

**COMPARAÇÃO ENTRE MODELOS PARA  
PREDIÇÃO DO NITROGÊNIO  
MINERALIZADO: UMA ABORDAGEM  
BAYESIANA**

**JANSER MOURA PEREIRA**

**2006**

**JANSER MOURA PEREIRA**

**COMPARAÇÃO ENTRE MODELOS PARA PREDIÇÃO DO  
NITROGÊNIO MINERALIZADO: UMA ABORDAGEM BAYESIANA**

Tese apresentada à Universidade Federal de Lavras  
como parte das exigências do Programa de Pós-  
Graduação em Agronomia, área de concentração em  
Estatística e Experimentação Agropecuária, para a  
obtenção do título de “Doutor”.

Orientador

Prof. Dr. Joel Augusto Muniz

Co-orientadora:

Profa Dra Thelma Sáfyadi

**LAVRAS**

**MINAS GERAIS – BRASIL**

**2006**

**Ficha Catalográfica Preparada pela Divisão de Processos Técnicos da  
Biblioteca Central da UFLA**

Pereira, Janser Moura

Comparação entre modelos para predição do nitrogênio mineralizado: uma abordagem bayesiana / Janser Moura Pereira. – Lavras: UFLA, 2006.

79 p. : il.

Orientador: Joel Augusto Muniz.

Tese (Doutorado) – UFLA.

Bibliografia.

1. Inferência bayesiana. 2. Modelos não lineares. 3. Amostrador de Gibbs. 4. Metropolis Hastings. 5. Fator de Bayes. 6. Critério de Informação Bayesiano. I. Universidade Federal de Lavras. II. Título.

CDD-519.542

**JANSER MOURA PEREIRA**

**COMPARAÇÃO ENTRE MODELOS PARA PREDIÇÃO DO  
NITROGÊNIO MINERALIZADO: UMA ABORDAGEM BAYESIANA**

Tese apresentada à Universidade Federal de Lavras  
como parte das exigências do Programa de Pós-  
Graduação em Agronomia, área de concentração em  
Estatística e Experimentação Agropecuária, para a  
obtenção do título de “Doutor”.

APROVADA em 15 de dezembro de 2006.

Prof. Dr. Marcelo Tavares	UFU
Profa Dra Thelma Sáfadi	UFLA
Prof. Dr. Carlos Alberto Silva	UFLA
Prof. Dr. Renato Ribeiro de Lima	UFLA

Prof. Dr. Joel Augusto Muniz  
UFLA  
(Orientador)

**LAVRAS  
MINAS GERAIS – BRASIL**

Aos meus pais, Alaor Alves de Moura e Cleuza Helena Pereira, pelo amor e  
incentivo.

À minha esposa, Andréa Clélia, pelo seu carinho, amizade e  
amor em todos os momentos.

Aos meus irmãos, Jander Antônio e Tatiana Anselma,  
pela amizade e carinho.

**DEDICO**

## **AGRADECIMENTOS**

A DEUS, por tudo.

À Universidade Federal de Lavras (UFLA), ao Programa de Pós-Graduação em Estatística e Experimentação Agropecuária e ao Departamento de Ciências Exatas (DEX), pela oportunidade e confiança no meu trabalho.

Ao professor Joel Augusto Muniz e à professora Thelma Sáfyadi, pela orientação, atenção e amizade.

Aos professores membros da banca examinadora, pelas sugestões e colaboração.

Aos professores do Departamento de Ciências Exatas da UFLA, pela amizade e pelos ensinamentos.

Aos funcionários do Departamento de Ciências Exatas da UFLA, pela assistência e eficiência com que nos atenderam.

Aos colegas de curso pós-graduação, pelo incentivo, companheirismo e fraternidade, em especial aos amigos Denismar e José Waldemar.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (Capes), pela concessão da bolsa de estudos.

A todos que, direta ou indiretamente, contribuíram para a realização deste trabalho.

## SUMÁRIO

	Página
LISTA DE TABELAS.....	i
LISTA DE FIGURAS.....	ii
RESUMO.....	iii
ABSTRACT.....	iv
1 INTRODUÇÃO.....	1
2 REFERENCIAL TEÓRICO.....	3
2.1 Comportamento do fenômeno: mineralização do nitrogênio.....	3
2.2 Modelos não lineares.....	4
2.2.1 Modelos não lineares adotados.....	6
2.3 Inferência bayesiana.....	8
2.3.1 Obtenção das distribuições posterioris condicionais completas	11
2.3.2 Priori não informativa.....	11
2.3.3 Intervalo de credibilidade.....	12
2.3.3.1 Intervalo de máxima densidade a posteriori ou intervalo HPD.....	12
2.3.4 Erro de Monte Carlo.....	13
3 MATERIAL E MÉTODOS.....	15
3.1 Material.....	15
3.2 Métodos.....	15
3.2.1 Métodos de reamostragem.....	16

3.2.1.1 Método da rejeição.....	16
3.2.1.2 Método de reamostragem ponderada.....	18
3.2.2 Método de Monte Carlo via cadeias de Markov (MCMC).....	19
3.2.2.1 Amostrador de Gibbs.....	19
3.2.2.2 Algoritmo de Metropolis-Hastings.....	20
3.3 Diagnósticos de convergência.....	21
3.3.1 Critério de Raftery & Lewis.....	22
3.3.2 Critério de Geweke.....	23
3.4 Comparação dos modelos não lineares.....	24
3.4.1 Fator de Bayes (FB).....	24
3.4.2 Critério de Informação Bayesiano (BIC).....	25
3.5 Posteriori conjunta.....	25
3.5.1 Posteriori conjunta para o modelo não linear de Stanford & Smith.....	25
3.5.2 Posteriori conjunta para o modelo não linear de Marion.....	26
3.5.3 Posteriori conjunta para o modelo não linear de Cabrera.....	28
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	30
4.1 Obtenção das posterioris condicionais completas para o modelo de Stanford & Smith.....	30
4.2 Obtenção das posterioris condicionais completas para o modelo de Marion.....	32
4.3 Obtenção das posterioris condicionais completas para o modelo de Cabrera.....	35
4.4 Análise dos dados.....	39
5 CONCLUSÕES.....	49
6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	51
7 ANEXO.....	56



## LISTA DE TABELAS

<b>TABELA</b>		<b>Página</b>
<b>TABELA 1</b>	Fator de dependência do critério de Raftery & Lewis (FD) e p-valor do critério de Geweke dos modelos (2.1), (2.2) e (2.3).....	39
<b>TABELA 2</b>	Média e desvio padrão a posteriori dos parâmetros dos modelos (2.1), (2.2) e (2.3), com seus respectivos intervalos HPD 95%, erro de Monte Carlo (Erro MC).....	43
<b>TABELA 3</b>	Fator de Bayes (FB) dos modelos (2.1), (2.2) e (2.3).....	44
<b>TABELA 4</b>	Critério de Informação Bayesiano (BIC) dos modelos (2.1), (2.2) e (2.3).....	44

