



LAÍS MESQUITA SILVA

**MODELOS NÃO LINEARES: APLICAÇÃO DA ANÁLISE
BAYESIANA AOS DADOS ORIGINAIS E ISOTONIZADOS DO
ACÚMULO DO NITROGÊNIO NO FEIJOEIRO CV. JALO**

LAVRAS – MG

2019

LAÍS MESQUITA SILVA

**MODELOS NÃO LINEARES: APLICAÇÃO DA ANÁLISE BAYESIANA AOS DADOS
ORIGINAIS E ISOTONIZADOS DO ACÚMULO DO NITROGÊNIO NO FELJOEIRO
CV. JALO**

Tese de doutorado apresentado a Universidade Federal de Lavras como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Estatística e Experimentação Agropecuária, para obtenção do título de doutor.

Prof. Dr. Augusto Ramalho de Moraes
Orientador

**LAVRAS – MG
2019**

**Ficha catalográfica elaborada pelo Sistema de Geração de Ficha Catalográfica da Biblioteca
Universitária da UFLA, com dados informados pelo(a) próprio(a) autor(a).**

Silva, Laís Mesquita.

Modelos não lineares: aplicação da análise bayesiana aos dados
originais e isotoniados do acúmulo do nitrogênio no feijoeiro cv.

Jalo / Laís Mesquita Silva. - 2019.

96 p. : il.

Orientador(a): Augusto Ramalho de Moraes.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Lavras, 2019.

Bibliografia.

1. Regressão não linear. 2. Modelo logístico. 3. Curva de
crescimento. I. Moraes, Augusto Ramalho de. II. Título.

LAÍS MESQUITA SILVA

**MODELOS NÃO LINEARES: APLICAÇÃO DA ANÁLISE BAYESIANA AOS DADOS
ORIGINAIS E ISOTONIZADOS DO ACÚMULO DO NITROGÊNIO NO FEJJOEIRO
CV. JALO**

Tese de doutorado apresentado a Universidade Federal de Lavras como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Estatística e Experimentação Agropecuária, para obtenção do título de doutor.

APROVADA em 26 de fevereiro de 2019.

Dr. Isabel de Souza Amorim	UFLA
Prof. Dr. Joel Augusto Muniz	UFLA
Profa. Dr. Alessandra Querino da Silva	UFGD
Prof. Dr. Paulo Henrique Sales Guimarães	UFLA

Prof. Dr. Augusto Ramalho de Moraes
Orientador

**LAVRAS – MG
2019**

*Aos meus pais, Paulo Afonso (in memoriam) e Maria Constança.
A Deus.
DEDICO.*

AGRADECIMENTOS

A Deus pelo dom da vida, por sua presença constante e força diária diante dos desafios da vida.

Aos meus pais, Paulo Afonso da Silva (in memoriam) e Maria Constança Costa Pinto Mesquita, pelo apoio, companheirismo, confiança e força como elementos essenciais para a realização deste sonho.

Ao meus irmãos, Caio Mesquita Silva e Samir Andrade Silva, pela amizade e carinho.

Ao professor Augusto Ramalho de Moraes pela orientação, incentivo, dedicação, disponibilidade, compreensão e apoio, minha gratidão.

Aos professores do Programa de Pós-Graduação em Estatística e Experimentação Agropecuária da UFLA, pelos ensinamentos transmitidos em cada disciplina.

E aos demais funcionários e colegas do Departamento de Estatística da UFLA gratidão pela amizade e companheirismo.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

“É muito melhor arriscar coisas grandiosas, alcançar triunfos e glórias, mesmo expondo-se a derrota, do que formar fila com os pobres de espírito que nem gozam muito nem sofrem muito, porque vivem nessa penumbra cinzenta que não conhece vitória nem derrota.”

Theodore Roosevelt

RESUMO

Os dados do acúmulo de massa possuem característica de ordenação, deste modo, a aplicação da transformação isotônica suaviza os dados para que a eficiência do ajuste seja aumentada. Com base nos modelos de regressão não lineares, os quais permitem sintetizar informações em poucos parâmetros, facilitando e auxiliando na explicação dos processos envolvidos no crescimento vegetal, os modelos não lineares logístico e Gompertz foram utilizados nos dados originais e isotonizados para descrever o acúmulo de nitrogênio do feijoeiro cv. Jalo; sendo usados o critério de informação de Akaike (AIC) e coeficiente de determinação ajustado como medidas de qualidades de ajuste. Obtiveram-se estimativas do peso assintótico máximo, da taxa de crescimento e do ponto de inflexão, o qual variou de acordo com o sistema de plantio e com a densidade de semeadura. A metodologia sobre a modelagem não linear bayesiana do crescimento em acúmulo de nitrogênio permitiu comparar por meio do modelo logístico os tipos de manejos tanto para os dados originais quanto para os dados isotonizados. Portanto o uso da regressão isotônica foi eficiente para a redução da precisão experimental. O modelo não linear logístico apresenta melhor qualidade de ajuste para a descrição do acúmulo de nitrogênio no qual o seu acúmulo aumentou ao longo do ciclo da cultura. O plantio direto apresentou maior acúmulo de nitrogênio do que o plantio convencional. A metodologia bayesiana foi eficiente ao utilizar a isotoniação dos dados, pois houve uma redução dos desvio padrão das estimativas para a maioria dos parâmetros, implicando em uma diminuição da amplitude dos intervalos de confiança.

Palavras-chave: Regressão não linear. Modelo logístico. Curva de crescimento.

ABSTRACT

The mass accumulation data has an ordering characteristic, so the application of the isotonic transformation smoothes the data so that the efficiency of the adjustment is increased. Based on the nonlinear regression models, which allow to synthesize information in a few parameters, facilitating and aiding in the explanation of the processes involved in plant growth, logistic and Gompertz nonlinear models were used in the original and isotonized data to describe the accumulation of nitrogen of common bean cv. Jalo; using the Akaike information criterion (AIC) and adjusted coefficient of determination as measures of adjustment qualities. Estimates of maximum asymptotic weight, growth rate and inflection point were obtained, which varied according to the planting system and sowing density. The methodology on the Bayesian nonlinear modeling of growth in nitrogen accumulation allowed us to compare, through the logistic model, the types of management for both the original data and the isotonized data. Therefore, the use of isotonic regression was efficient for the reduction of experimental precision. The logistic nonlinear model presents better adjustment quality for the description of nitrogen accumulation in which its accumulation increased during the crop cycle. No-tillage presented higher nitrogen accumulation than conventional tillage. The Bayesian methodology was efficient when using data isotonia, as there was a reduction of the standard deviation of the estimates for most of the parameters, implying a decrease in the amplitude of the confidence intervals.

Keywords: Nonlinear regression. Logistic model. Growth curve.

LISTA DE FIGURAS

<p>Figura 4.1 – Representação gráfica dos valores médios originais do acúmulo de nitrogênio (kg ha^{-1}) em função das épocas de avaliação, em dias após a emergência, para as três densidades de semeadura 75, 215 e 355 mil plantas ha^{-1} nos plantios em sistema convencional (PC) e direto (PD), para o feijoeiro cv. Jalo.</p>	43
<p>Figura 4.2 – Representação gráfica dos valores médios isotonizados do acúmulo de nitrogênio (kg ha^{-1}) em função das épocas de avaliação, em dias após a emergência, para as três densidades de semeadura 75, 215 e 355 mil plantas ha^{-1} nos plantios em sistema convencional (PC) e direto (PD), para o feijoeiro cv. Jalo.</p>	44
<p>Figura 4.3 – Ajuste do modelo logístico aos dados originais relativo ao acúmulo de nitrogênio no sistema de plantio convencional e nas três densidades de semeadura, feijoeiro cv. Jalo.</p>	47
<p>Figura 4.4 – Ajuste do modelo logístico aos dados originais relativo ao acúmulo de nitrogênio no sistema de plantio direto e nas três densidades de semeadura, feijoeiro cv. Jalo.</p>	48
<p>Figura 4.5 – Ajuste do modelo logístico aos dados isotonizados relativo ao acúmulo de nitrogênio no sistema de plantio convencional e nas três densidades de semeadura, feijoeiro cv. Jalo.</p>	48
<p>Figura 4.6 – Ajuste do modelo logístico aos dados isotonizados relativo ao acúmulo de nitrogênio no sistema de plantio direto e nas três densidades de semeadura, feijoeiro cv. Jalo.</p>	49
<p>Figura 4.7 – Traço da cadeia gerada pelo método MCMC para os parâmetros a, b, k, a_1, b_1 e k_1 do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto, respectivamente, na densidade de semeadura 75 para os dados tradicionais.</p>	53
<p>Figura 4.8 – Traço da cadeia gerada pelo método MCMC para os parâmetros da, db e dk do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto, respectivamente, na densidade de semeadura 75 para os dados tradicionais.</p>	54
<p>Figura 4.9 – Densidade a posteriori gerada pelo método MCMC para os parâmetros a, b, k, a_1, b_1, k_1, da, db e dk do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto na densidade de semeadura 75 para os dados tradicionais</p>	54

Figura 4.10 – Gráfico de pontos com intervalos confiáveis para os parâmetros $a, b, k, a_1, b_1, k_1, da, db$ e dk do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto na densidade de semeadura 75 para os dados tradicionais.	55
Figura 4.11 – Traço da cadeia gerada pelo método MCMC para os parâmetros a, b, k, a_1, b_1 e k_1 do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto, respectivamente, na densidade de semeadura 215 para os dados tradicionais.	56
Figura 4.12 – Traço da cadeia gerada pelo método MCMC para os parâmetros da, db e dk do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto, respectivamente, na densidade de semeadura 215 para os dados tradicionais. . . .	57
Figura 4.13 – Densidade a posteriori gerada pelo método MCMC para os parâmetros $a, b, k, a_1, b_1, k_1, da, db$ e dk do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto na densidade de semeadura 215 para os dados tradicionais	57
Figura 4.14 – Gráfico de pontos com intervalos confiáveis para os parâmetros $a, b, k, a_1, b_1, k_1, da, db$ e dk do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto na densidade de semeadura 215 para os dados tradicionais.	58
Figura 4.15 – Traço da cadeia gerada pelo método MCMC para os parâmetros a, b, k, a_1, b_1 e k_1 do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto, respectivamente, na densidade de semeadura 355 para os dados tradicionais.	59
Figura 4.16 – Traço da cadeia gerada pelo método MCMC para os parâmetros da, db e dk do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto, respectivamente, na densidade de semeadura 355 para os dados tradicionais. . . .	60
Figura 4.17 – Densidade a posteriori gerada pelo método MCMC para os parâmetros $a, b, k, a_1, b_1, k_1, da, db$ e dk do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto na densidade de semeadura 355 para os dados tradicionais	60
Figura 4.18 – Gráfico de pontos com intervalos confiáveis para os parâmetros $a, b, k, a_1, b_1, k_1, da, db$ e dk do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto na densidade de semeadura 355 para os dados tradicionais.	61
Figura 4.19 – Traço da cadeia gerada pelo método MCMC para os parâmetros a, b, k, a_1, b_1 e k_1 do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto, respectivamente, na densidade de semeadura 75 para os dados isotonzados.	65

Figura 4.20 – Traço da cadeia gerada pelo método MCMC para os parâmetros da , db e dk do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto, respectivamente, na densidade de semeadura 75 para os dados isotonzados. . . .	66
Figura 4.21 – Densidade a posteriori gerada pelo método MCMC para os parâmetros a , b , k , a_1 , b_1 , k_1 , da , db e dk do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto na densidade de semeadura 75 para os dados isotonzados	66
Figura 4.22 – Gráfico de pontos com intervalos confiáveis para os parâmetros a , b , k , a_1 , b_1 , k_1 , da , db e dk do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto na densidade de semeadura 75 para os dados isotonzados.	67
Figura 4.23 – Traço da cadeia gerada pelo método MCMC para os parâmetros a , b , k , a_1 , b_1 e k_1 do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto, respectivamente, na densidade de semeadura 215 para os dados isotonzados.	68
Figura 4.24 – Traço da cadeia gerada pelo método MCMC para os parâmetros da , db e dk do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto, respectivamente, na densidade de semeadura 215 para os dados isotonzados. . .	69
Figura 4.25 – Densidade a posteriori gerada pelo método MCMC para os parâmetros a , b , k , a_1 , b_1 , k_1 , da , db e dk do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto na densidade de semeadura 215 para os dados isotonzados	69
Figura 4.26 – Gráfico de pontos com intervalos confiáveis para os parâmetros a , b , k , a_1 , b_1 , k_1 , da , db e dk do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto na densidade de semeadura 215 para os dados isotonzados.	70
Figura 4.27 – Traço da cadeia gerada pelo método MCMC para os parâmetros a , b , k , a_1 , b_1 e k_1 do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto, respectivamente, na densidade de semeadura 355 para os dados isotonzados.	71
Figura 4.28 – Traço da cadeia gerada pelo método MCMC para os parâmetros da , db e dk do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto, respectivamente, na densidade de semeadura 355 para os dados isotonzados. . .	72
Figura 4.29 – Densidade a posteriori gerada pelo método MCMC para os parâmetros a , b , k , a_1 , b_1 , k_1 , da , db e dk do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto na densidade de semeadura 355 para os dados isotonzados	72

Figura 4.30 – Gráfico de pontos com intervalos confiáveis para os parâmetros a , b , k , a_1 , b_1 , k_1 , da , db e dk do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto na densidade de semeadura 355 para os dados isotonzados. 73

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 – Exemplo com dados fictícios para elucidação do processo de transformação de dados por meio da regressão isotônica	18
Tabela 3.1 – Modelo de Gompertz e Logístico e suas respectivas equações	41
Tabela 4.1 – Resumo da análise de variância com fontes de variação (FV), número de graus de liberdade (GL), quadrados médios com respectivo nível de significância do acúmulo de nitrogênio total (T) do feijoeiro cv. Jalo, para dados originais (sem) e isotonzados (com).	42
Tabela 4.2 – Estimativas para os parâmetros, valor do critério de informação de Akaike (AIC) e coeficiente de determinação para os modelos logístico (L) e Gompertz (G) no ajuste do acúmulo de nitrogênio do feijoeiro cv. Jalo, para o sistema de plantio convencional em três densidade de semeadura nos dados tradicionais (sem) e isotonzados (com).	45
Tabela 4.3 – Estimativas para os parâmetros, valor do critério de informação de Akaike (AIC) e coeficiente de determinação para os modelos logístico (L) e Gompertz (G) no ajuste do acúmulo de nitrogênio do feijoeiro cv. Jalo, para o sistema de plantio direto em três densidade de semeadura nos dados tradicionais (sem) e isotonzados (com).	46
Tabela 4.4 – Estimativas para os parâmetros do modelo logístico aos dados tradicionais do acúmulo de nitrogênio do feijoeiro cv. Jalo para o sistema de plantio convencional e direto na densidade de semeadura 75, desvio padrão (DP), Erro de Monte Carlo (MCE) e intervalo de credibilidade (HPD) com 95% de probabilidade.	52
Tabela 4.5 – Estimativas para os parâmetros do modelo Logístico aos dados tradicionais do acúmulo de nitrogênio do feijoeiro cv. Jalo para o sistema de plantio convencional e direto na densidade de semeadura 215, desvio padrão (DP), Erro de Monte Carlo (MCE) e intervalo de credibilidade (HPD) com 95% de probabilidade.	55

Tabela 4.6 – Estimativas para os parâmetros do modelo Logístico aos dados tradicionais do acúmulo de nitrogênio do feijoeiro cv. Jalo para o sistema de plantio convencional e direto na densidade de semeadura 355, desvio padrão (DP), Erro de Monte Carlo (MCErro) e intervalo de credibilidade (HPD) com 95% de probabilidade.	58
Tabela 4.7 – Estimativa do fator de dependência (FD) do critério de Raftery & Lewis e coeficiente de convergência (R) de Gelman & Rubin (R) utilizados na detecção da convergência das cadeias amostradas para os dados originais de nitrogênio do feijoeiro cv. Jalo, para o PC e PD nas densidade de semeadura 75, 215 e 355 mil plantas ha ⁻¹	62
Tabela 4.8 – Estimativas para os parâmetros do modelo Logístico aos dados isotonzados do acúmulo de nitrogênio do feijoeiro cv. Jalo para o sistema de plantio convencional e direto na densidade de semeadura 75, desvio padrão (DP), Erro de Monte Carlo (MCE) e intervalo de credibilidade (HPD) com 95% de probabilidade.	64
Tabela 4.9 – Estimativas para os parâmetros do modelo Logístico aos dados isotonzados do acúmulo de nitrogênio do feijoeiro cv. Jalo para o sistema de plantio convencional e direto na densidade de semeadura 215, desvio padrão (DP), Erro de Monte Carlo (MCE) e intervalo de credibilidade (HPD) com 95% de probabilidade.	67
Tabela 4.10 – Estimativas para os parâmetros do modelo Logístico aos dados isotonzados do acúmulo de nitrogênio do feijoeiro cv. Jalo para o sistema de plantio convencional e direto na densidade de semeadura 355, desvio padrão (DP), Erro de Monte Carlo (MCE) e intervalo de credibilidade (HPD) com 95% de probabilidade.	70
Tabela 4.11 – Estimativa do fator de dependência (FD) do critério de Raftery & Lewis e coeficiente de convergência (R) de Gelman & Rubin (R) utilizados na detecção da convergência das cadeias amostradas para os dados isotonzados de nitrogênio do feijoeiro cv. Jalo, para o PC e PD nas densidade de semeadura 75, 215 e 355 mil plantas ha ⁻¹	74

Tabela 4.12 – Critério de informação de Akaike (AIC), critério de informação bayesiano (BIC) e critério de informação do desvio (DIC) para os dados originais e isotonzados de nitrogênio do feijoeiro cv. Jalo, para o sistema de PC e PD das densidades de semeadura 75, 215 e 355 $kg.ha^{-1}$	75
---	----

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	10
2	REFERENCIAL TEÓRICO	12
2.1	Feijão	12
2.2	Regressão Isotônica	14
2.2.1	Processo de Normalização	17
2.3	Modelos de Regressão	19
2.3.1	Modelos Não Lineares	19
2.3.1.1	Modelo de Gompertz	20
2.3.1.2	Modelo Logístico	21
2.3.2	Método de estimação dos parâmetros na regressão não linear	22
2.3.2.1	Método iterativo de Gauss-Newton	22
2.4	Inferência Bayesiana	24
2.4.1	Monte Carlo via Cadeia de Markov	25
2.4.2	Amostrador de Gibbs	26
2.4.3	Metropolis-Hastings	26
2.4.4	Avaliação da convergência	27
2.4.5	Distribuições marginais	27
2.4.5.1	Modelo de Gompertz com erros independentes	28
2.4.5.1.1	Distribuições condicionais completas para o modelo de Gompertz	29
2.4.5.2	Modelo logístico com erros independentes	30
2.4.5.2.1	Distribuições condicionais completas para o modelo de logístico	31
3	MATERIAL E MÉTODOS	34
3.1	Material	34
3.2	Métodos	35
3.2.1	Análise de variância com dados originais	35
3.2.2	Transformação isotônica e análise de variância	36
3.2.3	Modelos não lineares	36
3.2.4	Avaliação do ajuste	37
3.2.5	Ajuste dos modelos utilizando o enfoque Bayesiano	39
3.2.6	Utilização dos programas computacionais	40
4	RESULTADOS e DISCUSSÃO	42

4.1	Análise de variância dos dados originais e transformados	42
4.2	Modelagem não linear	43
4.3	Inferência Bayesiana	50
4.3.1	Dados originais	51
4.3.2	Dados isotonzados	63
5	CONCLUSÃO	77
	REFERÊNCIAS	78

1 INTRODUÇÃO

No decorrer da expansão do vegetal, assim como nos seus diversos períodos de desenvolvimento, é de essencial importância o conhecimento do processo de ganho de massa auxiliando no controle da produção, pelos manejos mais adequados. Uma das formas de avaliar o crescimento vegetal é por meio do estudo de curvas de crescimento, as quais descrevem a relação funcional entre a idade e a massa (SILVA et al., 2010). Por meio do estudo quantitativo do crescimento vegetal, pode-se estimar o efeito dos diferentes tratamentos, já que este tipo de abordagem consiste na obtenção de medidas sequenciais do acúmulo de matéria orgânica no desenrolar das fases do vegetal (LUCCHESI, 1984).

A descrição do acúmulo de massa pode ser feita com base em modelos de regressão não lineares, os quais permitem sintetizar informações em poucos parâmetros, auxiliando na explicação dos processos envolvidos no crescimento vegetal, com parâmetros que possibilitam interpretações práticas.

Geralmente, em situações práticas, devido a alguma informação "*a priori*", os parâmetros de interesse apresentam algum tipo de ordenação. Assim deve-se buscar um modelo que preserve esta característica de ordenação (RODRIGUES et al., 2010). Deste modo, regressão isotônica é um método de estimação por mínimos quadrados que proporciona estimativas que satisfazem a característica de ordenação dos dados do acúmulo de massa, sendo seu uso essencial para que a eficiência do ajuste seja aumentada (GONÇALVES et al., 2012).

Ao se avaliar o crescimento de plantas, como o feijoeiro, existe uma relação de que sob condições favoráveis, os valores obtidos em função do tempo apresentam características de ordenação, como o acúmulo de massa das plantas desde a emergência até a colheita. Em situações desse tipo, a utilização da regressão isotônica apresenta-se como uma metodologia adequada, pois mantém a característica de ordenação, de modo que, ao aumentar a variável independente, a variável resposta conseqüentemente aumentará e, além disso, permite corrigir oscilações nos valores observados, os quais podem interferir na qualidade do ajuste dos modelos de regressão.

Portanto, com a transformação dos dados por meio da análise de regressão isotônica espera-se melhorar a qualidade do ajuste dos modelos não lineares e com aplicação da metodologia bayesiana, espera-se obter melhor ajuste devido à disponibilidade de poucas observações longitudinais (épocas) e à possibilidade de comparação das curvas provenientes de diferentes manejos (sistemas de plantio e densidades de semeadura).

O objetivo desse trabalho é apresentar um estudo sobre o comportamento bem como identificar o modelo que melhor caracteriza o padrão dos modelos não lineares de Gompertz e logístico em diferentes cenários de manejos culturais, crescimento em acúmulo de massa seca do macronutriente nitrogênio do feijoeiro ao longo do tempo em função das épocas de avaliação (em dias após a emergência), em três densidades de semeaduras (75, 215, 355 mil plantas por ha^{-1}) e nos sistemas de plantio convencional e direto utilizou-se a técnica de transformação por meio da regressão isotônica e aplicou-se análise bayesiana.

Incluem-se nos objetivos a avaliação da eficiência ou não da transformação isotônica dos dados de acúmulo de nitrogênio em função das épocas de avaliação, e a aplicação da análise bayesiana para a estimação dos parâmetros apresenta-se a modelagem não linear bayesiana do crescimento em acúmulo de nitrogênio de plantio do feijoeiro.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

Neste capítulo será apresentado uma revisão sobre os aspectos sociais do feijoeiro, da regressão isotônica, dos modelos de regressão não lineares e da inferência bayesiana.

2.1 Feijão

O feijoeiro-comum (*Phaseolus vulgaris L.*) é uma das principais culturas produzidas e consumidas no Brasil e no mundo, sendo que o Brasil se destaca como maior produtor mundial do grão. Possui propriedades técnicas e agronômicas que evidenciam um tipo de exploração agrícola tanto para pequenos como grandes produtores. Na América Latina, o feijão faz parte a dieta básica junto com o arroz em todos os tipos de populações possui alto valor nutricional, principalmente se for consumido junto com outros alimentos ricos em carboidrato (FAGERIA, 2002).

O feijão, alimento fonte de proteína vegetal, vitaminas do complexo B e sais minerais, ferro, cálcio e fósforo, o feijão é essencial por proporcionar segurança alimentar, nutricional e por atuar como suporte na dieta populacional. A ingestão do feijão varia de acordo com a região, o ambiente de moradia e poder econômico do consumidor.

O ciclo cultural do feijão é consideravelmente curto, variando em torno de 90 dias. No Brasil, em geral, são realizadas três safras; sendo que a primeira é caracterizada pelo alto índice de chuvas e conhecida como safra das águas e ocorre na região Centro-Sul de agosto a dezembro e, no Nordeste, de outubro a fevereiro. A segunda safra é chamada de safra da seca, pois ocorre no período com menor índice de chuva e acontece de dezembro a março. A última safra se refere ao feijão irrigado, com a concentração de plantio, na região Centro-Sul, de abril a junho (BRASIL, 2013).

Para o ano de 2017, as produções de feijão foram da ordem de 1,38 milhão de toneladas na primeira safra, 1,22 milhão de toneladas na segunda safra e 672,6 mil toneladas na terceira safra (CONAB, 2017). Houve uma redução da área semeada de 8,8%, equivalente a 960,7 mil hectares, na primeira safra 2018/2019 em relação à temporada passada, pois o produtor optou por uma cultura que possuía uma melhor rentabilidade, competindo com a cultura da soja e do milho por área (CONAB, 2018). De Franco (2016) enfatiza que o consumo per capita tende a crescer de 17 para 22 kg/habitante/ano até o ano de 2022.

Sobre o crescimento da vagem, a temperatura e as chuvas exercem grande importância, uma vez que altas temperaturas influenciam prejudicialmente o florescimento e a frutificação

do feijoeiro. As baixas temperaturas são capazes de provocar carência de flores e, assim, levar a um decréscimo de rendimento. Já nas regiões aptas para o cultivo, o florescimento acontece à medida que a temperatura do ar apresenta valores em torno de 21°C. O excesso ou déficit de água nos diferentes estágios da cultura afetam o rendimento em qualquer fase do ciclo, reduzindo a produtividade. Quanto à aplicação de água, faz-se necessário em intervalos de 5 a 10 dias, de acordo com a capacidade de armazenamento de água no solo, do estágio da cultura e da evapotranspiração (BARBOSA; GONZAGA, 2012).

Deve-se ter cuidado especial quanto à escolha da área e do solo, pois o feijoeiro é uma planta com raiz delicada e o maior volume de raízes está concentrado nos primeiros 20 cm de profundidade, sendo indicados solos com boa aeração, de textura areno-argilosa, rico de matéria orgânica e elementos nutritivos (BRASIL, 2013). Outro fato que afeta na escolha do solo é o tipo de cultura sendo este, estabelecido por semeadura convencional, direta ou por cultivo mínimo (BARBOSA; GONZAGA, 2012).

O feijoeiro é uma leguminosa hospedeira de várias doenças que variam de acordo com o ano, a época, o local e o tipo de cultivar utilizada, sendo que os seus procedentes são fungos, bactérias, vírus e nematoides. De acordo com Barbosa e Gonzaga (2012) apresentaram as principais doenças causadas por fungos na parte aérea, por exemplo, são antracnose, ferrugem e mancha-angular e seus agentes causadores são *Colletotrichum lindemuthianum*, *Uromyces appendiculatus*, *Pseudocercospora griseola*, respectivamente.

Como o feijoeiro é uma cultura de ciclo curto e pouco competitiva, com poucas raízes profundas, capaz de ser semeado em épocas distintas e plantado como agricultura de subsistência associada a outras culturas, possui peculiaridades que podem influenciar o seu desenvolvimento e produção. Assim, analisar a taxa de absorção e a acumulação final dos nutrientes possibilita identificar as quantidades de nutrientes absorvidos e a absorção relativa, para utilização em considerável variação de populações, adubações e hábitos de crescimento de acordo com os dias após a emergência (ALBUQUERQUE, 2012). Estudar o efeito dos macronutrientes no crescimento, produção e composição mineral em partes distintas da planta é necessário, também, adquirir dados confiáveis para comparação e verificação do estado nutricional, por meio da análise química do tecido (DANTAS; BERGAMIM FILHO; MALAVOLTA, 1979).

Os elementos químicos carbono (C), oxigênio (O), hidrogênio (H), nitrogênio (N), fósforo (P), potássio (K), cálcio (Ca), magnésio (Mg) e enxofre (S) são denominados macronutrientes. São retirados tanto do ar e da água quanto do solo e são necessários em altas con-

centrações tanto pelo feijoeiro como para qualquer outra cultura. Cada elemento tem grande importância no desenvolvimento da planta e nos cultivos comerciais e o suprimento dos nutrientes P, K, Ca, Mg e S é proporcionado pelo uso de fertilizantes e corretivos no solo (RESENDE et al., 2005).

O nitrogênio faz parte da composição das proteínas e é um dos elementos exigidos em maior quantidade pelas plantas. Sua deficiência acarreta diversos sintomas como o amarelamento (clorose), diminuição das folhas, baixo índice de proteína na semente e partes vegetativas, plantas raquíticas e angulosas, entre outros. O manejo adequado do nitrogênio é fator importante para que se consiga boas produtividades de grãos da cultura e, também, passa a reduzir a degradação do solo. Aliado a este fato, um dos fatores que mais limita maiores produções de feijão é a deficiência de nitrogênio, que é um fato de ocorrência comum em solos de cerrado (FAGERIA, 2002). A aplicação do fósforo é feita em quantidades consideravelmente altas pois este elemento é essencial na formação e crescimento da raiz, sendo fundamental para o desenvolvimento das sementes e produção das plantas. O potássio age de forma efetiva na ativação enzimática, fotossíntese, uso eficiente da água, formação de amido e síntese de proteínas e qualidade do produto final. O cálcio é imprescindível em todas as culturas e tem papel decisivo no desempenho do processo de produção. Outro nutriente substancial nos sistemas enzimáticos é o magnésio, que atua na fotossíntese e respiração. O enxofre é importante e necessário na formação de aminoácidos e proteínas, para a fotossíntese e resistência ao frio (NUTRI-FATOS, 1996).

