_v) \propto \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{j=1}^n [y_j^2 - 2y_j Vx_j^* + V^2 x_j^{*2}] - \frac{\tau_v}{2} [V^2 - 2V\mu_v + \mu_v^2] \right\}$$

Resolvendo-se o somatório anterior e considerando que os termos que não dependem do parâmetro V são termos constantes para este parâmetro, a distribuição *a posteriori* condicional completa para o parâmetro V do modelo pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned} p(V|k, l, \tau, \mathbf{y}, \mu_v, \tau_v) \\ \propto \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \left[\sum_{j=1}^n y_j^2 - 2V \sum_{j=1}^n y_j x_j^* + V^2 \sum_{j=1}^n x_j^{*2} \right] - \frac{\tau_v}{2} [V^2 - 2V\mu_v + \mu_v^2] \right\} \end{aligned}$$

Rearranjando-se os termos da expressão anterior de maneira adequada, ou seja, colocando o termo que acompanha V^2 em evidência e completando-se o quadrado, a expressão pode ser reescrita como:

$$p(V|k, l, \tau, \mathbf{y}, \mu_v, \tau_v) \propto \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[V^2 \left(\tau \sum_{j=1}^n x_j^{*2} + \tau_v \right) - 2V \left(\tau \sum_{j=1}^n y_j x_j^* + \tau_v \mu_v \right) \right] \right\}$$

$$\propto \exp \left\{ -\frac{(\tau \sum_{j=1}^n x_j^{*2} + \tau_v)}{2} \left[V^2 - 2V \left(\frac{\tau \sum_{j=1}^n y_j x_j^* + \tau_v \mu_v}{(\tau \sum_{j=1}^n x_j^{*2} + \tau_v)} \right) \right] \right\} \quad (7)$$

Lembrando que $x_j^* = 1 - \exp(-k(x_j - l))$.

A expressão (7) representa o núcleo de uma distribuição normal com média e variância dadas, respectivamente, por:

$$\mu = \frac{\tau \sum_{j=1}^n y_j x_j^* + \tau_v \mu_v}{\tau \sum_{j=1}^n x_j^{*2} + \tau_v} \quad e \quad \sigma^2 = \frac{1}{\tau \sum_{j=1}^n x_j^{*2} + \tau_v}$$

Analogamente, a distribuição *a posteriori* condicional completa para o parâmetro k , taxa específica de degradação, segundo a distribuição *a posteriori* conjunta, pode ser escrita de forma proporcional, como:

$$\begin{aligned} p(k|V, l, \tau, \mathbf{y}, a_k, b_k) &\propto \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{j=1}^n [y_j - V x_j^*]^2 \right\} k^{a_k-1} (1-k)^{b_k-1} \\ &\propto \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{j=1}^n [y_j - V(1 - \exp(-k(x_j - l)))]^2 \right\} k^{a_k-1} (1-k)^{b_k-1} \end{aligned} \quad (8)$$

Entretanto, a expressão (8) não representa o núcleo de uma distribuição conhecida e, para este caso, foi necessária a utilização do algoritmo Metropolis-Hastings. Esse algoritmo utiliza a ideia de que um valor é gerado de uma distribuição auxiliar e aceito com uma dada probabilidade que garante a convergência da cadeia para a distribuição de equilíbrio que, neste caso, é a distribuição *a posteriori* do parâmetro k . A distribuição auxiliar utilizada no algoritmo foi uma distribuição normal com parâmetros μ e σ^2 iguais a 0,013 e 1×10^{-9} , respectivamente.

A distribuição condicional completa para o parâmetro l , que representa o tempo de colonização das bactérias, do modelo de Orskov&McDonald (1979), segundo a distribuição *a posteriori* conjunta, pode ser escrita de forma proporcional, como:

$$\begin{aligned}
p(l|V, k, \tau, \mathbf{y}, \alpha_l, \beta_l) &\propto \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{j=1}^n [y_j - Vx_j^*]^2 \right\} l^{\alpha-1} \exp\{-\beta l\} \\
&\propto l^{\alpha-1} \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{j=1}^n [y_j - V(1 - \exp(-k(x_j - l)))]^2 - \beta l \right\} \quad (9)
\end{aligned}$$

Assim como no caso anterior, a expressão (9) representa o núcleo de uma distribuição conhecida, fazendo-se necessário o uso do algoritmo Metropolis-Hastings. Assim sendo, para o parâmetro l a distribuição auxiliar utilizada será a distribuição gama com parâmetros α e β iguais a 31 e 10, respectivamente.

Finalmente, para o parâmetro precisão τ , a distribuição *a posteriori* conjunta pode ser escrita de forma proporcional, como:

$$\begin{aligned}
p(\tau|V, k, l, \mathbf{y}, \alpha_\tau, \beta_\tau) &\propto \tau^{n/2} \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{j=1}^n [y_j - Vx_j^*]^2 \right\} \tau^{\alpha_\tau-1} \exp\{-\beta_\tau \tau\} \\
&\propto \tau^{\alpha_\tau-1+n/2} \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{j=1}^n [y_j - V(1 - \exp(-k(x_j - l)))]^2 \right\} - \tau \beta_\tau \quad (10)
\end{aligned}$$

Rearranjando os termos da expressão (10) de maneira adequada, essa pode ser reescrita por:

$$p(\tau|V, k, l, \mathbf{y}, \alpha_\tau, \beta_\tau) \propto \tau^{\frac{2\alpha_\tau+n}{2}-1} \exp \left\{ -\left[\frac{1}{2} \sum_{j=1}^n [y_j - V(1 - \exp(-k(x_j - l)))]^2 + \beta_\tau \right] \tau \right\}$$

A qual representa o núcleo de uma distribuição gama com parâmetros, dado por:

$$\alpha^* = \frac{2\alpha_\tau + n}{2}$$

$$\beta^* = \beta_\tau + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \left[y_j - V(1 - \exp(-k(x_j - l))) \right]^2$$

em que: α_τ e β_τ são os hiperparâmetros da distribuição gama utilizada como *priori* para o parâmetro precisão e assumindo valores iguais a 2 e 3, respectivamente, para o ajuste aos dados estudados.

De posse das expressões para as distribuições *a posteriori* condicionais completas; para os casos em que foi possível obter um núcleo de uma distribuição conhecida, utilizou-se o amostrador de Gibbs para gerar a amostra de valores para o parâmetro. Já nos casos em que a condicional completa não apresentou o núcleo conhecido foi utilizado o algoritmo de Metropolis-Hastings para gerar a amostra de valores para o parâmetro.

O algoritmo para o amostrador de Gibbs e o Metropolis-Hastings foi implementado utilizando-se a linguagem R (R Development Core Team, 2011). Para a análise foi considerado um número fixo de 300.000 iterações, utilizando um descarte (*burn-in*) das primeiras 30.000 iterações para retirar o efeito dos valores iniciais e um espaçamento entre pontos amostrados (*thin*) de 40 observações. Para esses valores estipulados foi verificada a condição de convergência das cadeias por meio dos critérios de Geweke (1992), Heidelberger&Welch (1993), Raftery& Lewis (1992) e o Erro de Monte Carlo (EMC), que estão disponíveis no pacote *BOA* (*Bayesian Output Analysis*) do software R.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 Ajuste pela metodologia clássica

Na Figura 2 é apresentado gráfico de dispersão referente aos dados de produção de gás em função dos tratamentos abordados, proporcionando com isso uma visualização inicial do comportamento do fenômeno em questão. É possível perceber que o tratamento composto por silagem de capim elefante com um acréscimo de 7% de resíduo de batata (SCE7%) apresenta um patamar de produção de gás inferior quando comparado ao tratamento formado por silagem de capim elefante acrescido de 14% de resíduo de batata (SCE14%), diferença essa que pode ser observada a partir da décima hora após a implantação do experimento, aproximadamente; e ainda, mediante plotagem das repetições existentes, observa-se que a variabilidade dentro dos tratamentos é um pouco maior para o tratamento SCE14%. Lembrando que neste estudo foram considerados apenas os valores médios para ajuste dos modelos.

Figura 2 - Valores observados e curva média para os dados de produção de gases, em ml, em função do tempo de incubação, para cada tratamento estudado

Após a análise gráfica, considerando inicialmente o tratamento SCE7%, na Tabela 1 são apresentadas as estimativas para os parâmetros do modelo não sigmoidal considerando os erros independentes (sem fator autorregressivo), com AR(1) e com AR(2).