## LISTA DE FIGURAS

<b>FIGURA</b>		<b>Página</b>
<b>FIGURA 1</b>	N potencialmente mineralizável ( $N_0$ ), com base nas quantidades acumuladas de N mineralizado durante a incubação sucessiva.....	3
<b>FIGURA 2</b>	Trajétórias e traços das cadeias dos parâmetros $N_0, k$ e $\tau_e$ do modelo de Stanford & Smith.....	40
<b>FIGURA 3</b>	Trajétórias e traços das cadeias dos parâmetros $N_0, k, b$ e $\tau_e$ do modelo de Marion.....	41
<b>FIGURA 4</b>	Trajétórias e traços das cadeias dos parâmetros $N_1, k_1, k_0$ e $\tau_e$ do modelo de Cabrera.....	42
<b>FIGURA 5</b>	Densidades e histogramas dos parâmetros $N_0, k$ e $\tau_e$ do modelo de Stanford & Smith.....	45
<b>FIGURA 6</b>	Densidades e histogramas dos parâmetros $N_0, k, b$ e $\tau_e$ do modelo de Marion.....	46
<b>FIGURA 7</b>	Densidades e histogramas dos parâmetros $N_1, k_1, k_0$ e $\tau_e$ do modelo de Cabrera.....	47

## RESUMO

PEREIRA, Janser Moura. **Comparação entre modelos para predição do nitrogênio mineralizado: uma abordagem bayesiana.** 2006. 79 p. Tese (Doutorado em Estatística e experimentação Agropecuária) – Universidade Federal de Lavras, Lavras, MG.\*

Estudos recentes utilizam a inferência bayesiana nas mais diversas áreas. Portanto, propõe-se neste trabalho desenvolver uma abordagem bayesiana para prever as quantidades de nitrogênio mineralizados por intermédio de modelos não lineares, ou seja, ajustar um modelo de probabilidade para um grupo de dados e sintetizar o resultado por meio de uma distribuição de probabilidade para os parâmetros dos modelos. Os modelos não lineares considerados para avaliar a dinâmica da mineralização do nitrogênio e para ilustrar o procedimento bayesiano foram: modelo de Stanford & Smith, modelo de Marion e modelo de Cabrera. A comparação dos modelos ocorreu por meio do Fator de Bayes (*FB*) e do Critério de Informação Bayesiano (*BIC*). Neste trabalho, foram utilizados o amostrador de Gibbs e o Metropolis Hastings, para inferência dos parâmetros. Implementou-se um algoritmo no software R para realizar a amostragem de Gibbs das distribuições posteriores dos parâmetros dos modelos. A convergência das cadeias foram monitoradas por meio de análise gráfica e pelos critérios de Geweke e Raftery & Lewis que estão implementados no pacote BOA, executável no software R. O modelo de Cabrera foi o que proporcionou melhor qualidade de ajuste ao conjunto de dados de mineralização de nitrogênio, seguido pelo modelo de Stanford & Smith e, por último, o de Marion. Em virtude dos resultados apresentados, pode-se atestar que a metodologia bayesiana apresentou bons resultados na estimação dos parâmetros dos modelos, ou seja, o ajuste de modelos por meio de distribuições posteriori condicionais completas constitui uma metodologia confiável e bastante precisa.

**Palavras Chaves:** inferência bayesiana, modelos não lineares, amostrador de Gibbs, Metropolis Hastings, fator de Bayes, critério de informação bayesiano.

---

\* Comitê Orientador: Prof. Dr. Joel Augusto Muniz – UFLA (Orientador) e Profa Dra Thelma Sáfyadi – UFLA (Co-orientadora)

## ABSTRACT

PEREIRA, Janser Moura. **Comparison of the models for prediction of the mineralized nitrogen: a bayesian boarding.** 2006. 79 p. Thesis (Doctorate in Statistics and Agricultural Experimentation) – Federal University of Lavras, Lavras, Minas Gerais, Brazil.\*

Recent studies use the Bayesian Inference in the most several areas. Therefore, intends in this work to develop a Bayesian boarding to predict of the nitrogen mineralized through nonlinear models, that is, to adjust a model of probability for a group of data and to synthesize the result through a distribution of probability for the parameters of models. The nonlinear models considered to evaluate the mineralization of organic nitrogen and to illustrate the bayesian procedure they were: model of Stanford & Smith, model of Marion and model of Cabrera. The comparison of the models was promoted through the Bayes Factor (FB) and Bayes Information Criterion (BIC). In this work we had used Gibbs Sampling and Metropolis Hastings to accomplish inference of the parameters. A Gibbs Sampling algorithm was implemented on R to get the posterior distributions of the models parameters. The convergence of the chains was monitored through graphic analysis, and for the criteria of Geweke and Raftery & Lewis, implemented in the BOA package, executable in the freeware R. The model that provided better adjustment quality to the group of data was the model of Cabrera, being followed by the model of Stanford & Smith and last the one of Marion. Because of the presented results, it can be attested that the Bayesian methodology presented good results in the estimate of the parameters of the models, in other words, the adjustment of models through distributions complete conditional posteriori constitutes a reliable methodology and accuracy.

**Key Words:** bayesian inference, nonlinear models, Gibbs Sampling, Metropolis Hastings, Bayes Factor, Bayesian Information Criterion.

---

\* Guidance Committee: Prof. DSc. Joel Augusto Muniz – UFLA (Adviser) and Prof. DSc. Thelma Sáfyadi - UFLA.

## 1 INTRODUÇÃO

O N potencialmente mineralizável do solo é uma medida da quantidade de N mineralizado sob condições ótimas de umidade e temperatura, podendo ser empregado para estimar o nitrogênio (N) que será disponibilizado durante o ciclo de uma cultura. Durante o período de crescimento das plantas, existe variação nas quantidades de N inorgânico, principalmente  $N-NO_3^-$  (nitrato) e também na capacidade que o solo tem de fornecer N às plantas, por meio da mineralização. A contribuição relativa dos resíduos e formas orgânicas varia de acordo com tipo de solo e o sistema de manejo (Stanford & Smith, 1976). Entre os fatores que contribuem para o incremento da produtividade das culturas, a disponibilidade de N é um dos mais importantes, pois exerce efeito mais pronunciado na produção. Apesar disso, o manejo da adubação nitrogenada é difícil, por ser o N um elemento que apresenta dinâmica complexa e em virtude do fato da adubação nitrogenada não apresentar efeito residual (Raij, 1991).

Compreender as transformações do N no solo constitui um fator importante para a maximização de seu uso pelas plantas e também para uma maior eficiência na adubação nitrogenada. Isso porque o nitrogênio é essencial ao crescimento e à produção das culturas, constituindo, na maioria dos casos, o elemento que mais limita o crescimento e desenvolvimento das plantas (Silva et al., 1994).