2.2 Regressão Isotônica

Em algumas situações práticas, devido à alguma informação *a priori*, as observações e o método de análise dos dados de interesse apresentam algum tipo de ordenação. Por exemplo, para os valores observados do acúmulo de massa de nitrogênio em função da idade de crescimento das plantas do feijoeiro constituem um conjunto de dados que preservam a característica de ordenação pois à medida que a planta se desenvolve, maior quantidade de massa vai existindo. Assim, deve-se buscar um modelo que preserve esta característica de ordem. Para os dados de acúmulo ao macronutriente nitrogênio, no feijoeiro cv. Jalo, não é diferente, pois ao se tratar do desenvolvimento das plantas do feijoeiro, existem informações *a priori*, como as épocas de avaliação, desde a emergência até a maturação fisiológica, portanto, até a col-

heita. Desta maneira, os dados de crescimento, em relação ao tempo, possuem propriedades de ordenação (BRITO et al., 2012; SORATO, 2017).

A regressão isotônica, proposta por Barlow et al. (1972), é vista como uma regressão não paramétrica que minimiza a soma dos quadrados de uma função não decrescente. Deste modo, diferencia-se da regressão usualmente utilizada por se valer da informação de uma relação de ordem da variável resposta.

O termo isotônico (ou monotônica) refere-se ao fato de que um aumento na variável independente implique no aumento da variável resposta. Se a variável resposta diminui com o aumento da variável preditora, utiliza-se o termo antitônica (BRITO et al., 2012).

Com a finalidade de caracterização teórica da regressão isotônica Barlow et al. (1972) apresentaram algumas definições básicas.

Definição 1: Seja X um conjunto de números x_1, \dots, x_k . Uma função de valor real f em X é isotônica (ou não decrescente) se para $x, y \in X, x < y$ implicar em $f(x) \leq f(y)$.

Definição 2: Sejam X como na definição 1, g uma função em X e w uma dada função positiva em X . Uma função isotônica g^* em X é uma regressão isotônica de g com pesos w , se ela minimiza, na classe das funções isotônicas f em X , a soma

$$\sum_{x \in X} [y_j(x) - f(x)]^2 w(x). \quad (2.1)$$

De posse da definição 2 surgem algumas perguntas: a primeira delas é se a regressão isotônica existe e uma outra é, existindo, será ela única? A resposta a estas perguntas é sim, e tal fato será demonstrado em teoremas posteriores. O problema de se encontrar a regressão isotônica é então o seguinte: encontrar uma função não decrescente que minimize a soma de quadrado dos erros 2.3, ou seja, dentre todas as funções não decrescentes possíveis, busca-se uma que torna a soma de quadrados de erros a menor possível.

Nas definições 1 e 2, foi utilizado o conceito de ordem dos números reais, chamada de ordem simples, sem que este termo fosse explicitamente definido, isso ocorreu por ser esta ordem a natural que é trabalhada comumente nos problemas de regressão. No entanto os conceitos e resultados teóricos que são apresentados com a regressão isotônica são bem mais gerais e requerem as seguintes definições apresentadas em Lipschutz (1972):

Definição 3: Uma relação binária " \preceq " em X estabelece uma ordem simples em X se:

1. Ela é reflexiva: $x \preceq x$ para todo $x \in X$;
2. Ela é transitiva: $x, y, z \in X, x \preceq y, y \preceq z \Rightarrow x \preceq z$;

3. Ela é anti-simétrica: $x, y \in X, x \preceq y, y \preceq x \Rightarrow x = y$;

4. Quaisquer dois elementos são comparáveis: $x, y \in X \Rightarrow$ ou $x \preceq y$ ou $y \preceq x$.

Definição 4: Uma relação binária " \preceq " em X estabelece uma ordem parcial em X se ela satisfaz as condições 1, 2 e 3 da definição 3, ou seja, ela é reflexiva, transitiva e anti-simétrica.

Definição 5: Uma relação binária " \preceq " em X estabelece uma quase ordem em X se ela satisfaz as condições 1 e 2 da definição 3, ou seja, se ela é reflexiva e transitiva.

Como pode ser observado, toda ordem simples é uma ordem parcial e toda ordem parcial é uma quase ordem. Assim, se a teoria feita sobre uma quase ordem, ela será mais geral do que se fosse feita sobre uma ordem simples, pois englobará todas elas.

Definição 6: Uma função de valor real $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ é isotônica com respeito a uma quase-ordem \preceq em que x se $x, y \in X, x \preceq y$ implicar em $f(x) \leq f(y)$.

Naturalmente, de posse da definição 6, pode-se pensar no problema da regressão isotônica geral sobre um conjunto quase-ordenado, e a definição para esta situação é similar à apresentada pela definição 2.

Definição 7: Se g é uma função em um conjunto quase-ordenado X e w uma dada função positiva sobre X . Uma função isotônica g^* sobre X é uma regressão isotônica de g com pesos w se ela minimiza, na classe das funções isotônicas em X a soma

$$\sum_{j=1}^{m(x)} [y_j(x) - f(x)]^2 w(x). \quad (2.2)$$

Estes conceitos podem ser aplicados para o caso em que f é uma função antitônica como apresentado na próxima definição.

Definição 8: Seja X um conjunto finito x_1, \dots, x_k com a ordem simples $x_1 \prec \dots \prec x_k$. Uma função de valor real f sobre X é antitônica se para $x, y \in X, x \prec y$ implicar em $f(x) \geq f(y)$.

Note que, com as mudanças naturais, todas as definições e consequentemente todos os teoremas para a regressão isotônica também serão válidos para a regressão antitônica. O termo "regressão monótona" foi utilizado inicialmente, no entanto, Barlow et al. (1972) sugeriram o termo "isotônico" que significa "preservando a ordem" e é preferido à monotonicidade que pode ser interpretado como "preservando a ordem" ou "ordem reversa".

Desta maneira, um problema comum em regressão está relacionado a um conjunto de valores pré-fixados $X = x_1, x_2, \dots, x_k$, tais que $x_1 < x_2 < \dots < x_k$. Para $i = 1, 2, \dots, k$ os valores $y_j(x_i)$, $j = 1, 2, \dots, m_i$ são medidas de alguma variável de interesse (variável resposta). Isto é, para $x \in X, y_i(x), \dots, y_{m_i}(x)$ são observações de alguma distribuição.

Seja $\mu = \mu(x) = E[Y|X = x]$, a média da distribuição da variável Y dado $x \in X$. Se μ é modelada como uma função linear nos parâmetros, é razoável estimar μ por regressão linear. Nesse caso, a solução do problema é ajustar uma função linear nos parâmetros aos dados no sentido dos mínimos quadrados, isto é, minimizar

$$\sum_{x \in X} \sum_{j=1}^{m(x)} [y_j(x) - f(x)]^2 \quad (2.3)$$

na classe das funções f , em que f é uma função linear nos parâmetros. Essa teoria é bem discutida em Draper e Smith (1998). Para o caso em que um modelo de regressão não linear nos parâmetros seja adotado para $f(x)$, uma referência é Bates e Wattes (1988), Draper; Smith (1998). Para uma caracterização mais geral da regressão isotônica apresentam-se algumas definições básicas a partir do texto de Barlow et al. (1972.)

No contexto não paramétrico, se quer minimizar a expressão de (2.3), em que f é uma função qualquer definida em X , a solução deste problema é dada por $\hat{\mu}(x) = \bar{y}(x)$.

Em certas situações é razoável supor que μ seja uma função não decrescente de x . Uma estimativa de μ poderia ser obtida minimizando a soma de quadrados (2.1) na classe das funções não decrescente f em X , ou seja, na classe das funções f tais que $x_i < x_j$ implica em $f(x_i) < f(x_j)$.

Leite (2015) utilizou a metodologia da análise de regressão isotônica para transformação dos dados que propiciou um aumento da porcentagem de convergência e a qualidade dos ajustes do modelo de regressão não linear logístico a dados de crescimento que apresentavam falhas descritas por decréscimos dos teores de soluto ao longo do tempo. Do mesmo modo, Rodrigues et al. (2010) utilizaram esta metodologia para estudar a convergência e qualidade dos ajustes dos modelos de regressão não linear logístico, Von Bertalanffy e Gompertz a dados de crescimento que apresentavam distúrbios caracterizados por baixas de pesos em determinadas faixas de idades de animais (dias).

2.2.1 Processo de Normalização

Rodrigues et al. (2010) mostraram o processo de normalização dos dados por meio do algoritmo PAVA (*pool-adjacent-violators algorithm*) aplicado para calcular a regressão isotônica para uma ordem simples. O método inicia-se por meio de uma função $g(x)$. Se $g(x)$ é isotônica, então $g(x) = g^*(x)$. Caso contrário deve existir algum índice i tal que $g(x_{i-1}) < g(x_i)$ é deno-

minado violador. Estes dois valores são substituídos pelas suas médias ponderadas, as quais são denotadas por $Av(i-1, i)$, isto é:

$$g(i-1, i) = \frac{g(x_{i-1})\omega(x_{i-1}) + g(x_i)\omega(x_i)}{\omega(x_{i-1}) + \omega(x_i)} \quad (2.4)$$

Após o cálculo desta média ponderada, os pesos $\omega(x_{i-1})$ e $\omega(x_i)$ são substituídos pela soma $\omega(x_{i-1}) + \omega(x_i)$. Se o novo conjunto, com $p-1$ valores é isotônico, então $g^*(x_{i-1}) = g^*(x_i) = (Av(i-1, i))$ e $g^*(x_j) = g(x_j)$, com $j = 1, 2, \dots, k-1$. De outra forma, existe um violador e o processo precedente é repetido até que se obtenha um conjunto com valores isotônicos. Os valores de g^* são as médias ponderadas dos blocos de valores para os quais existia um violador. Portanto, a regressão isotônica é obtida por um procedimento simples, com significado estatístico, o uso de médias locais para os valores que apresentavam violadores.

SORATO (2017) elucida melhor esse processo, por meio de um exemplo com dados fictícios, os quais são apresentados na tabela 2.1, juntamente com a regressão isotônica pronta.

Tabela 2.1 – Exemplo com dados fictícios para elucidação do processo de transformação de dados por meio da regressão isotônica

i	1	2	3	4	5	6
x	13	23	33	43	53	63
Pesos	1	1	1	1	1	1
$g(x)$	45,76	16,17	34,65	150,15	138,60	334,95
$g^*(x)$	30,96	30,96	34,65	144,37	144,37	334,95

Observe que $g(13) > g(23)$ o que caracteriza esse par de valores como o primeiro violador, assim ambos os valores podem ser substituídos pela média ponderada dada por:

$$g^*(23) = M^* = \frac{g(13) \times w(13) + g(23) \times w(23)}{w(13) + w(23)} = \frac{45,76 \times 1 + 16,17 \times 1}{1 + 1} = 30,96.$$

Desse modo, esse bloco de violadores é substituído pelo valor de sua média ponderada. Ao continuar a análise, o próximo grupo violador é $g(43) > g(53)$, e o processo é repetido, isto é, esse bloco é substituído pela média ponderada que é dada por:

$$g^*(53) = M^* = \frac{g(43) \times w(43) + g(53) \times w(53)}{w(43) + w(53)} = \frac{150,15 \times 1 + 138,60 \times 1}{1 + 1} = 144,37.$$

Nesse ponto, é possível observar que foi encontrado um conjunto de valores isotônicos e o processo é encerrado.

2.3 Modelos de Regressão

2.3.1 Modelos Não Lineares

De acordo com Draper e Smith (1998) os modelos não lineares são usados para descrever o comportamento do crescimento da dinâmica de nutrientes do solo ou de seres vivos, perda de água (secagem), degradação de forrageiras e velocidade de infiltração, entre outros processos que são analisados à medida que o tempo varia e que sejam necessários, de acordo com a área e problema específico, proporcionando estudos para cada situação e variável analisada.

Estes modelos são aplicados em vários campos de estudo e pesquisas, como a biologia, por exemplo, que estão relacionados com o desenvolvimento de vários organismos, como plantas e animais. Em outros campos como química, engenharia e economia, os modelos não lineares também possuem aplicações (SEBER e WILD, 1989). Na agricultura são evidentes as vantagens econômicas e das técnicas administrativas (manejos culturais) em se ter conhecimento de como a produção de massa das plantas cresce, em função da idade da planta, o modo e a rapidez desse crescimento, e ainda, como essas características reagem quando submetidas a condições ambientais ou tratamentos planejados. São considerados como mecanicistas e surgem como solução para fazer suposições por meio do tipo de crescimento e podem ser preditas equações para determinar o modelo de crescimento, ou pode ser empírico e escrito como algum polinômio apropriado.

Um modelo de regressão é considerado como não linear se pelo menos um de seus parâmetros aparece na forma não linear. Por outro lado, um modelo é considerado como não linear se ao menos uma das derivadas parciais relativas aos parâmetros conter um dos parâmetros.

Para n pares de valores do tipo (x_i, y_i) , com $i = 1, 2, \dots, n$ uma relação não linear entre elas pode ser descrita como:

$$y_i = f(x_i, \beta) + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n \quad (2.5)$$

em que, y_i representa os valores da variável resposta, x_i os valores da variável independente e β representa o vetor de parâmetros a serem estimados, ε_i é a componente aleatória não observável ou erro aleatório associado à y_i , considerados independentemente distribuídos com média zero e variância σ^2 e $f(x_i, \beta)$ é o modelo adotado, ou seja, o vetor de funções não lineares em β . O modelo descrito na equação (2.5) pode ser escrito como:

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(x_1, \beta) \\ f(x_2, \beta) \\ \vdots \\ f(x_n, \beta) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix}. \quad (2.6)$$

Dos vários modelos existentes, serão apresentados dois modelos não lineares, ressaltando sua definição, propriedades e aplicação.

2.3.1.1 Modelo de Gompertz

Gompertz desenvolveu os principais estudos sobre mortalidade do século XIX. Em reconhecimento a muitos de seus estudos, no ano de 1819, tornou-se membro da Sociedade Real de Londres. Em 1825, no estudo “On the Nature of the Function Expressive of the Law of Human Mortality, and on a New Mode of Determining the Value of Life Contingencies”, apresentou uma lei que descrevia o crescimento geométrico da taxa de mortalidade. Este estudo apresentou um avanço em relação aos estudos de Thomas Malthus, voltado ao cálculo de anuidades e seguros contra morte. Com intenção de descrever o crescimento de tumores sólidos, Gompertz desenvolveu uma equação que pode ser usada para descrever o crescimento de uma população (DOMINGUES, 2011).

A equação de Gompertz (BOYCE; PRIMA, 1994), usada para descrever o crescimento de uma população vegetal, é dada pela solução da seguinte equação diferencial

$$\begin{cases} \frac{dY}{dt} = k b \ln \frac{a}{b} \\ Y(0) = b_0 \end{cases} \quad (2.7)$$

A resolução desse problema de valor inicial (P.V.I.), conforme apresentado na Equação 2.7, fornece a solução como função do tempo que descreve a produção de matéria seca no instante t , dada por:

$$Y_i = a e^{\{-b[e^{(-kt_i)}]\}} + \varepsilon_i. \quad (2.8)$$

em que, Y_i é o i -ésimo valor observado da variável resposta com $i = 1, 2, \dots, n$ tempos; a é a assíntota superior ou o peso/tamanho assintótico máximo a ser atingido pela variável resposta; b é um parâmetro de locação, pois mantém o formato sigmoidal do modelo e está associado com o ponto de inflexão e não possui interpretação prática direta; k é a taxa de crescimento ou índice de maturidade de modo que, maiores valores indicam um crescimento mais lento e menores

valores estão relacionados ao crescimento precoce; t_i é i -ésimo valor assumido pela variável explicativa; o ε_i é o erro aleatório associado à i -ésima observação, em que $\varepsilon_i \stackrel{i.i.d}{\sim} N(0, \sigma^2)$.

2.3.1.2 Modelo Logístico

O modelo logístico foi proposto pelo sociólogo belga Pierre François Verhulst em 1837, para estudar o crescimento de populações humanas. O modelo clássico de Verhulst ou modelo Logístico é uma modificação do modelo de Malthus e prevê que à medida que o tempo cresce, a população tende a um valor limite, ou seja, prediz fatores inibidores no crescimento da população. Este modelo foi usado e teve maior impacto no século XX para projetar a demografia americana pelos pesquisadores americanos R. Pearl e L. Reed (BASSANEZZI, 2002).

O modelo Logístico (BASSANEZZI, 2002) é representado por:

$$\begin{cases} \frac{dY}{dt} = k b \ln\left(1 - \frac{a}{b}\right) \\ Y_0 = b_0 \end{cases} \quad (2.9)$$

Este modelo apresenta algumas parametrizações, sendo que o mais usual é encontrada em Ratkowsky (1983), cuja expressão é:

$$Y_i = \frac{a}{1 + b e^{-k t_i}} + \varepsilon_i \quad (2.10)$$

em que, Y_i representa o valor observado da variável resposta com $i = 1, 2, \dots, n$, n tempos; a é a assíntota superior ou o peso/tamanho assintótico máximo que a planta pode atingir; b é um parâmetro de locação, pois mantém o formato sigmoidal do modelo e está associado com o ponto de inflexão e não possui interpretação prática direta; k é a taxa de crescimento ou índice de maturidade de modo que, maiores valores indicam um crescimento mais lento e menores valores estão relacionados ao crescimento precoce; t_i é i -ésimo valor assumido pela variável explicativa; o ε_i é o erro aleatório associado à i -ésima observação, em que $\varepsilon_i \stackrel{i.i.d}{\sim} N(0, \sigma^2)$

Tanto o modelo de Gompertz quanto o modelo Logístico apresentam forma sigmoidal e são simétricos em relação ao ponto de inflexão, o qual é dado por $\hat{x} = \frac{\ln(\hat{\beta})}{k}$, e é nesse ponto que ocorre a mudança de concavidade da curva e no qual a taxa de crescimento atinge seu valor máximo. Ao substituir a expressão do ponto de inflexão na função logística obtém-se o valor da função $\hat{y} = \frac{\hat{\alpha}}{2}$, ou seja, é nesse valor que y atinge a metade do valor máximo assintótico.

2.3.2 Método de estimação dos parâmetros na regressão não linear

O método de mínimos quadrados é utilizado na estimação de parâmetros em modelos não lineares de modo semelhante ao que é usado nos modelos lineares (GALLANT, 1987); o que foi realçado por Pereira et al. (2014) destacaram que o método dos mínimos quadrados (MMQ) é um processo bastante aplicado na estimação de parâmetros em modelos de regressão linear e não linear, em detrimento de outros métodos que podem ser adotados, como o Método dos Momentos e da Máxima Verossimilhança.

Admitindo que a função esperança é contínua e possibilita a derivação de primeira e segunda ordens com relação aos parâmetros, a partir da equação apresentada em 2.8 ou 2.10 pode-se obter a soma de quadrados dos erros (SQE), que é dada por:

$$S(\beta) = SQE = \sum_{n=1}^n [y_i - f(x_i, \beta)]^2 = (\mathbf{Y} - f(\beta))'(\mathbf{Y} - f(\beta)). \quad (2.11)$$

Desta maneira, para se obter a soma de quadrados mínima, deriva-se a equação da soma de quadrados de acordo com cada parâmetro e, em seguida, iguala-se a zero, obtendo-se um sistema de equações normais não lineares, o qual não possui solução explícita para os parâmetros. Então, faz-se necessário o uso de métodos iterativos que auxiliam na obtenção da solução aproximada do sistema. Entre os métodos iterativos se destaca o método de Gauss-Newton ou método da linearização (MAZUCHELI; ACHCAR, 2002).

2.3.2.1 Método iterativo de Gauss-Newton

O método iterativo de Gauss-Newton, conhecido também como método de linearização, utiliza uma expansão da série de Taylor de primeira ordem, da função $f(\beta)$, em torno de β^0 , o qual é um vetor de estimativas iniciais com a finalidade de aproximação do modelo não linear a um modelo linear e então, aplicar o método de mínimos quadrados ordinários para estimar os parâmetros (GALLANT, 1987; SILVA et al., 2007).

Gallant (1987) expressa, por meio de uma propagação da série de Taylor de primeira ordem como aproximação de um modelo não linear a um modelo linear e em seguida a aplicação do método de mínimos quadrados para obtenção das estimativas, o método iterativo de Gauss-Newton, por meio de suas consecutivas interações e acarreta a uma solução.

Nesse método, inicialmente, considera-se $\beta^0 = [\beta_1^0, \beta_2^0, \dots, \beta_p^0]$ como conjunto de valores iniciais dos parâmetros em que p é o número de parâmetros do modelo. Em seguida, a partir

dos valores iniciais, aproxima-se a função $f(\beta)$, por termos lineares da expressão, em série de Taylor, na vizinhança de β^0 , pela expressão:

$$f(\beta) = f(\beta^0) + \frac{\partial f(\beta^0)}{\partial \beta}(\beta - \beta^0)$$

em que $\frac{\partial f(\beta^0)}{\partial \beta}$ é a matriz de derivadas parciais em relação a cada parâmetro β . Uma das maneiras de simplificar é substituir $\frac{\partial f(\beta^0)}{\partial \beta}$ por $F(\beta^0)$ e reescrever matricialmente como:

$$Y = f(\beta) + e,$$

e, o modelo fica expresso por:

$$Y = f(\beta^0) + F(\beta^0)(\beta - \beta^0) + \varepsilon.$$

A aproximação da soma de quadrados dos erros é:

$$SQR = \|Y - f(\beta^0) - F(\beta^0)(\beta - \beta^0)\|^2.$$

O valor que minimiza a soma de quadrados dos erros, β^* , pode ser encontrado usando-se a expressão

$$\beta^* = [F'(\beta^0)F(\beta^0)]^{-1}F'(\beta^0)[Y - f(\beta^0)].$$

É importante enfatizar que uma das características deste método é que se a função esperança é linear o processo é repetido até obter a convergência, a partir do critério de parada estabelecido. Faz-se necessário um novo ciclo se o critério de convergência não for admitido pelo pesquisador. O novo valor de β para o passo seguinte será $\beta^1 = \beta^0 + \beta^*$, e assim sucessivamente até que o critério seja satisfeito. Em geral, na utilização desse procedimento, o algoritmo deverá convergir se tiver valores iniciais adequados e, esses valores podem ser obtidos em estudos anteriores, por desenvolvimento teórico ou por uma grade de valores que minimizem a soma de quadrados dos erros. Gallant (1987) e Draper e Smith (1998) apresentaram sugestões de técnicas para a obtenção de valores iniciais, com vistas a se ter um convergência mais rápida.

2.4 Inferência Bayesiana

Uma das abordagens que se tem mostrado eficiente na estimação dos parâmetros é a abordagem bayesiana, a qual leva em consideração tanto as observações realizadas no experimento quanto os parâmetros do modelo como sendo variáveis aleatórias. Destaca-se como vantagens da abordagem bayesiana, o sucesso da modelagem, mesmo com amostra relativamente pequena, e a obtenção das estimativas intervalares mais precisas, conforme comentam Macedo et al., 2014 e Martins Filho et al. 2008.

Para Gelman et al. (1997) o principal procedimento de inferência bayesiana é fundamentada no Teorema de Bayes. Desta maneira, seja $y = (y_1, y_2, \dots, y_n)$ uma amostra aleatória de tamanho n de uma distribuição de probabilidade $f(y|\theta)$, no qual y é o vetor de amostras observadas e θ é o vetor de parâmetros de interesse de dimensão k . A intenção é incorporar informações de probabilidade sobre θ dado y . Portanto, tem-se que iniciar o procedimento com um modelo utilizando uma distribuição de probabilidade conjunta para θ e y . O peso ou densidade de probabilidade conjunta pode ser escrita como produto de duas densidades sendo $P(y)$ e a distribuição dos dados $P(\theta|y)$, ou seja,

$$P(\theta|y) = \frac{P(\theta, y)}{P(y)} = \frac{P(\theta)P(y|\theta)}{P(y)}$$

em que $P(\theta, y)$ é a função de verossimilhança para a amostra, $P(y)$ a distribuição a priori de y e $P(\theta|y)$ é a distribuição a posteriori de θ dado y . Ainda, tem-se que $P(y) = \sum_{\theta} P(y|\theta)P(\theta)$ e $P(y) = \int P(y|\theta)P(\theta)d\theta$ referem-se aos casos discreto e contínuo, respectivamente.

Desse modo, o Teorema de Bayes pode ser reescrito como

$$P(\theta|y) \propto P(\theta)P(\theta, y)$$

em que \propto corresponde a uma proporcionalidade.

Antes dos dados serem observados, a observação y é desconhecida e sua distribuição é dada por:

$$P(y) = \int P(\theta, y)d\theta = \int P(\theta)P(y|\theta)d\theta.$$

Essa distribuição é denominada distribuição preditiva a priori, porque não é condicionada a observação prévia e preditiva porque é a distribuição de uma quantidade observável.

A distribuição de \tilde{y} é denominada distribuição preditiva a posteriori: posteriori porque é condicionada aos dados y e preditiva porque é a predição de uma observação \tilde{y} .

$$P(\tilde{y}|y) = \int P(\tilde{y}, \theta|y) d\theta = \int P(\tilde{y}|\theta, y) P(\theta|y) d\theta = \int P(\tilde{y}|\theta) P(\theta|y) d\theta$$

A função de verossimilhança tem papel importante na fórmula de Bayes, pois representa o meio através do qual os dados y transformam o conhecimento a priori sobre θ , ou seja, a verossimilhança pode ser interpretada como expressão de informação sobre θ fornecida pelos dados y .

Para se fazer inferências sobre um determinado parâmetro θ_{i+1} , com $i = 1, 2, \dots, p$, deve-se obter a distribuição marginal a posteriori desse parâmetro, que é dada pela integral da distribuição a posteriori com relação aos demais parâmetros. Na maioria dos casos, devido à complexibilidade dessas integrais, a obtenção das distribuições marginais não é feita por meio analítico, necessitando de métodos numéricos para a sua resolução (MENDES, 2011). Destaca-se a classe de algoritmos denominada de Monte Carlo via cadeias de Markov (MCMC), em particular os métodos de amostragem Metropolis-Hasting e Gibbs Sampler, têm sido os mais utilizados na geração de amostras da distribuição marginal a posteriori. Para a utilização desses algoritmos, é necessário que se obtenha, a partir da distribuição a posteriori, um conjunto de distribuições chamadas de distribuições condicionais completas (SILVA et al., 2008).

2.4.1 Monte Carlo via Cadeia de Markov

Segundo Casella e Berger (2011) o método Monte Carlo via Cadeia de Markov (MCMC) é extremamente útil para a resolução de cálculos envolvendo integrais mais complexas.

Mendes (2011) destaca a partir de Gamerman e Lopes (2006) que a cadeia de Markov é um método estocástico no qual o estado futuro da cadeia θ^{k+1} depende somente do estado atual θ^k e dos dados, e não da história passada da cadeia. As primeiras interações são influenciadas pelo estado inicial $\theta^{(1)}$ e são descartadas sendo este processo conhecido como aquecimento da cadeia ou burn-in. Mas devido a existência das dependências entre as observações subsequentes da cadeia e, conseqüentemente, para se obter uma amostra independente, as observações finais devem ser obtidas a cada k iterações, sendo este valor conhecido como salto, "thin" ou intervalo de amostragem (PAULINO; TURKMAN; MURTEIRA, 2003).

Deste modo, MCMC é usado para gerar amostras aleatórias, ou seja, obter uma amostra das distribuições marginais a posteriori dos parâmetros de interesse, por meio de um processo iterativo, utilizando as distribuições condicionais completas de cada parâmetro. O amostrador de Gibbs e o Metropolis-Hastings são os principais algoritmos a partir do processo MCMC.

2.4.2 Amostrador de Gibbs

O amostrador de Gibbs é um processo iterativo de amostragem de uma cadeia de Markov cujo núcleo da transição é formado pelas distribuições condicionais completas capaz de gerar variáveis aleatórias de uma distribuição marginal sem que se conheça sua densidade (GAMERMAN e LOPES, 2006). O processo se dá conforme o número k de iterações aumenta e a sequência de valores gerados se aproxima da distribuição de equilíbrio, ou seja, da densidade marginal desejada para cada parâmetro, quando se assume que a convergência foi atingida (MENDES, 2011).

De acordo com Mendes (2011) as etapas para a realização do amostrador de Gibbs podem ser resumidas nos seguintes passos:

- i) Especificar os valores iniciais $\theta^{(0)} = \theta_1^{(0)}, \dots, \theta_S^{(0)}$ e inicializar o contador de iterações $k = 1$;
- ii) Obtenha um novo valor para $\theta^{(k)}$ a partir de $\theta^{(k-1)}$ por meio de sucessivas gerações de valores. Para $i = 1$ até S , faça:
 Gere um valor para $\theta_1^{(k)}$ de $\theta_1^{(k)} \sim P(\theta_1 | \theta_1^{(k)}, \dots, \theta_{i+1}^{(k-1)}, \dots, \theta_S^{(k-1)}, Y)$
- iii) Faça $k = k + 1$ e volte para o passo ii.
- iv) Repita o procedimento até alcançar a convergência.

O conjunto dos i valores amostrados representa amostras da distribuição marginal a posteriori de θ .