Tabela1 - Estimativas e Intervalo de Confiança de 95% para os parâmetros do modelo não sigmoidalem relação ao tratamento SCE7%

Parâmetros	IC Inf	Estimativa	IC Sup
Sem AR			
<i>V</i>	278,5061	321,9549	365,4037
<i>k</i>	0,0100	0,0130	0,0159
<i>l</i>	1,5776	2,9375	4,2975
AR(1)			
<i>V</i>	286,5284	312,7208	338,9132
<i>k</i>	0,0117	0,0136	0,0155
<i>l</i>	2,4786	3,2508	4,0230
<i>Phi1</i>	-0,9666	-0,6956	0,3097
AR(2)			
<i>V</i>	292,7103	308,5865	324,4632
<i>k</i>	0,0128	0,0140	0,0151
<i>l</i>	2,9943	3,4118	3,8292
<i>Phi1</i>	-1,8312	-1,2448	-0,1155
<i>Phi2</i>	-0,9624	-0,7292	0,1229

É possível perceber que os valores apresentados para o potencial máximo de produção de gás (*V*), taxa específica de produção de gás (*k*) e tempo de colonização das bactérias (*l*) detêm resultados relativamente parecidos, quando comparados aos casos ajustados. Também é possível verificar que o intervalo de 95% de confiança obtido para os parâmetros autorregressivos (*Phi1* e *Phi2*), na maioria dos casos, contém o valor zero, o que pode indicar uma possível não significância para o parâmetro em questão. Os valores para o potencial máximo de produção de gás apresentaram valores próximos a 312 ml, com uma taxa específica de produção de gás de 0,0136ml/h e tempo de colonização de 3,2 horas, aproximadamente.

A fim de estabelecer qual o ajuste mais adequado em relação ao parâmetro autorregressivo, utilizou-se o teste da razão de verossimilhança (TRV) no intuito de verificar a significância da inclusão deste parâmetro no modelo. Os resultados estão expostos na Tabela 2.

Tabela 2 - Valor p e estatística L para comparação entre ajuste com e sem AR para o modelo não sigmoidal, considerando o tratamento SCE7%

Ajustes	L	Valor P
Sem AR x AR(1)	2,1290	0,1445
Sem AR x AR(2)	5,4030	0,0671

Mediante os valores de probabilidade apresentados na Tabela 2, não há indícios suficientes para rejeitar as hipóteses nulas ($H_0^{(1)}$ e $H_0^{(2)}$), desta forma se pode concluir que para o ajuste do modelo Não sigmoidal aos dados de produção de gases para o tratamento SCE7% não é necessário utilizar nenhum fator de correção devido à possibilidade de autocorrelação residual. Em relação às estimativas dos parâmetros, para o modelo não sigmoidal no tratamento SCE7%, o modelo selecionado resultou em um potencial máximo de produção de gás de 321,95 ml, com uma taxa de produção de gás de 0,013ml/h e tempo de colonização das bactérias de 2,93 horas.

Ainda no tratamento SCE7%, mas agora considerando o ajuste do modelo de Schofield, seguindo a mesma linha de análise utilizada, na Tabela 3 são apresentadas as estimativas dos parâmetros do modelo, bem como o intervalo de confiança de 95% para todos os parâmetros estimados.

Tabela 3 - Estimativas e Intervalo de Confiança de 95% para os parâmetros do modelo de Schofield em relação ao tratamento SCE7%

Parâmetros	IC Inf	Estimativa	IC Sup
Sem AR			
<i>V</i>	185,6109	219,1577	252,7045
<i>k</i>	0,0099	0,0169	0,0239
<i>l</i>	-2,4069	7,2853	16,9774
AR(1)			
<i>V</i>	185,1048	223,5125	261,9201
<i>k</i>	0,0086	0,0160	0,0234
<i>l</i>	-5,6837	6,5039	18,6914
<i>Phi1</i>	-0,4854	0,2729	0,7969
AR(2)			
<i>V</i>	186,0717	215,6516	245,2314
<i>k</i>	0,0126	0,0193	0,0260
<i>l</i>	4,4118	9,3399	14,2679
<i>Phi1</i>	-0,0164	0,4182	0,5517
<i>Phi2</i>	-0,985	-0,8773	-0,2788

Observando os resultados apresentados na Tabela 3 percebe-se que para este caso as estimativas do potencial máximo de produção de gás são menores que as obtidas pelo modelo não sigmoidal, com valores próximos a 219 ml, já a taxa de degradação mantém valores parecidos aos apresentados no modelo anterior, aproximadamente 0,016ml/h,

entretanto para o tempo de colonização das bactérias o modelo de Schofield estimou um valor mais alto, em torno de 7 horas.

Em relação aos intervalos de confiança, um destaque para o tempo de colonização das bactérias, parâmetro l , que apresentou um intervalo com uma amplitude bastante alta em todos os ajustes, contendo o valor zero na maioria dos casos, o que pode gerar um questionamento a respeito da significância das estimativas para este parâmetro.

Ao realizar o teste de significância do ajuste autorregressivo (Tabela 4), o mesmo não indicou a necessidade do AR(1). Porém, o valor de probabilidade para a comparação entre o modelo de referencia (sem AR) versus o modelo com AR(2) foi inferior ao nível de significância de 5%, apontando que há indícios suficientes para rejeitar a hipótese nula $H_0^{(2)}$ e com isso concluir que para modelo de Schofield no tratamento SCE7%, o ajuste mais adequado é o que leva em consideração o fator de autorregressivo de segunda ordem.

Tabela 4 - Valor p e estatística L para comparação entre ajuste com e sem AR para o modelo de Schofield, considerando o tratamento SCE7%

Ajustes	L	Valor P
Sem AR x AR(1)	0,2803	0,5965
Sem AR x AR(2)	6,3765	0,0412

Na Tabela 5 são apresentadas as estimativas dos parâmetros para o modelo Gompertz, bem como seus intervalos de 95% de confiança. Os valores estimados para o potencial máximo de produção de gás foram em torno de 236 ml com uma taxa de produção maior (0,040ml/h) em comparação aos modelos anteriormente ajustados. Os valores de eficiência microbiana (parâmetro a) indicam a eficiente utilização dos substratos rapidamente fermentáveis pelos microorganismos ruminais e não diferem em relação aos ajustes. Quanto aos intervalos de 95% de confiança para os parâmetros autorregressivos verifica-se que todos eles contêm o valor zero e, assim como no caso do modelo não sigmoidal, traz indícios de que esse parâmetro possa ser considerado nulo também para este modelo.

Tabela 5 - Estimativas e Intervalo de Confiança de 95% para os parâmetros do modelo Gompertz em relação ao tratamento SCE7%

Parâmetros	IC Inf	Estimativa	IC Sup
Sem AR			
<i>V</i>	203,8108	235,1628	266,5148
<i>k</i>	0,0280	0,0401	0,0521
<i>a</i>	2,3845	3,2032	4,0220
AR(1)			
<i>V</i>	203,924	237,5847	271,2453
<i>k</i>	0,0266	0,0393	0,0519
<i>a</i>	2,2843	3,1735	4,0628
<i>Phi1</i>	-0,5379	0,1603	0,7281
AR(2)			
<i>V</i>	204,4868	236,2929	268,099
<i>k</i>	0,0291	0,0407	0,0523
<i>a</i>	2,6439	3,2634	3,8829
<i>Phi1</i>	-0,0202	0,3500	0,4589
<i>Phi2</i>	-0,9698	-0,7778	0,0098

Ao testar a significância dos fatores autorregressivos no modelo Gompertz, via TRV, é possível verificar na Tabela 6 que os ajustes AR(1) e AR(2) não contribuem para o ajuste do modelo em questão. Ambos apresentaram estatística L com valores baixos e valores de probabilidade acima de 0,05.

Tabela 6 - Valor p e estatística L para comparação entre ajuste com e sem AR para o modelo Gompertz, considerando o tratamento SCE7%

Ajustes	L	Valor P
Sem AR x AR(1)	0,1194	0,7297
Sem AR x AR(2)	4,3108	0,1159

Terminada a etapa de verificação dos melhores ajustes segundo a utilização ou não de fatores autorregressivos, foi selecionado dentre estes três modelos, aquele que melhor representou a curva de produção de gás por meio da utilização de alguns critérios e seleção já bem conhecidos na literatura. Na Tabela 7 são apresentados os avaliadores em questão, bem como os valores obtidos para cada modelo pré-selecionado, sendo eles: o modelo Não sigmoidal sem fator autorregressivo, o modelo de Schofield com autorregressivo de segunda ordem e o modelo Gompertz sem AR.