Na agricultura comercial moderna, grande quantidade de nitrogênio é adicionada ao solo, constituindo-se fonte potencial de poluição ambiental. A contaminação dos mananciais com resíduos de  $N-NO_3^-$  (nitrato) e  $N-NH_4^+$  (amônia) tem causado sérias preocupações, uma vez que, em excesso (acima de 10 e 0,02  $mgL^{-1}$ ), essas formas de nitrogênio podem causar danos à saúde dos homens e dos animais. Embora tal contaminação seja proveniente de várias

fontes, como resíduos municipais e industriais, as práticas agrícolas, em especial a adubação do solo com nitrogênio, que têm aumentado abusivamente nos últimos anos, têm sido consideradas as principais (Ferguson et al., 1991). Em algumas lavouras, doses elevadas de fertilizantes nitrogenados, quase sempre, excedem os requerimentos culturais, acarretando eutrofização – lixiviação das formas de nitrogênio para o lençol freático e ou escoamento superficial das mesmas em direção aos mananciais (Sainju et al., 1999).

Para que este problema decresça, é necessário que os agricultores usem adubos nitrogenados e orgânicos em quantidades adequadas que, ao mesmo tempo, aumentem a produtividade das culturas e diminuam, ao mínimo possível, os teores de  $\text{N-NO}_3^-$  e  $\text{N-NH}_4^+$  no solo (Unlu et al., 1999). De preferência, é preciso sincronizar melhor a liberação de N pelos resíduos com as fases de maior requerimento nutricional das culturas. A predição com maior precisão (acurácia) do N mineralizado possibilita a maior eficiência de uso do nutriente.

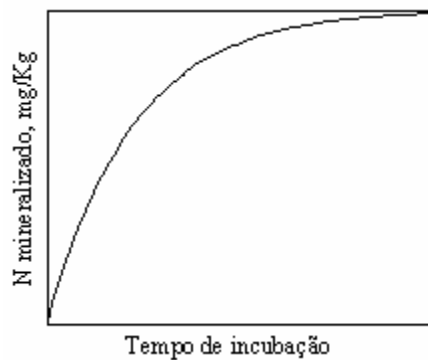
Assim, propõe-se, neste trabalho, desenvolver uma abordagem bayesiana para prever as quantidades de N mineralizados por intermédio dos modelos não lineares, ou seja, ajustar um modelo de probabilidade para um grupo de dados e sintetizar o resultado por meio de uma distribuição de probabilidade para os parâmetros dos modelos. Utilizaram-se dados experimentais (dados reais) associados à mineralização de N em Latossolo do Sul de Minas Gerais, sob efeito da calagem, descritos em Silva et al. (1994) (seção 3.1). Na seção (3.5) serão apresentadas as posteriores conjuntas dos modelos de Cabrera (1993), Marion et al. (1981) e Stanford & Smith (1972). A comparação dos modelos foi feita por meio do Fator de Bayes e do Critério de Informação Bayesiano (BIC).

## 2 REFERENCIAL TEÓRICO

### 2.1 Comportamento do fenômeno: mineralização do nitrogênio

Segundo Stanford & Smith (1972), a mineralização de N em solo pode ser descrita por uma equação exponencial simples que relaciona o N mineralizado, oriundo de um único compartimento (“pool”) de N potencialmente mineralizável, com o tempo de incubação. Gupta & Reuszer (1967) e Chew et al. (1976) afirmam que a mineralização da matéria orgânica é maior nos primeiros períodos de incubação, devido à presença de compostos orgânicos de fácil decomposição. Black (1968) afirma que fatores, como o manuseio do solo, a secagem, o congelamento e a moagem, podem acelerar a decomposição da matéria orgânica.

Com base nessas afirmações e de acordo com Stanford & Smith (1972), que avaliaram o nitrogênio potencialmente mineralizável do solo ( $N_0$ ) por meio de incubação aeróbica, a mineralização potencial do N orgânico do solo ( $N_0$ ) tem o comportamento conforme descrito na Figura 1.



**FIGURA 1:** N potencialmente mineralizável ( $N_0$ ) com base nas quantidades acumuladas de N mineralizado durante a incubação sucessiva.

Nota-se, no comportamento dos dados mostrados no gráfico, que, nos primeiros períodos de incubação, a mineralização do nitrogênio é maior e, à medida que o tempo decorre, a mineralização da matéria orgânica vai diminuindo, ou seja, a curva assintótica tende-se a estabilizar. Isso ocorre em razão de prevalecerem no solo compostos orgânicos que apresentam taxas de decomposição diferenciadas. De fato, são encontrados no solo compostos orgânicos nitrogenados facilmente decomponíveis como proteínas, aminoácidos, açúcares simples, entre outros, e compostos mais resistentes à decomposição, como é o caso do N associado às substâncias húmicas, açúcares complexos, etc. Assim, as maiores taxas de decomposição observadas no início da incubação se explicam em função dos ataques microbianos às moléculas de maior biodisponibilidade.

À medida que avança o tempo de incubação, diminui a concentração no solo de moléculas facilmente decomponíveis e aumenta a de compostos recalcitantes, menos suscetíveis à decomposição. Isso explica o caráter não linear da mineralização do nitrogênio em função do tempo de incubação, o que justifica a adoção de modelos não lineares para o estudo do fenômeno mineralização do nitrogênio.

## **2.2 Modelos não lineares**

Os modelos são classificados como: lineares, não lineares e linearizáveis. Nos modelos não lineares, não é possível encontrar uma forma analítica para a estimação dos parâmetros, isto é, as expressões dos estimadores não apresentam uma solução explícita, exigindo o uso de métodos numéricos iterativos. A vantagem de se trabalhar com modelos não lineares é que seus parâmetros possuem uma interpretação biológica e, em muitas situações,



necessitam-se de menos parâmetros nos modelos não lineares, o que simplifica e facilita a interpretação.

Draper & Smith (1998) classificam os modelos como:

- a) **modelos lineares:** aqueles que são lineares em relação aos parâmetros, ou seja,

$$\frac{\partial}{\partial \beta_i} g_j(X, \beta) = h(X),$$

para  $i = 1, 2, \dots, p$  e  $j = 1, 2, \dots, n$ ;

em que  $p$  é o número de parâmetros do modelo e  $n$  é o número de observações.

Como ilustração, é apresentado o seguinte modelo:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X + \beta_2 X^2 + \varepsilon$$

em que  $\varepsilon$  é o erro de caráter aditivo e  $\beta_0$ ,  $\beta_1$  e  $\beta_2$  são os parâmetros a serem estimados. O cálculo das derivadas parciais:

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

mostra que nenhuma delas depende de algum parâmetro do modelo, portanto, o modelo é dito linear;

- b) **modelos linearizáveis:** são modelos não lineares que, por meio de alguma transformação, se tornam lineares. Seja o modelo,

$$Y = \beta^X \varepsilon$$

em que  $\beta$  é o parâmetro a ser estimado e  $\varepsilon$  é o erro de caráter multiplicativo.