2.4.3 Metropolis-Hastings

O algoritmo Metropolis-Hastings é utilizado quando as distribuições condicionais a posteriori são difíceis de serem identificadas como uma forma padrão dificultando a geração direta de amostras a partir destas distribuições. Porém, sob o ponto de vista prático, a escolha da distribuição é crucial para o bom desenvolvimento do algoritmo, influenciando na convergência para a distribuição marginal a posteriori (CHIB; GREENBERG, 1995).

Os passos a seguir especificam o algoritmo Metropolis-Hastings (MENDES, 2011):

- i) Inicialize o contador de iterações $k = 0$ e especifique os valores iniciais $\theta^{(0)}$;
- ii) Gere um novo valor θ' da distribuição proposta $q(\cdot|\theta)$;
- iii) Calcule a probabilidade de aceitação $\alpha(\theta, \theta')$ e gere $u \sim U(0, 1)$

$$\alpha(\theta, \theta') = \min \left\{ 1, \frac{P(\theta'|Y)q(\theta|\theta')}{P(\theta|Y)q(\theta'|\theta)} \right\}$$

iv) Se $u \leq \alpha$, então aceite o novo valor, θ' , e faça $\theta_1^{(k=1)} = \theta'$. Caso contrário, rejeite e faça $\theta^{k+1} = \theta$;

v) Incremente o contador de k para $k + 1$ e volte ao passo ii até atingir a convergência.

À medida que o número de iterações aumenta, $k \rightarrow \infty$, a sequência se aproxima de sua condição de equilíbrio, atingindo a característica de estacionariedade com um comportamento assintótico (NOGUEIRA; SÁFADI; FERREIRA, 2004).

Segundo Gamerman e Lopes (2006), um caso particular é o algoritmo Metropolis que considera apenas distribuições propostas do tipo simétricas, isto é, $q(\theta'|\theta) = q(\theta|\theta')$, para todos os valores de θ, θ' . Neste caso, a probabilidade de aceitação é reduzida a: $\alpha(\theta, \theta') = \min \left[1, \frac{P(\theta')}{P(\theta)} \right]$

2.4.4 Avaliação da convergência

Os testes de diagnósticos de Gelman e Rubin (1992), Geweke (1992), Heidelber e Welch (1983) e Raftery e Lewis (1992) são maneiras de realizar a análise de convergência das cadeias e o controle eficiente evita um número excessivo ou escasso de iterações no processo de amostragem, já que o amostrador de Gibbs e Metropolis-Hastings são iterativos. Desta maneira, uma verificação da convergência é essencial e assim inferir sobre os resultados como sendo os valores das distribuições marginais dos parâmetros do modelo considerado, conforme destacam Nogueira, Sáfadi e Ferreira (2004) na avaliação dos critérios de convergência.

2.4.5 Distribuições marginais

A partir dos estudos de Mendes (2011) serão apresentadas a seguir as distribuições condicionais completas para cada parâmetro, tanto no modelo de Gompertz quanto no modelo logístico, a fim de obter aproximações das distribuições marginais dos parâmetros. O uso do Amostrador de Gibbs é utilizado quando as condicionais completas possuem formas conheci-

das; já o algoritmo Metropolis-Hastings é utilizado no caso em que as condicionais possuem distribuições desconhecidas.

2.4.5.1 Modelo de Gompertz com erros independentes

Admitindo que os parâmetros a , b e k do modelo de Gompertz (equação 2.8) são uniformes, ou seja, $p(a) p(b) p(k) \propto w$, desta modo, obtêm-se a distribuição *a posteriori* conjunta dos parâmetros desse modelo.

Para que o modelo de Gompertz possua erros independentes, considerou-se que os $\varepsilon_i = Y_i - a \exp\{-b[\exp(-kt_i)]\}$ são independentes e identicamente distribuídos (i.i.d.) e seguem uma distribuição normal, isto é, $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma_\varepsilon^2)$. Admitiu-se como *priori* para precisão, τ , que é o inverso da variância σ_ε^2 , uma distribuição Gama com hiperparâmetros α e β , desta maneira, $P(\tau|\alpha, \beta) \propto \tau^{\alpha-1} \exp(-\beta \tau)$.

Para os erros do modelo, tem-se que a verossimilhança é dada por:

$$L(y|a, b, k, \tau, \alpha, \beta) \propto \tau^{\frac{n}{2}} \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{t=1}^n [y_t - a \exp\{-b \exp(-kt)\}]^2 \right\},$$

em que $y = (y_1, \dots, y_n)$ é um vetor de observações.

A distribuição *a posteriori* conjunta, a partir do teorema de Bayes, é dada por:

$$P(a, b, k, \tau|y, \alpha, \beta) \propto L(y|a, b, k, \tau, \alpha, \beta) p(a) p(b) p(k) P(\tau|\alpha, \beta)$$

e substituindo as devidas expressões, obtem-se:

$$P(a, b, k, \tau|y, \alpha, \beta) \propto \tau^{\frac{n}{2}} \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{t=1}^n [y_t - a \exp\{-b \exp(-kt)\}]^2 \right\} \tau^{\alpha-1} \exp(-\beta \tau).$$

A partir da distribuição *a posteriori* conjunta foram obtidas as distribuições condicionais completas para cada parâmetro, com o intuito de obter aproximações das distribuições marginais dos parâmetros. Sobre as condicionais completas e essas possuem formas conhecidas, o Amostrador de Gibb determina as marginais, porém se as condicionais possuem distribuições desconhecidas, utiliza-se o algoritmo Metropolis-Hastings.

2.4.5.1.1 Distribuições condicionais completas para o modelo de Gompertz

A partir da distribuição conjunta dos parâmetros do modelo de Gompertz com estrutura de erros independentes, a distribuição condicional para o parâmetro a pode ser escrita como:

$$P(a|b, k, \tau, y, \alpha, \beta) = \frac{P(a, b, k, \tau | y, \alpha, \beta)}{\int P(a, b, k, \tau | y, \alpha, \beta) da} \quad (2.12)$$

Neste caso considera-se que os termos que não dependem de a são termos constantes. A expressão 2.12 pode ser reescrita como:

$$P(a|b, k, \tau, y, \alpha, \beta) \propto \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{t=1}^n [y_t - a \exp[-b \exp(-kt)]]^2 \right\} \quad (2.13)$$

Desenvolvendo o quadrado e posteriormente somatório em 2.13, obtém-se a proporcionalidade seguinte:

$$\propto \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \left[\sum_{t=1}^n y_t^2 - 2a \sum_{t=1}^n y_t \exp[-b \exp(-kt)] + a^2 \sum_{t=1}^n (\exp[-b \exp(-kt)])^2 \right] \right\} \quad (2.14)$$

Colocando-se o termo que acompanha a^2 em evidência na expressão 2.14 e utilizando o complemento de quadrado, tem-se que a última expressão é proporcional à:

$$\propto \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \left(\sum_{t=1}^n (\exp[-b \exp(-kt)])^2 \right) \left[-2a \frac{\sum_{t=1}^n y_t \exp[-b \exp(-ky)]}{\sum_{t=1}^n (\exp[-b \exp(-kt)])^2} + a^2 \right] \right\} \quad (2.15)$$

A expressão 2.15 representa o núcleo de uma distribuição normal com média e variância dadas, respectivamente, por:

$$\mu = \frac{\sum_{t=1}^n y_t \exp[-b \exp(-ky)]}{\sum_{t=1}^n (\exp[-b \exp(-kt)])^2} \quad e \quad \sigma^2 = \frac{\sigma_e^2}{\sum_{t=1}^n (\exp[-b \exp(-kt)])^2}.$$

A distribuição condicional completa *a posteriori* b do modelo de Gompertz pode ser escrita, proporcionalmente, da seguinte forma:

$$P(b|a, k, \tau, y, \alpha, \beta) \propto \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{t=1}^n [y_t - a \exp[-b \exp(-kt)]]^2 \right\} \quad (2.16)$$

Considerando o parâmetro k do modelo de Gompertz, sua distribuição condicional completa *a posteriori* é dada por:

$$P(k|a, b, \tau, y, \alpha, \beta) \propto \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{t=1}^n [y_t - a \exp[-b \exp(-kt)]]^2 \right\} \quad (2.17)$$

Para os parâmetros b e k , as distribuições condicionais completas *a posteriori* não têm forma conhecida, quando comparada a alguma distribuição padrão.

A condicional completa *a posteriori* para o parâmetro τ , pode ser escrita de forma proporcional da seguinte maneira:

$$P(\tau|a, b, k, y, \alpha, \beta) \propto \tau^{\frac{n}{2}} \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{t=1}^n [y_t - a \exp\{-b \exp(-kt)\}]^2 \right\} \tau^{\alpha-1} \exp(-\beta \tau) \quad (2.18)$$

Reescrevendo os termos da expressão 2.18 de maneira adequada, isto é, agrupando-se alguns termos, a seguinte proporcionalidade é obtida:

$$\propto \tau^{\frac{n+2\alpha}{2}-1} \exp \left\{ -\tau \left[\beta + \frac{1}{2} \sum_{t=1}^n [y_t - a \exp\{-b \exp(-kt)\}]^2 \right] \right\} \quad (2.19)$$

A expressão 2.19 representa o núcleo de uma distribuição gama com os seguintes parâmetros:

$$\alpha^* = \frac{n+2\alpha}{2} \quad e \quad \beta^* = \beta + \frac{1}{2} \sum_{t=1}^n \{y_t - a \exp[-b \exp(-kt)]\}^2$$

sendo α e β os hiperparâmetros da distribuição gama utilizada como *priori* para o parâmetro τ .

2.4.5.2 Modelo logístico com erros independentes

Para o modelo logístico (equação 2.10), é admitido também que os parâmetros a , b e k são uniformes, ou seja, $p(a) p(b) p(k) \propto w$, desta modo, obtêm-se a distribuição *a posteriori* conjunta dos parâmetros desse modelo.

Sob a mesma suposição de que os erros $\varepsilon_i = Y_i - a[1 + b \exp(-kt_i)]^{-1}$ são i.i.d. assumiu-se como *priori* para a precisão, τ , uma distribuição gama como hiperparâmetros α e β , isto é: $P(\tau|\alpha, \beta) \propto \tau^{\alpha-1} \exp(-\beta \tau)$.

Para os erros do modelo temos que a verossimilhança é dada por:

$$L(y|a, b, k, \tau, \alpha, \beta) \propto \tau^{\frac{n}{2}} \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{t=1}^n [y_t - a[1 + b \exp(-kt)]^{-1}]^2 \right\},$$

em que $y = (y_1, \dots, y_n)$.

A distribuição *a posteriori* conjunta, a partir do teorema de Bayes, é dada por:

$$P(a, b, k, \tau | y, \alpha, \beta) \propto L(y | a, b, k, \tau, \alpha, \beta) p(a) p(b) p(k) P(\tau | \alpha, \beta)$$

e substituindo as devidas expressões, temos:

$$P(a, b, k, \tau | y, \alpha, \beta) \propto \tau^{\frac{n}{2}} \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{t=1}^n [y_t - a[1 + b \exp(-kt)]^{-1}]^2 \right\} \tau^{\alpha-1} \exp(-\beta \tau).$$

2.4.5.2.1 Distribuições condicionais completas para o modelo de logístico

A partir da distribuição conjunta dos parâmetros do modelo Logístico com estrutura e erro independente, a distribuição condicional para o parâmetro a , considerando que os termos que não dependem de a são termos constantes para este parâmetro, pode ser escrita como:

$$P(a | b, k, \tau, y, \alpha, \beta) = \frac{P(a, b, k, \tau | y, \alpha, \beta)}{\int P(a, b, k, \tau | y, \alpha, \beta) da} \quad (2.20)$$

A expressão 2.20 pode ser reescrita como:

$$P(a | b, k, \tau, y, \alpha, \beta) \propto \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{t=1}^n [y_t - a[1 + b \exp(-kt)]^{-1}]^2 \right\} \quad (2.21)$$

Desenvolvendo o quadrado em 2.21, tem-se que $P(a | b, k, \tau, y, \alpha, \beta)$ é proporcional à seguinte expressão:

$$\propto \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{t=1}^n \left[y_t^2 - 2y_t a [1 + b \exp(-kt)]^{-1} + a^2 ([1 + b \exp(-kt)]^{-1})^2 \right] \right\} \quad (2.22)$$

Desenvolvendo o somatório em 2.22, obtém-se a proporcionalidade abaixo:

$$\propto \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \left[\sum_{t=1}^n y_t^2 - 2a \sum_{t=1}^n y_t [1 + b \exp(-kt)]^{-1} + a^2 \sum_{t=1}^n ([1 + b \exp(-kt)]^{-1})^2 \right] \right\} \quad (2.23)$$

Colocando-se o termo que acompanha a^2 em evidência na expressão 2.23 e utilizando o complemento de quadrado, tem-se que a última expressão é proporcional à:

$$\propto \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \left(\sum_{t=1}^n ([1 + b \exp(-kt)]^{-1})^2 \right) \left[-2a \frac{\sum_{t=1}^n y_t [1 + b \exp(-kt)]^{-1}}{\sum_{t=1}^n ([1 + b \exp(-kt)]^{-1})^2} + a^2 \right] \right\} \quad (2.24)$$

A expressão 2.24 representa o núcleo de uma distribuição normal com média e varância dadas, respectivamente, por:

$$\mu = \frac{\sum_{t=1}^n y_t [1 + b \exp(-kt)]^{-1}}{\sum_{t=1}^n ([1 + b \exp(-kt)]^{-1})^2} + a^2 \quad e \quad \sigma^2 = \frac{\sigma_e^2}{\sum_{t=1}^n ([1 + b \exp(-kt)]^{-1})^2}$$

A distribuição condicional completa *a posteriori* para o parâmetro b do modelo logístico pode ser escrita, proporcionalmente, da seguinte forma:

$$P(b|a, k, \tau, y, \alpha, \beta) \propto \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{t=1}^n [y_t - a[1 + b \exp(-kt)]^{-1}]^2 \right\} \quad (2.25)$$

Considerando o parâmetro k do modelo logístico, sua distribuição condicional completa *a posteriori* é dada por:

$$P(k|a, b, \tau, y, \alpha, \beta) \propto \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{t=1}^n [y_t - a[1 + b \exp(-kt)]^{-1}]^2 \right\} \quad (2.26)$$

Assim como no modelo de Gompertz, para os parâmetros b e k , as distribuições condicionais completas *a posteriori* não têm forma conhecida quando comparada a alguma distribuição padrão. Desta maneira, utiliza-se o algoritmo Metropolis-Hastings na estimação das análises dos parâmetros.

A distribuição condicional completa *a posteriori* para o parâmetro τ pode ser escrita, de forma proporcional, da seguinte maneira:

$$P(\tau|a, b, k, y, \alpha, \beta) \propto \tau^{\alpha-1} \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{t=1}^n [y_t - a[1 + b \exp(-kt)]^{-1}]^2 \right\} \tau^{\alpha-1} \exp(-\beta \tau) \quad (2.27)$$

Reescrevendo os termos da expressão 2.27 de maneira adequada, isto é, agrupando-se alguns termos, a seguinte proporcionalidade é obtida:

$$\propto \tau^{\frac{n+2\alpha}{2}-1} \exp \left\{ -\tau \left[\beta + \frac{1}{2} \sum_{t=1}^n [y_t - a[1 + b \exp(-kt)]^{-1}]^2 \right] \right\} \quad (2.28)$$

A expressão 2.28 representa o núcleo de uma distribuição gama com os seguintes parâmetros:

$$\alpha^* = \frac{n+2\alpha}{2} \quad e \quad \beta^* = \beta + \frac{1}{2} \sum_{t=1}^n \{y_t - a[1 + b \exp(-kt)]^{-1}\}^2$$

sendo α e β os hiperparâmetros da distribuição gama utilizada como *priori* para o parâmetro τ .

3 MATERIAL E MÉTODOS

3.1 Material

Os dados utilizados neste trabalho são provenientes de um experimento conduzido a campo com a cv. feijoeiro Jalo em área experimental do Departamento de Agricultura (DAG) da Universidade Federal de Lavras (UFLA), em Lavras, MG, na safra primavera-verão 2012/2013 em solo tipo latossolo vermelho distroférico típico (OLIVEIRA et al., 2011).

O município de Lavras está situado na região sul de Minas Gerais, Brasil, a uma altitude média de 918 metros, nas coordenadas geográficas de 21°40'06" de latitude sul e 45°00'00" de longitude oeste. O clima da região de Lavras é classificado como temperado suave (mesotérmico) com inverno seco e verão chuvoso, subtropical (DANTAS; CARVALHO; FERREIRA, 2007).

A cultivar do feijão comum (*Phaseolus vulgaris L.*) Jalo possui um porte semiprostrado, do tipo III, com crescimento indeterminado, do grupo comercial manteigão, com peso médio de 100 grãos de 30 a 40 gramas e ciclo médio (RAMALHO; ABREU, 2006).

O experimento foi realizado em duas áreas contíguas, em uma delas foi utilizado o sistema de plantio convencional e, na outra, o sistema de plantio direto. Em cada sistema de plantio, o experimento foi instalado em delineamento em blocos casualizados, com três repetições, sendo os tratamentos dispostos no esquema fatorial 3 x 7, sendo constituídas pelas combinações de três densidades de semeadura (75, 215, e 355 mil plantas por hectare) com as sete épocas de avaliação (13, 23, 33, 43, 53, 63, 73 dias após emergência (DAE) das plantas no sistema de plantio convencional e, aos 10, 20, 30, 40, 50, 60 e 70 DAE no sistema de plantio direto.)

A parcela experimental foi constituída por quatro linhas de cinco metros de comprimento, espaçadas entre si por meio metro (0,50 m), com área total de 10 m²; como área útil, foram utilizadas as duas linhas centrais, com área de 5 m².

Para se obter o acúmulo de massa seca da parte aérea ao longo do ciclo da cultura, foram amostradas cinco plantas, na área útil da parcela, sendo que as plantas foram cortadas rente ao solo, lavadas em água corrente, enxutas à sombra e, então, secas em estufa com circulação de ar a 65° – 70°C, até peso constante. Em seguida esses materiais foram pesadas em balança de precisão, determinando-se o peso da massa seca, e transformado em acúmulo de massa seca por hectare.

Para se obter o progresso de acúmulo do macronutriente nitrogênio na parte aérea ao longo do ciclo da cultura do feijoeiro, as amostras de matéria seca foram encaminhadas ao laboratório de Análise Foliar, no Departamento de Ciências do solo, da UFPA. Nesse laboratório as amostras de matéria seca foram moídas em moinho tipo Willey e analisadas quimicamente para obtenção de teores de macronutriente de nitrogênio (N), o qual foi extraído pelo método de Kjeldahl.

Com base nos valores obtidos dos teores do nutriente e do acúmulo de matéria seca, em cada parcela, foi obtida a marcha de acúmulo de N, os quais foram expressos em quilos por hectare (kg ha^{-1}).

3.2 Métodos

3.2.1 Análise de variância com dados originais

Os valores observados acúmulo de nitrogênio (em kg ha^{-1}) do feijoeiro cv. Jalo, foram submetidos à análise da variância, de acordo com o seguinte modelo linear:

$$y_{ijkl} = \mu + s_i + b_{j(i)} + d_k + sd_{ik} + e_{l(ik)} + \varepsilon_{ijkl} \quad (3.1)$$

em que

- μ é uma constante;
- s_i é o efeito do i -ésimo sistema de plantio;
- $b_{j(i)}$ é o efeito do j -ésimo bloco dentro do i -ésimo sistema de plantio;
- d_k é o efeito da k -ésima densidade de semeadura;
- sd_{ik} é o efeito da interação entre i -ésimo sistema de plantio e a k -ésima densidade de semeadura;
- $e_{l(ik)}$ é o efeito da l -ésima época de avaliação dentro da combinação do i -ésimo sistema de plantio com k -ésima densidade de semeadura;
- ε_{ijkl} é o erro experimental associado à observação y_{ijkl} , considerados independentes, com média zero, variância constante e normalmente distribuídos.

As pressuposições básicas da análise de variância foram avaliadas, sendo a aditividade do modelo avaliada pelo teste de aditividade de Tukey, a homocedasticidade da variância dos resíduos pelo teste máximo de Hartley ou pelo teste de Bartlett; a normalidade dos erros pelo teste de Shapiro-Wilk e a independência dos resíduos pelo teste de Durbin-Watson.

3.2.2 Transformação isotônica e análise de variância

Com a finalidade futura de melhorar a praticidade de ajuste e verificar a influência da regressão isotônica no comportamento esperado da curva do acúmulo de massa seca e de acúmulo dos macronutrientes, aplicou-se a transformação isotônica aos dados originais, em cada combinação de bloco, sistema de plantio e densidade de semeadura, ou seja, os dados foram isotonizados em função das épocas de avaliação dentro de cada bloco, sistema de plantio e densidade de semeadura.

Em seguida, os dados isotonizados, ou seja, com a transformação isotônicas, foram submetidos à análise de variância de acordo com o modelo linear proposto em 3.1.

3.2.3 Modelos não lineares

Com a finalidade de descrever o acúmulo de massa seca total do macronutriente nitrogênio, em função das épocas de avaliação, para os dados originais e os transformados, para cada combinação de sistema de plantio e densidade de semeadura, foram ajustados os modelos não lineares de Gompertz e de Verhulst.

A parametrização do modelo de Gompertz utilizada foi:

$$y_i = a e^{(-e^{(b-kt_i)})} + \varepsilon_i$$

e, a do modelo Logístico foi:

$$y_i = \frac{a}{1 + be^{-kt_i}} + \varepsilon_i$$

em que

- y_i valor médio de massa seca ou do acúmulo do macronutriente observado na t-ésima época de avaliação;

- a parâmetro correspondente ao peso assintótico máximo, sendo interpretado como o peso de massa seca ou acúmulo máximo esperado na maturação ou ao final do ciclo vegetativo ou ainda o peso ou acúmulo da planta adulta;
- b parâmetro de locação, não possuindo interpretação biológica direta, está relacionado aos pesos iniciais da planta e ao ponto de inflexão da curva;
- k é a taxa de crescimento ou índice de maturidade fisiológica ou velocidade de crescimento da planta, e que deve ser entendida como a mudança de peso em relação ao peso assintótico, sendo visto como indicador da velocidade com que a planta se aproxima de seu tamanho adulto;
- t_i são as épocas de avaliação, em dias após a emergência (DAE), das plantas;
- ε_i é o erro ou desvio aleatório associado ao modelo, o qual pressupõe-se que seja independente e identicamente distribuído, de modo que $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$.

A estimação dos parâmetros de ambos os modelos foi realizada por meio do método de mínimos quadrados, o qual consiste na minimização da soma de quadrado dos erros, e que gera um sistema de equações normais não linear, que não possui forma fechada para as soluções. Assim, utilizou-se o método iterativo de Gauss-Newton modificado, que está implementado na função `nls` do pacote `qpcR` do *software* R (PINHEIRO et al., 2015; R CORE TEAM, 2018).

3.2.4 Avaliação do ajuste

Com a finalidade de avaliação a qualidade de ajuste de ambos os modelos, aos dados de acúmulo de nitrogênio, em cada desdobramento de sistema de plantio e densidade de semeadura, foram utilizados o critério de informação de Akaike (AIC) e o coeficiente de determinação ajustado.

O critério de informação de Akaike é baseado na teoria da decisão, a qual admite a existência de um modelo real que descreve os dados e tenta selecionar um modelo que mais se aproxima desse modelo real, sendo estimado pela expressão:

$$AIC = -2\ln(L(\theta)) + 2p$$

em que $\ln(L(\theta))$ é o valor do logaritmo natural no ponto de máximo da função de verossimilhança e p é o número de parâmetros do modelo.

Seleciona-se como o modelo mais adequado ou como aquele que apresentou melhor ajuste o modelo que apresentar o menor valor de AIC.

O coeficiente de determinação ajustado é estimado utilizando-se a expressão

$$R_a^2 = 1 - \frac{(1 - R^2)(n - 1)}{n - p}$$

em que

- n é o número de observações, correspondendo ao número de épocas de avaliação;
- p é o número de parâmetros de cada modelo;
- R^2 é o coeficiente de determinação, sendo determinado por $R^2 = 1 - \frac{SQE}{SQTot}$

sendo $SQTot$ a soma de quadrados total corrigida pela média e SQE a soma de quadrado dos desvios ou dos erros.

O valor de R_a^2 será utilizado somente para seleção de modelos, de modo que o maior valor representa um modelo que teve melhor ajuste que outro modelo com mesmo valor.

Além do critério de informação Akaike (AIC), foi utilizado o critério de informação bayesiano (BIC), proposto por Schwarz (1978), considerado como um critério de avaliação de modelos definido em termos da probabilidade a posteriori (EMILIANO et al., 2010) e é estimado pela seguinte expressão:

$$BIC = -2\ln(L(\theta)) + p\log(n)$$

em que $\ln(L(\theta))$ é o valor do algoritmo natural no ponto de máximo da função de verossimilhança, p é o número de parâmetros do modelo e n é o número de observações da amostra.

O critério utilizado para comparação dos modelos logísticos relacionados a parte bayesiana tanto no plantio convencional como no plantio direto em cada densidade de semeadura foi o critério de informação do desvio (DIC) proposto por Spiegelhalter et al. (2002), em que

$$DIC = D(\bar{\theta}) + 2p_D$$

onde $p_D = \bar{D}(\theta) - D(\bar{\theta})$, para $D(\theta) = -2 \ln L(\hat{\theta}) + V$, sendo V uma constante que se cancela e, portanto, não precisa ser conhecida e $\bar{D}(\theta) = E[D(\theta)]$.

O DIC muito usado na seleção dos modelos bayesianos em que a distribuição *a posteriori* dos modelos é obtida pela simulação Monte Carlo via cadeia de Markov (MCMC) além de ser uma generalização hierárquica ao critério de informação de Akaike (AIC), utilizado em modelos de regressão clássica (CAMPOS, 2011). Pode ser amplamente utilizado para comparar modelos com diferentes níveis de complexidade e a ideia de classificação é através da escolha do modelo com menor DIC, sendo este o mais apropriado para o uso e seguintes discussões.

3.2.5 Ajuste dos modelos utilizando o enfoque Bayesiano

Para a estimação dos parâmetros utilizando-se a metodologia bayesiana foi assumido que os erros seguem uma distribuição normal com média zero e variância homogênea (σ^2) e considerando-se que a precisão é dada por $\tau = \frac{1}{\sigma^2}$, considerando que $e_i \sim N(0, \frac{1}{\tau})$

As distribuições *a priori* para os parâmetros a , b e k de ambos os modelos são estabelecidos de acordo com a interpretação biológica de cada um e com o intervalo de ocorrência.

Para o parâmetro a que representa o acúmulo máximo de massa seca, tendo-se $\alpha > 0$, pode ser considerada uma distribuição gama com hiperparâmetros α_1 e β_1 .

No caso do parâmetro b , que representa a ideia de locação da curva e estando relacionado com o ponto de inflexão, tem-se $b > 0$, também foi considerada uma distribuição gama com hiperparâmetros α_2 e β_2 .

Já para o parâmetro k que representa o índice de maturidade, tem-se $0 < r < 1$, para o qual foi considerado uma distribuição beta com hiperparâmetros α e β .

E, para a precisão τ foi considerada a distribuição gama com hiperparâmetros α_3 e β_3 .

Considerando a independência entre os parâmetros dos modelos foi obtida a distribuição *a priori* conjunta, $P(\theta)$, para o vetor de parâmetros de interesse θ , $\theta = [\alpha, \beta, r, \tau]'$.

Para cada modelo, dadas a função de verossimilhança, $P(\theta|Y)$ e a distribuição *a priori* conjunta, foi obtida a distribuição a posteriori conjunta, $P(\theta|Y) \propto P(\theta, Y)P(\theta)$.

Foram obtidas as distribuições marginais *a posteriori* de forma analítica e utilizou-se os métodos de Monte Carlo via Cadeia de Markov (MCMC) para obter as aproximações.

Em seguida, foi determinada a distribuição *a posteriori* completa de cada parâmetro e utilizando o algoritmo "Metropolis-Hastings".

A verificação da convergência das cadeias geradas foi feita de acordo com os critérios avaliados por Nogueira, Sáfadi e Ferreira (2004).

Para cada conjunto de dados, o ajuste dos modelo Logístico foi realizado utilizando a estimativa da média *a posteriori* de cada parâmetro; e posteriormente, foi utilizado o critério de informação do desvio (DIC) para selecionar o modelo que melhor descreve o acúmulo da massa seca em função das épocas de avaliação (idade da planta).

Para comparar o acúmulo assintótico de massa seca dos sistemas de plantio convencional a com o plantio direto $a1$, será gerada uma cadeia para diferença, $a - a1$, e criado o intervalo de credibilidade HPD (intervalo de máxima densidade *a posteriori*). Em caso de o intervalo não conter o zero, será concluído que existe diferença entre os acúmulos assintóticos. De modo semelhante, será feito para o índice de maturidade e , também, para a comparação das densidades de semeadura.

3.2.6 Utilização dos programas computacionais

Em um primeiro momento foi realizada a isotonização dos dados observados de acúmulo de nitrogênio feijoeiro cv. Jalo com pesos iguais em todas as épocas de avaliação, por meio dos pacotes stats, Iso, dplyr, tidyr e tidyverse do *software* R (R CORE TEAM, 2018).