Tabela 7 - Avaliadores dos modelos selecionados para o tratamento SCE7%

Avaliadores	não sigmoidal - sem AR	Schofield - com AR(2)	Gompertz - sem AR
AIC	44,2602	65,522	60,3538
QMR	8,7116	236,957	65,1279
R²	0,9991	0,974	0,9929
R²_{aj}	0,9989	0,966	0,9915

Como é possível analisar, os três modelos apresentaram resultados satisfatórios, com estimativas plausíveis. Dentre os valores apresentados, o primeiro ponto que chama a atenção é o quadrado médio do resíduo (QMR) que coloca o modelo de Schofield como o pior ajuste, quando comparado com os demais; fato este que se ratifica através dos valores do coeficiente de determinação e coeficiente de determinação ajustado, que apresentam o modelo com o menor índice 0,97 e 0,96, respectivamente. E também segundo o critério de informação de Akaike (AIC) que detém o valor de 65,52, sendo este o maior valor observado dentre as estatísticas de AIC. Utilizando o critério ΔAIC o modelo não sigmoidal se mostrou superior em relação aos demais, tendo 99% de chances de ser o melhor ajuste, quando comparado aos modelos de Schofield e Gompertz.

Mediante os avaliadores observados, o modelo que melhor representa a produção acumulada de gases considerando o tratamento SCE7% é o modelo não sigmoidal sem o fator autorregressivo, que apresenta os menores valores para o critério de informação de Akaike (44,26) e para o quadrado médio residual (8,71), e que também detém de um coeficiente de determinação e coeficiente de determinação ajustado com valores altos.

Na Figura 3 é apresentado o ajuste do modelo não sigmoidal sem AR para os dados do tratamento SCE7%, bem como o gráfico de resíduos versus valores ajustados no qual se pode observar a aleatoriedade do resíduo, o que confirma os resultados encontrados para este modelo no que se refere a não existência de autocorrelação residual.

Figura 3 - (a) gráfico do ajuste em relação aos valores médios e (b) gráfico do resíduo versus valor ajustado para o modelo não sigmoidal sem AR, considerando o tratamento SCE7%

Portanto, o modelo não sigmoidal de Orskov&McDonald (1979) sem o fator autorregressivo, pode ser expresso da seguinte forma:

$$\hat{y}_j = 321,9549(1 - \exp(-0,0130(x_j - 2,9375)))$$

em que: $\hat{y}_j$ é a estimativa para a produção acumulada de gás (ml), o valor 321,95 ml corresponde ao potencial máximo de produção de gás, 0,0130 ml/h representa uma taxa específica de produção de gases, o tempo de colonização das bactérias foi de 2,9 horas e x_j é o tempo de incubação da amostra, dado em horas.

Os modelos descritos anteriormente também foram ajustados aos dados de produção de gases oriundos do tratamento constituído pela silagem de capim elefante acrescido de 14% de resíduo de batata (SCE14%). Na Tabela 8 são apresentadas as estimativas para os parâmetros do modelo não sigmoidal de Orskov e McDonald (1979), considerando os ajustes sem o fator autorregressivo, com o autorregressivo de primeira ordem AR(1) e com o fator autorregressivo de segunda ordem AR(2).

Tabela 8 - Estimativas e Intervalo de Confiança de 95% para os parâmetros do modelo não sigmoidal em relação ao tratamento SCE14%

Parâmetros	IC Inf	Estimativa	IC Sup
Sem AR			
<i>V</i>	351,4873	379,2682	407,0492
<i>k</i>	0,0248	0,0312	0,0376
<i>l</i>	1,2865	2,7609	4,2352
AR(1)			
<i>V</i>	353,9702	376,575	399,1798
<i>k</i>	0,0265	0,0318	0,0372
<i>l</i>	1,6763	2,8572	4,0382
<i>Phi1</i>	-0,7790	-0,3118	0,3780
AR(2)			
<i>V</i>	358,5974	375,8555	393,1135
<i>k</i>	0,0276	0,0316	0,0356
<i>l</i>	1,7769	2,6300	3,4830
<i>Phi1</i>	-1,1154	-0,4885	0,0448
<i>Phi2</i>	-0,9533	-0,6899	0,1691

Os valores estimados para o potencial máximo de produção de gás (*V*) são próximos de 376 ml, a taxa específica de produção de gases pela degradação da fração potencialmente degradável (*k*) apresenta valores próximos a 0,03ml/h e o tempo de colonização das bactérias (*l*) estimado é de 2,7 horas. Quanto ao intervalo de 95% de confiança obtido para os parâmetros autorregressivos *Phi1* e *Phi2*, em todos os casos, o valor zero está contido no intervalo, o que conforme dito anteriormente pode indicar uma possível falta de significância para o parâmetro em questão.

Na Tabela 9 são apresentadas a estatística L e o valor de probabilidade, referentes ao teste da razão de verossimilhança (TRV), calculado com o intuito de testar a significância da inclusão de um fator autorregressivo no modelo Não sigmoidal.

Tabela 9 - Valor p e estatística L para comparação entre ajuste com e sem AR para o modelo não sigmoidal, considerando o tratamento SCE14%

Ajustes	L	Valor P
Sem AR x AR(1)	0,7076	0,4002
Sem AR x AR(2)	3,2251	0,1994

Os valores P apresentados na Tabela 9 evidenciam que não há indícios suficientes para rejeitar as hipóteses nulas ($H_0^{(1)}$ e $H_0^{(2)}$), concluindo desta forma que, para o ajuste do modelo não sigmoidal aos dados de produção de gases para o tratamento SCE14% não é necessário utilizar nenhum fator de correção devido à possibilidade de autocorrelação residual. As estimativas dos parâmetros para tal modelo são: potencial máximo de produção de gás de 379,26 ml, com uma taxa específica de produção de gases de 0,0312 ml/h e tempo de colonização das bactérias de 2,76 horas.

Considerando agora o modelo proposto por Schofield e seguindo a mesma linha de análise utilizada, na **Erro! Argumento de opção desconhecido.** são apresentadas as estimativas e os intervalos de 95% de confiança para os parâmetros deste modelo.

Tabela 10 - Estimativas e Intervalo de Confiança de 95% para os parâmetros do modelo de Schofield em relação ao tratamento SCE14%

Parâmetros	IC Inf	Estimativa	IC Sup
Sem AR			
<i>V</i>	294,6521	343,7769	392,9017
<i>k</i>	0,0114	0,0219	0,0324
<i>l</i>	-7,7137	2,1047	11,9231
AR(1)			
<i>V</i>	288,3618	348,1515	407,9412
<i>k</i>	0,0096	0,0207	0,0318
<i>l</i>	-11,3708	1,3547	14,0802
<i>Phi1</i>	-0,4818	0,3494	0,8497
AR(2)			
<i>V</i>	326,7355	342,5144	358,2933
<i>k</i>	0,0191	0,0229	0,0267
<i>l</i>	0,6288	2,8313	5,0337
<i>Phi1</i>	0,3267	0,4911	0,6042
<i>Phi2</i>	-0,9979	-0,981	-0,8382

Ao observar a Tabela 10 percebe-se que para o modelo de Schofield os valores obtidos para as estimativas do potencial máximo de produção de gás, taxa específica de produção de gases e tempo de colonização das bactérias são um pouco menores, quando comparadas às estimativas do modelo não sigmoidal. Em relação aos intervalos de 95% de confiança, destaca-se os intervalos dos parâmetros *Phi1* e *Phi2* do ajuste AR(2), pois não contemplam o valor zero, indicando uma possível significância na utilização dos fatores autorregressivos de segunda ordem para este modelo. Em suma, o potencial máximo de

produção de gás ficou próximo de 343 ml, com uma taxa específica de produção de gases de 0,020ml/h e tempo de colonização das bactérias de 2 horas, aproximadamente.

Realizando o teste de razão de verossimilhança (TRV), o mesmo não indicou a necessidade do fator autorregressivo de primeira ordem AR(1), apresentando um valor de probabilidade superior à 0,05. Porém, para a comparação entre o modelo de referencia (sem AR) versus o modelo com AR(2) o valor de probabilidade obtido é inferior a 0,0001, apontando que há indícios suficientes para rejeitar a hipótese nula $H_0^{(2)}$, e concluir que para o modelo de Schofield no tratamento SCE14% o ajuste mais adequado é o que leva em consideração o fator de autorregressivo de segunda ordem AR(2).