Utilizando-se a transformação logarítmica, ou seja, aplicando-se o logaritmo em ambos os lados da equação, têm-se:

$$\log(Y) = \log(\beta^X \varepsilon)$$

$$\log(Y) = X \log(\beta) + \log(\varepsilon).$$

Fazendo  $g = \log(Y)$ ;  $c = \log(\beta)$ ;  $e = \log(\varepsilon)$ , a equação pode ser escrita como  $g = cX + e$ , sendo linear, pois

$$\frac{\partial g}{\partial c} = X = h(X)$$

que independe do parâmetro  $c$ , mostrando que o modelo original é linearizável.

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

$$Y = \beta_1 X + \beta_2^X + \varepsilon$$

em que  $\beta_1$  e  $\beta_2$  são os parâmetros a serem estimados. O cálculo das derivadas parciais de  $Y$ :

$$\frac{\partial Y}{\partial \beta_1} = X \text{ e } \frac{\partial Y}{\partial \beta_2} = X \beta_2^{X-1},$$

mostra que a segunda delas depende do parâmetro  $\beta_2$ , indicando que o modelo em questão é não linear.

### 2.2.1 Modelos não lineares adotados

De acordo com Camargo et al. (2002) e Pereira et al. (2005), existem oito modelos não lineares utilizados para descrever e prever as relações na dinâmica da mineralização do nitrogênio no solo. Os oito modelos não lineares são classificados como: exponencial simples (Cabrera, 1993; Jones, 1984; Marion et al., 1981 e Stanford & Smith, 1972), exponencial duplo (Inobushi et al., 1985; Molina et al., 1980), parabólico (Broadbent, 1986) e hiperbólico (Juma et al., 1984). De forma geral, os modelos exponenciais simples consideram somente uma forma de N potencialmente mineralizável, decomposto a uma taxa proporcional à sua concentração. Enquanto os modelos exponenciais duplos

consideram a existência de dois “pools”, ou seja, existem duas taxas ocorrendo no processo, sendo uma mais estável, característica de compostos mais resistente, concomitantemente a outra menos estável. A mais estável relacionada com o N é dificilmente mineralizável e, a menos estável ao N é facilmente mineralizável (Pereira, 2004).

Três dos modelos estatísticos utilizados são definidos por:

(i) modelo exponencial simples de Stanford & Smith (1972):

$$y_i = N_0 [1 - \exp(-kt_i)] + e_i \quad (2.1)$$

(ii) modelo exponencial simples de Marion et al. (1981):

$$y_i = N_0 [1 - \exp(-kt_i^b)] + e_i \quad (2.2)$$

(iii) modelo exponencial simples de Cabrera (1993):

$$y_i = N_1 [1 - \exp(-k_1 t_i)] + k_0 t_i + e_i \quad (2.3)$$

em que,

$y_i$  é o nitrogênio mineralizado até o tempo  $t_i$  ;

$t_i$  é o tempo de incubação, com  $i = 1, \dots, n$ ;

$N_0$  é o nitrogênio potencialmente mineralizável;

$N_1$  é o nitrogênio facilmente mineralizável;

$k$ ,  $k_0$  e  $k_1$  são taxas ou constantes de mineralização;

$b$  é um parâmetro que não tem interpretação biológica (constante qualquer);

$e_i$  é um vetor de erros com distribuição normal com média zero e variância  $\sigma_e^2$ .

Marion et al. (1981) propuseram um modelo não linear similar ao modelo descrito por Stanford & Smith (1972) introduzindo um expoente ( $b$ ) ao tempo. Cabrera (1993) propôs um modelo não linear que descreve a existência de dois “pools”, ou seja, duas taxas envolvidas no processo, sendo  $k_0$  a taxa ou

constante de mineralização do “pool” mais estável e  $k_1$  a taxa do “pool” menos estável.

### 2.3 Inferência bayesiana

A inferência bayesiana nas últimas décadas tem ganhado muitos adeptos devido ao avanço computacional, ou seja, às técnicas de simulação relativamente simples, mas extremamente poderosas, que puderam ser implementadas graças ao avanço dos recursos computacionais. Para Gelman et al. (2003), a inferência bayesiana é o processo de ajustar um modelo de probabilidade para um grupo de dados e resumir o resultado por uma distribuição de probabilidade nos parâmetros do modelo e em quantidades não observáveis como predição para novas observações.

A estatística é fundamentada em informações a respeito de uma determinada quantidade de interesse  $\theta$  e a toda informação relaciona-se um grau  $p$  de incerteza referente a  $\theta$ . Um dos objetivos da inferência bayesiana é minimizar o grau de incerteza, ou seja, reduzir ao mínimo o grau de incerteza a respeito de  $\theta$  (quantidade de interesse). Porém, a incerteza a respeito de  $\theta$  pode assumir diferentes graus, que podem ser representados por meio de modelos probabilísticos para  $\theta$ . Conseqüentemente, é natural que diferentes pesquisadores apresentem modelos distintos, pois os mesmos podem apresentar diferentes graus de “incerteza” sobre  $\theta$  (Ehlers, 2003).

O grau de “incerteza”, ou a informação que se tem a respeito de  $\theta$ , é representado probabilisticamente por meio de  $p(\theta)$ . A informação sobre  $\theta$  pode ser aumentada observando-se uma quantidade aleatória  $Y$  relacionada com  $\theta$ , na qual a distribuição amostral  $p(y|\theta)$  define esta relação. Uma vez observada  $Y = y$ , a quantidade de informação sobre  $\theta$  aumenta e o teorema de Bayes é a

regra de atualização utilizada para mensurar este aumento de informação (Ehlers, 2003),

$$p(\theta|y) = \frac{p(\theta, y)}{p(y)} = \frac{p(y|\theta)p(\theta)}{p(y)} = \frac{p(y|\theta)p(\theta)}{\int p(\theta, y)d\theta}. \quad (2.4)$$

Observe que, em (2.4),  $1/p(y)$  desempenha o papel de uma constante normalizadora de  $p(\theta|y)$ , pois não depende de  $\theta$ . Para um valor fixo de  $y$ , a função  $p(y|\theta)$  fornece a verossimilhança de cada um dos possíveis valores de  $\theta$ , ou seja,  $p(y|\theta) = L(\theta; y)$ , enquanto  $p(\theta)$  é chamada de distribuição a priori de  $\theta$ . Essas duas fontes de informação, priori e verossimilhança, são combinadas, levando à distribuição a posteriori de  $\theta$ ,  $p(\theta|y)$ . Portanto, a forma usual do teorema de Bayes é:

$$p(\theta|y) \propto L(\theta; y) \times p(\theta) \quad (2.5)$$

É importante ressaltar que essa forma simplificada do teorema de Bayes dada em (2.5) é útil para a resolução de problemas que envolvam estimação de parâmetros, já que o denominador é apenas uma constante normalizadora. Porém, em outras situações, como seleção de modelos, este termo tem um papel crucial (Ehlers, 2003).