Em seguida foi realizada as análises de variância para os dados tradicionais e isotonizados por meio do programa computacional Sisvar (FERREIRA, 2011).

Com a utilização dos dados tradicionais e isotonizados do acúmulo de nitrogênio, do feijoeiro cv. Jalo, procedeu-se a modelagem não linear utilizando-se os modelos de Gompertz e logístico para estudar o desenvolvimento das plantas em acúmulo de massa de nitrogênio, em relação às épocas de avaliação (em dias após emergência) em cada densidade de semeadura (75, 215 e 355 kg ha⁻¹) e para cada tipo de manejo, nos sistemas de plantio convencional e direto.

Em ambos os modelos da Tabela 3.1, tem-se que y_t representa o peso ou acúmulo de matéria seca kg ha⁻¹) observado na e_t -ésima época de avaliação, a peso assintótico máximo, b parâmetro de locação, k taxa de crescimento, t representa as épocas de avaliação, em dias após a emergência (DAE) das plantas e o ε representa o erro experimental, com média zero e variância constante.

Tabela 3.1 – Modelo de Gompertz e Logístico e suas respectivas equações

Modelo	Equação
Gompertz	$y_i = a e^{(-e^{(b-kt_i)})} + \varepsilon_i$
Logístico	$y_i = \frac{a}{1+b e^{-kt_i}} + \varepsilon_i$

Para avaliação da qualidade de ajuste e comparação dos modelos foi utilizado o critério de informação Akaike (AIC) e o coeficiente de determinação ajustado (R^2), sendo considerado como modelo mais adequado aquele que apresentar menor estimativa para AIC e maior R_a^2 .

Tanto as estimativas dos parâmetros quanto o ajuste dos modelos foram realizadas com a utilização da função `nls`, pacote `qpcR`, software R (R CORE TEAM, 2018).

A abordagem bayesiana sofre uma grande simplificação ao ser implementada em *softwares* como o WinBugs (SPIEGELHALTER et al. 2002). Na linguagem BUGS as gerações de cadeias estão prontas, é preciso somente definir a distribuição para os dados e as distribuições *a priori* para os parâmetros do modelo.

A avaliação da convergência das cadeias foi verificada pelo pacote BOA (“Bayesian Output Analysis”) do *software* R (R CORE TEAM, 2018).

Já os pacotes `r2jags`, `AICcmodavg`, `superdiag` e `mcmcplots` do software R (R CORE TEAM, 2018) foram utilizados para a obtenção do critério de informação do Desvio (DIC) e as diferentes construções gráficas.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste tópico é apresentado, inicialmente, a análise de variância para os dados originais e isotonzados. Em seguida, apresenta-se a estimação dos parâmetros dos modelos de Gompertz e logístico para os dados com e sem transformação isotônica. E, finalmente, apresenta-se a análise bayesiana utilizando o modelo logístico dos dados originais e transformados.

4.1 Análise de variância dos dados originais e transformados

A análise da variância para os valores originais do acúmulo de nitrogênio e os dados isotonzados (transformados pelo processo isotônico), na Tabela 4.1, mostra que houve efeito significativo de todos os fatores, indicando que tanto os sistemas de plantio, como as densidades de semeadura e as épocas de avaliação afetam de modo significativo o acúmulo de nitrogênio.

Nota-se, também, que a transformação isotônica foi eficiente pois houve redução no erro experimental, o que é desejável na pesquisa.

Tabela 4.1 – Resumo da análise de variância com fontes de variação (FV), número de graus de liberdade (GL), quadrados médios com respectivo nível de significância do acúmulo de nitrogênio total (T) do feijoeiro cv. Jalo, para dados originais (sem) e isotonzados (com).

FV	GL	Originais	Isotonzados
Sistemas	1	6983,782*	6983,931*
Bloco(Sistemas)	4	514,472**	514,466**
Densidades	2	6660,131*	6660,251*
Sistemas*Densidades	2	903,365**	903,313**
DAE(S*D)	(36)	1065,421*	1005,766*
DAE d. pc 75	6	476,211*	477,668*
DAE d. pc 215	6	577,546*	587,053*
DAE d. pc 355	6	1169,375*	1233,750*
DAE d. pd 75	6	478,524*	470,932*
DAE d. pd 215	6	1199,410*	1138,000*
DAE d. pd 355	6	2491,457*	2127,195*
Erro	80	122,135	82,265
CV (%)	-	35,53	29,16
Média (kg ha ⁻¹)	-	31,104	31,104

** 1% e *5% de significância pelo teste F.

Com a finalidade de avaliar o comportamento do acúmulo de nitrogênio no feijoeiro cv. Jalo tanto nos dados originais quanto nos dados isotonzados, procedeu-se o desdobramento

das épocas de avaliação dentro de cada combinação de sistemas de plantio e densidades de sementeira. Os resultados na Tabela 4.1, indicaram que houve efeito significativo para os DAE e cada sistema de plantio combinado com as densidades de sementeira bem como para os sistemas de plantio, densidades de sementeira e sua interação.

Para avaliar a precisão do experimento, Ribeiro et al. (2004) em experimentos que avaliam cultivares de feijoeiro, recomendam que o coeficiente de variação (CV) esteja entre 14% e 26,5% para que haja uma boa precisão. Pela Tabela 4.1, verifica-se que ao se trabalhar com dados isotonzados houve uma melhora na precisão experimental, com redução do coeficiente de variação. Esses valores dão indícios de baixa precisão do experimento em relação os trabalho de Ribeiro et al. (2004), porém deve-se destacar que estes autores não abordaram a variável acúmulo de nitrogênio.

4.2 Modelagem não linear

Figura 4.1 – Representação gráfica dos valores médios originais do acúmulo de nitrogênio (kg ha^{-1}) em função das épocas de avaliação, em dias após a emergência, para as três densidades de sementeira 75, 215 e 355 mil plantas ha^{-1} nos plantios em sistema convencional (PC) e direto (PD), para o feijoeiro cv. Jalo.

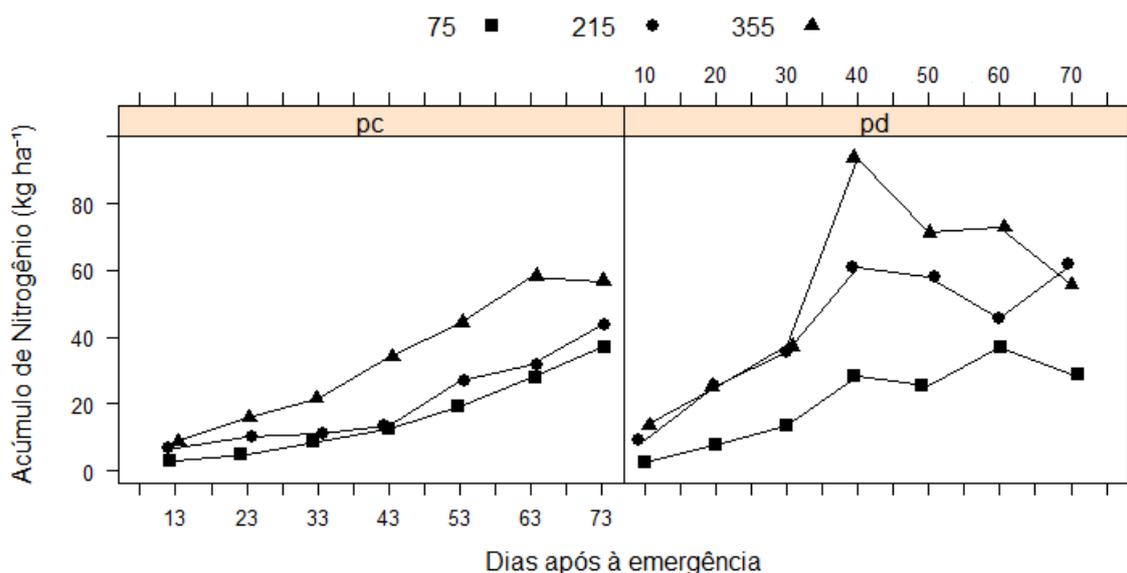
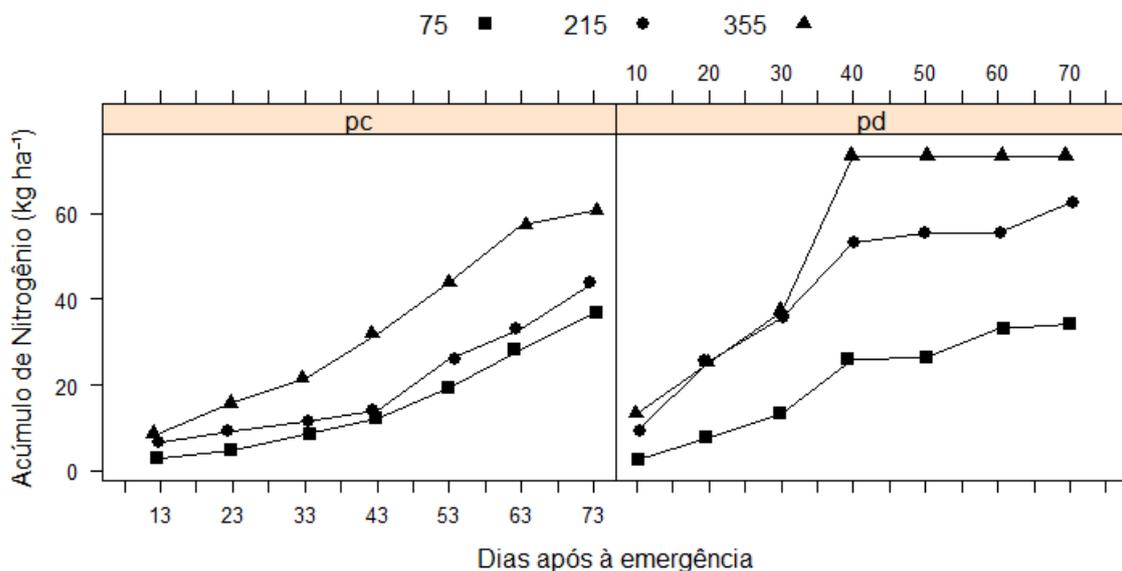


Figura 4.2 – Representação gráfica dos valores médios isotonzados do acúmulo de nitrogênio (kg ha^{-1}) em função das épocas de avaliação, em dias após a emergência, para as três densidades de semeadura 75, 215 e 355 mil plantas ha^{-1} nos plantios em sistema convencional (PC) e direto (PD), para o feijoeiro cv. Jalo.



Os gráficos apresentados nas Figuras 4.1 e 4.2 ilustram o comportamento da trajetória sigmoideal do acúmulo de massa seca do nitrogênio para os dados sem transformação isotônica (Fig. 4.1), chamados de tradicionais, e os valores com transformação (Fig. 4.2), chamados de dados isotonzados.

Desse modo, verifica-se que a modelagem do acúmulo de nitrogênio deve ser realizada por meio de modelos não lineares que captam ou descrevam de modo adequado o tipo comportamento sigmoideal do acúmulo de nitrogênio.

Nas tabelas 4.2 e 4.3, estão apresentadas as estimativas do critério de informação de Akaike (AIC) e os coeficientes de determinação ajustados (R_a^2) relativos ao ajuste dos modelos de Gompertz e Logístico aos dados do acúmulo de nitrogênio no feijoeiro cv. Jalo. Os valores de AIC permitem que se selecione como melhor modelo àquele que apresentou as menores estimativas; desse modo, o modelo Logístico apresenta-se como melhor qualidade de ajuste. Já, o coeficiente de determinação ajustado indica que o maior valor apresenta melhor qualidade de ajuste, também representado pelo modelo Logístico.

As estimativas do acúmulo máximo de N variaram de 33,0 a 76, 6 kg ha^{-1} , estimados pelo modelo logístico, e desconsiderando a densidade de 215 no PC. Estes valores estão próximos aos encontrados por Ramos Junior (2006), que observou acúmulo de N de 31,4 ha^{-1} da cultivar de feijão carioca precoce. Mas, foram menores do que o acúmulo de N encontrado por

Carvalho et al. (2014), cujas estimativas variaram de 86,1 a 113,3 kg ha⁻¹ e, Ciancio (2010) mostrou resultado médio de 80,4 ha⁻¹.

Pessoa et al. (1996) verificaram quantidades de N acumulado variando de 37,0, em manejo sem irrigação, até 83,0 ha⁻¹ sob irrigação, destacando ser este macronutriente, o acúmulo em maior quantidade.

Tabela 4.2 – Estimativas para os parâmetros, valor do critério de informação de Akaike (AIC) e coeficiente de determinação para os modelos logístico (L) e Gompertz (G) no ajuste do acúmulo de nitrogênio do feijoeiro cv. Jalo, para o sistema de plantio convencional em três densidade de semeadura nos dados tradicionais (sem) e isotonzados (com).

Densidade	Modelo	Parâmetros			AIC	R^2_a	
		<i>a</i>	<i>b</i>	<i>k</i>			
75	sem	L	68,1939	69,9159	0,0542	10,2567	0,9991
		G	284,1442	1,7165	0,0138	14,1545	0,9985
	com	L	67,0176	69,2493	0,0548	11,1998	0,9990
		G	269,0000	1,7120	0,0141	15,4007	0,9982
215	sem	L	182,8995	103,9036	0,0374	37,4018	0,9653
		G	8751332,0000	2,515	0,00305	37,54494	0,96422
	com	L	147,4128	94,6286	0,0394	33,2075	0,9813
		G	51074,4200	2,2620	0,0042	33,6176	0,9800
355	sem	L	66,9041	42,1331	0,0682	36,5790	0,9849
		G	82,0032	1,3281	0,0343	39,6028	0,9768
	com	L	74,4828	46,6616	0,0610	33,2761	0,9910
		G	101,3365	1,3017	0,0278	36,6532	0,9854

Tabela 4.3 – Estimativas para os parâmetros, valor do critério de informação de Akaike (AIC) e coeficiente de determinação para os modelos logístico (L) e Gompertz (G) no ajuste do acúmulo de nitrogênio do feijoeiro cv. Jalo, para o sistema de plantio direto em três densidade de semeadura nos dados tradicionais (sem) e isotonzados (com).

Densidade	Modelo	Parâmetros			AIC	R^2_a	
		a	b	k			
75	sem	L	33,0130	31,2926	0,1167	35,2886	0,9677
		G	35,1917	1,8188	0,0686	36,7221	0,9622
	com	L	34,5632	32,9986	0,1008	35,2400	0,9674
		G	37,6173	1,6456	0,0586	35,2684	0,9689
215	sem	L	59,3449	24,0373	0,1105	42,7619	0,9605
		G	61,3240	1,3739	0,0731	42,9811	0,9602
	com	L	55,6757	25,9715	0,1017	38,0363	0,9770
		G	58,2401	1,3503	0,0657	36,8031	0,9814
355	sem	L	76,5837	26,6388	0,1216	51,3319	0,9388
		G	79,4217	1,5881	0,0747	53,8474	0,9110
	com	L	76,5837	26,6388	0,1216	51,3319	0,9388
		G	79,4217	1,5881	0,0747	53,8474	0,9110

As estimativas do parâmetro relativo ao peso assintótico (a) indicam no plantio convencional que o modelo de Gompertz apresentou valores sobrestimados nas densidades de semeadura 75 e 215, tanto para os dados originais (sem), quanto para os isotonzados (com). Isto indica que o modelo de Gompertz estimou peso assintótico acima dos valores coerentes para a cultura do feijoeiro, portanto, este modelo não é o mais adequado. Já no plantio direto (Tabela 4.3), verificou-se que à medida que se aumentam as densidades de semeadura, há um aumento no acúmulo de nitrogênio de acordo com as estimativas do parâmetro a , em ambos os modelos.

Menores valores para o parâmetro k ocorreram nas populações de 215 mil plantas por hectare, no plantio convencional, e também, 215 mil plantas por hectare no plantio direto, indicando que nesta densidade, as plantas demoraram mais tempo para atingirem a maturação, ocorrendo desenvolvimento mais tardio das plantas e, é claro, podendo elas atingirem maiores pesos e ou produções. Conhecimentos, como densidades de semeadura de feijoeiro que acarretam maior precocidade a respeito do crescimento, são importantes para avaliar o sistema de plantio mais eficiente (VIEIRA et al., 2009).

Com relação às estimativas da taxa de maturidade (k), Tabelas 4.2 e 4.3, maiores valores ocorreram na maior densidade de semeadura em ambos os plantios. E para os tipos de plantios,

foram sempre maiores no PD; desse modo, no PD e maior densidade de semeadura, o acúmulo de N ocorre de modo mais precoce.

Devido às estimativas dos indicativos de qualidades indicaram como mais adequado o modelo logístico, as considerações seguintes, como gráficos, serão restritas apenas a este modelo.

As Figuras 4.3 e 4.4 descrevem o ajuste do modelo logístico para os dados originais nos plantios PC e PD, respectivamente. Em ambos os plantios, a densidade 355 mil plantas ha^{-1} se destaca como aquela que com maior acúmulo de N. No PC o comportamento do acúmulo de N foi semelhante nas densidades de 75 e 215, mas, sempre inferiores ao acúmulo da densidade de 355. Estes resultados discordam um pouco de Alves et al. (2009), os quais verificaram que densidades de semeadura de 240 mil plantas ha^{-1} garante uma boa produtividade de grãos.

Figura 4.3 – Ajuste do modelo logístico aos dados originais relativo ao acúmulo de nitrogênio no sistema de plantio convencional e nas três densidades de semeadura, feijoeiro cv. Jalo.

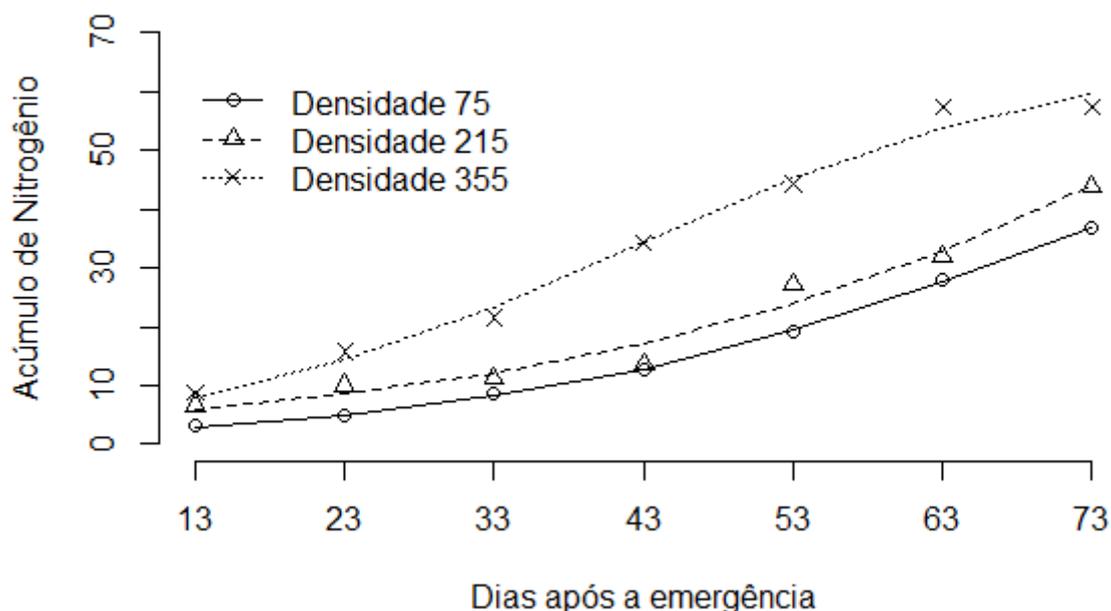


Figura 4.4 – Ajuste do modelo logístico aos dados originais relativo ao acúmulo de nitrogênio no sistema de plantio direto e nas três densidades de semeadura, feijoeiro cv. Jalo.

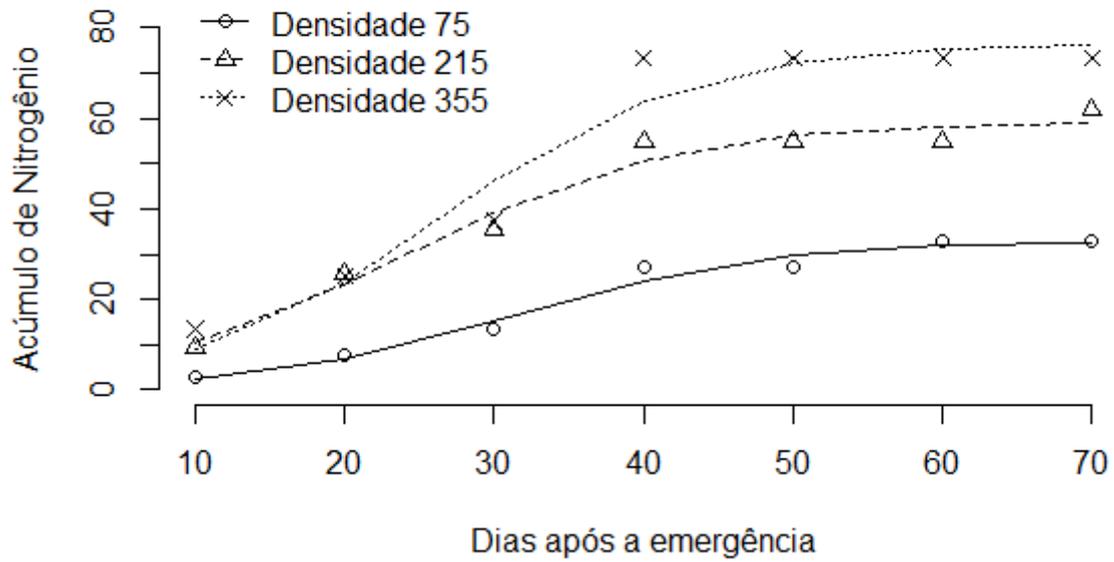


Figura 4.5 – Ajuste do modelo logístico aos dados isotonzados relativo ao acúmulo de nitrogênio no sistema de plantio convencional nas três densidades de semeadura, feijoeiro cv. Jalo.

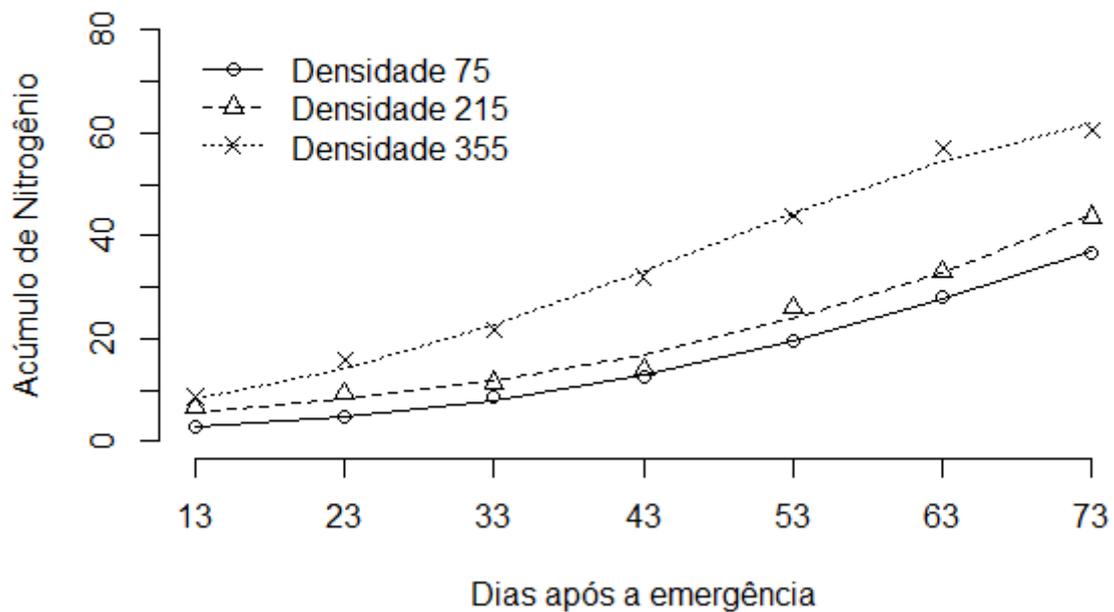
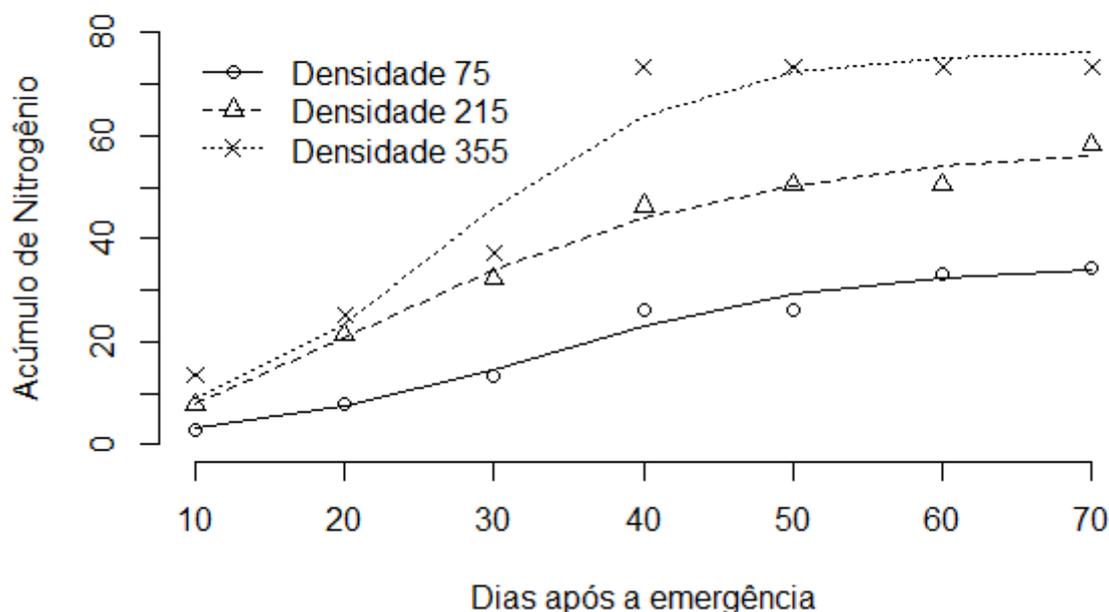


Figura 4.6 – Ajuste do modelo logístico aos dados isotonzados relativo ao acúmulo de nitrogênio no sistema de plantio direto e nas três densidades de semeadura, feijoeiro cv. Jalo.



No sistema de plantio direto (Figura 4.4), o acúmulo de nitrogênio foi distinto entre as densidades principalmente a partir da segunda época de avaliação. Pelo comportamento mostrado nesta figura e pelas estimativas dos parâmetros (Tabela 4.3) a densidade de 75 mil plantas ha^{-1} apresentou menores acúmulos de N e os maiores acúmulos ocorreram na densidade de 355. Observa-se com os modelos logístico e Gompertz e suas respectivas estimativas dos parâmetros, que com o passar dos dias houve aumento significativo do acúmulo de nitrogênio nas densidades 75, 215 e 355 mil plantas ha^{-1} .

Para os dados isotonzados mostrados nas Figuras 4.5 e 4.6 para os plantios convencional e direto, respectivamente, observe um comportamento semelhante aos dados originais, mas com uma melhoria de qualidade de ajuste.

Para NUTRI-FATOS (1996) a cultura do feijoeiro, em um nível de produção de 1 tonelada de grãos, o total absorvido de nitrogênio é de 100 kg, sendo que essa cultura fixa a maior parte desse nutriente no ar. Porém, para atender às recomendações de inoculação do feijoeiro, a fixação simbiótica de N não tem sido suficiente para atender a demanda da planta. Desta maneira, se obtém resposta ao N aplicado, principalmente nas semeaduras realizadas na época de seca e na cultura irrigada, quando se tem um maior potencial de produção. O com-

portamento do acúmulo de nitrogênio ilustrado nas Figuras 4.1 4.2 e os ajustes pelo modelo logístico nas Figuras 4.3, 4.4, 4.5 e 4.6 estão de acordo com NUTRI-FATOS (1996), pois a absorção do nitrogênio ocorre praticamente durante todo o ciclo da cultura, mas a época de maior exigência, quando a velocidade de absorção é máxima ocorre dos 35 aos 50 dias da emergência da planta, coincidindo com a época de florescimento e neste período, a planta absorve cerca de 2,0 a 2,5 kg N/ha dia.

Dados relativos ao crescimento em altura de plantas de duas cultivares de feijoeiro foram avaliadas por Martins Filho et al. (2008). Os autores estimaram maiores taxas de maturidade para a cultivar Carioca em relação à Neguinho, sugerindo que a cultivar Carioca possui um ciclo de cultivo menor, podendo ser usada em situações com restrição no tempo de cultivo, como em sucessão com outras culturas. Vieira et al. (2008) avaliaram o crescimento em altura de plantas para as cultivares Ouro Negro e Talismã, estimando alturas assintóticas máximas de 100 cm, com incrementos até aos 50 DAE, em plantio direto, e até 72 DAE, no plantio convencional. Ajustaram o modelo logístico, que possibilitou a descrição do crescimento de modo adequado.