Tabela 11 - Valor p e estatística L para comparação entre ajuste com e sem AR para o modelo de Schofield, considerando o tratamento SCE14%

Ajustes	L	Valor P
Sem AR x AR(1)	0,5791	0,4467
Sem AR x AR(2)	20,5166	< 0,0001

Dando continuidade nas análises, na Tabela 12 são apresentadas as estimativas dos parâmetros para o modelo de Gompertz no tratamento SCE14%.

Tabela 12 - Estimativas e Intervalo de Confiança de 95% para os parâmetros do modelo Gompertz em relação ao tratamento SCE14%

Parâmetros	IC Inf	Estimativa	IC Sup
Sem AR			
<i>V</i>	311,4569	352,7807	394,1046
<i>k</i>	0,0369	0,0586	0,0802
<i>l</i>	1,8219	2,8771	3,9324
AR(1)			
<i>V</i>	308,8596	355,7032	402,5468
<i>k</i>	0,0341	0,0571	0,0802
<i>l</i>	1,6542	2,8402	4,0261
<i>Phi1</i>	-0,5083	0,2527	0,7921
AR(2)			
<i>V</i>	328,7314	353,7988	378,8663
<i>k</i>	0,0444	0,0576	0,0709
<i>l</i>	2,3195	2,8174	3,3152
<i>Phi1</i>	0,0075	0,3762	0,5486
<i>Phi2</i>	-0,9893	-0,915	-0,4624

Os valores estimados para o potencial máximo de produção de gás estão próximos de 354 ml, com uma taxa específica de produção de gases de 0,05ml/h e fator de eficiência microbiana estimado de 2,8. Quanto aos intervalos de 95% de confiança, assim como no modelo de Schofield os intervalos obtidos para os parâmetros autorregressivos de segunda ordem AR(2) não contemplam o zero, ratificando a significância destes parâmetros no ajuste do modelo.

De acordo com a Tabela 13, o teste de significância do ajuste autorregressivo não indicou a necessidade do fator AR(1). Entretanto, o valor de probabilidade da comparação entre o modelo de referencia (sem AR) versus o modelo com AR(2) apresentou um valor menor que 0,05, concluindo que há indícios suficientes para rejeitar a hipótese $H_0^{(2)}$, logo, para o modelo Gompertz no tratamento SCE14%, o ajuste mais adequado é o que inclui o fator autorregressivo de segunda ordem.

Tabela 13 - Valor p e estatística L para comparação entre ajuste com e sem AR para o modelo Gompertz, considerando o tratamento SCE14%

Ajustes	L	Valor P
Sem AR x AR(1)	0,3479	0,5553
Sem AR x AR(2)	10,9678	0,0042

Após selecionar um ajuste de cada modelo, o próximo passo é selecionar dentre estes três modelos, aquele que melhor representou a curva de produção de gás para o tratamento SCE14%. Foram utilizadas algumas estatísticas tais como AIC, coeficiente de determinação e quadrado médio residual (QMR); os resultados são apresentados na Tabela 14.

Tabela 14 - Avaliadores dos modelos selecionados para o tratamento SCE14%

Avaliadores	não sigmoidal - sem AR	Schofield - com AR(2)	Gompertz - com AR(2)
AIC	60,1001	62,358	66,6228
QMR	63,0950	626,590	349,2529
R^2	0,9974	0,974	0,9854
R^2_{aj}	0,9968	0,969	0,9825

Novamente os três modelos apresentaram resultados satisfatórios, com estimativas plausíveis. Dentre os valores apresentados, o primeiro ponto que chama a atenção

é o quadrado médio do resíduo (QMR) que coloca o modelo de Schofield como o pior ajuste, quando comparado com os demais; fato este que se ratifica através dos valores do coeficiente de determinação e coeficiente de determinação ajustado, que apresentam o modelo com o menor índice 0,97 e 0,96, respectivamente; e também segundo o critério de informação de Akaike (AIC) que detém o segundo pior valor observado (62,35).

Segundo os avaliadores analisados, o modelo que melhor representa a produção acumulada de gases considerando o tratamento SCE14% é o modelo não sigmoidal sem o fator autorregressivo, pois apresenta os menores valores para o critério de informação de Akaike (60,10) e para o quadrado médio residual (63,09), e ainda detém de um alto índice para o coeficiente de determinação e o coeficiente de determinação ajustado, 0,997 e 0,996, respectivamente. Observando o ΔAIC , o modelo não sigmoidal tem 95% de chances de ser melhor que o modelo Gompertz e 75% de ser melhor que o modelo de Schofield.

O ajuste do modelo não sigmoidal sem AR para os dados do tratamento SCE14% pode ser visualizado na Figura 4, bem como o gráfico de resíduos versus valores ajustados no qual se pode observar a aleatoriedade do resíduo, o que confirma os resultados encontrados para este modelo no que se refere a não existência de autocorrelação residual; e fica evidenciada a qualidade do ajuste do modelo.

Figura 4 - (a) gráfico do ajuste em relação aos valores médios e (b) gráfico do resíduo versus valor ajustado para o modelo Não sigmoidal sem AR, considerando o tratamento SCE14%

Desta forma, o modelo não sigmoidal de Orskov&McDonald (1979) sem o fator autorregressivo, que pode ser expresso da seguinte forma:

$$\hat{y}_j = 379,2682(1 - \exp(-0,0312(x_j - 2,7609)))$$

em que: $\hat{y}_j$ é a estimativa para a produção acumulada de gás(ml), o valor 379,26 ml corresponde ao potencial máximo de produção de gás, 0,0312ml/h representa uma taxa específica de produção de gases pela degradação da fração potencialmente degradável, o tempo de colonização das bactérias foi de 2,76 horas e x_j é o tempo de incubação da amostra, dado em horas.

Tabela 155–Estimativas para os parâmetros do modelo não sigmoidal em relação aos tratamentos SCE7% e SCE14%

Parâmetros	Tratamentos	
	SCE7%	SCE14%
<i>V</i>	321,9549	379,2682
<i>k</i>	0,013	0,0312
<i>l</i>	2,9375	2,7609

Percebe-se que para o tratamento SCE14%, os valores estimados para o potencial máximo de produção de gás e para a taxa específica de produção de gás são maiores do que os valores obtidos considerando o SCE7%. Segundo Tavares (2009), isto se deve ao fato de que alimentos ricos em carboidratos, como o amido presente na raspa de batata, propiciam uma maior fermentação ruminal e, conseqüentemente, maior produção de gás em relação a outros alimentos com maior proporção de carboidratos estruturais (parede celular).

E ainda, os valores obtidos para os parâmetros do modelo não sigmoidal proposto por Orskov&McDonald (1979) condiz com os valores obtidos por Tavares (2009).

4.2 Ajuste pela metodologia bayesiana

Dado os resultados obtidos na metodologia clássica, para desenvolver o ajuste bayesiano, utilizou-se apenas o modelo não sigmoidal proposto por

Orskov&McDonald(1979) no tratamento formado pela silagem de capim elefante acrescida de 7% de resíduo de batata (SCE7%). A convergência das cadeias de cada um dos parâmetros do modelo foi monitorada por meio da visualização gráfica do traço da cadeia gerada pelo método MCMC, e pelos critérios propostos Geweke (1992), Heidelberger&Welch (1993) e Raftery& Lewis (1992), além do Erro de Monte Carlo (EMC).

Através dos dados da Tabela 16, visualizam-se os resultados para os critérios de convergência das cadeias. Pelo critério de Geweke (1992), o valor p obtido foi sempre maior que o nível de significância pré-fixado de 0,05, não apresentando evidências contra a convergência para os parâmetros. A regra de decisão do critério de Raftery& Lewis (1992) é baseada no fator de dependência (FD), que é responsável pelo acréscimo multiplicativo ao número de iterações necessárias para se alcançar a convergência; de acordo com os autores, se o fator de dependência for maior que cinco, se pode concluir que a cadeia não atingiu convergência. O critério de Raftery& Lewis (1992), para todos os parâmetros analisados, o fator de dependência (FD) foi inferior a cinco, concluindo com isso, que a cadeia atingiu convergência. O critério de Heidelberger&Welch (1993), cujos resultados não foram apresentados, demonstrou a aceitação da hipótese nula de estacionariedade da amostra gerada, não sendo necessário um número maior de iterações além das computadas na análise.