As inferências sobre a distribuição a posteriori conjunta consistem na verdade em encontrar uma distribuição para um parâmetro específico,  $\theta_i$ . A forma de encontrar tal distribuição, chamada distribuição marginal de  $\theta_i$ , é integrando a distribuição *posteriori conjunta* em relação aos outros parâmetros do modelo, ou seja,

$$f(\theta_i) = \int \dots \int f(\theta_i, \theta_{-i}) d\theta_{-i} \quad (2.6)$$

em que  $\theta_{-i} = (\theta_1, \dots, \theta_{i-1}, \theta_{i+1}, \dots, \theta_j)$  é o conjunto complementar de parâmetros para  $\theta_i$  (Rosa, 1998).

Porém, muita das vezes, a forma analítica da marginal (2.6) é complexa e multidimensional ou, até mesmo, impossível de ser calculada analiticamente, ou seja, a inferência exata somente será possível se estas integrais puderem ser calculadas analiticamente, caso contrário devem-se usar aproximações. Nesse caso, métodos numéricos iterativos, como método de Monte Carlo via cadeias de Markov (MCMC) são utilizados para gerar valores de uma distribuição condicional a posteriori para cada parâmetro (Sorensen, 1996). Dentre os métodos de simulação que fazem o uso de cadeias de Markov destacam-se o amostrador de Gibbs e o Metropolis Hastings (Hastings, 1970).

O amostrador de Gibbs é uma alternativa para a obtenção de (2.6), método inicialmente utilizado por Gelfand & Smith (1990), na estatística, o qual foi elaborado por Geman & Geman (1984). Gamerman (1997) também utiliza o método MCMC para amostragem da densidade a posteriori e, para os casos em que não existem formas específicas para as distribuições condicionais completas, a amostragem Gibbs pode ser implementada com o auxílio do algoritmo Metropolis & Hastings (Hastings, 1970; Metropolis et al., 1953), para realizar o sorteio na condicional completa da amostragem Gibbs.

A motivação para o uso da amostragem Gibbs é que a real distribuição pode ser aproximada por uma distribuição empírica de  $n$  valores, de tal forma que  $n$  seja grande o suficiente para que a amostragem Gibbs atinja a convergência (Zeger & Karin, 1991). Gelfand & Smith (1990) utilizam a mesma idéia ilustrando a inferência bayesiana em um conjunto de dados normais, usando o amostrador de Gibbs. Casella & George (1992) utilizam o amostrador de Gibbs para ilustrar o fato de que as condicionais completas, quando  $n \rightarrow \infty$ , determinam as marginais, isto é, quando se tem uma amostra suficientemente

grande de um determinado parâmetro, dados os demais, obtém-se uma distribuição empírica que se aproxima suficientemente da distribuição marginal.

### 2.3.1 Obtenção das distribuições posterioris condicionais completas

Em geral, cada uma das componentes  $\theta_i$  pode ser uni ou multidimensional, a distribuição condicional completa é a distribuição da  $i$ -ésima componente de  $\theta$  condicionada em todas as outras componentes. A condicional completa pode ser obtida a partir da distribuição conjunta da seguinte forma:

$$p(\theta_i | \theta_{-i}) = \frac{p(\theta)}{\int p(\theta) d\theta_i} \quad (2.7)$$

em que  $\theta_{-i} = (\theta_1, \dots, \theta_{i-1}, \theta_{i+1}, \dots, \theta_j)$ ,  $\theta = (\theta_1, \dots, \theta_i, \dots, \theta_j)$  e  $p(\theta)$  é a distribuição conjunta, sendo  $j$  o número de parâmetros do modelo. Assim, para se obter a distribuição condicional completa de  $\theta_i$ , basta pegar os termos da distribuição conjunta que não dependem de  $\theta_i$  (Sorensen, 1996 e Ehlers, 2003).

### 2.3.2 Priori não informativa

A priori é caracterizada como não informativa quando a verossimilhança é dominante ou quando se deseja representar o desconhecimento sobre  $\theta$ . A primeira idéia é pensar em todos os possíveis valores para  $\theta$  como igualmente prováveis, isto é,  $p(\theta) \propto v$ , com  $v$  sendo uma constante e  $\theta$  limitado em um intervalo real. Muitas vezes, a priori, é a forma de se quantificar a incerteza sobre o parâmetro, porém, a priori não-informativa não representa necessariamente o desconhecimento do pesquisador sobre o parâmetro, mas

deve ser usada também de forma a viabilizar a inferência a posteriori (Box & Tiao, 1992).

### 2.3.3 Intervalo de credibilidade

Na inferência bayesiana, toda informação probabilística que se tem a respeito de um determinado parâmetro  $\theta$  é representada por meio de sua distribuição a posteriori. A partir de tal distribuição, estimam-se parâmetros como média, mediana e moda a posteriori, baseando-se nos valores observados da distribuição a posteriori de  $\theta$ .

No entanto, essa informação restringe-se a um único valor, ou seja, toda informação presente na distribuição a posteriori de  $\theta$  é condensada em uma estimativa pontual. Portanto, fica evidente a necessidade de associarmos uma medida da precisão de tal estimativa (média, mediana ou moda). Para isso, é necessário incorporar o conceito de intervalo de credibilidade que permite mensurar a precisão com que este número foi estimado.

Define-se  $C = [a, b]$  como intervalo de credibilidade de  $100(1 - \alpha)\%$ , ou nível de credibilidade  $(1 - \alpha)$ , para  $\theta$  se  $P[\theta \in C] \geq 1 - \alpha$ . Note que a definição expressa, de forma probabilística, a pertinência ou não de  $\theta$  ao intervalo. Assim, quanto menor for o tamanho do intervalo, mais concentrada é a distribuição do parâmetro, ou seja, o tamanho do intervalo informa sobre a dispersão do parâmetro  $\theta$  (Ehlers, 2003).

#### 2.3.3.1 Intervalo de máxima densidade a posteriori ou intervalo HPD

A sigla HPD corresponde à abreviação da expressão “*Highest Posterior Density*”, ou seja, região de alta ou máxima densidade a posteriori. A estimativa de intervalo de densidade de probabilidade máxima (HPD) é um meio de gerar



intervalos posterioris bayesianos. Paulino et al. (2003) afirmam que existe uma infinidade de regiões de credibilidade com o mesmo grau de credibilidade. Portanto, o intervalo HPD é um intervalo de credibilidade de comprimento mínimo, obtido a partir dos valores de  $\theta$  com maior densidade a posteriori. No pacote BOA, executável no “freeware” R, utiliza-se o algoritmo descrito por Chen & Shao (1999) para estimar os intervalos HPD, sob a suposição de distribuições posterioris marginais unimodal.

### 2.3.4 Erro de Monte Carlo

No contexto de inferência bayesiana, o método de Monte Carlo é utilizado para o cálculo de integrais definidas, utilizando-se aproximações.