Quanto a isotonização dos dados, Rodrigues et al. (2018) mostraram ser eficiente a teoria da regressão isotônica quanto as observações de peso-idade de machos da raza Guzerá recém-desmamados; verificaram que o modelo Logístico foi o mais adequado para descrever o crescimento dos animais por apresentar alta porcentagem de convergência (100%) e qualidade de ajuste satisfatória, medida por meio do quadrado médio do erro (QME) e pelo coeficiente de determinação (R^2). Gonçalves et al. (2012) utilizaram a isotonização como uma maneira de melhorar os avaliadores de qualidade ao analisar os dados de deposição de zinco (Zn) na tíbia de aves machos da linhagem Hubbard, e ainda, verificaram que o modelo logarítmico apresentou estimativas dos parâmetros mais coerentes com os valores relatados na literatura.

4.3 Inferência Bayesiana

Uma das finalidades do item 4.2, referido como parte frequentista foi selecionar o melhor modelo de acordo com os critérios de avaliação da qualidade do ajuste, AIC e R_a^2 , sendo, escolhido o modelo logístico independente se os dados de nitrogênio do feijoeiro, cv. Jalo, são tradicionais ou isotonizados e, também, quanto ao tipo de manejo, convencional e direto, e densidades de semeadura (75, 215 e 355 mil plantas ha^{-1}); em todos esses casos, o modelo logístico apresentou maiores estimativas de R_a^2 e menores AIC em relação ao modelo de Gompertz.

Desta maneira, nesta seção, serão apresentados os resultados da análise bayesiana somente para o modelo logístico.

A partir dos estudos de Silva et al. (2005), no qual o ajuste de modelos de regressão não linear a dados referentes à curvas de crescimento e lactação, a inferência bayesiana foi utilizada com sucesso reduzindo o número de estimativas viesadas na presença de poucas observações enquanto a estimação por intervalo é mais precisa em relação à obtida pela metodologia frequentista. De acordo com Silva et al. (2007), a principal vantagem de utilizar a inferência bayesiana é permitir que as estimativas dos parâmetros do modelo não linear sejam estimadas simultaneamente com os efeitos de possíveis fatores que as afetam.

Foram utilizadas 50.000 iterações na implementação dos algoritmos MCMC com espaçamento entre os pontos amostrados (*thin*) de 100 observações, e no aquecimento (*burn-in*) desprezou-se as 1.000 primeiras iterações para obter amostras convergentes a serem usadas na inferência dos parâmetros das distribuições marginais *a posteriori*.

4.3.1 Dados originais

Nas Tabelas 4.4, 4.5 e 4.6 estão apresentadas as estimativas da média a posteriori dos parâmetros, desvio padrão (DP), erro de Monte Carlo (MCE) e intervalo de máxima densidade a posteriori (HPD) do modelo logístico ajustado aos dados tradicionais de nitrogênio do feijoeiro cv. Jalo no sistema de plantio convencional e direto nas densidades de semeadura 75, 215 e 355 mil plantas ha⁻¹.

As amostras das distribuições marginais a posteriori para as diferenças dos parâmetros foram obtidas por meio da utilização das amostras geradas para as distribuições marginais dos parâmetros, ou seja, considerou-se a diferença da cadeia dos parâmetros como uma função dada por $d(a) = a - a1$, neste caso, o parâmetro corresponde ao peso assintótico máximo dos dados tradicionais do plantio convencional menos o peso assintótico máximo dos dados tradicionais do plantio direto. Para o parâmetro de locação (b) e taxa de crescimento (k) também foram realizadas essas diferenças.

As gráficos apresentados nessa seção mostram as distribuições marginais dos parâmetros do modelo de crescimento logístico, da variância residual e das diferenças entre os parâmetros a , b e k . Essas figuras retratam de forma prática a utilização da metodologia bayesiana, a qual está fundamentada as distribuições de probabilidade para estimar os parâmetros de interesse.

Desta maneira, os gráficos gerados pelo método MCMC contribuíram para a monitoração informal da convergência, obtida por intermédio da análise dos gráficos do traço da cadeia e da densidade *a posteriori* para os parâmetros do modelo logístico, que estão apresentada nas Figuras 4.7, 4.8, 4.9 e 4.10 relacionadas a densidade 75, Figuras 4.11, 4.12, 4.13 e 4.14 referentes a densidade 215 e as Figuras 4.15, 4.16, 4.17 e 4.18 pertencentes a densidade de semeadura 355 mil plantas por ha⁻¹. Portanto, percebe-se que os valores encontrados para o modelo logístico no PC estão mais dispersos em relação aos valores pontuais da média a posteriori. Ainda nas figuras, percebe-se que, a maioria dos parâmetros apresentam uma distribuição com tendência à simetria, fato já observado pela proximidade das estimativas.

Tabela 4.4 – Estimativas para os parâmetros do modelo logístico aos dados tradicionais do acúmulo de nitrogênio do feijoeiro cv. Jalo para o sistema de plantio convencional e direto na densidade de semeadura 75, desvio padrão (DP), Erro de Monte Carlo (MCE) e intervalo de credibilidade (HPD) com 95% de probabilidade.

Plantio	Densidade	Parâmetros	Média	DP	MCE	HPD	
						LI	LS
PC	75	<i>a</i>	69,048	7,262	0,230	57,245	87,522
		<i>b</i>	70,153	3,680	0,116	63,624	78,921
		<i>k</i>	0,054	0,003	0,000	0,049	0,060
		τ	9,212	5,457	0,173	1,936	22,257
PD	75	<i>a</i> ₁	33,270	2,896	0,009	29,063	38,556
		<i>b</i> ₁	31,653	2,891	0,009	27,708	37,626
		<i>k</i> ₁	0,126	0,055	0,000	0,073	0,209
		τ ₁	0,291	0,162	0,000	0,058	0,0691
		<i>da</i>	35,778	7,774	0,246	22,641	54,868
		<i>db</i>	38,500	4,652	0,147	30,113	47,891
		<i>dk</i>	-0,071	0,547	0,000	-0,154	-0,018

De acordo com os resultados apresentados na Tabela 4.4 percebe-se que para o ajuste do modelo logístico no PD houve uma eficiência melhor de ajuste devido aos menores valores do desvio padrão e MCE e, apresentando menores amplitudes para o intervalo HPD. É possível verificar que, em média, o parâmetro *a*, ou seja, o peso de massa seca ou acúmulo máximo esperado na maturação ao final do ciclo vegetativo apresentou diferença significativa entre os dois plantios comparados. Para o parâmetro *k*, taxa de crescimento ou índice de maturidade fisiológica, sendo este um indicador de velocidade com que a planta se aproxima de seu tamanho adulto, deste modo, observou-se que o intervalo de credibilidade contém apenas valores nega-

tivos, o que permite afirmar que o PD apresentou maior precocidade que o PC concordando com os resultados de Martins Filho et al. (2008).

Figura 4.7 – Traço da cadeia gerada pelo método MCMC para os parâmetros a , b , k , a_1 , b_1 e k_1 do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto, respectivamente, na densidade de semeadura 75 para os dados tradicionais.

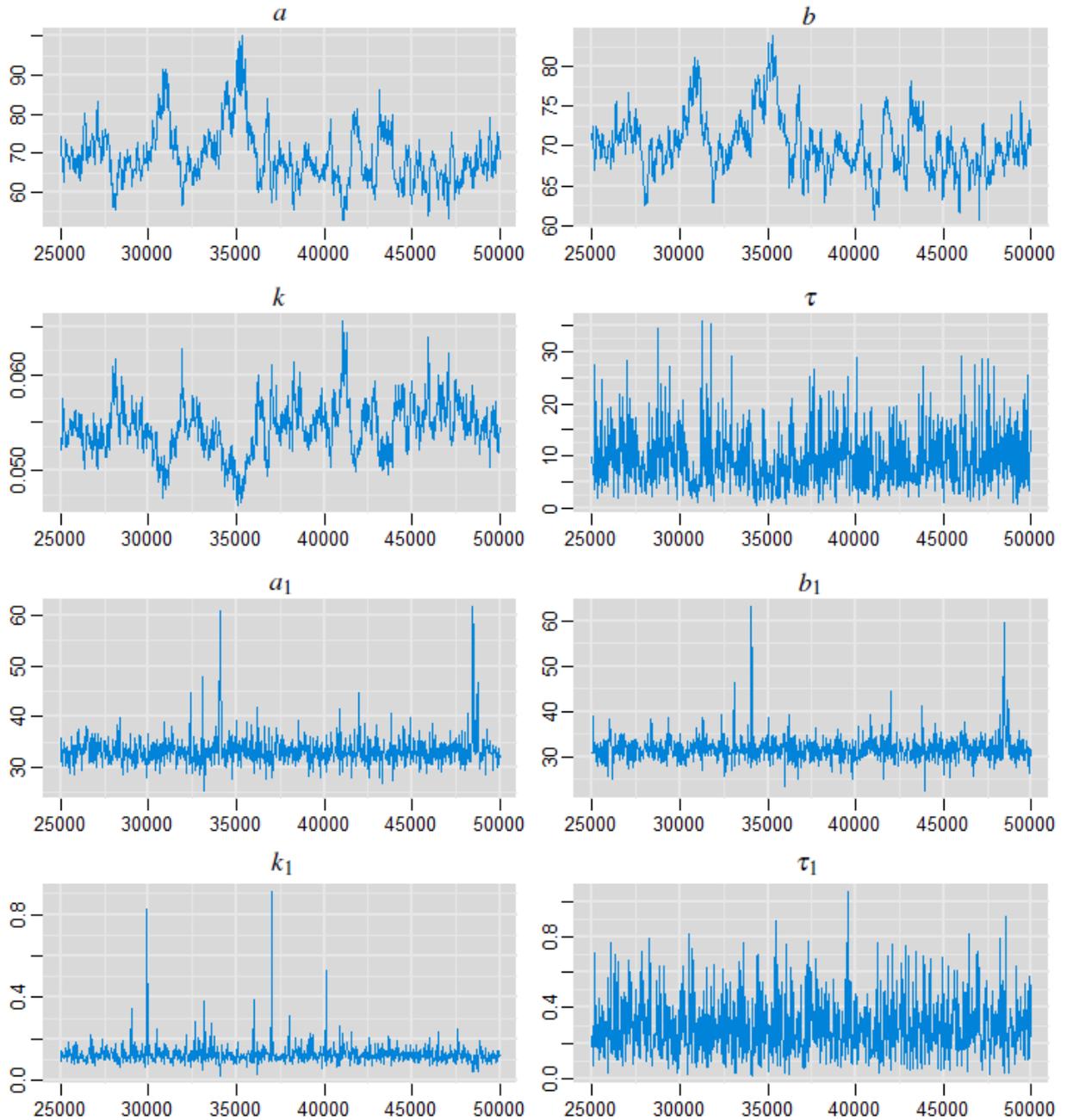


Figura 4.8 – Traço da cadeia gerada pelo método MCMC para os parâmetros da , db e dk do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto, respectivamente, na densidade de semeadura 75 para os dados tradicionais.

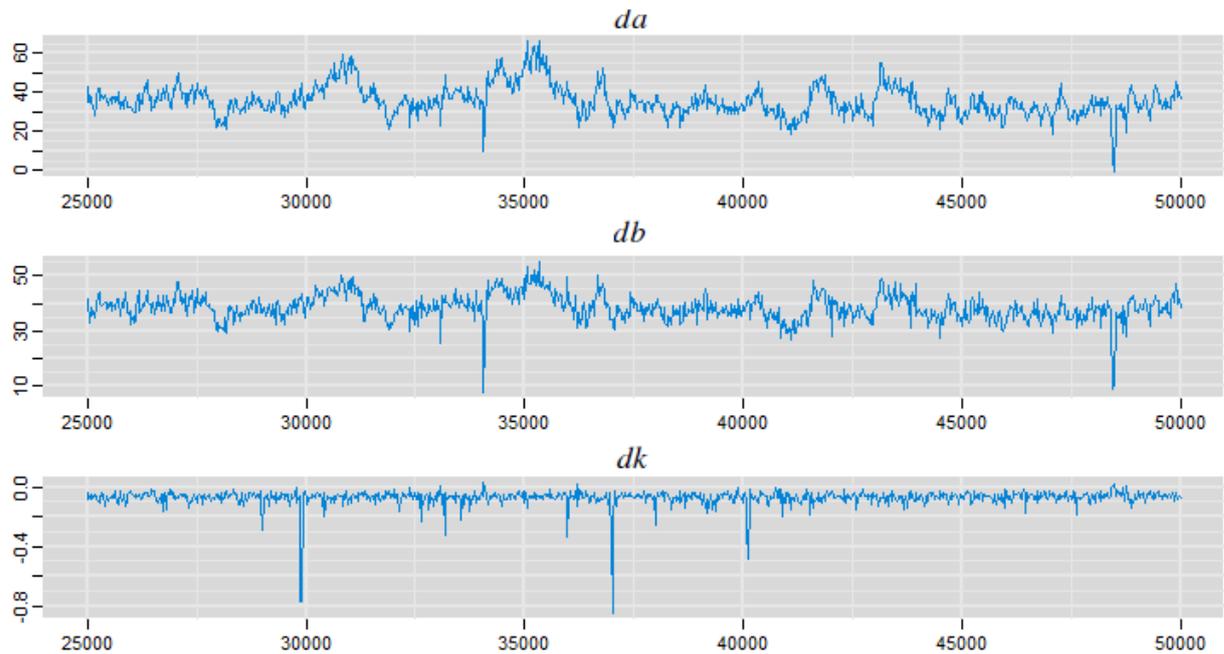


Figura 4.9 – Densidade a posteriori gerada pelo método MCMC para os parâmetros a , b , k , a_1 , b_1 , k_1 , da , db e dk do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto na densidade de semeadura 75 para os dados tradicionais

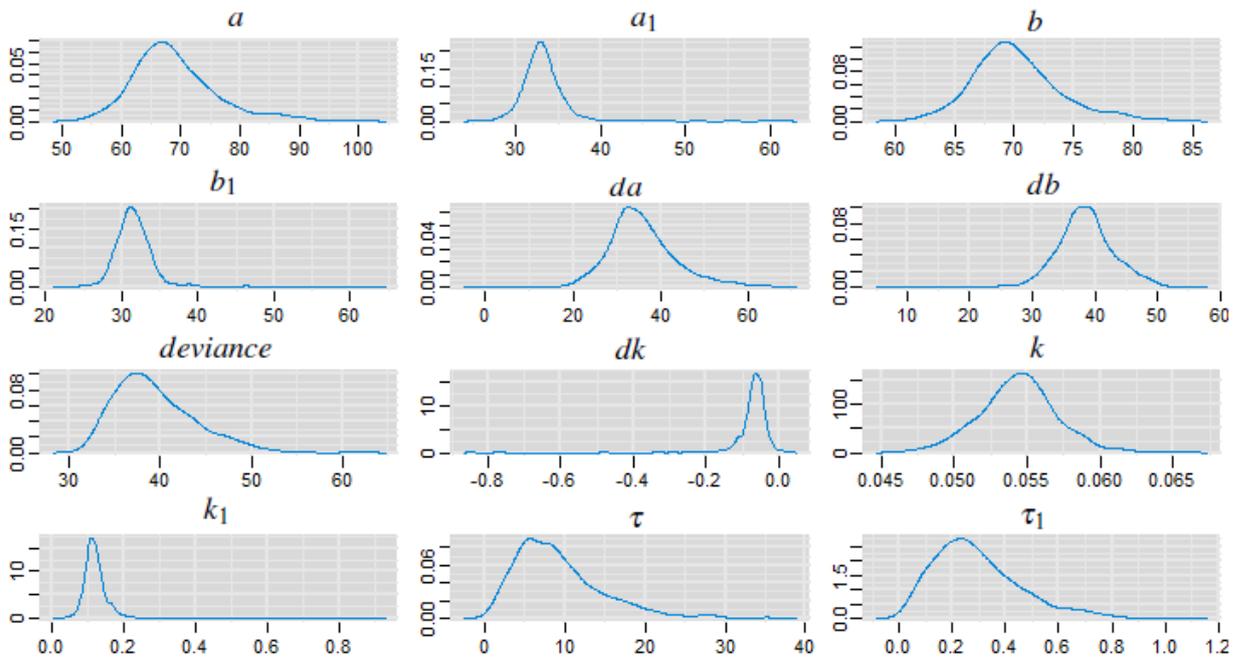


Figura 4.10 – Gráfico de pontos com intervalos confiáveis para os parâmetros a , b , k , a_1 , b_1 , k_1 , da , db e dk do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto na densidade de semeadura 75 para os dados tradicionais.

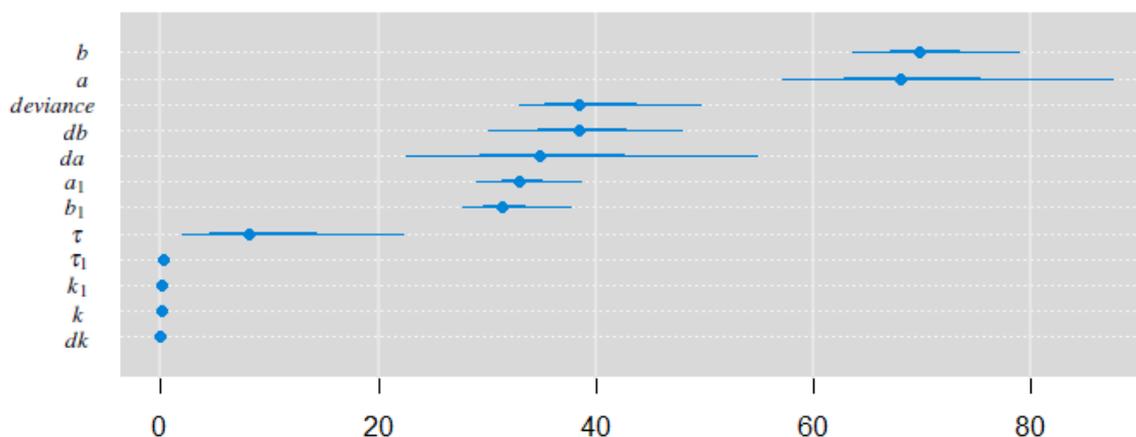


Tabela 4.5 – Estimativas para os parâmetros do modelo Logístico aos dados tradicionais do acúmulo de nitrogênio do feijoeiro cv. Jalo para o sistema de plantio convencional e direto na densidade de semeadura 215, desvio padrão (DP), Erro de Monte Carlo (MCE) e intervalo de credibilidade (HPD) com 95% de probabilidade.

Plantio	Densidade	Parâmetros	Média	DP	MCE	HPD	
						LI	LS
PC	215	a	620,820	537,800	17,008	58,732	1924,387
		b	131,797	39,900	1,262	58,241	195,361
		k	0,037	0,000	0,000	0,028	0,059
		τ	0,242	0,130	0,004	0,057	0,561
PD	215	a_1	59,728	4,613	0,146	53,993	67,776
		b_1	24,207	3,031	0,096	19,309	29,236
		k_1	0,115	0,039	0,001	0,071	0,174
		τ_1	0,098	0,005	0,001	0,057	0,561
		da	561,092	0,005	17,010	-1,202	1862,365
		db	107,590	0,399	1,263	34,092	171,468
		dk	-0,078	0,003	0,001	-0,137	-0,029

Sobre os resultados apresentados na Tabela 4.5 percebe-se que para o ajuste do modelo logístico no PD houve uma eficiência melhor de ajuste devido aos menores valores do desvio padrão e MCE e, apresentando menores amplitudes para o intervalo HPD.

É possível verificar que, em média, o parâmetro a , ou seja, o peso de massa seca ou acúmulo máximo esperado na maturação ao final do ciclo vegetativo não apresentou diferença significativa entre os dois plantios comparados, ou seja, mediante avaliação do intervalo de credibilidade para as diferenças, pois, se este vier a conter o valor zero, conclui-se que, em

média, os parâmetros das populações envolvidas no contraste são iguais. O mesmo não foi verificado para o parâmetro k , taxa de crescimento ou índice de maturidade fisiológica, sendo visto como um indicador da velocidade com que a planta se aproxima de seu tamanho adulto, pois se observou que o intervalo de credibilidade contém apenas valores negativos, o que permite afirmar que o PD apresentou maior precocidade que o PC.

Figura 4.11 – Traço da cadeia gerada pelo método MCMC para os parâmetros a , b , k , a_1 , b_1 e k_1 do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto, respectivamente, na densidade de semeadura 215 para os dados tradicionais.

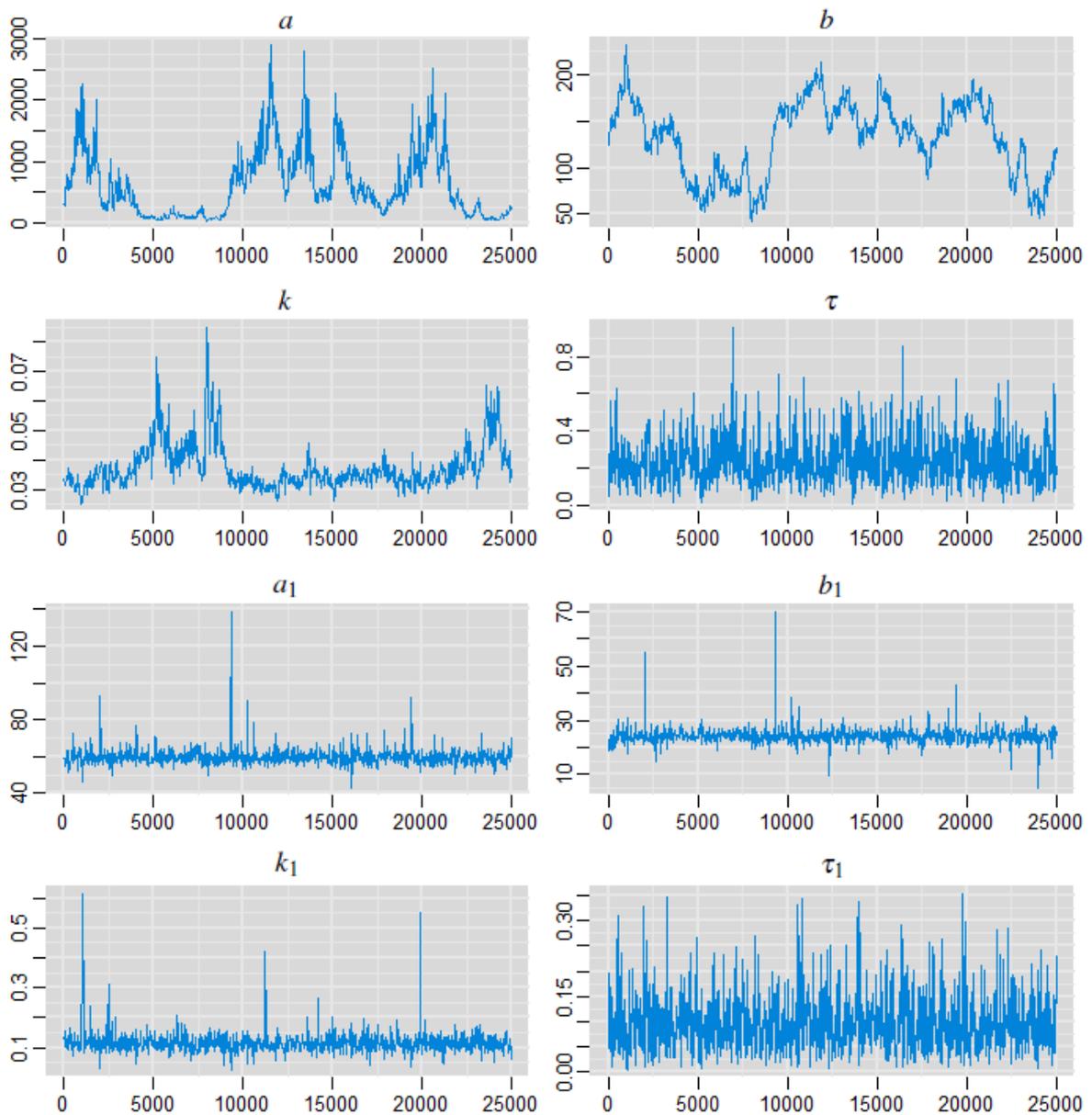


Figura 4.12 – Traço da cadeia gerada pelo método MCMC para os parâmetros da , db e dk do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto, respectivamente, na densidade de semeadura 215 para os dados tradicionais.

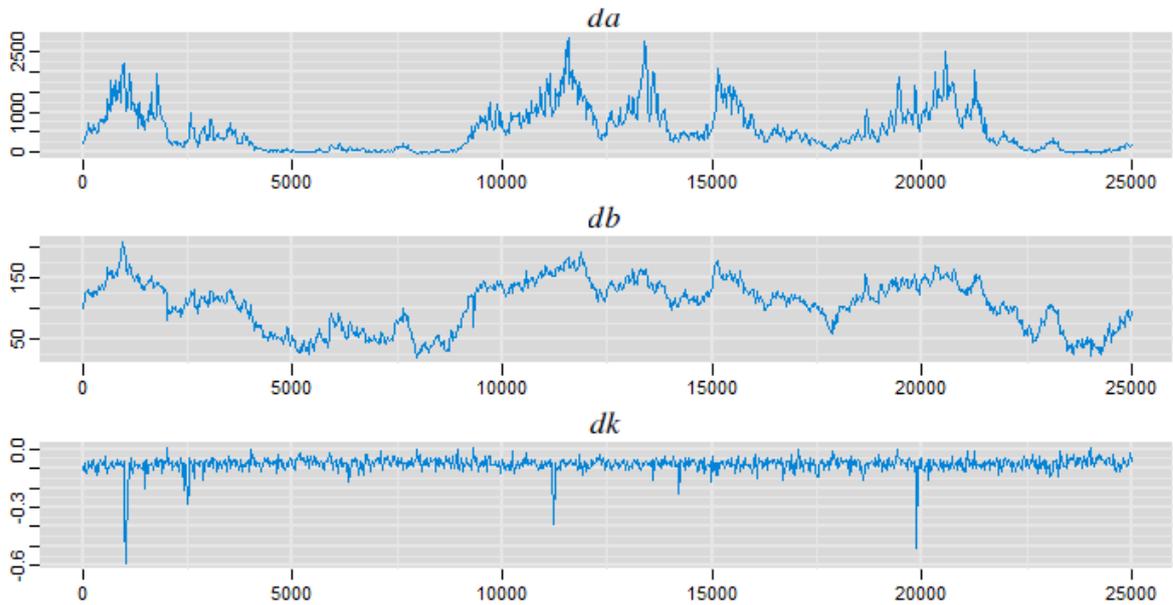


Figura 4.13 – Densidade a posteriori gerada pelo método MCMC para os parâmetros a , b , k , a_1 , b_1 , k_1 , da , db e dk do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto na densidade de semeadura 215 para os dados tradicionais

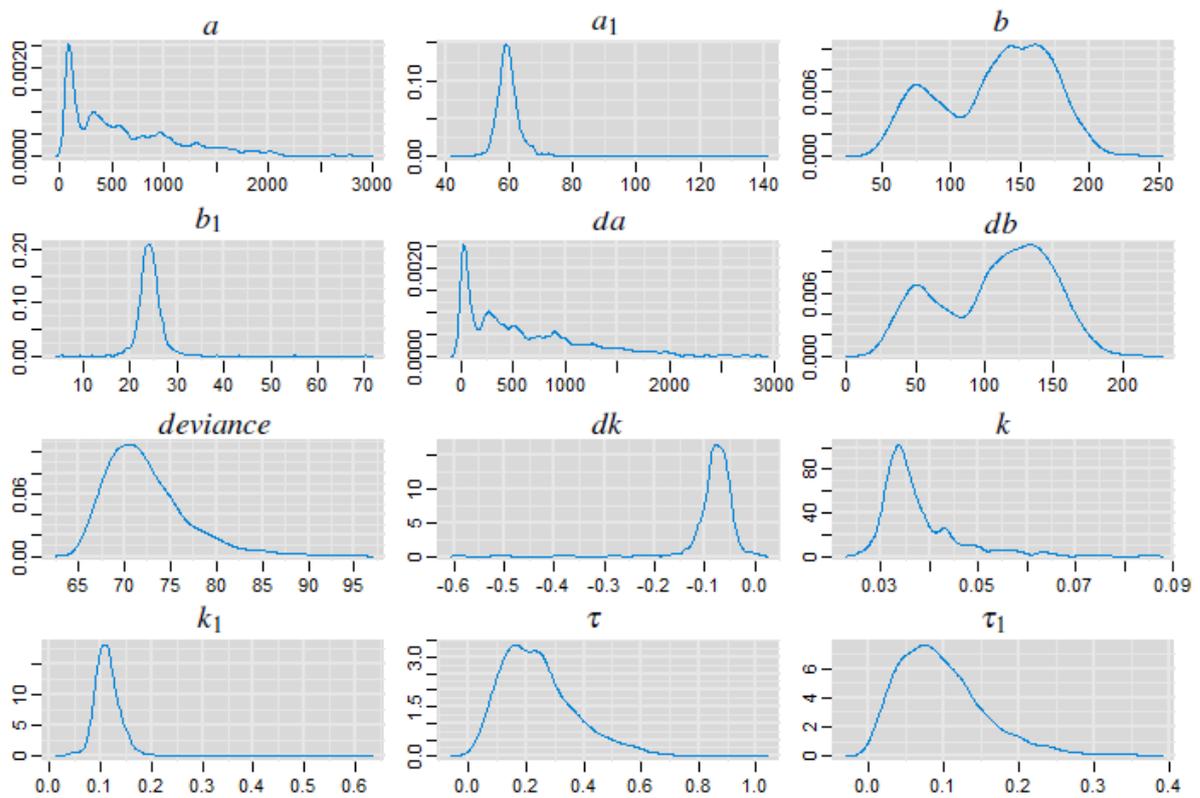


Figura 4.14 – Gráfico de pontos com intervalos confiáveis para os parâmetros a , b , k , a_1 , b_1 , k_1 , da , db e dk do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto na densidade de semeadura 215 para os dados tradicionais.