Tabela 16 - Critérios de Geweke (valor p) e Raftery Lewis (fator de dependência - FD), utilizados na detecção da convergência das cadeias amostradas

Parâmetros	Geweke(Valor p)	Raftery& Lewis (FD)
V	0,3939	1,0475
k	0,6633	1,0315
l	0,9425	0,9698
τ	0,7951	1,0003

Os resultados apresentados na Tabela 16 podem ser confirmados por meio da visualização gráfica do traço da cadeia, nas Figuras 5e6, após o descarte das 30.000 iterações iniciais (*burn-in*) e o intervalo entre pontos amostrados (*thin*) de 40 observações.

Figura 5 - Gráficos dos traços das cadeias geradas pelo método MCMC, do modelo não sigmoidal de Orskov&McDonald (1979)

Pelos gráficos da Figura 5, apresentada anteriormente, observa-se que as cadeias geradas para os parâmetros do modelo oscilaram em torno da média estimada, não apresentando picos discrepantes ao longo da cadeia. E ainda, através da Figura 6 é possível perceber que há simetria na distribuição dos parâmetros V , k e l ; em contrapartida, o parâmetro τ , apresentam uma distribuição assimétrica.

Figura 6 - Gráficos das distribuições marginais a posteriori, para os parâmetros do modelo não sigmoidal de Orskov&McDonald (1979)

Observam-se, por meio dos dados da Tabela 17, as estimativas da média e moda *a posteriori*, o intervalo de máxima densidade *a posteriori* e o Erro de Monte Carlo (EMC). Os resultados mostram estimativas da média e da moda *a posteriori* bastante próximas, evidenciando distribuições do tipo simétricas, exceto para o parâmetro τ . Nesses casos, para os parâmetros V , k e l , um resumo pontual da informação contida nas distribuições *a posteriori* pode ser dado tanto pela média *a posteriori* como pela moda *a posteriori*. Já para o parâmetro τ , devido à distância entre a média e a moda, o que leva à indicação de uma distribuição assimétrica, o resumo pontual é mais bem expresso através da moda *a posteriori*.

A partir do parâmetro de precisão τ , é possível obter a estimativa em relação à variância residual (σ^2), dada por:

$$\sigma^2 = \frac{1}{\tau} = \frac{1}{0,1808} \cong 5,53$$

Percebe-se que a variabilidade residual obtida por meio do ajuste bayesiano é menor do que a variabilidade encontrada no ajuste clássico (8,71).

Tabela 17 - Valores estimados da média e moda a posteriori, e intervalo de máxima densidade a posteriori (HPD) para os parâmetros do modelo de Orskov e McDonald no ajuste aos dados do tratamento SCE7%

Parâmetros	Média	Moda	Intervalo HPD 95%		EMC
			Inf	Sup	
V	321,2802	321,0842	316,3141	326,4368	$3,45 \times 10^{-2}$
k	0,0130	0,0130	0,0129	0,0131	$3,82 \times 10^{-7}$
l	2,9539	2,9346	2,4522	3,4762	$3,39 \times 10^{-3}$
τ	0,2039	0,1808	0,0655	0,4158	$1,34 \times 10^{-3}$

Ainda pela Tabela 17, é possível observar que a metodologia bayesiana mostrou-se efetiva para estimar os parâmetros do modelo não sigmoidal proposto por Orskov&McDonald (1979), bem como a precisão do erro (parâmetro τ) e os intervalos HPD para os parâmetros. Em relação aos intervalos HPD de 95%, percebe-se que a amplitude dos intervalos é pequena, indicando uma boa acurácia para as estimativas obtidas.

Desta forma, o modelo não sigmoidal proposto por Orskov&McDonald (1979) ajustado aos dados médios do tratamento SCE7%, mediante a abordagem bayesiana, é dado pela seguinte expressão:

$$\hat{y}_j = 321,2802(1 - \exp(-0,0130(x_j - 2,9539)))$$

em que: $\hat{y}_j$ é a produção acumulada de gás (ml), o valor 321,28 ml corresponde ao potencial máximo de produção de gás, 0,0130ml/h representa uma taxa específica de produção de gases pela degradação da fração potencialmente degradável, o tempo de colonização das bactérias foi de 2,9 horas e x_j é o tempo de incubação da amostra, dado em horas. Na Figura 7 é apresentado o ajuste do modelo não sigmoidal, segundo a metodologia bayesiana.

Figura 7 - Gráfico do ajuste do modelo não sigmoidal no tratamento SCE7%, por meio da metodologia bayesiana

Na Tabela 18, é possível perceber que as estimativas obtidas por meio das abordagens clássica e bayesiana estão próximas; o que era de se esperar, uma vez que as informações *a priori* utilizadas metodologia bayesiana derivaram dos resultados obtidos na metodologia clássica. Em relação à estimativa para a variância residual, a abordagem bayesiana apresentou um valor menor (5,53), contra os 8,71 da abordagem clássica.

Tabela 18 - Valores estimados para os parâmetros do modelo não sigmoidal de Orskov e McDonald, segundo as metodologias clássica e bayesiana, no ajuste aos dados do tratamento SCE7%

Parâmetros	Clássica			Bayesiana		
	Inf.	Estimativa	Sup.	Inf.	Estimativa	Sup.
V	278,5061	321,9549	365,4037	316,3141	321,2802	326,4368
k	0,01	0,013	0,0159	0,0129	0,013	0,0131
l	1,5776	2,9375	4,2975	2,4522	2,9539	3,4762
σ^2		8,711			5,53	

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Nas condições do presente estudo, e de acordo com os resultados obtidos, pode-se concluir o que segue:

As metodologias clássica e bayesiana foram igualmente viáveis e eficientes para análise de dados de produção de gases oriundos de experimentos de degradação ruminal.

Dentre os modelos avaliados no estudo, em todos os casos, o modelo não sigmoidal proposto por Orskov&McDonald (1979) foi o que apresentou a melhor qualidade de ajuste segundo os avaliadores utilizados.

A verificação da pressuposição de independência do erro é de extrema importância no ajuste de modelos e a consideração de uma estrutura autoregressiva, desde que significativa, resulta em intervalos de confiança de menor amplitude para os parâmetros.

A metodologia bayesiana, apesar do esforço que deve ser empenhado na obtenção das distribuições *a posteriori*, é uma metodologia bastante viável para obtenção dos ajustes e os resultados encontrados foram condizentes com o fenômeno em estudo.

Comparando os tratamentos observados, SCE7% e SCE14% foi possível perceber que o percentual de resíduo de batata contribui para o aumento do potencial máximo de produção de gás.

O software R mostrou-se ágil e eficiente no ajuste dos modelos não lineares segundo a abordagem clássica, via pacote gnls; e também obteve um bom desempenho na rotina construída para obtenção dos resultados bayesianos.