De acordo com Ehlers (2003), o estimador de Monte Carlo é dado por:

$$\hat{I} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n g(X_i),$$

em que  $\hat{I}$  é uma aproximação para a integral que se deseja calcular, portanto, precisamos estudar o erro  $\hat{I} - I$ . Uma vez que as gerações são independentes, então, pela Lei Forte dos Grandes Números, segue que  $\hat{I}$  converge quase certamente para  $I$ , isto é,

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n g(X_i) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} E[g(X)].$$

Além disso, definindo  $\sigma^2 = Var[g(X)]$  e assumindo que esta variância existe o erro padrão de Monte Carlo é uma estimativa consistente de  $\sigma$ , dada por:

$$\hat{\sigma} = \sqrt{\frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n [g(x_i) - \bar{g}]^2},$$

isto é, a aproximação pode ser tão acurada quanto se deseje, bastando aumentar o valor de  $n$  (número de iterações).

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

### 3 MATERIAL E MÉTODOS

#### 3.1 Material

Para ilustração do estudo dos três modelos, utilizaram-se dados experimentais associados à mineralização de N em Latossolo do Sul de Minas Gerais sob efeito da calagem, descritos em Pereira et al. (2005) e Silva et al. (1994). Assim, foram consideradas as quantidades acumuladas de N mineralizado durante onze tempos de incubação (1, 2, 3, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 21 e 28 semanas). A acidez do solo foi corrigida visando-se elevar a saturação por bases a 60%, com o pH em água do solo atingindo valores na faixa de 6,0-6,2. A extração do N mineral (nitrato + amônio) formado durante a incubação foi feita pela lavagem periódica do solo com solução de  $\text{CaCl}_2$  (Cloreto de Cálcio)  $0,01 \text{ mol L}^{-1}$ . A quantificação do N mineralizado foi feita em destilador de arraste de vapores, sendo o N-amônio quantificado após a adição de MgO (Óxido de Magnésio) no extrato de  $\text{CaCl}_2$  e o nitrato, após o uso de liga de Devarda no extrato remanescente. As amostras de solo foram incubadas em condições ambientais do Laboratório de Relação Solo-Planta do DCS/UFLA (Departamento de Ciências do Solo da Universidade Federal de Lavras), com a temperatura ambiente oscilando entre  $21^\circ\text{C}$  e  $28^\circ\text{C}$ . O delineamento experimental utilizado foi o inteiramente ao acaso, com três repetições.

#### 3.2 Métodos

Para realizar a inferência sobre os parâmetros é necessário determinar as marginais a posteriori. De posse das marginais, utiliza-se o método MCMC para realizar amostragem das densidades a posterioris e, para os casos em que não

existem formas específicas para as distribuições condicionais completas, a amostragem Gibbs é implementada por intermédio do algoritmo Metropolis Hastings. Serão apresentados alguns métodos de reamostragem com o intuito de facilitar a compreensão do amostrador de Gibbs e a amostragem por rejeição com algoritmo Metropolis Hastings.

### 3.2.1 Métodos de reamostragem

A idéia dos métodos de reamostragem é gerar valores em duas etapas. Na primeira etapa, geram-se valores de uma distribuição auxiliar conhecida no sentido de aproximar-se da distribuição de interesse, ou seja, da posteriori. Na segunda etapa, utiliza-se um mecanismo de correção a fim de que os valores amostrados da distribuição auxiliar sejam representativos (ao menos aproximadamente) da distribuição a posteriori. O mecanismo de correção não necessariamente é estocástico. A densidade de interesse será denotada por  $p(\theta|x)$  e a densidade auxiliar é denotada por  $q(\theta)$  (Gamerman, 1997).

#### 3.2.1.1 Método da rejeição

Considere uma densidade auxiliar  $q(\theta)$ , da qual sabemos gerar amostras. A idéia é utilizar  $q(\theta)$  para fazer geração de  $p(\theta|x)$ . A única restrição matemática sobre  $q(\theta)$  é que exista uma constante  $A < \infty$ , tal que  $p(\theta|x) < Aq(\theta)$ , para todo  $\theta$ . O método gera valores da densidade proporcional a  $p(\theta|x)$ , se apenas o núcleo de  $p(\theta|x)$  é conhecido. Basta que  $Aq(\theta)$  sirva como envelope, cobrindo todo o gráfico de  $p(\theta|x)$ , independente da escala utilizada (Gamerman, 1997).

O método consiste em gerar um valor  $\theta^*$  de uma distribuição auxiliar  $q(\theta)$  e aceitar este valor como sendo da distribuição a posteriori com probabilidade  $p(\theta|x)/Aq(\theta)$ . Caso contrário,  $\theta^*$  não é aceito como um valor gerado da posteriori e o processo é repetido até que um valor seja aceito. O método também funciona se em vez da posteriori,  $p(\theta|x)$ , que, em geral, é desconhecida, utilizarmos a sua versão não normalizada, ou seja,  $p(x|\theta)p(\theta)$  (Ehlers, 2003).

Em algumas situações, toma-se a priori  $p(\theta)$  como sendo a densidade auxiliar, ou seja,  $q(\theta) = p(\theta)$ , então, a constante  $A$  deve ser tal que  $p(x|\theta) < A$ . Esta desigualdade só pode ser satisfeita se tomarmos  $A$  como sendo o valor máximo da função de verossimilhança, isto é,  $A = p(x|\hat{\theta})$ , em que  $\hat{\theta}$  é o estimador de máxima verossimilhança de  $\theta$ . Então, a probabilidade de aceitação de  $\theta^*$  se simplifica em  $p(x|\theta)/p(x|\hat{\theta})$ , que é sempre menor ou igual a 1.

Pode-se utilizar o seguinte algoritmo para gerar valores da posteriori:

- 1) gerar um valor  $\theta^*$  da distribuição auxiliar  $q(\theta)$  (conhecida);
- 2) gerar  $u \sim U(0,1)$ ;
- 3) aceitar  $\theta^*$  como valor da posteriori se  $u < p(\theta|x)/Aq(\theta)$ , caso contrário rejeitar  $\theta^*$  e retornar ao item 1.

Um problema técnico associado ao método é a necessidade de se maximizar a função de verossimilhança, o que pode não ser uma tarefa simples em modelos mais complexos. Se este for o caso, então, o método de rejeição perde o seu principal atrativo, que é a simplicidade (Gelman, 1997).

### 3.2.1.2 Método de reamostragem ponderada

O método de reamostragem ponderada tem o mesmo princípio do método da rejeição, ou seja, parte de valores gerados de uma distribuição auxiliar  $q(\theta)$  fácil de ser amostrada, mas com a vantagem de que ela não precisa ser um envelope para  $p(\theta|x)$ , isto é, não há necessidade de maximização da verossimilhança. A desvantagem do método é a de que ele fornece valores apenas aproximadamente distribuídos segundo a posteriori (Gamerman, 1997).