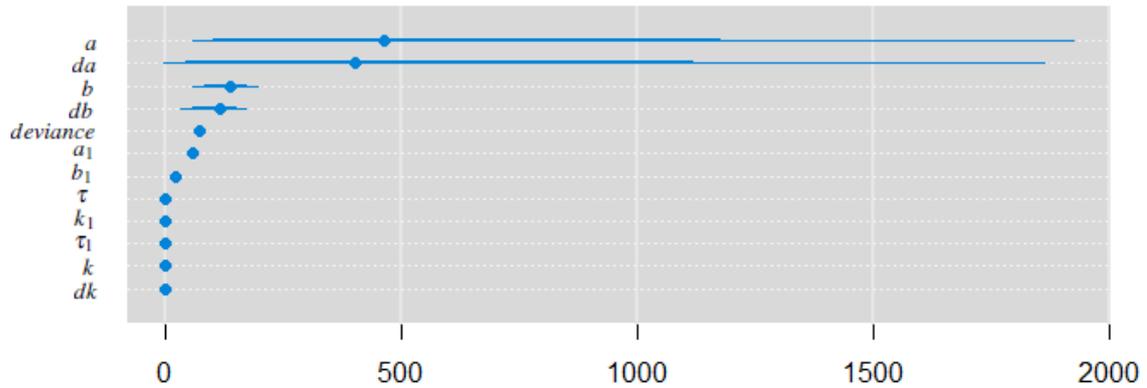


Tabela 4.6 – Estimativas para os parâmetros do modelo Logístico aos dados tradicionais do acúmulo de nitrogênio do feijoeiro cv. Jalo para o sistema de plantio convencional e direto na densidade de semeadura 355, desvio padrão (DP), Erro de Monte Carlo (MCErro) e intervalo de credibilidade (HPD) com 95% de probabilidade.

Plantio	Densidade	Parâmetros	Média	DP	MCE	HPD	
						LI	LS
PC	355	a	68,858	7,583	0,240	58,551	90,386
		b	43,182	4,226	0,134	37,258	54,281
		k	0,067	0,010	0,000	0,048	0,0887
		τ	0,242	0,139	0,004	0,048	0,583
PD	355	a_1	76,618	7,942	0,251	63,069	91,001
		b_1	26,935	5,005	0,158	19,992	33,696
		k_1	0,283	0,581	0,018	0,068	2,598
		τ_1	0,027	0,0176	0,000	0,003	0,069
		da	-7,760	10,872	0,344	-25,281	18,436
		db	16,247	6,311	0,200	6,224	29,572
		dk	-0,215	0,581	0,018	-2,539	0,004

Os resultados apresentados na tabela 4.6 mostram que para o ajuste do modelo logístico no PC houve uma eficiência melhor de ajuste devido aos menores valores do desvio padrão e MCE e, apresentando menores amplitudes para o intervalo HPD. É possível verificar que, em média, o parâmetro a e k , ou seja, o peso de massa seca ou acúmulo máximo esperado na maturação ao final do ciclo vegetativo e a taxa de crescimento ou índice de maturidade fisiológica, não apresentaram diferença significativa entre os dois plantios comparados, ou seja, mediante avaliação do intervalo de credibilidade para as diferenças, pois, se este vier a conter

o valor zero, conclui-se que, em média, os parâmetros das populações envolvidas no contraste são iguais.

Figura 4.15 – Traço da cadeia gerada pelo método MCMC para os parâmetros a , b , k , a_1 , b_1 e k_1 do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto, respectivamente, na densidade de semeadura 355 para os dados tradicionais.

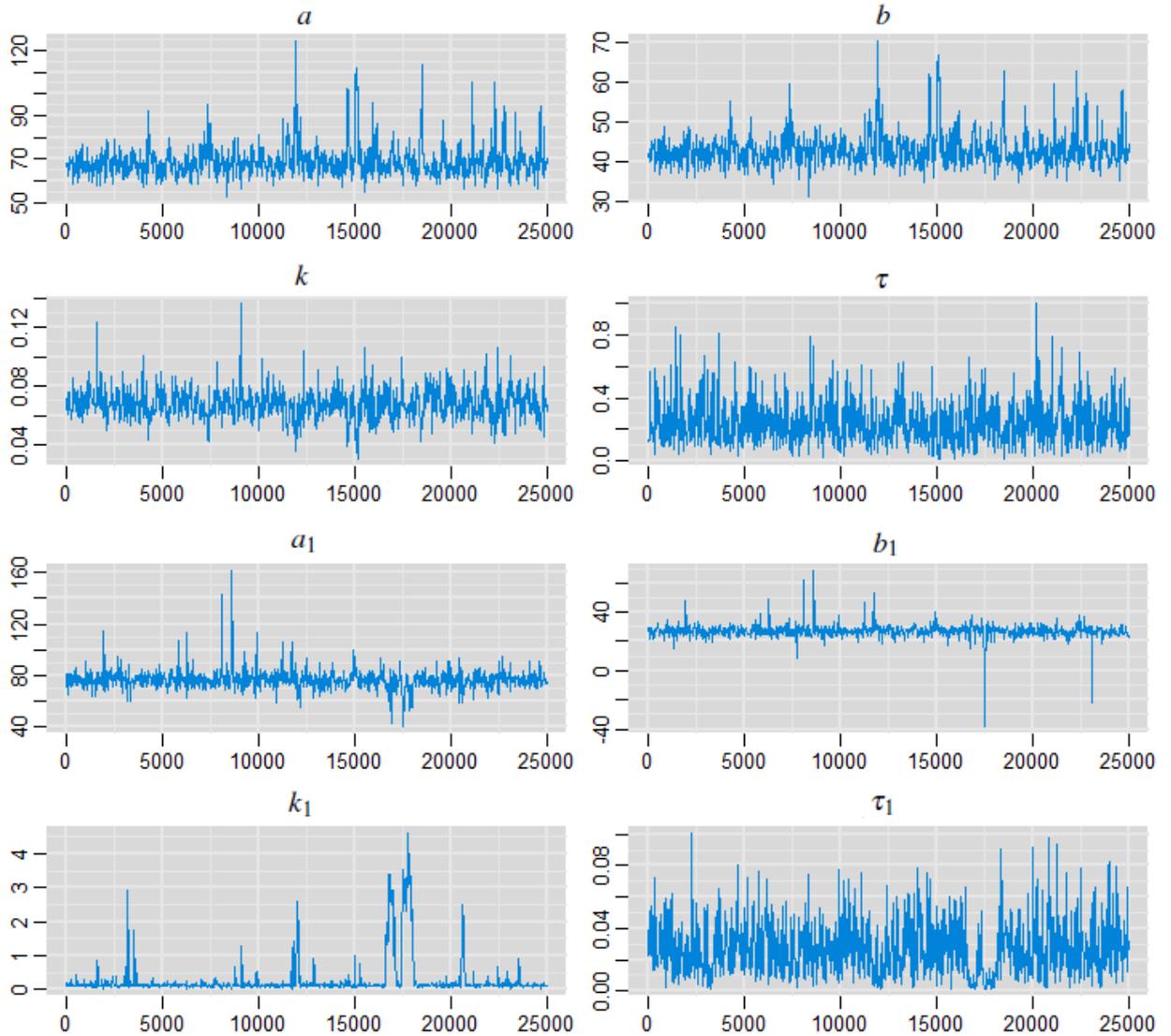


Figura 4.16 – Traço da cadeia gerada pelo método MCMC para os parâmetros da , db e dk do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto, respectivamente, na densidade de semeadura 355 para os dados tradicionais.

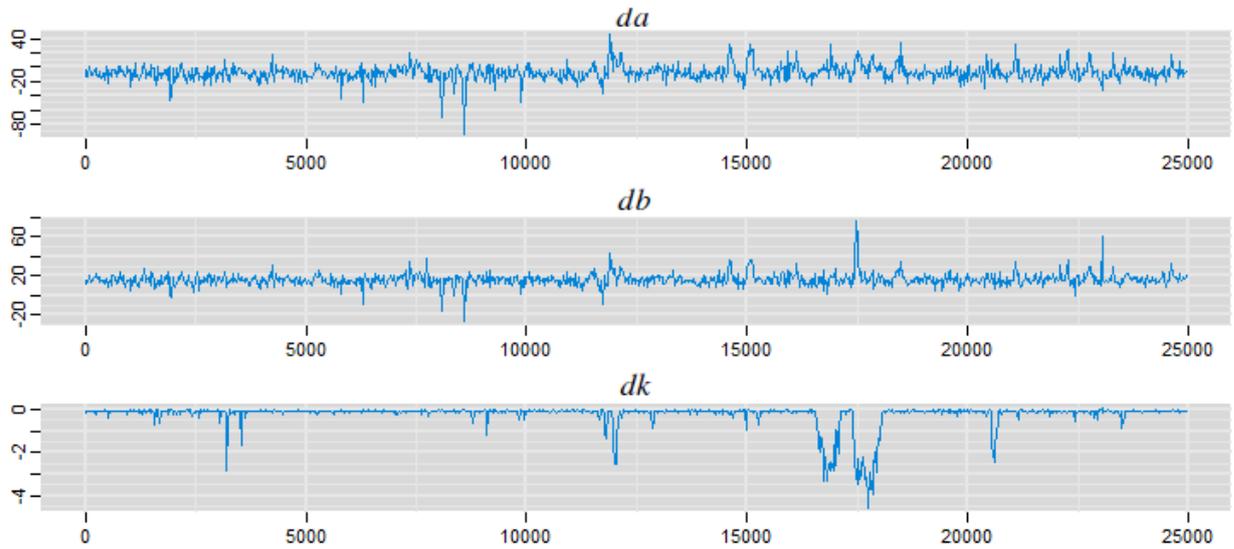


Figura 4.17 – Densidade a posteriori gerada pelo método MCMC para os parâmetros a , b , k , a_1 , b_1 , k_1 , da , db e dk do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto na densidade de semeadura 355 para os dados tradicionais

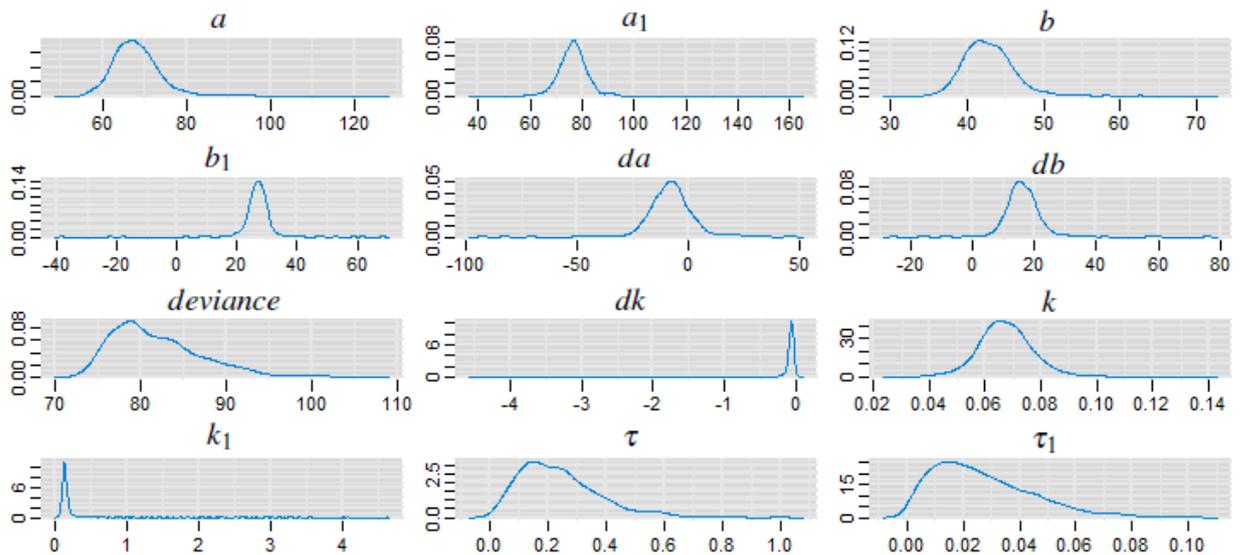


Figura 4.18 – Gráfico de pontos com intervalos confiáveis para os parâmetros a , b , k , a_1 , b_1 , k_1 , da , db e dk do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto na densidade de semeadura355 para os dados tradicionais.

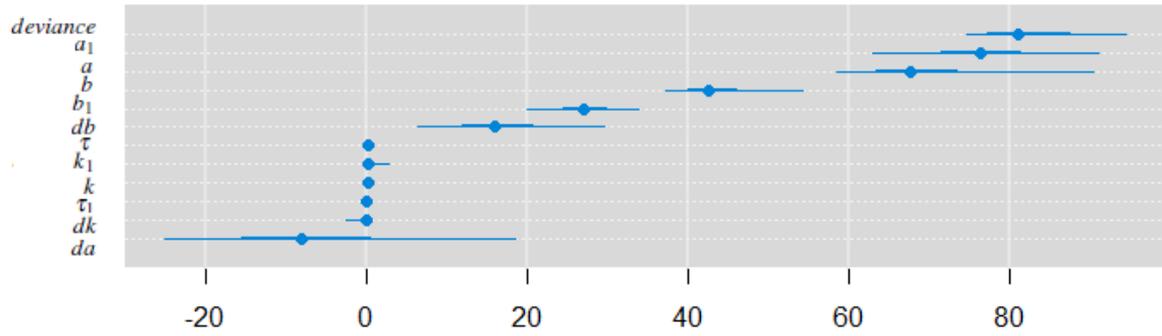


Tabela 4.7 – Estimativa do fator de dependência (FD) do critério de Raftery & Lewis e coeficiente de convergência (R) de Gelman & Rubin (R) utilizados na detecção da convergência das cadeias amostradas para os dados originais de nitrogênio do feijoeiro cv. Jalo, para o PC e PD nas densidade de semeadura 75, 215 e 355 mil plantas ha⁻¹.

Densidade	Plantio	Parâmetros	FD	R
75	PC	<i>a</i>	4,971	1,00
		<i>b</i>	4,753	1,00
		<i>k</i>	4,231	1,01
		τ	4,001	1,01
	PD	<i>a</i> ₁	4,576	1,00
		<i>b</i> ₁	4,743	1,00
		<i>k</i> ₁	5,587	1,11
		τ ₁	3,351	1,00
		<i>da</i>	4,789	1,00
		<i>db</i>	4,653	1,10
		<i>dk</i>	3,798	1,00
		215	PC	<i>a</i>
<i>b</i>	2,678			1,40
<i>k</i>	3,942			1,43
τ	3,410			1,00
PD	<i>a</i> ₁		3,140	1,00
	<i>b</i> ₁		2,332	1,00
	<i>k</i> ₁		3,919	1,14
	τ ₁		2,216	1,00
	<i>da</i>		3,578	1,02
	<i>db</i>		2,950	1,30
	<i>dk</i>		3,121	1,00
	355		PC	<i>a</i>
<i>b</i>		2,143		1,16
<i>k</i>		2,872		1,01
τ		2,890		1,00
PD		<i>a</i> ₁	2,977	1,03
		<i>b</i> ₁	3,115	1,12
		<i>k</i> ₁	3,699	1,33
		τ ₁	1,092	1,01
		<i>da</i>	3,978	1,00
		<i>db</i>	3,490	1,01
		<i>dk</i>	2,341	1,04

A partir da Tabela 4.7, observe que o algoritmo Metropolis-Hastings indicou a possibilidade de convergência em relação a maioria dos parâmetros e suas respectivas diferenças, nas densidades 75, 215 e 355 mil plantas ha⁻¹, o que, segundo Gelman & Rubin (1992), os valores obtidos mediante ao coeficiente de convergência (R) estão muito próximos ao valor

unitário. Outro indicativo de convergência se deu pelo teste de Raftery & Lewis (1992), o qual apresentou fator de dependência (FD) menor que 5, concordando com Delfino et al. (2011), pois obtiveram FD menor que 5, e assim disseram haver garantias suficientes para afirmar a convergência das cadeias.

De um modo geral, para os dados tradicionais, o método bayesiano implementado mostrou-se eficiente na estimação dos parâmetros nas densidades de semeadura 75, 215 e 355 kg ha⁻¹. Esta metodologia foi apresentada por Silva et al. (2005) para comparar parâmetros à curvas de crescimento e lactação de cabras referentes a duas diferentes populações e por Martins Filho et al. (2008) para ajustar o modelo não linear logístico para dados de crescimento de duas cultivares de feijoeiro, “Neguinho” e “Carioca”.

4.3.2 Dados isotonizados

Nas Tabelas 4.8, 4.9 e 4.12 estão apresentadas as estimativas da média a posteriori dos parâmetros, desvio padrão, erro de Monte Carlo e intervalo de máxima densidade a posteriori (HPD) do modelo logístico ajustado aos dados isotonizados de nitrogênio do feijoeiro cv. Jalo no sistema de plantio convencional e direto nas densidades de semeadura 75, 215 e 355 kg ha⁻¹.

As amostras das distribuições marginais a posteriori para as diferenças dos parâmetros foram obtidas por meio da utilização das amostras geradas para as distribuições marginais dos parâmetros, ou seja, considerou-se a diferença da cadeia dos parâmetros como uma função dada por $d(a) = a - a1$, neste caso, o parâmetro corresponde ao peso assintótico máximo dos dados isotonizados do plantio convencional menos o peso assintótico máximo dos dados isotonizados do plantio direto. Para o parâmetro de locação (b) e taxa de crescimento (k) também foram realizadas essas diferenças.

As figuras apresentadas nessa seção mostram as distribuições marginais dos parâmetros do modelo de crescimento logístico, da variância residual e das diferenças entre os parâmetros a , b e k . Essas figuras retratam de forma prática a utilização da metodologia bayesiana, a qual está fundamentada as distribuições de probabilidade para estimar os parâmetros de interesse.

Desta maneira, os gráficos gerados pelo método MCMC contribuíram para a monitoração informal da convergência, obtida por intermédio da análise dos gráficos do traço da cadeia e da densidade *a posteriori* para os parâmetros do modelo logístico, que estão apresentada nas Figuras 4.19, 4.20, 4.21 e 4.22 relacionadas a densidade 75, Figuras 4.27, 4.28, 4.29 e 4.30 referentes a densidade 215 e as Figuras 4.27, 4.28, 4.29 e 4.30 pertencentes a densidade

de semeadura 355 mil plantas por ha^{-1} . Portanto, percebe-se que os valores encontrados para o modelo logístico no PC estão mais dispersos em relação aos valores pontuais da média a posteriori. Ainda nas figuras, percebe-se que, a maioria dos parâmetros apresentam uma distribuição com tendência à simetria, fato já observado pela proximidade das estimativas.

Tabela 4.8 – Estimativas para os parâmetros do modelo Logístico aos dados isotonzados do acúmulo de nitrogênio do feijoeiro cv. Jalo para o sistema de plantio convencional e direto na densidade de semeadura 75, desvio padrão (DP), Erro de Monte Carlo (MCE) e intervalo de credibilidade (HPD) com 95% de probabilidade.

Plantio	Densidade	Parâmetros	Média	DP	MCE	HPD	
						LI	LS
PC	75	a	70,167	6,920	0,219	58,600	87,860
		b	70,790	3,472	0,110	64,500	79,200
		k	0,054	0,000	0,000	0,049	0,059
		τ	10,264	5,862	0,185	1,936	23,640
PD	75	a_1	23,035	0,005	11,673	-1480,000	1271,000
		b_1	-32,604	1015,000	32,110	-2109,000	1911,000
		k_1	-60,834	982,000	31,060	-1937,000	1921,000
		τ_1	0,006	0,000	0,000	0,001	0,017
		da	47,131	529,200	16,730	-1201,000	1542,000
		db	103,394	1015,00	32,100	-1839,000	2180,000
		dk	60,888	982,000	31,060	-1921,000	1937,000

Os resultados apresentados na tabela 4.8 mostram que para o ajuste do modelo logístico no PC houve uma eficiência melhor de ajuste devido aos menores valores do desvio padrão e MCE e, apresentando menores amplitudes para o intervalo HPD. É possível verificar que, em média, o parâmetro a e k , ou seja, o peso de massa seca ou acúmulo máximo esperado na maturação ao final do ciclo vegetativo e a taxa de crescimento ou índice de maturidade fisiológica, não apresentaram diferença significativa entre os dois plantios comparados, ou seja, mediante avaliação do intervalo de credibilidade para as diferenças, pois, se este vier a conter o valor zero, conclui-se que, em média, os parâmetros das populações envolvidas no contraste são iguais.

Figura 4.19 – Traço da cadeia gerada pelo método MCMC para os parâmetros a , b , k , a_1 , b_1 e k_1 do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto, respectivamente, na densidade de semeadura 75 para os dados isotonzados.

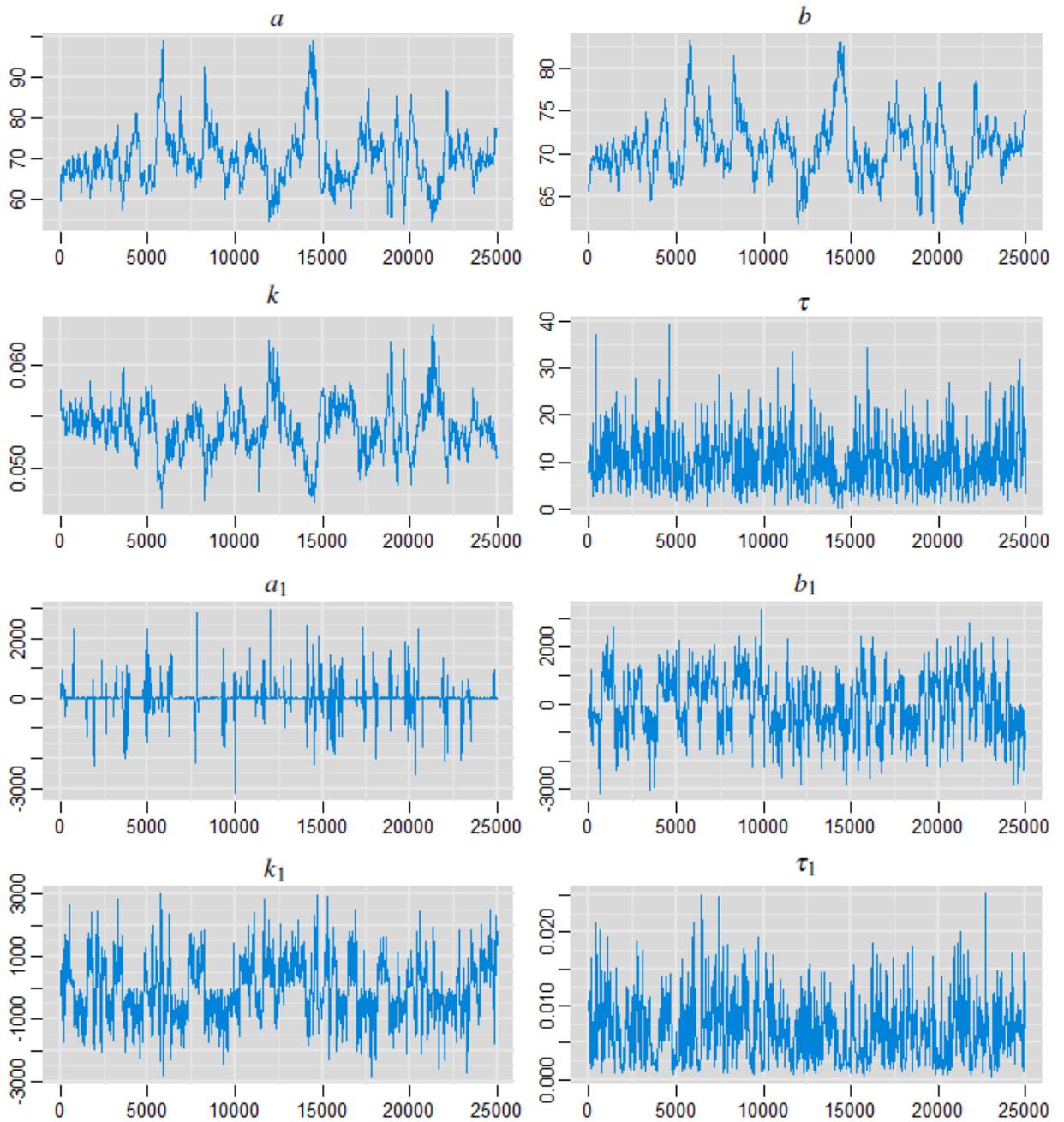


Figura 4.20 – Traço da cadeia gerada pelo método MCMC para os parâmetros da , db e dk do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto, respectivamente, na densidade de semeadura 75 para os dados isotonzados.

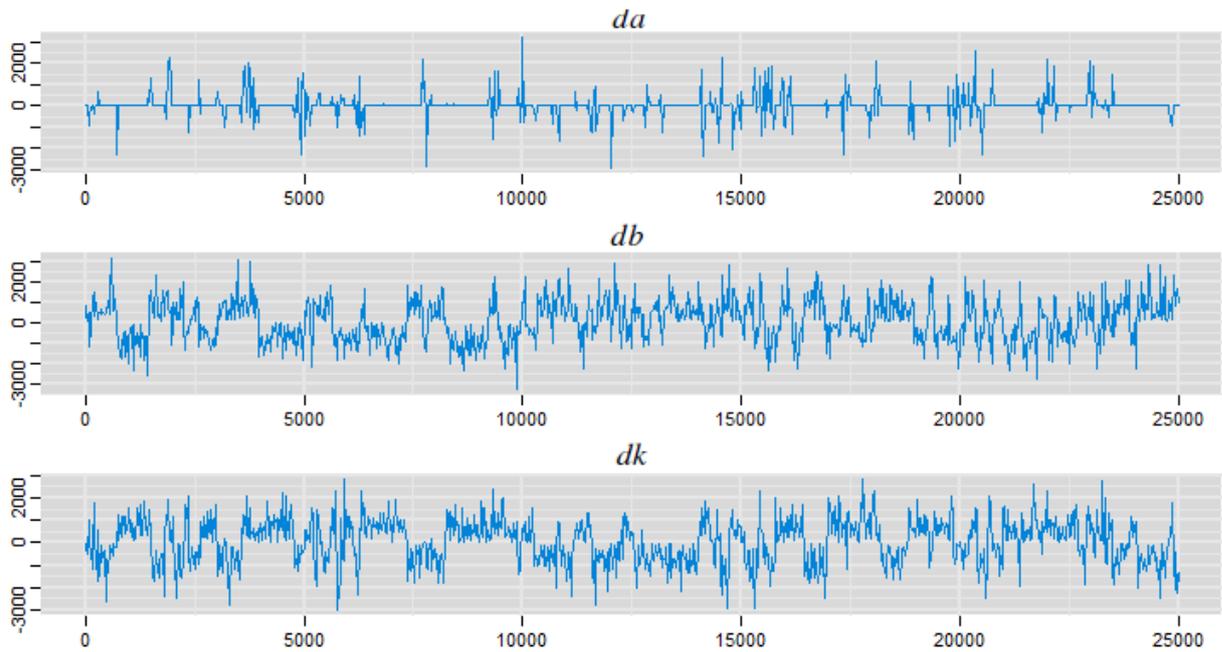


Figura 4.21 – Densidade a posteriori gerada pelo método MCMC para os parâmetros a , b , k , a_1 , b_1 , k_1 , da , db e dk do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto na densidade de semeadura 75 para os dados isotonzados

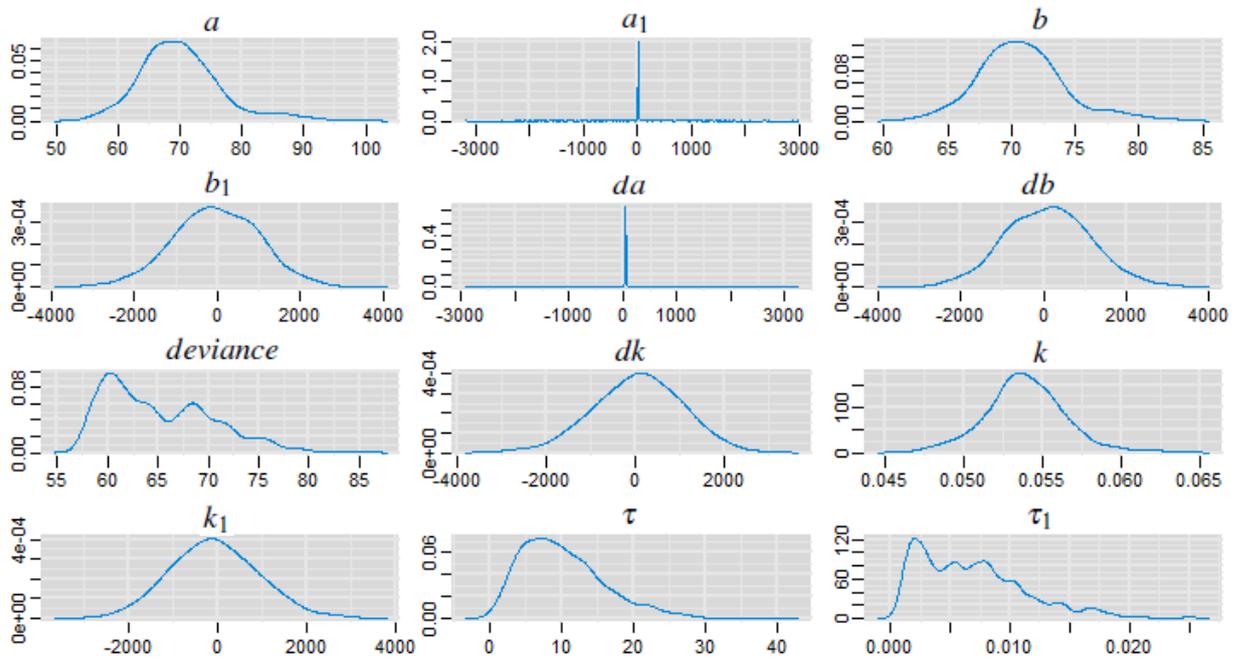


Figura 4.22 – Gráfico de pontos com intervalos confiáveis para os parâmetros a , b , k , a_1 , b_1 , k_1 , da , db e dk do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto na densidade de semeadura 75 para os dados isotonzados.