REFERÊNCIAS

- AROEIRA, L.J.M.; LOPES, F.C.F.; DAYRELL, M.S. Degradabilidade de alguns alimentos no rúmen de vacas Holandês/Zebu. **Revista da Sociedade Brasileira de Zootecnia**, Viçosa, v.25, n.6, p.1178-1186, 1996.
- BERCHIELLI, T.T.; PIRES, A.V.; OLIVEIRA, S.G. (Eds.) **Nutrição de Ruminantes**. Jaboticabal: FUNEP, 2006. 583p.
- BEUVINK, J.M.W.; KOGUT, J. Modeling gas production kinetics of grass silages incubated with buffered ruminal fluid. **Journal of Animal Science**, Champaign, v.71, p.1041-046, 1993.
- BOX, G.E.; TIAO, G.C. **Bayesian inference in statistical analysis**. New York: Wiley, 1992. 588 p.
- BROEMELING, L. D. **Bayesian analysis of linear models**. New York: M. Dekker, 1985. 454p.
- CASELLA, G.; GEORGE, E.I. Explaining the Gibbs Sampler. **The American Statistician**, New York, v.46, p.167-174, 1992.
- CHEN, M.H.; SHAO, Q.M. Monte Carlo estimation of Bayesian credible and HPD intervals. **Journal of Computational and Graphical Statistics**, Alexandria, v.8, n.1, p.69-92, 1999.
- CHIB, S.; GREENBERG, E. Understanding the Metropolis-Hastings algorithm. **The American Statistician**, Alexandria, v.49, n.4, p.327-335, 1995.
- DRAPER, N.R.; SMITH, H. **Applied regression analysis**. 3.ed. New York: John Wiley & Sons, 1998. 706p.
- EHLERS, R.S. **Introdução à Inferência Bayesiana**. Departamento de estatística – UFPR, 2005. Disponível em: <<http://leg.ufpr.br/ehlers/bayes>>. Acesso em: 10 ago. 2012.
- EZEQUIEL, J.M.B.; GALATI, R.L. Técnicas *in vitro* e *in situ* para estimativa da degradabilidade ruminal de alimentos. In: SIMPÓSIO INTERNACIONAL AVANÇOS EM TÉCNICAS DE PESQUISA EM NUTRIÇÃO DE RUMINANTES, Pirassununga, 2007. **Anais...** Pirassununga: USP, 2007. p.16-71.
- FRANCE, J.; DHANOA, M.S.; THEODOROU, M.K.; LISTER S. J.; DAVIES D. R.; ISAC D. A model to interpret gas accumulation profiles with *in vitro* degradation of ruminal feeds. **Journal of Theoretical Biology**, London, v.163, p.99-111, 1993.
- GALLANT, A.R. **Nonlinear statistical models**. New York: J. Wiley, 1987. 610 p.
- GAMERMAN, D. **Markov Chain Monte Carlo: stochastic simulation for Bayes inference**. London: Chapman & Hall, 1997. 245 p.
- GAMERMAN, D.; LOPES, H.F. **Markov Chain Monte Carlo: stochastic simulation for Bayes inference**. London: Chapman & Hall, 2006. 323 p.

GELFAND, A.E.; SMITH, A.F.M. Sampling based approaches to calculating marginal densities. **Journal of the American Statistical Association**, Alexandria, v.85, n.410, p.398-409, 1990

GELMAN, A.; CARLIN, J. B.; STERN, H. S.; RUBIN, D. B. **Bayesian data analysis**. London: Chapman Hall, 1997. 526 p.

GELMAN, A.; RUBIN, D.B. Inference from iterative simulation using multiple sequences. **Statistical Science**, Hayward, v.7, p.457-472, 1992.

GEMAN, S.; GEMAN, D. Stochastic relaxation, Gibbs Distributions and Bayesian restoration of Images. **IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence**. New York, v.6, p.721-741, 1984.

GETACHEW, G.; BLÜMMEL, M.; MAKKAR, H.P.S.; BECKER, K. In vitro gas measuring techniques for assessment of nutrition quality of feeds: a review. **Animal Feed Science Technology**, Amsterdam, v.72, p.261-281, 1998.

GEWEKE, J. Evaluating the accuracy of sampling-based approaches to calculating posterior moments. **Bayesian Statistics**, New York, v.4, p.625-631, 1992.

GREEN, P.J. Reversible jump Markov Chain Monte Carlo Computation and Bayesian model determination. **Biometrika**, London, v.82, p.711-732, 1995.

GOMIDE, J.A. A técnica de fermentação ruminal *in vitro* na avaliação de forragens. **Revista da Sociedade Brasileira de Zootecnia**, Viçosa, v.3, p.210-224, 1974.

GROOT, J.C.J.; CONE, J.W.; WILLIAMS, B.A.; DEBERSAQUES, F. M. A.; LANTINGA, E. A. Multiphasic analysis of gas production kinetics for in vitro fermentation of ruminant feeds. **Animal Feed Science and Technology**, Netherlands, v.64, p.77-89, 1996.

HASTINGS, W.K. Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications. **Biometrika**, London, v.57, n.1, p.97-109, 1970.

HEIDELBERG, P.; WELCH, P. Simulation run length control in the presence of an initial transient. **Operations Research**, Landing, v.31, p.1109-1114, 1993.

HOFFMANN, R.; VIEIRA, S. **Análise de regressão: uma introdução à econometria**. São Paulo: HUCITEC, 1998. 379 p.

JEFFREYS, H. **Theory of probability**. Oxford: Claredon, 1961. 325 p.

LAVRENCIC, A.; STEFANON, B.; SUSMEL, P. An evaluation of the Gompertz model in degradability studies of forage chemical components. **Animal Science**. Cambridge, v.64, p.423-431. 1997

MALAFIA, P.A.M.; VALADARES FILHO, S.C.; VIEIRA, R.A.M. et al. Cinética ruminal de alguns alimentos investigada por técnicas gravimétricas e metabólicas. **Revista Brasileira de Zootecnia**, Viçosa, v.27, p.370-380, 1998.

MAURÍCIO, R.M.; MOULD, F.L.; DHANOA, M.S.; OWEN, E.; CHANNA, K.S.; THEODOROU, M.K. A semi-automated *in vitro* gas production technique for ruminant feedstuff evaluation. **Animal Feed Science and Technology**, Amsterdam v.79, p.321-330, 1999.

MAURÍCIO, R. M.; PEREIRA, L. G. R.; GONÇALVES, L. C.; RODRIGUEZ, N. M. Relação entre pressão e volume para implantação da técnica *in vitro* semi-automática de produção de gases na avaliação de forrageiras tropicais. **Arquivo Brasileiro de Medicina Veterinária e Zootecnia**. Belo Horizonte, v.55, n.2, p.216-219. 2003.

MAZZINI, A. R. A.; MUNIZ, J. A.; AQUINO, L. H.; SILVA, F. F. Curva de crescimento de novilhos Hereford: heterocedasticidade e resíduos autoregressivos. **Ciência Rural**. Santa Maria, v.35, n.2, p. 422-427, 2005.

MENKE, K.H.; RAAB, L.; SALEWSKY, A.; STEINGASS, H.; FRITZ, D.; SCHNEIDER, W. The estimation of the digestibility and metabolizable energy content of ruminant feedstuffs from the gas production when they are incubated with rumen liquor *in vitro*. **The Journal of Agricultural Science**, Cambridge, v.93, p.217-223, 1979.

MERTENS, D.R. Principles of modeling and simulation in teaching and research. **Journal of Dairy Science**, Champaign, v.60, n.7, p.1176-1186, 1976.

MERTENS, D.R.; LOFTEN, J.R. The effects of starch on large fiber digestion kinetics *in vitro*. **Journal of Dairy Science**, Champaign, v.63, p.1437-1446. 1980.

METROPOLIS, N.; ROSENBLUTH, A.W.; ROSENBLUTH, M.N.; TELLER, A.H.; TELLER, E. Equations of state calculations by fast computing machine. **Journal of Chemical Physics**, New York, v.21, p.1087-1092, 1953.

MORETTIN, P.A.; TOLOI, C. M. C. **Previsão de séries temporais**. 3.ed. São Paulo: Atual, 2004. 436p.

MOTULSKY, H.; CHRISTOPOULOS, A. **Fitting models to biological data using linear and nonlinear regression. A practical guide to curve fitting**. 4.ed. San Diego: GraphPad Software Inc., 2003. 351p.

NOGUEIRA, D.A.; SAFÁDI, T.; FERREIRA, D.F. Avaliação de critérios de convergência para o método de Monte Carlo via Cadeias de Markov. **Revista Brasileira de Estatística**, Rio de Janeiro, v.65, n.224, p.59-88, 2004.

ORSKOV, E.R. Evaluation of fibrous diets for ruminants. In: INTERNATIONAL SEMINAR ON FEEDINGS EVALUATION MODERN ASPECTS-PROBLEMS-FUTURE TRENDS, 1986, Aberdeen. **Proceedings...** Aberdeen: Rowett Research Institute, 1986. p.38-41.

ORSKOV, E.R.; MCDONALD, I. The estimation of protein degradability in the rumen from incubation measurements weighted according to rate of passage. **Journal of Agricultural Science**, Cambridge, v.92, p.499-503, 1979.

PAULINO, C.D.; TURKMAN, M.A.A.; MURTEIRA, B. **Estatística Bayesiana**. Lisboa: Fundação Calouste Gulbenkian, 2003. 429 p.

PELL, A.N., SCHOFIELD, P. Computerized monitoring of gas production to measure forage digestion in vitro. **Journal of Dairy Science**, Champaign, v.76, p.1063-1073, 1993.

PEREIRA, J. M. Comparação entre modelos para predição do nitrogênio mineralizado: uma abordagem bayesiana, Lavras: UFLA, 2006. 79p.