Suponha que temos uma amostra  $\theta_1, \dots, \theta_n$  gerada de uma distribuição auxiliar  $q(\theta)$  e, a partir dela, construímos pesos  $w_i$  com  $i = 1, \dots, n$ , em que

$$w_i = \frac{p(\theta_i|x)/q(\theta_i)}{\sum_{j=1}^n p(\theta_j|x)/q(\theta_j)}.$$

O método consiste em tomar uma segunda amostra (reamostra) de tamanho  $m$  da distribuição discreta em  $\theta_1, \dots, \theta_n$ , com probabilidades  $w_1, \dots, w_n$ . Aqui, também, não é necessário que se conheça completamente a posteriori, mas apenas o produto da priori pela verossimilhança (versão não normalizada), já que, neste caso, os pesos não se alteram (Ehlers, 2003).

Tomando novamente a priori como densidade auxiliar, isto é,  $q(\theta) = p(\theta)$ , os pesos se simplificam para:

$$w_i = \frac{p(x|\theta_i)}{\sum_{j=1}^n p(x|\theta_j)}, \quad i = 1, \dots, n.$$

O algoritmo para gerar valores (aproximadamente) da posteriori é:

- 1) gerar valores  $\theta_1, \dots, \theta_n$  de uma distribuição auxiliar  $q(\theta)$  (conhecida);

- 2) calcular os pesos  $w_i$ ,  $i = 1, \dots, n$ .
- 3) reamostrar valores com probabilidades  $w_1, \dots, w_n$ .

### 3.2.2 Método de Monte Carlo via cadeias de Markov (MCMC)

Todos os métodos de simulação apresentados até agora geram os valores de forma independente (não-Markovianos), isto é, as observações sucessivas são estatisticamente independentes. O método de Monte Carlo via cadeias de Markov (MCMC) consiste de simulações iterativas, baseadas em cadeias de Markov e, conseqüentemente, os valores gerados não serão mais independentes (Gamerman, 1997). Os métodos MCMC mais utilizados são o amostrador de Gibbs e o algoritmo de Metropolis-Hastings.

#### 3.2.2.1 Amostrador de Gibbs

No amostrador de Gibbs, a cadeia irá sempre se mover para um novo valor, isto é, não existe mecanismo de aceitação-rejeição. As transições de um estado para outro são feitas de acordo com as distribuições condicionais completas  $p(\theta_i | \theta_{-i})$ , em que  $\theta_{-i} = (\theta_1, \dots, \theta_{i-1}, \theta_{i+1}, \dots, \theta_j)$ , sendo  $j$  o número de parâmetros do modelo (Ehlers, 2003).

O amostrador de Gibbs é um processo Markoviano, por sustentar uma memória curta, sendo a variável gerada dependente apenas da variável gerada anteriormente. O algoritmo de Gibbs fornece uma forma alternativa para gerar sucessivos valores de uma distribuição condicional completa. Segundo Gamerman (1997), o amostrador de Gibbs pode ser descrito da seguinte forma:

- 1) inicie o contador de iterações da cadeia  $l = 1$  e escolha valores iniciais

$$\theta^0 = (\theta_1^{(0)}, \dots, \theta_j^{(0)});$$

2) obtenha um novo valor  $\theta^{(l)} = (\theta_1^{(l)}, \dots, \theta_j^{(l)})$ , a partir de  $\theta^{(l-1)}$ , por meio de sucessivas gerações de valores

$$\begin{aligned}\theta_1^{(l)} &\sim p\left(\theta_1 \mid \theta_2^{(l-1)}, \theta_3^{(l-1)}, \dots, \theta_j^{(l-1)}\right) \\ \theta_2^{(l)} &\sim p\left(\theta_2 \mid \theta_1^{(l)}, \theta_3^{(l-1)}, \dots, \theta_j^{(l-1)}\right) \\ &\vdots \\ \theta_j^{(l)} &\sim p\left(\theta_j \mid \theta_1^{(l)}, \theta_2^{(l)}, \dots, \theta_{j-1}^{(l)}\right)\end{aligned}$$

3) mude o contador  $l$  para  $l+1$  e retorne ao passo 2, até atingir a convergência.

### 3.2.2.2 Algoritmo de Metropolis-Hastings

Em alguns casos, a forma da distribuição condicional completa não é reconhecida, o que inviabiliza sua amostragem pelos métodos convencionais. Alguns métodos adicionais podem ser utilizados, como, por exemplo, amostragem por rejeição com o algoritmo de Metropolis-Hastings.

O algoritmo de Metropolis-Hastings utiliza a mesma idéia dos métodos de rejeição vistos anteriormente, ou seja, um valor é gerado da distribuição auxiliar e aceito com uma dada probabilidade. Esse mecanismo de correção garante a convergência da cadeia para a distribuição de equilíbrio (Ehlers, 2003).

Suponha que a cadeia esteja no estado  $\theta$  e um valor  $\theta^*$  é gerado de uma distribuição auxiliar proposta  $q(\cdot \mid \theta)$ . Note que a distribuição auxiliar proposta pode depender do estado atual da cadeia. O novo valor  $\theta^*$  é aceito com a seguinte probabilidade:

$$\alpha(\theta, \theta^*) = \min\left(1, \frac{p(\theta^* \mid x)q(\theta \mid \theta^*)}{p(\theta \mid x)q(\theta^* \mid \theta)}\right) \quad (3.1)$$

em que  $p$  é a distribuição de interesse.



É notório que a cadeia pode permanecer no mesmo estado por muitas iterações e, na prática, costuma-se monitorar isso calculando-se a porcentagem média de iterações para as quais novos valores são aceitos. O algoritmo de Metropolis-Hastings pode ser descrito da seguinte forma:

- 1) inicie o contador de iterações da cadeia  $t = 0$  e escolha valores iniciais  $\theta^0$ ;
- 2) gere um novo valor  $\theta^*$  da distribuição  $q(\cdot|\theta)$ ;
- 3) calcule a probabilidade de aceitação  $\alpha(\theta, \theta^*)$  por meio de (3.1) e gere  $u \sim U(0,1)$ ;
- 4) se  $u \leq \alpha$  então aceita-se o novo valor e faça  $\theta^{(t+1)} = \theta^*$ , caso contrário, rejeite e faça  $\theta^{(t+1)} = \theta^{(t)}$ ;
- 5) incremente o contador de  $t$  para  $t + 1$  e volte ao passo 2.

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

### 3.3 Diagnósticos de convergência

Uma questão de ordem prática é como os valores iniciais influenciam o comportamento da cadeia. Considere uma longa realização da cadeia com comprimento (número de iterações)  $t = l + gm$ , em que  $l$  é o número inicial de iterações necessárias para que a cadeia atinja o estado de equilíbrio,  $m$  é o número das iterações que serão utilizadas na aplicação do método de Monte Carlo e  $g$  o espaçamento (pulo) entre iterações sucessivas, delineado para eliminar a autocorrelação entre as consecutivas iterações. O período constituído pelas  $l$  primeiras iterações costuma designar-se por período de aquecimento (*burn-in*). Este período pode ser mais ou menos longo e, para contornar este “problema”, há métodos de diagnóstico para verificar se a cadeia se encontra ou não no estado de equilíbrio (Paulino et al., 2003).