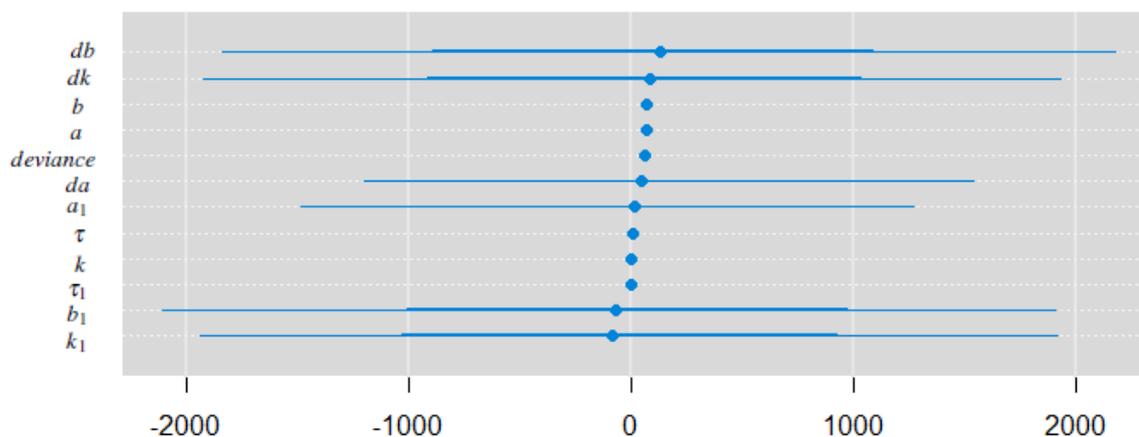


Tabela 4.9 – Estimativas para os parâmetros do modelo Logístico aos dados isotonzados do acúmulo de nitrogênio do feijoeiro cv. Jalo para o sistema de plantio convencional e direto na densidade de semeadura 215, desvio padrão (DP), Erro de Monte Carlo (MCE) e intervalo de credibilidade (HPD) com 95% de probabilidade.

Plantio	Densidade	Parâmetros	Média	DP	MCErro	HPD	
						LI	LS
PC	215	a	787,597	479,200	15,150	89,774	1898,543
		b	148,436	27,540	0,871	73,291	187,199
		k	0,0347	0,000	0,000	0,029	0,046
		τ	0,428	0,2285	0,007	0,096	0,991
PD	215	a_1	56,044	3,170	0,100	51,208	61,541
		b_1	26,210	2,180	0,007	22,576	30,335
		k_1	0,0103	0,002	0,000	0,071	0,143
		τ_1	0,194	0,111	0,000	0,037	0,460
	215	da	731,553	479,300	15,160	36,713	1841,267
		db	122,226	27,770	0,0878	48,434	161,390
		dk	-0,068	0,002	0,000	-0,108	-0,03556

De acordo com os resultados apresentados na tabela 4.9 percebe-se que para o ajuste do modelo logístico no PD houve uma eficiência melhor de ajuste devido aos menores valores do desvio padrão e MCE e, apresentando menores amplitudes para o intervalo HPD. É possível verificar que, em média, o parâmetro a , ou seja, o peso de massa seca ou acúmulo máximo esperado na maturação ao final do ciclo vegetativo apresentou diferença significativa entre os dois plantios comparados. O mesmo não foi verificado para o parâmetro k , taxa de crescimento ou índice de maturidade fisiológica, sendo visto como um indicador da velocidade com que

a planta se aproxima de seu tamanho adulto, pois se observou que o intervalo de credibilidade contém apenas valores negativos, o que permite afirmar que o PD apresentou maior precocidade que o PC concordando com os resultados de Martins filho et al. (2008).

Figura 4.23 – Traço da cadeia gerada pelo método MCMC para os parâmetros a , b , k , a_1 , b_1 e k_1 do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto, respectivamente, na densidade de semeadura 215 para os dados isotinizados.

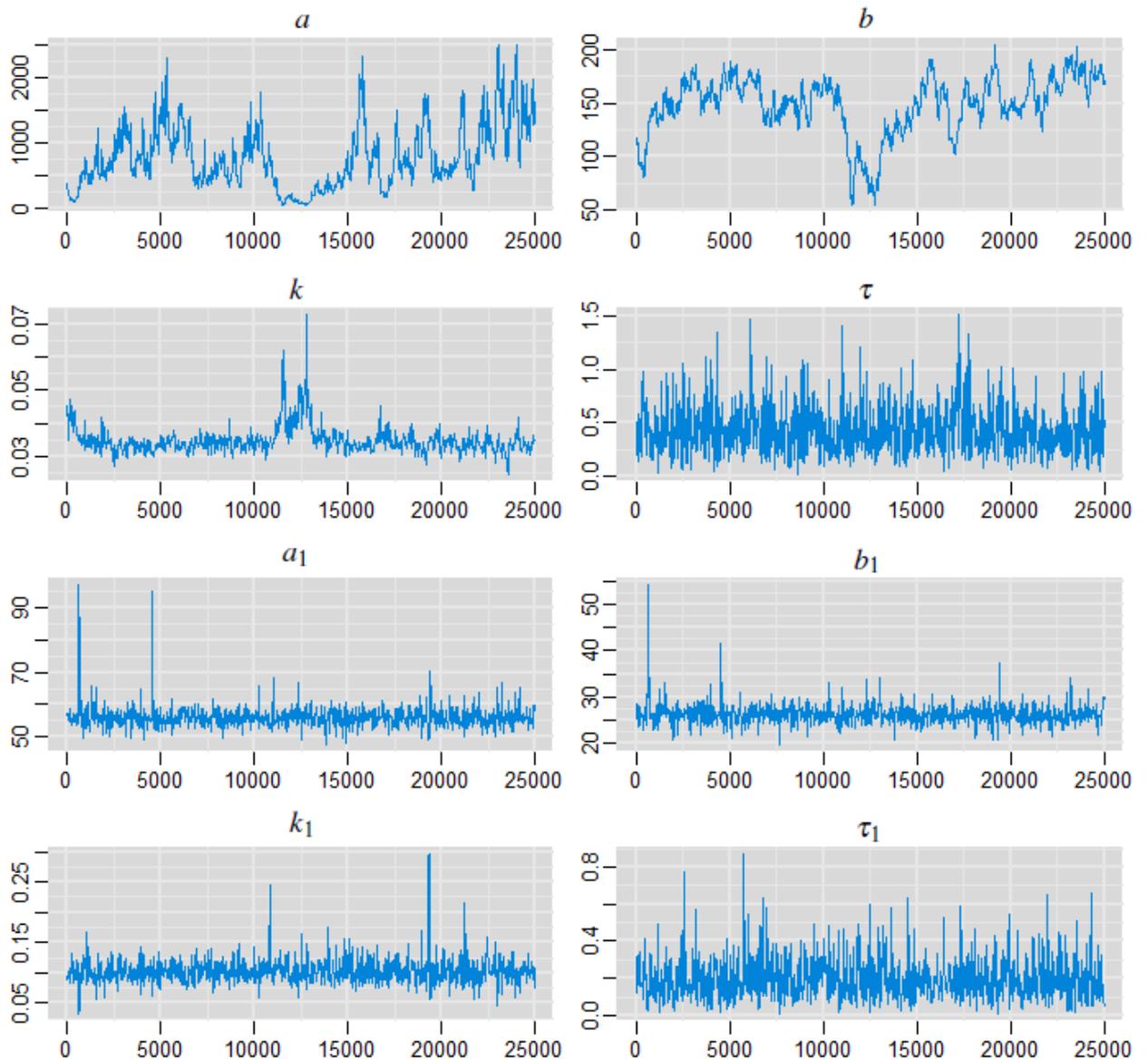


Figura 4.24 – Traço da cadeia gerada pelo método MCMC para os parâmetros da , db e dk do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto, respectivamente, na densidade de semeadura 215 para os dados isotonzados.

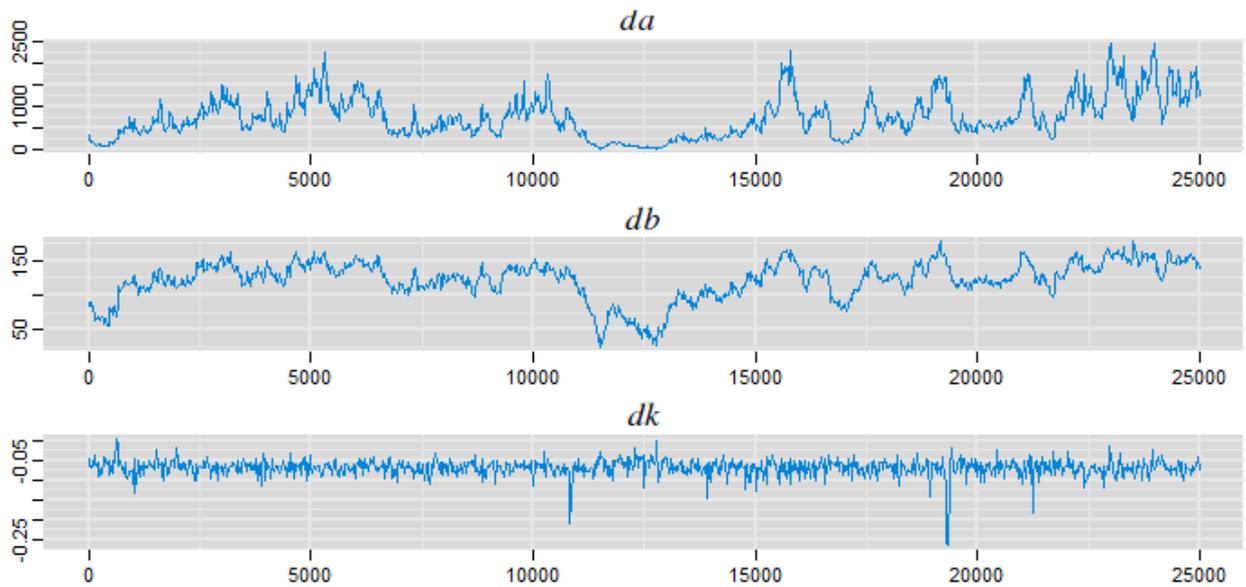


Figura 4.25 – Densidade a posteriori gerada pelo método MCMC para os parâmetros a , b , k , a_1 , b_1 , k_1 , da , db e dk do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto na densidade de semeadura 215 para os dados isotonzados

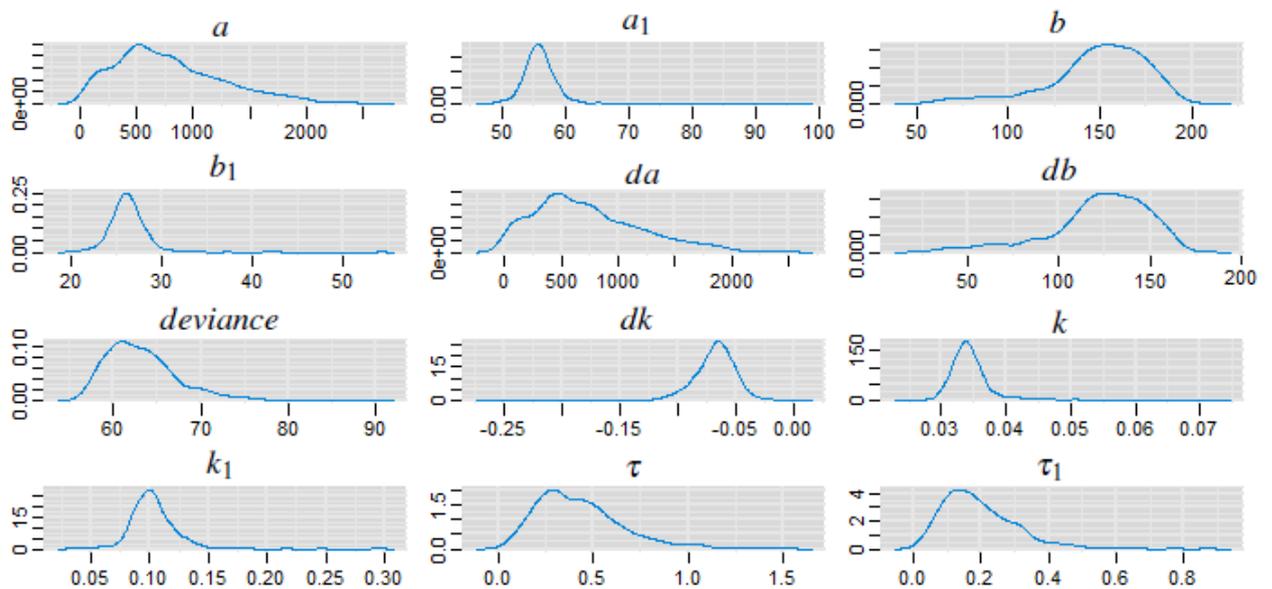


Figura 4.26 – Gráfico de pontos com intervalos confiáveis para os parâmetros a , b , k , a_1 , b_1 , k_1 , da , db e dk do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto na densidade de semeadura 215 para os dados isotonzados.

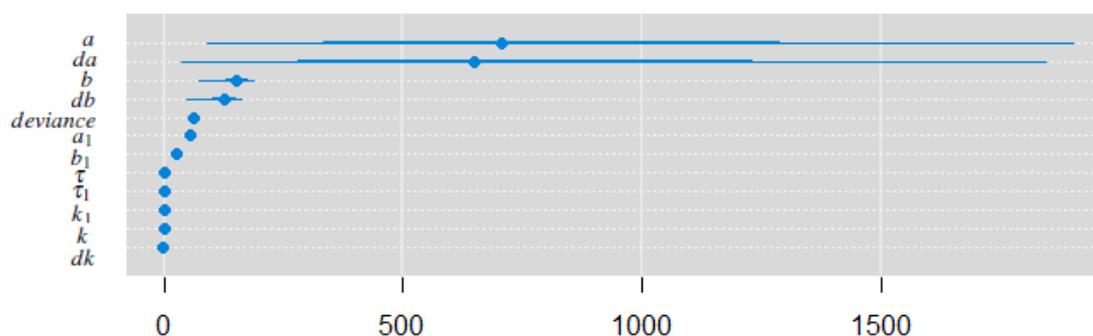


Tabela 4.10 – Estimativas para os parâmetros do modelo Logístico aos dados isotonzados do acúmulo de nitrogênio do feijoeiro cv. Jalo para o sistema de plantio convencional e direto na densidade de semeadura 355, desvio padrão (DP), Erro de Monte Carlo (MCE) e intervalo de credibilidade (HPD) com 95% de probabilidade.

Plantio	Densidade	Parâmetros	Média	DP	MCE	HPD	
						LI	LS
PC	355	a	76,673	7,604	0,240	66,109	96,877
		b	47,796	4,120	0,130	41,781	58,661
		k	0,060	0,007	0,000	0,045	0,074
		τ	0,388	0,233	0,007	0,085	0,966
PD	355	a_1	75,946	7,324	0,232	62,854	88,898
		b_1	26,811	3,882	0,123	20,228	32,241
		k_1	0,356	0,851	0,027	0,074	3,518
		τ_1	0,027	0,019	0,000	0,003	0,072
		da	0,727	10,726	0,339	-15,145	23,036
		db	20,986	5,852	0,185	12,111	34,179
		dk	-0,296	0,851	0,027	-3,459	-0,012

Sobre os resultados apresentados na Tabela 4.10 percebe-se que para o ajuste do modelo logístico no PC houve uma eficiência melhor de ajuste devido aos menores valores do desvio padrão e MCE e, apresentando menores amplitudes para o intervalo HPD. É possível verificar que, em média, o parâmetro a , ou seja, o peso de massa seca ou acúmulo máximo esperado na maturação ao final do ciclo vegetativo não apresentou diferença significativa entre os dois plantios comparados, ou seja, mediante avaliação do intervalo de credibilidade para as diferenças, pois, se este vier a conter o valor zero, conclui-se que, em média, os parâmetros das populações envolvidas no contraste são iguais. O mesmo não foi verificado para o parâmetro k , taxa de

crescimento ou índice de maturidade fisiológica, sendo visto como um indicador da velocidade com que a planta se aproxima de seu tamanho adulto, pois se observou que o intervalo de credibilidade contém apenas valores negativos, o que permite afirmar que o PD apresentou maior precocidade que o PC.

Figura 4.27 – Traço da cadeia gerada pelo método MCMC para os parâmetros a , b , k , a_1 , b_1 e k_1 do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto, respectivamente, na densidade de semeadura 355 para os dados isotonzados.

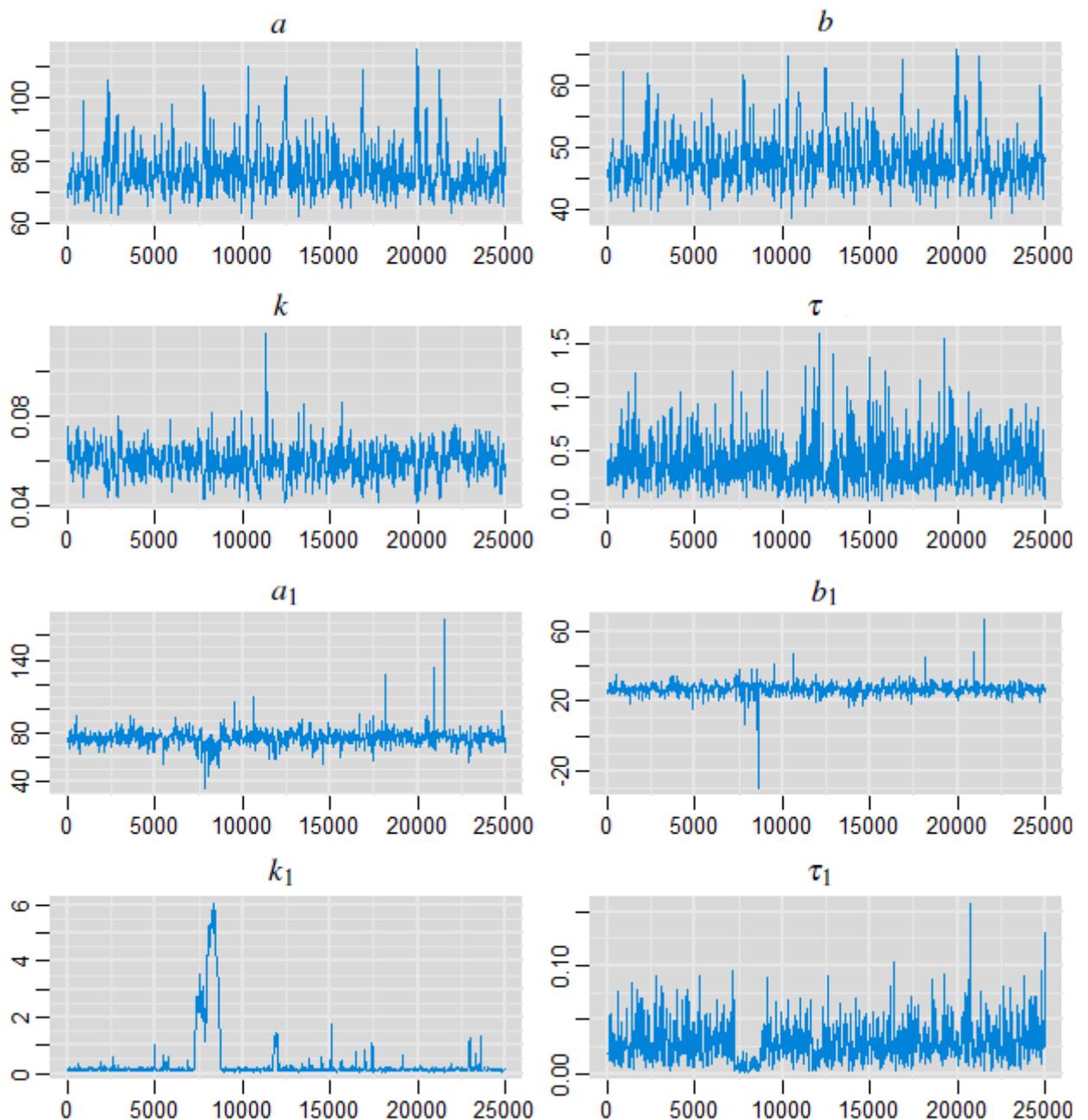


Figura 4.28 – Traço da cadeia gerada pelo método MCMC para os parâmetros da , db e dk do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto, respectivamente, na densidade de semeadura 355 para os dados isotonzados.

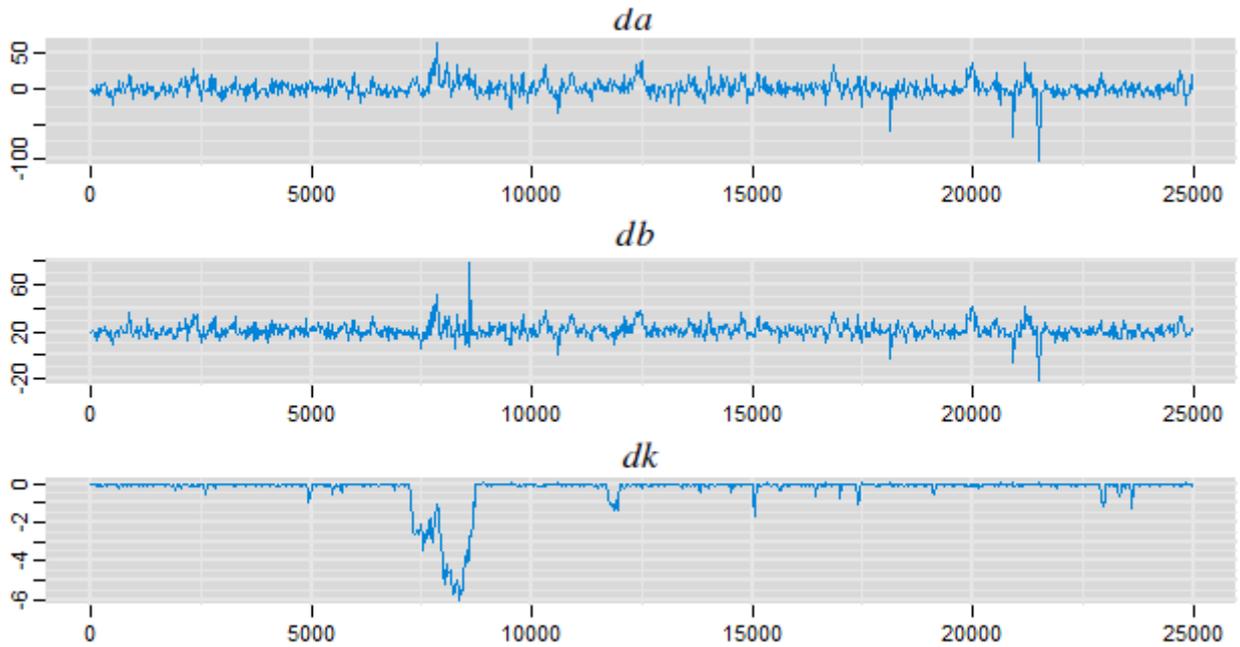


Figura 4.29 – Densidade a posteriori gerada pelo método MCMC para os parâmetros a , b , k , a_1 , b_1 , k_1 , da , db e dk do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto na densidade de semeadura 355 para os dados isotonzados

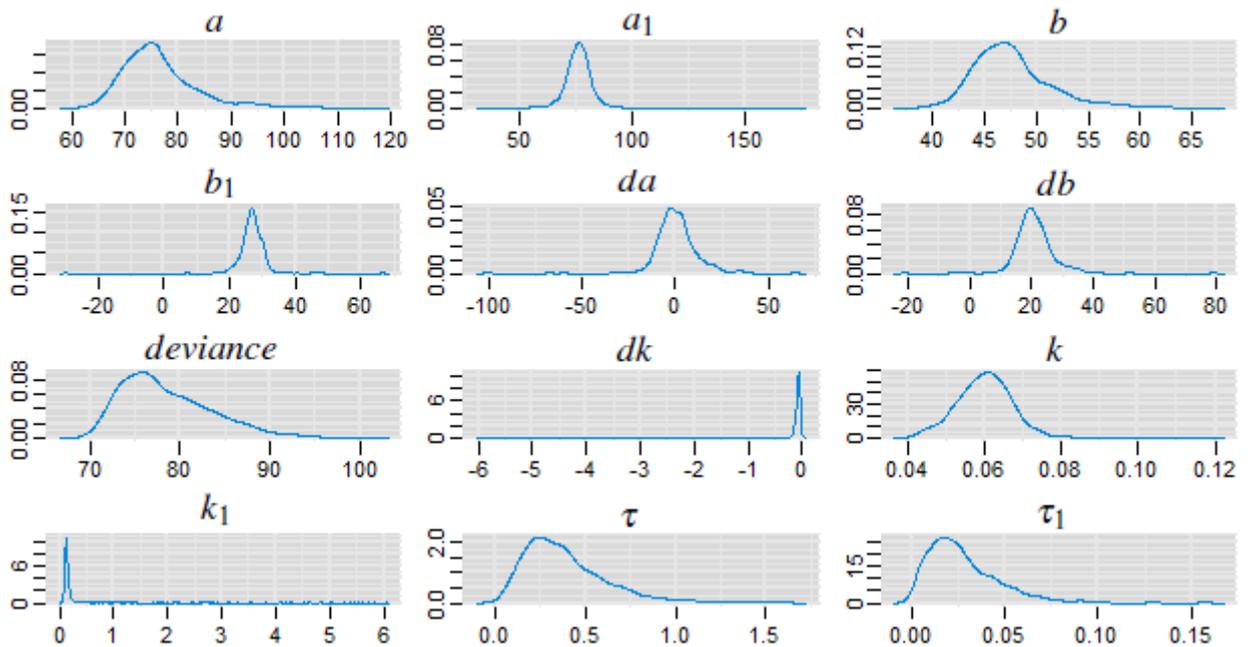
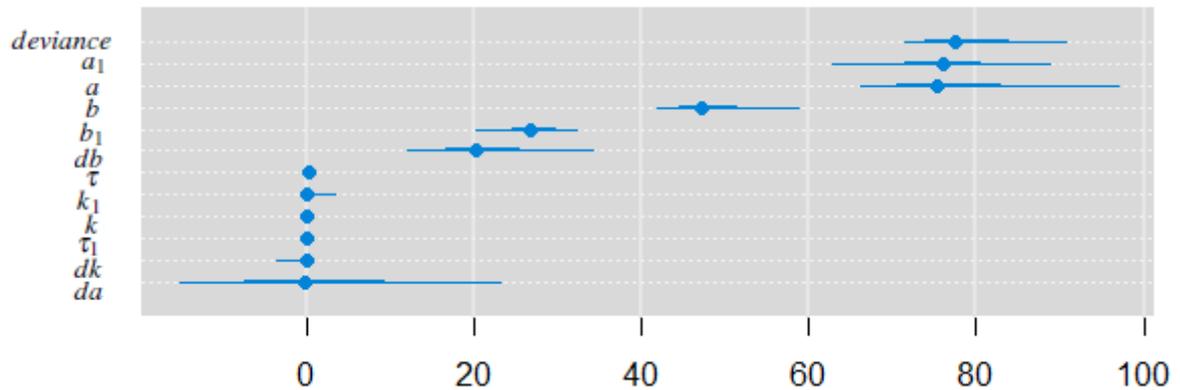


Figura 4.30 – Gráfico de pontos com intervalos confiáveis para os parâmetros a , b , k , a_1 , b_1 , k_1 , da , db e dk do modelo logístico, referente ao plantio convencional e direto na densidade de semeadura 355 para os dados isotonzados.



Para os dados isotonzados, o método bayesiano implementado mostrou-se eficiente aos dados isotonzados na estimação dos parâmetros das densidades de semeadura 75, 215 e 355 kg ha⁻¹. O procedimento de correção dos dados de nitrogênio no feijoeiro cv. Jalo via regressão isotônica mostrou-se eficiente no uso do modelo logístico pois houve uma redução do desvio padrão das estimativas para a maioria dos parâmetros implicando uma diminuição da amplitude dos intervalos de confiança. Este resultado está de acordo com Gonçalves et al. (2012) no qual os modelos platô de resposta polinomial quadrático, não linear exponencial e logarítmico para os dados de deposição de zinco (Zn) na tíbia de aves machos da linhagem Hubbard a isotonzação dos dados propiciou uma melhora em todos os avaliadores de qualidade de ajuste considerados no trabalho.