PEREIRA, L.G.R.; MAURÍCIO, R.M.; CARNEIRO, J. C.; AROEIRA, L. J. M. Avaliação de espécies arbóreas pela técnica in vitro semi-automática de produção de gases. In: REUNIÃO ANUAL DA SOCIEDADE BRASILEIRA DE ZOOTÉCNICA, 44., 2007, Jaboticabal. **Anais...** Jaboticabal: UNESP, 2007. p.1-3.

PEREIRA, J.M.; MUNIZ, J.A.; SILVA, C.A. Nonlinear models to predict nitrogen mineralization in an oxisol. **Scientia Agricola**. Piracicaba, v.62, n.4, p.395-400, 2005.

R DEVELOPMENT CORE TEAM. **R**: A language and environment for statistical computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. Disponível em: <<http://www.R-project.org>>. Acesso em: 09 jan. 2011.

RAFTERY, A.L.; LEWIS, S. Comment: one long run with diagnostics: implementation strategies for Markov chain Monte Carlo. **Statistical Science**. Hayward, v.7, n.4, p.493-497, 1992.

ROSA, G.J.M. **Análise Bayesiana de modelos lineares mistos robustos via Amostrador de Gibbs**. 1998. p.57. Tese (Doutorado em Estatística e Experimentação Agrônômica) – Universidade de São Paulo, Piracicaba, SP.

RUSSELL, J.B.; O'CONNOR, J.D.; FOX, D.G.; VAN SOEST, P.J.; SNIFFEN, C.J. A net carbohydrate and protein system for evaluating cattle diets: I. Ruminal fermentation. **Journal of Animal Science**, Champaign, v.70, n.12, p.3551-3561, 1992.

SANTOS, R.A.; TEIXEIRA, J.C.; PEREZ, J.R.; PAIVA, P.C.A.; MUNIZ, J.A.; ARCURI, P.B. Estimativa da degradabilidade ruminal de alimentos utilizando a técnica de produção de gás em bovinos, ovinos e caprinos. **Ciência e Agrotecnologia**, Lavras, v.27, n.3, p.689-695, 2003.

SCHOFIELD, P.; PELL, A.N. Validity of using accumulated gas pressure readings to measure forage digestion in vitro: A comparison involving three forages. **Journal of Dairy Science**, Champaign, v.78, n.10, p.2230-2238, 1995.

SCHOFIELD, P.; PITT, R.E.; PELL, A.N. Kinetics of fiber digestion from in vitro gas production. **Journal of Animal Science**, Champaign, v.72, n.11, p.2980-2991, 1994.

SOUZA, G. S. **Introdução aos modelos de regressão linear e não linear**. Brasília: Embrapa-SPI/Embrapa-SEA, 1998. 489p.

TAVARES, V.B. Silagens de capim-elefante aditivadas com raspas de batata diversa na alimentação de bovinos leiteiros, Lavras: UFLA, 2009. 100 p.

TAMMINGA, S. Recent advances in our knowledge on protein digestion and absorption in ruminants. In: INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON PROTEIN METABOLISM AND NUTRITION, 4., 1983. **Anais...** Clermont-Ferrand: INRA, 1983. v.1, p.263-287.

TEIXEIRA, J.C. Introdução aos métodos de determinação de digestibilidade em ruminantes. In: SIMPÓSIO INTERNACIONAL DE DIGESTIBILIDADE EM RUMINANTES, 1997. **Anais...** Lavras: FAEPE, 1997. p.7-27.

THEODOROU, M.K.; WILLIAMS, B.A.; DHANOA, M.S.; McALLAN, A.B. A simple gas production method using a pressure transducer to determine the fermentation kinetics of ruminal feeds. **Animal Feed Science and Technology**, Amsterdam, v.48, n. 1, p.185-197, 1994.

VALADARES FILHO, S.C. Utilização da técnica “*in situ*” para a avaliação de alimentos. In: SIMPÓSIO INTERNACIONAL DE PRODUÇÃO DE RUMINANTES; REUNIÃO ANUAL DA SOCIEDADE BRASILEIRA DE ZOOTECNIA, 31., 1994, Maringá. **Anais...** Maringá: SBZ, 1994.p.95-118.

VAN SOEST, P.J. **Nutritional ecology of the ruminant**. 2.ed. Ithaca: CornellUniversity Press. 1994. 476p.

VISMARA, L.S.; KARAM, D.; MORITA L.H.M. Aplicação das inferências clássica e bayesiana na estimação dos parâmetros do modelo de densidade populacional de plantas daninhas. **Planta Daninha**, Viçosa, v. 25, p. 661-669, 2007.

APÊNDICES

APÊNDICE A – Programação em R utilizada no desenvolvimento da metodologia clássica

```
rm(list=ls(all=TRUE))
```

```
d1=read.csv2("sce14.csv",h=T);d1
```

```
attach(d1)
```

```
require(nlme)
```

```
##### MODELO NÃO SIGMOIDAL #####
```

```
## Modelo não sigmoidal sem AR;
```

```
m0.1=gnls(med~v*(1-exp(-k*(tempo-l))),start=list(v=300,k=0.06,l=7), verbose=T)
```

```
summary(m0.1)
```

```
intervals(m0.1)
```

```
# Modelo não sigmoidal com AR1
```

```
m0.2=gnls(med~v*(1-exp(-k*(tempo-
```

```
l))),start=list(v=300,k=0.06,l=7),corr=corARMA(form=~1,p=1,q=0), verbose=T)
```

```
summary(m0.2)
```

```
intervals(m0.2)
```

```
# Modelo não sigmoidal com AR2
```

```
m0.3=gnls(med~v*(1-exp(-k*(tempo-
```

```
l))),start=list(v=300,k=0.06,l=7),corr=corARMA(form=~1,p=2,q=0), verbose=T)
```

```
summary(m0.3)
```

```
intervals(m0.3)
```

```
anova(m0.1,m0.2)
```

```
anova(m0.1,m0.3)
```

```
##### MODELO DE SCHOFIELD #####
```

```
# Modelo Schofield sem AR
```

```
m1.0=gnls(med~v/(1+exp(2-4*k*(tempo-l))),start=list(v=300,k=0.06,l=7))
```

```
summary(m1.0)
```

```
intervals(m1.0)
```

```
# Modelo Schofield com AR1
```

```
m1.1=gnls(med~v/(1+exp(2-4*k*(tempo-
```

```
l))),start=list(v=300,k=0.06,l=10),corr=corARMA(form=~1,p=1,q=0))
```

```
summary(m1.1)
```

```
intervals(m1.1)
```



```
# # Modelo Schofield com AR2
```

```
m1.2=gnls(med~v/(1+exp(2-4*k*(tempo-
l))),start=list(v=350,k=0.02,l=2),corr=corARMA(form=~1,p=2,q=0))
summary(m1.2)
intervals(m1.2)
```

```
anova(m1.0, m1.1)
anova(m1.0, m1.2)
```

```
##### MODELO DE GOMPERTZ #####
```

```
# Modelo Gompertz sem AR
```

```
m2.0=gnls(med~v*exp(-a*exp(-k*tempo)),start=list(v=300,a=6,k=0.1))
summary(m2.0)
intervals(m2.0)
```

```
# Modelo Gompertz com AR1
```

```
m2.1=gnls(med~v*exp(-a*exp(-
k*tempo)),start=list(v=300,a=6,k=0.1),corr=corARMA(form=~1,p=1,q=0))
summary(m2.1)
intervals(m2.1)
```

```
# # Modelo Gompertz com AR2
```

```
m2.2=gnls(med~v*exp(-a*exp(-
k*tempo)),start=list(v=300,a=6,k=0.1),corr=corARMA(form=~1,p=2,q=0), verbose=T)
summary(m2.2)
intervals(m2.2)
```

```
anova(m2.0, m2.1)
anova(m2.0, m2.2)
```

```
#### Gráficos e estatísticas - estas rotinas foram rodadas para todos os modelos:
```

```
spar(mfrow=c(1,3), pty = "s")
acf(residuals(m0.1))
acf(residuals(m0.2))
acf(residuals(m0.3))
pacf(residuals(m0.1))
pacf(residuals(m0.2))
pacf(residuals(m0.3))
```

```
par(mfrow=c(3,3), pty = "s")
```

```

plot(med~tempo,d1)
points(fitted(m0.1)~tempo,pch=16, col="green")
plot(med~tempo,d1)
points(fitted(m0.2)~tempo,pch=16,col="red")
plot(med~tempo,d1)
points(fitted(m0.3)~tempo,pch=16,col="blue")
r1=residuals(m0.1,type="normalized")
p1=predict(m0.1)
plot(p1,r1,ylim=c(-5,5),pch=16)
abline(h=0, col="RED",lwd=2)
r2=residuals(m0.2,type="normalized")
p2=predict(m0.2)
plot(p2,r2,ylim=c(-5,5),pch=16)
abline(h=0, col="RED",lwd=2)
r3=residuals(m0.3,type="normalized")
p3=predict(m0.3)
plot(p3,r3,ylim=c(-5,5),pch=16)
abline(h=0, col="RED",lwd=2)
qqnorm(r1); qqline(r1, lty=2)
qqnorm(r2); qqline(r2, lty=2)
qqnorm(r3); qqline(r3, lty=2)

shapiro.test(r1)
shapiro.test(r2)
shapiro.test(r3)

rt1 = residuals(m0.1)
rt2 = residuals(m0.2)
rt3 = residuals(m0.3)
cbind(r1,rt1,r2,rt2,r3,rt3)