Tabela 4.11 – Estimativa do fator de dependência (FD) do critério de Raftery & Lewis e coeficiente de convergência (R) de Gelman & Rubin (R) utilizados na detecção da convergência das cadeias amostradas para os dados isotonzados de nitrogênio do feijoeiro cv. Jalo, para o PC e PD nas densidade de semeadura 75, 215 e 355 mil plantas ha^{-1} .

Densidade	Plantio	Parâmetros	FD	R
75	PC	<i>a</i>	1,310	1,13
		<i>b</i>	1,455	1,10
		<i>k</i>	11,730	1,06
		τ	3,006	1,00
	PD	<i>a</i> ₁	1,124	1,04
		<i>b</i> ₁	1,102	1,03
		<i>k</i> ₁	6,934	1,14
		τ ₁	2,269	1,00
		<i>da</i>	5,852	1,09
		<i>db</i>	2,321	1,10
		<i>dk</i>	5,871	1,00
215	PC	<i>a</i>	4,265	1,21
		<i>b</i>	4,333	1,20
		<i>k</i>	2,305	1,22
		τ	3,887	1,01
	PD	<i>a</i> ₁	2,111	1,07
		<i>b</i> ₁	1,134	1,09
		<i>k</i> ₁	4,989	1,02
		τ ₁	2,269	1,00
		<i>da</i>	3,760	1,25
		<i>db</i>	4,203	1,21
		<i>dk</i>	4,510	1,01
355	PC	<i>a</i>	4,873	1,00
		<i>b</i>	3,722	1,00
		<i>k</i>	5,799	1,00
		τ	1,103	1,00
	PD	<i>a</i> ₁	2,417	1,02
		<i>b</i> ₁	6,210	1,02
		<i>k</i> ₁	2,527	1,30
		τ ₁	3,422	1,01
		<i>da</i>	4,100	1,00
		<i>db</i>	5,001	1,01
		<i>dk</i>	4,989	1,00

A partir da Tabela 4.11, observe que o algoritmo Metropolis-Hastings indicou a possibilidade de convergência em relação a maioria dos parâmetros, em ambas as populações, o que, segundo Gelman & Rubin (1992), os valores obtidos mediante ao coeficiente de convergência (R) estão muito próximos ao valor unitário. Outro indicativo de convergência se deu pelo teste

de Raftery & Lewis (1992), o qual apresentou fator de dependência (FD) maior que 5, dessa vez, não concordando com Delfino et al. (2011), para a densidade de semeadura 75, 215 e 355 mil plantas ha^{-1} , alguns parâmetros obtiveram FD menor que 5, portanto são garantias suficientes para afirmar a convergência das cadeias. Porém, para o parâmetro dk nas densidades 75 e 355 pode-se afirmar que não houve indicativo de convergência devido ao FD ser superior a 5.

Tabela 4.12 – Critério de informação de Akaike (AIC), critério de informação bayesiano (BIC) e critério de informação do desvio (DIC) para os dados originais e isotonzados de nitrogênio do feijoeiro cv. Jalo, para o sistema de PC e PD das densidades de semeadura 75, 215 e 355 $kg.ha^{-1}$

Dados	Plantio	Densidade	Critério de Informação		
			AIC	BIC	DIC
Originais	PC	75	13,633	13,471	13,0
		215	38,653	38,491	35,8
		355	38,91	38,747	37,8
	PD	75	37,953	37,791	37,4
		215	45,249	45,087	45,3
		355	54,542	54,380	56,7
Isotonizados	PC	75	12,524	12,361	12,2
		215	38,100	37,948	32,1
		355	35,455	35,455	34,4
	PD	75	37,943	37,781	38,6
		215	40,376	40,214	39,4
		355	54,918	54,756	60,5

Com a finalidade de comparar a influência do tipo de plantio a partir dos dados tradicionais do nitrogênio feijoeiro cv. Jalo e sob o enfoque bayesiano para o modelo logístico, indicaram que o plantio convencional nas densidades de semeadura 75, 215 e 355 $kg ha^{-1}$ são melhores, devido aos menores valores das estatísticas do DIC, AIC e BIC, que o plantio direto referente aos dados tradicionais da mesma cultivar e densidades.

Para os dados isotonzados do nitrogênio feijoeiro cv. Jalo, as estatísticas do DIC, AIC e BIC para o modelo logístico indicaram que o plantio convencional nas densidades de semeadura 75, 215 e 355 $kg ha^{-1}$ são melhores que o plantio direto referente aos dados tradicionais da mesma cultivar e densidades. Macedo et al. (2014) utilizou os modelos logístico, Gompertz e Von Bertalanffy para avaliar a influência do gene halotano sobre a curva de crescimento de suínos e constatou que o modelo logístico foi o que melhor se ajustou aos dados e através DIC no qual, este mesmo modelo apresentou menor critério em relação aos grupos estudados,

portanto o mais adequado para descrever as curvas de crescimento dos animais. Firat et al. (2015) utilizou o critério de informação do desvio (DIC) com base nas medidas bayesiana para comparar os modelos de Gompertz, Richards e logístico, aplicados aos dados médios de pesos semanais de codornas japonesas; os resultados indicaram que os modelos de Gompertz e Richards apresentaram melhores qualidades de ajuste do que o modelo logístico.

5 CONCLUSÃO

O uso da regressão isotônica foi eficiente para redução da precisão experimental.

O modelo não linear logístico apresenta melhor qualidade de ajuste para a descrição do acúmulo de nitrogênio do que o modelo de Gompertz.

Ocorreu aumento do acúmulo de nitrogênio na parte aérea do feijoeiro, cv. Jalo, ao longo do ciclo da cultura.

O plantio direto apresenta maior acúmulo de nitrogênio do que o plantio convencional.

A metodologia de inferência bayesiana foi eficiente ao utilizar a isotonização dos dados, pois houve uma redução do desvio padrão das estimativas para a maioria dos parâmetros, implicando em uma diminuição da amplitude dos intervalos de confiança.

REFERÊNCIAS

- AKAIKE, H. A new look at the statistical model identification. **IEEE Transactions on Automatic Control**, Boston, v. 19, n. 6, p. 716-723, 1974.
- ALBUQUERQUE, A. **Acúmulo de matéria seca e macronutrientes em diferentes órgãos de cultivares de feijoeiro em função de populações de plantas e ambientes de cultivo**. Tese (doutorado) - Universidade Federal de Lavras, p. 278, 2012.
- ALVES, A. F. et al. Densidades populacionais para cultivares alternativas de feijoeiro no norte de minas gerais. **Ciência e Agrotecnologia**, v. 33, n. 06, p. 1495–1502, 2009.
- BARLOW, R.E. et al. **Statistical inference under order restrictions: the theory and application of isotonic regression**. New York: John Wiley & Sons, p. 388, 1972.
- BARBOSA, A. F.; GONZAGA, A. C. de O. Informações técnicas para o cultivo do feijoeiro-comum na região central-brasileira: 2012-2014. Santo Antônio de Goiás: **Embrapa Arroz e Feijão**, p. 247, 2012.
- BASSANEZI, R. C. **Ensino-aprendizagem com modelagem matemática: uma nova estratégia**. São Paulo: Contexto, p. 389, 2002.
- BATES, D. M.; WATTS, D. G. **Nonlinear regression analysis and its applications**. New York: J. Wiley, p. 365, 1988.
- BENINCASA, M. M. P. **Análise de crescimento de plantas noções básicas**. 2. ed. Jaboticabal: FUNEP, p. 41, 2003.
- BOYCE, W. E.; PRIMA, R. C. de. **Equações diferenciais elementares e problemas de valores de contorno**. 5. ed. Rio de Janeiro: LTC, 1994. 606 p.
- BRASIL. Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento. Feijão. Disponível em: <<http://www.agricultura.gov.br/vegetal/culturas/feijao/saiba-mais>>. Acesso em: 29 jul. 2013.
- BRITO, M. C. M. et al. Estimaco do tamanho ótimo de parcela via regresso antitnica. **Revista Brasileira de Biometria**, v.30, n.3, p. 353-366, 2012.
- CAMPOS, A. M. **Uma abordagem bayesiana para alguns modelos de crescimento na presena de assimetria e heteroscedasticidade**. So Carlos, p.63, 2011.
- CARVALHO, J. J. et al. Teor e acmulo de nutrientes em gros de feijo comum em semeadura direta sob dficit hdrico. **Irriga**, Edio Especial Inovagri, p. 104-117, 2014.
- CASELLA, G.; BERGER, R. L. Inferncia estatstica-traduco da 2ª edio norteamericana. **Centage Learning**, 2011.
- CIANCIO, N. H. R. **Produo de gros, matria seca e acmulo de nutrientes em culturas submetidas  adubao orgnica e mineral**. 2006. 134 f. Dissertao (Mestrado em Cincia do Solo) - Universidade Federal de Santa Catarina, Santa Maria, 2010.
- CHIB, S.; GREENBERG, E. Understanding the metropolis-hasting algoritthm. **The American Statistician**, Salt Lake, v. 49, n. 4, p. 327-345, Nov. 1995.

- CONAB. Companhia Nacional de Abastecimento. 2017. <<http://www.agricultura.gov.br/vegetal/culturas/feijao/saiba-mais>>. Acessado: 10-10-2018.
- CONAB. Companhia Nacional de Abastecimento. 2018. <<http://www.agricultura.gov.br/vegetal/culturas/feijao/saiba-mais>>. Acessado: 11-10-2018.
- DANTAS, A. A. A.; CARVALHO, L. G. de; FERREIRA, E. Classificação e tendências climáticas em Lavras, MG. **Ciência e Agrotecnologia**, Lavras, v. 31, n. 6, p. 1862-1866, nov./dez. 2007.
- DANTAS, J. P.; BERGAMIM FILHO, H.; MALAVOLTA, E. Estudos sobre nutrição mineral do feijão macassar (*Vigna sinenses* (L.) ENDL.) II exigência de macro e micronutrientes. **Anais da Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz"**, Piracicaba, v. 26, p. 425-433, 1979.
- DE FRANCO, A. P. F. **Aplicação de benziladenina em cultivares arbustivas de feijão-vagem**. Dissertação (Mestrado) – Universidade Estadual de Goiás, Câmpus Ipameri, 2016.
- DELFINO, A. C. dos S. et al. Análise bayesiana de toxidez e interferência em ensaios de diluição seriada. **Revista Brasileira de Biometria**, São Paulo, v.29, n.2, p.325-341, 2011.
- DOMINGUES, J. S. Análise do modelo de Gompertz no crescimento de tumores sólidos e inserção de um fator de tratamento. **Biomatemática**, Campinas, v. 21, p. 103-112, 2011.
- DRAPER, N. R.; SMITH, H. **Applied regression analysis**. 3. ed. New York: John Wiley, 1998. 706 p.
- EMILIANO, P. A. et al. Critérios de Informação de Akaike Versus Bayesiano: Análise Comparativa. **Simpósio Nacional de Probabilidade e Estatística - 19º SINAPE**. São Pedro-SP, 2010.
- FAGERIA, N. K. Nutrient management for sustainable dry bean production in the tropics. **Communications in Soil Science and Plant Analysis**, New York, v. 33, p. 1537-1575, 2002.
- FIRAT, M. Z. et al. Bayesian analysis for the comparison of nonlinear regression model parameters: an application to the growth of Japanese quails. **Revista Brasileira de Ciência Avícola**, v. 18 ,p. 19–26, 2016.
- FERNANDES, T. J. et al. Parameterization effects in nonlinear models to describe growth curves. **Acta Scientiarum**. Technology, v.37, n.4, p.397-402, 2015.
- FERNANDES, T. J. et al., Seleção de modelos não lineares para a descrição das curvas de crescimento do fruto do cafeeiro. **Coffee Science**, Lavras, v.9, n.2, 207-215, 2014.
- FERREIRA, D. F. Sisvar: a Guide for its Bootstrap procedures in multiple comparisons. **Ciênc. agrotec.** [online]. 2014, vol.38, n.2 [citado 2015-10-17], pp. 109-112 .
- FERREIRA, D. F. Sisvar: a computer statistical analysis system. **Ciência e Agrotecnologia** (UFLA), v. 35, n.6, p. 1039-1042, 2011.
- FERREIRA, D. F. SISVAR: um programa para análises e ensino de estatística. **Revista Symposium** (Lavras), v. 6, p. 36-41, 2008.

- FERREIRA, D.F. Análises estatísticas por meio do Sisvar para Windows versão 4.0. In...**45a Reunião Anual da Região Brasileira da Sociedade internacional de Biometria**. UFSCar, São Carlos, SP, Julho de 2000. p.255-258.
- FONSECA, F., MUNIZ, J. A., DE AQUINO, L. H., SÁFADI, T. Abordagem Bayesiana da curva de lactação de cabras Saanen de primeira e segunda ordem de parto. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, v. 40, n.1, 27-33, 2005.
- GALLANT, A. R. **Nonlinear statistical e model**. New York: John Wiley, 1987. 624 p.
- GAMERMAN, D., LOPES, H. F. Markov chain Monte Carlo: Stochastic Simulation for Bayesian Inference (2nd ed.). **Chapman and Hall/CRC**, 2006.
- GELMAN, A. et al. **Bayesian data analysis**. London: Chapman Hall, 1997. 526p.
- GELMAN, A.; RUBIN, D. B. Inference from iterative simulation using multiple sequences. **Statistical Science**, Hayward, v. 7, n. 4, p. 457-511, May 1992.
- GEWEKE, J. **Evaluating the accuracy of sampling-based approaches to calculating posterior moments**. New York: Oxford University, p. 631, 1992.
- GONÇALVES, R. P. et al. Ajuste de modelos de platô de resposta via regressão isotônica. **Ciência Rural**, Santa Maria, v.42, n.2, p.354-359, 2012.
- HEIDELBERG, P.; WELCH, P. Simulation run length control in the presence of an initial transient. **Operations Research**, Baltimore, v. 31, n. 6, p. 1109-1114, Nov./Dec. 1983.
- LEAL, R. M., M Prado, R. D. Desordens nutricionais no feijoeiro por deficiência de macronutrientes, boro e zinco. **Revista Brasileira de Ciências Agrárias**, v.3, n.4,p. 301-306, 2008.
- LEITE, R. S. **Uma introdução a regressão isotônica em modelos não lineares na dinâmica do potássio em solos não saturados**. Trabalho de conclusão de curso (Graduação em Estatística) - Universidade Estadual da Paraíba, Centro de Ciências e Tecnologia, p. 37, 2015.
- LIPSCHUTZ, S. **Teoria dos conjuntos**. São Paulo: Makron Books do Brasil, p. 336, 1972.
- LUCCHESI, A. A. Utilização prática da análise de crescimento vegetal. **Anais da Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz"**, Piracicaba, v. 41, p. 181-202, 1984.
- MACEDO, Leandro Roberto de et al. Modelagem hierárquica Bayesiana na avaliação de curvas de crescimento de suínos genotipados para o gene halotano. **Ciência Rural**, vol.44, n.10, p.1853-1859, 2014.
- MARTINS FILHO, S. et al. Abordagem bayesiana das curvas de crescimento de duas cultivares de feijoeiro. **Ciência Rural**, Santa Maria, v. 38, n. 6, p. 1516-1521, nov./dez. 2008.
- MAZUCHELI, J.; ACHCAR, J. Algumas considerações em regressão não linear. **Acta Scientiarum**, Maringá, v. 24, n. 6, p. 1761-1770, 2002.
- MENDES, P. N. **Ajuste dos Modelos de Gompertz e Logístico na descrição das curvas de crescimento de tomates: uma abordagem Bayesiana**. Tese (doutorado) - Universidade Federal de Lavras, p. 82, 2011.

MOURA, M. S. B. de et al. Modelos de crescimento para o feijão-caupi e o milho, sob sistemas de plantio exclusivo e consorciado, no Semiárido brasileiro. **Embrapa Semiárido-Artigo em periódico indexado (ALICE)**, 2008.

NOGUEIRA, D.A. et al. 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.

NUTRI-FATOS. Informação agrônômica sobre nutrientes para as culturas. Piracicaba: **Potafos**, p. 12, 1996. (Arquivo do Agrônomo, 10).

OLIVEIRA, E. C. et al. Viabilidade técnica e econômica da produção de ervilha (*Pisum sativum* L.) cultivada sob diferentes lâminas de irrigação. **Engenharia Agrícola**, Jaboticabal, v. 31, n. 2, p. 324-333, mar./abr., 2011.

PAULINO, C. D., TURKMAN, M. A. A., MURTEIRA, B. **Estatística bayesiana**. Lisboa, Fundação Calouste Gulbenkian, 2003.

PEREIRA, A. A; MORAIS, A. R.; SCALCO, M. S.; FERNANDES, T.J. Descrição do crescimento vegetativo do cafeeiro cultivar Rubi MG 1192 utilizando modelos de regressão. **Coffee Science**, Lavras, v. 9, n.2, p. 266-274, 2014.

PESSOA, A. C. S. et al. Concentração e acumulação de nitrogênio, fósforo e potássio pelo feijoeiro cultivado sob diferentes níveis de irrigação. **Ciência Rural**, Santa Maria, v. 26, n. 1, p. 69-74, 1996.

PINHEIRO, P. F. et al. Phytotoxicity and cytotoxicity of essential oil from leaves of *Plectranthus amboinicus*, carvacrol, and thymol in plant bioassays. **Journal of agricultural and food chemistry**, v. 63, n. 41, p. 8981-8990, 2015.

PRADO, T. K. L. do, VILLELA, T. S., MUNIZ, J. A. Ajuste dos modelos Gompertz e Logístico aos dados de crescimento de frutos de coqueiro anão verde. **Ciência Rural**, v. 43, n.5, 2013.

R CORE TEAM. **R: a language and environment for statistical computing**. Vienna: R Foundation for Statistical Computing, 2018.

RAFTERY, A. L.; LEWIS, S. How many iterations in the Gibbs sampler? In: BERNARDO, J. M. et al. (Ed.). **Bayesian statistics**. Oxford: Oxford University, p. 763-774, 1992.

RAMALHO, M. A. P.; ABREU, A. F. B. Cultivares. In: VIEIRA, C.; PAULA JÚNIOR, T. J.; BORÉM, A. Feijão. 2. ed. Viçosa, MG: UFV, 2006. p. 415-436

RAMOS JUNIOR, E. U. **Níveis de fósforo e épocas de semeadura na extração de nutrientes do cultivar de feijão carioca precoce**. 2006. xvi, 134 f. Tese (doutorado) - Universidade Estadual Paulista, Faculdade de Ciências Agrônômicas de Botucatu, 2006.

RENCHER, A. C.; SHAALJE, G. B. **Linear models in statistics**. 2nd ed. New Jersey: John Wiley, 2008. 672 p.

RESENDE, O. et al. Forma, tamanho e contração volumétrica do feijão (*Phaseolus vulgaris* L.) durante a secagem. **Revista Brasileira de Produtos Agroindustriais**, Campina Grande, v. 7, n. 1, p. 15-24, 2005.

- RIBEIRO, N. D. et al. Precisão experimental na avaliação de cultivares de feijão de diferentes hábitos de crescimento. **Ciência Rural**, Santa Maria, v. 34, n.5, p. 1371-1377, set./out. 2004.
- RODRIGUES, Adriano et al. Regressão isotônica para estudos de curvas de crescimento de bovinos Guzerá. **Revista Ceres**, Viçosa, v. 65, n.1, p. 024-027, jan/fev, 2018
- RODRIGUES, A. et al. Utilização da regressão isotônica em estudos de curvas de crescimento. **Revista Brasileira de Biometria**, São Paulo, v.28, n.4, p.85-101, 2010.
- ROSOLEM, C. A.; BOARETTO, A. E.; NAKAGAWA, J. Adubação foliar do feijoeiro: VIII., fontes e doses de cálcio. **Científica**, São Paulo, v. 18, p. 81-86, 1990.
- ROSOLEM, C. A.; MARUBAYASHI, O. M. Seja o doutor do seu feijoeiro. **Informação Agrônômica**, Piracicaba, n. 68, p. 1-16, 1994. Encarte.
- SEBER, G.A.F.; WILD, C. J. **Nonlinear regression**. New York: John Wiley and Sons, 1989.
- SCHWARZ, G. E. "Estimating the dimension of a model". **Annals of Statistics** 6 (2): 461-464, 1978.
- SILVA, A. J. da et al. Resposta do feijão-caupi à doses e formas de aplicação de fósforo em Latossolo Amarelo do Estado de Roraima. **Acta Amazônica**, Manaus, v. 40, n. 1, p. 31-36, 2010.
- SILVA, F.F. et al. Abordagem bayesiana da curva de lactação de cabras Saanen de primeira e segunda ordem de parto. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, Brasília, v.40, n.1. p.27-33, 2005.
- SILVA, N.A.M. et al. Aplicação do método bayesiano na estimação de curva de Crescimento em animais da raça Nelore. **Ceres**, v.54, n.312, p.191-198, 2007.
- SILVA, T. R. B. da et al. Aplicação foliar de boro e cálcio no feijoeiro. **Científica**, Jaboticabal, v. 34, n. 1, p. 46-52, 2006.
- SILVA, F. F. et al. Comparação Bayesiana de modelos de previsão para diferenças nas progênes no melhoramento genético do gado Nelore. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, Brasília, v. 43, n.1, p. 37-45, jan. 2008.
- SPIEGELHALTER, D.; BEST, N.; CARLIN, B.; VAN DER LINDE, A. Bayesian measures of model complexity and fit (with discussion). **Journal of the Royal Statistical Society, Series B**, 64:583-640, 2002.
- SORATO, A. M. da C. **Ajuste de modelo logístico ao acúmulo de massa seca de cultivares de feijoeiro via regressão isotônica**. Tese (doutorado) - Universidade Federal de Lavras, p. 85, 2017.
- TEMÓTEO, A. da S. et al. Crescimento e acúmulo de nitrogênio e potássio pelo melão pele de sapo fertirrigado. **Irriga**, Botucatu, v. 15, n. 3, p. 275-281, jul./set. 2010.
- TERRA, M. F.; MUNIZ, J. A.; SAVIAN, T. V. Ajuste dos modelos Logístico e Gompertz aos dados de crescimento de frutos da tamareira-anã (*Phoenix roebelenii* O'BRIEN). **Magistra**, Cruz das Almas, v. 22, n. 1, p. 1-7, 2010.

VIEIRA, N. M. B. et al. Altura de planta e acúmulo de matéria seca do feijoeiro cvs. BRS MG Talismã e Ouro Negro em plantio direto e convencional. **Ciência e Agrotecnologia**, Lavras, v. 32, n. 6, p. 1687-1693, nov./dez. 2008.

ANEXOS

ROTINAS UTILIZADAS NO SOFTWARE R

```
#Rotina Regressao Isotonica
rm(list=ls())
#Nitrogenio
#Plantio Convencional
#Dados
dados <- read.table("C:\\Users\\Lais\\Desktop\\JaloISO\\
macro.txt", header=T)
attach(dados)
require(qpcR)
library(stats)
require(Iso)
require(dplyr)
require(tidyr)
require(tidyverse)

# Para a densidade 75
## Bloco 1
d75<-filter(dados,pop==75, blo==1,
sis=="pc")
y<-d75$Nitrogenio
x<- d75$dae
a=isoreg(x,y)
total=a$yf
total
total1<-total;total1
length(a$yf)

## Bloco 2
d75<-filter(dados,pop==75, blo==2,
sis=="pc")
y<-d75$Nitrogenio
x<- d75$dae
a=isoreg(x,y)
total=a$yf
total
total2<-total;total2
length(a$yf)
#plot(m <- isoreg(dae, f))

## Bloco 3
d75<-filter(dados,pop==75, blo==3,
sis=="pc")
y<-d75$Nitrogenio;y
```

```

x<- d75$dae
a=isoreg(x,y)
total=a$yf
total
total3<-total;total3
length(a$yf)

ns<-data.frame(total1,total2, total3)
write.csv2(ns,file="ns.csv")
media<-rowMeans(ns); media

##### Analise Bayesiana
#### Uma cadeia
#### Plantio Convencional
rm(list=ls())
require(R2jags)
require(AICcmodavg)
model.file <- system.file(package="R2jags",
"model", "dados.txt")
file.show(model.file)
#PC -> Trad
#75TradPC
y <- c(3.018667,4.720000,8.633000,12.386833,19.423500,
28.084000,36.849000)
x=c(13,23,33,43,53,63,73)
N=7

jags.data <- list (N= N, y = y, x = x)
jags.parameters <- c("a", "b", "k","tau")

##run model
mod1 <- jags(data = jags.data,
parameters = jags.parameters,
model.file = model.file,
n.chains = 2, n.iter = 50000)
print(mod1)
#Calculo do AIC e BIC
#Modelo logístico
#AIC <- -2*log(verss) + 2*p
n=7
t=c(13,23,33,43,53,63,73)
p=3
deviance <-7.633
AIC <- deviance + 2*3
AIC

BIC <- deviance + p*log(n)

```

BIC

```

bayes.mod.fit.mcmc <- as.mcmc(mod1)
summary(bayes.mod.fit.mcmc)
xyplot(bayes.mod.fit.mcmc, parms = c("a", "b", "k"))
densityplot(bayes.mod.fit.mcmc, aspect="fill")
autocorr.plot(bayes.mod.fit.mcmc)

#Testes de convergencia
geweke.diag(bayes.mod.fit.mcmc)
geweke.plot(bayes.mod.fit.mcmc)
raftery.diag(bayes.mod.fit.mcmc)
heidel.diag(bayes.mod.fit.mcmc)
effectiveSize(bayes.mod.fit.mcmc)
#gelman.diag(bayes.mod.fit.mcmc)

#Pacote para verificacao da convergencia da cadeia
#require(boa)
library(boa)
#Entrando no menu do pacote
boa.menu()
#Passos para inserir os dados
1 #- File
3 #- Import Data >>
5 #- Data Matrix Objects
dados \#Enter object name [none]
#Passos para a convergencia:
1
1 #back
3 #- Analysis
4 #- Convergence Diagnostics >>
6 #Raftery & Lewis
3 #-Brooks, Gelman, &Rubin

4 #-Geweke

5 #-Heidelberg & Welch

citation("boa")

#####
# Diferença das cadeias
rm(list=ls())
#75 Convencional Trad e Iso

```

```

require(R2jags)
require(AICcmodavg)
require(lattice)
require(coda)
set.seed(123)

3 #-Brooks, Gelman, &Rubin

4 #-Geweke

5 #-Heidelberg & Welch

citation("boa")

#####
# Diferena das cadeias
rm(list=ls())
#75 Convencional Trad e Iso
require(R2jags)
require(AICcmodavg)
require(lattice)
require(coda)
set.seed(123)
model.file <- system.file(package="R2jags",
"model", "schoolss.txt")
file.show(model.file)

#data
y <- c(3.018667,4.720000,8.633000,12.386833,19.423500,
28.084000,36.849000) #dados orig
y1<- c(3.018667,4.720000,8.633000,12.600000,19.210333
,28.084000,36.849000) #dados isoto
x=c(13,23,33,43,53,63,73)
N=7

jags.data <- list (N= N, y = y, y1 = y1, x = x)

jags.parameters <- c("a", "b", "k","tau", "a1", "b1",
"kl", "taul", "da", "db", "dk")

#run model
mod1 <- jags(data = jags.data,
parameters = jags.parameters,
model.file = model.file,
n.chains = 2, n.iter = 50000)

```

```
mod1

#bayes.mod.fit.upd <- update(mod1, n.iter=1000)
#bayes.mod.fit.upd <- autojags(mod1)

print(mod1)

plot(mod1)

traceplot(mod1)

bayes.mod.fit.mcmc <- as.mcmc(mod1)

summary(bayes.mod.fit.mcmc)

xyplot(bayes.mod.fit.mcmc, parms = c("a", "b", "k"))

densityplot(bayes.mod.fit.mcmc, aspect="fill")

autocorr.plot(bayes.mod.fit.mcmc)

#Testes de convergencia
geweke.diag(bayes.mod.fit.mcmc)
geweke.plot(bayes.mod.fit.mcmc)
raftery.diag(bayes.mod.fit.mcmc)
heidel.diag(bayes.mod.fit.mcmc)
effectiveSize(bayes.mod.fit.mcmc)
#gelman.diag(bayes.mod.fit.mcmc)

library(superdiag)
superdiag(bayes.mod.fit.mcmc, burnin = 100)

library(mcmcplots)

denplot(bayes.mod.fit.mcmc)

denplot(bayes.mod.fit.mcmc,
parms = c("a", "b", "k"))

traplot(bayes.mod.fit.mcmc,
parms = c("a", "b", "k", "tau"))
traplot(bayes.mod.fit.mcmc,
parms = c("a1", "b1", "k1", "tau1"))
traplot(bayes.mod.fit.mcmc,
parms = c("da", "db", "dk"))
```

```
mcmcplot(bayes.mod.fit.mcmc)

caterplot(bayes.mod.fit.mcmc,
  parms = c("a", "b", "k"))
caterplot(bayes.mod.fit.mcmc,
  parms = c("a1", "b1", "k1"))
caterplot(bayes.mod.fit.mcmc,
  parms = c("da", "db", "dk"))
plot(bayes.mod.fit.mcmc,
  parms = c("a", "b", "k"))

caterplot(bayes.mod.fit.mcmc,
  parms = c("a", "b", "k"),
  labels = c("a", "b", "k"))
```