```

APÊNDICE B – Programação em R utilizada no desenvolvimento da metodologia bayesiana

A seguir é apresentada a rotina construída para desenvolver os resultados através da abordagem bayesiana:

```
rm(list=ls(all=TRUE))

## Pacotes necessários:
require(MCMCpack)
require(msm)

## carregando os dados:
t=c(4,8,12,24,36,48,72,96)
ysi=c(7.9841 ,17.0035 ,33.3173 ,78.8697 ,112.3713 ,143.9045 ,187.8814 ,226.4943)

n=length(t)
Niter=300000
nn=length(t)-1

## Matrizes para guardar as cadeias:
V=matrix(0,Niter,1)
K=matrix(0,Niter,1)
L=matrix(0,Niter,1)
taue=matrix(0,Niter,1)

mu_V=matrix(0,Niter,1)
var_V=matrix(0,Niter,1)

cand_K=matrix(0,Niter,1)
prob_1=matrix(0,Niter,1)
z=matrix(0,Niter,1)
K_num=matrix(0,Niter,1)
K_denom=matrix(0,Niter,1)

cand_L=matrix(0,Niter,1)
prob_2=matrix(0,Niter,1)
w=matrix(0,Niter,1)
L_num=matrix(0,Niter,1)
L_denom=matrix(0,Niter,1)

alfa_tae=matrix(0,Niter,1)
beta_tae=matrix(0,Niter,1)

## Valores iniciais:
V[1]=320
K[1]=0.013
L[1]=3
taue[1]=0.1
```

```
## Hiperparâmetros - parâmetros das distribuições a priori:
```

```
# Parâmetro V - Distribuição Normal (mu0;tau0)
```

```
mu0_V=321
```

```
sdv=16
```

```
vv=sdv^2
```

```
tau0_V=1/vv
```

```
# Parâmetros K - Distribuição Beta (a_K;b_K)
```

```
a_K=83.17
```

```
b_K=1663
```

```
# parâmetro L - Distribuição Gamma (alfa_L;beta_L)
```

```
alfa_L=31.09
```

```
beta_L=10.54
```

```
# parâmetro taue - Distribuição Gamma (alfa_t;beta_t)
```

```
alfa_t=2
```

```
beta_t=3
```

```
## Gerando as cadeias:
```

```
for(i in 2:Niter)
```

```
{
```

```
# Algoritmo Gibbs para o parametro V
```

```
mu_V[i]=((taue[i-1]*(sum(ysi*(1-exp(-K[i-1]*(t-L[i-1]))))))+(tau0_V*mu0_V))/((taue[i-1]*(sum((1-exp(-K[i-1]*(t-L[i-1]))^2))))+(tau0_V))
```

```
var_V[i]=1/((taue[i-1]*(sum((1-exp(-K[i-1]*(t-L[i-1]))^2))))+(tau0_V))
```

```
V[i]=rnorm(1,mu_V[i],sqrt(var_V[i]))
```

```
# Metropolishastings para o parametro K
```

```
cand_K[i]=abs(rnorm(1,0.013,sqrt(1E-9))) #valor gerado da dist candidata
```

```
K_num[i]=(exp((-taue[i-1]/2)*(sum((ysi-V[i-1]*(1-exp(-cand_K[i]*(t-L[i-1]))^2))))*((cand_K[i]^a_K-1))*((cand_K[i]-1)^(b_K-1))))
```

```
K_denom[i]=(exp((-taue[i-1]/2)*(sum((ysi-V[i-1]*(1-exp(-K[i-1]*(t-L[i-1]))^2))))*((K[i-1]^a_K-1))*((K[i-1]-1)^(b_K-1))))
```

```
prob_1[i]=min(1,(K_num[i]/K_denom[i])) # cond completa de K(algoritmo MH)
```

```
z[i]=runif(1,0,1)
```

```
if (z[i]<=prob_1[i]) {K[i]=cand_K[i]} else {K[i]=K[i-1]}
```

```
# Metropolishastings para o parametro L
```

```
cand_L[i]=rgamma(1,31,10) #valor gerado da dist candidata
```

```
L_num[i]=exp((-taue[i-1]/2)*sum(((ysi)-(V[i-1]*(1-exp(-K[i-1]*(t-cand_L[i]))))^2))*((cand_L[i])^(alfa_L-1))*exp(-beta_L*cand_L[i]))
```

```
L_denom[i]=exp((-taue[i-1]/2)*sum(((ysi)-(V[i-1]*(1-exp(-K[i-1]*(t-L[i-1]))))^2))*((L[i-1])^(alfa_L-1))*exp(-beta_L*L[i-1]))
```

```
prob_2[i]=min(1,(L_num[i]/L_denom[i])) # cond completa de L(algoritmo MH)
```

```
w[i]=runif(1,0,1)
```

```
if (prob_2[i]>= w[i]) L[i]=cand_L[i] else L[i]=L[i-1]
```

```
# Algoritmo Gibbs para o parametro tau
alfa_tau[i]=((2*alfa_t+n)/2)
beta_tau[i]=beta_t+(sum(((ysi)-(V[i-1]*(1-exp(-K[i-1]*(t-L[i-1]))))^2)/2)
tau[i]=rgamma(1,shape=alfa_tau[i],scale=1/beta_tau[i]) #cond completa de tau (GS)

}
```

```
## Gráficos das cadeias e densidades:
```

```
par(mfrow=c(4,2))
plot.ts(V)
plot(density(V))
```

```
plot.ts(K)
plot(density(K))
```

```
plot.ts(L)
plot(density(L))
```

```
plot.ts(tau)
plot(density(tau))
```

```
cadeia=cbind(V,K,L,tau)
```

```
## Criando matriz:
```

```
Conv<- matrix(0,Niter,4,dimnames=list(c(1:Niter),c("V","K","L","tau")))
Conv[,1] <- V
Conv[,2] <- K
Conv[,3] <- L
Conv[,4] <- tau
```

```
## Análise inicial no BOA:
```

```
library(boa)
boa.menu()
```

```
## Estabelecendo Burn-in e Thin:
```

```
burn <- 10000
thin <- 20
val<- round((Niter-burn)/(thin+1))
```

```
## Criando matriz de análise cadeia com descarte e salto:
```

```
Vfin<- rep(0,val)
Kfin<- rep(0,val)
Lfin<- rep(0,val)
taufin<- rep(0,val)
```

```

in1 <- burn+1
for (i in 1:val) {
Vfin[i] <- V[in1]
Kfin[i] <- K[in1]
Lfin[i] <- L[in1]
tauefin[i] <- taue[in1]
in1 <- in1+thin+1
}

Convf<- matrix(0,val,4,dimnames=list(c(1:val),c("Vfin","Kfin","Lfin","tauefin")))
Convf[,1] <- Vfin
Convf[,2] <- Kfin
Convf[,3] <- Lfin
Convf[,4] <- tauefin

## Análise de convergência das cadeias finais
boa.menu()

## Gráficos:
par(mfrow=c(2,2))
plot(density(Vfin),main="Dist Posteriori de V")
plot(density(Kfin),main="Dist Posteriori de K")
plot(density(Lfin),main="Dist Posteriori de L")
plot(density(tauefin),main="Dist Posteriori de tau")

## Obtendo a Média e Moda das estimativas:
library(modeest)
mlv(Vfin)
mean(Vfin)
mlv(Kfin)
mean(Kfin)
mlv(Lfin)
mean(Lfin)
mlv(tauefin)
mean(tauefin)

```