Conforme o número de iterações aumenta, a cadeia gradualmente esquece os valores iniciais e, eventualmente, converge para uma distribuição de equilíbrio. Assim, em aplicações práticas, é comum que as iterações iniciais sejam descartadas, como se formassem uma amostra de aquecimento.

Os métodos ou critérios utilizados para diagnosticar, ou seja, para monitorar a convergência, podem ser classificados como informais e formais. Os métodos informais foram inicialmente propostos por Gelfand & Smith (1990). Esses autores sugeriram técnicas gráficas para a verificação da convergência, como, por exemplo, a técnica gráfica que consiste em observar a trajetória da cadeia ao longo das iterações. Se o gráfico, após um período inicial, apresenta repetidamente o mesmo comportamento qualitativo e quantitativo, então, pode-se concluir pela convergência da cadeia (Gamerman, 1997).

Dentre os métodos formais, podem-se citar os seguintes critérios de convergência: Gelman & Rubin (1992), Geweke (1992), Heidelberger & Welch (1983), Raftery & Lewis (1992) e outros mais. Esses métodos e outros foram comparados no trabalho de Cowles & Carlin (1996), que concluíram que não se pode afirmar qual deles é o mais eficiente.

No presente trabalho, a monitoração da convergência das cadeias foi realizada por meio de análise gráfica, critério de Geweke (1992) e critério de Raftery & Lewis (1992). Os critérios de Gelman & Rubin, Raftery & Lewis, Geweke, Heidelberger & Welch e outros estão implementados no pacote BOA, executável no freeware R, conforme R Development Core Team (2004).

### **3.3.1 Critério de Raftery & Lewis**

O critério proposto por Raftery & Lewis (1992) é um método que estima quantas iterações são necessárias para que o amostrador de Gibbs apresente convergência à distribuição estacionária, propondo quantidades necessárias para

isso. O método fornece as estimativas do “burn-in”, que é o número de iterações que devem ser descartadas, o número de iterações que devem ser computadas  $N$  (Total) e a distância mínima de uma iteração à outra, para se obter a subamostra aproximadamente independente (“thin”). Ou seja, o método fornece o tamanho do descarte que deve ser dado para extrair o efeito dos valores iniciais e o salto de uma iteração para a outra, para retirar o efeito de dependência entre os valores amostrados. A regra de decisão do critério de Raftery & Lewis é baseada no fator de dependência. O fator de dependência é responsável pelo acréscimo multiplicativo ao número de iterações necessárias para se alcançar a convergência, devido à autocorrelação dentro da seqüência. De acordo com Raftery & Lewis (1992), se o fator de dependência for maior que 5, pode-se concluir que a cadeia não atingiu convergência.

### 3.3.2 - Critério de Geweke

O critério proposto por Geweke (1992) consiste em indicar a convergência da média  $a$  posteriori da quantidade amostrada,  $g(\theta)$ , em uma única cadeia, isto é, os valores  $g(\theta^{(i)})$  são calculados a cada iteração da simulação, formando uma série temporal. A partir da cadeia, a variância assintótica  $S_g^2(0)$  da medida de  $g(\theta)$  pode ser estimada.

O critério de Geweke consiste nos seguintes passos:

**Passo 1:** divide-se a cadeia de tamanho  $N$  em duas seqüências. A primeira seqüência possui  $N_a$  primeiras iterações e a segunda  $N_b$  restantes iterações. Geweke (1992) sugere que as médias devem ser estimadas após o descarte de algumas iterações iniciais e que sejam considerados  $N_a = 0,1N$  e  $N_b = 0,5N$ .

**Passo 2:** estimam-se as médias  $\hat{g}_a$  e  $\hat{g}_b$  e as variâncias assintóticas  $\hat{S}_{g_a}^2(0)$  e  $\hat{S}_{g_b}^2(0)$ , respectivamente. As variâncias são determinadas pela estimação da densidade espectral.

Pode-se mostrar que, se as razões  $N_a/N$  e  $N_b/N$  são fixas e  $N \rightarrow \infty$ , então:

$$\frac{\hat{g}_a - \hat{g}_b}{\sqrt{\frac{\hat{S}_{g_a}^2(0)}{N_a} + \frac{\hat{S}_{g_b}^2(0)}{N_b}}} \sim N(0,1).$$

Portanto, um teste pode ser construído e se a diferença padronizada entre as médias for muito grande, existe indicação de ausência de convergência. A regra de decisão do critério de Geweke é baseada na estimativa do p-valor. De acordo com Geweke (1992), se o p-valor for menor que um nível de significância adotado pelo pesquisador, conclui-se que a cadeia não atingiu convergência.

### 3.4 Comparação dos modelos não lineares

A comparação dos modelos foi realizada por intermédio do Fator de Bayes e do Critério de Informação Bayesiano (BIC).

#### 3.4.1 Fator de Bayes (FB)

Suponha dois modelos  $M_1$  e  $M_2$ . Segundo Berkhof et al. (2003), Han & Carlin (2001) e Paulino et al. (2003), o Fator de Bayes está formalmente definido como a razão entre as posterioris e as prioris, ou seja,

$$FB_{12} = \frac{[p(M_1|x)/p(M_2|x)]}{[p(M_1)/p(M_2)]} = \frac{p(x|M_1)}{p(x|M_2)}$$

em que  $p(M_i)$  é a probabilidade a priori e  $p(M_i | x) = [p(M_i)p(x | M_i)] / p(x)$  é a probabilidade a posteriori do modelo  $M_i$  com  $i = 1, 2$ . Observe que se as prioris forem iguais, então  $FB_{12}$  é maior que 1 se  $M_1$  apresentar uma probabilidade posteriori maior, ou seja, o modelo 1 é mais plausível ou verossímil do que o modelo 2, então, opta-se por escolher o modelo 1 para predizer o fenômeno em questão.

### 3.4.2 Critério de Informação de Bayesiano (BIC)

De acordo com Carlin & Louis (2000), o Critério de Informação Bayesiano (BIC) pode ser definido da seguinte forma:

$$BIC_i = 2E \{ \ln [L(\theta_i | x, M_i)] \} - p_i \ln(n),$$

em que  $n$  é o tamanho da amostra.

A regra de decisão baseada no BIC consiste na escolha do modelo que apresentar maior valor de  $BIC_i$ .

## 3.5 Posteriori conjunta

### 3.5.1 Posteriori conjunta para o modelo não linear de Stanford & Smith

Para a obtenção da posteriori conjunta (3.5) do modelo não linear de Stanford & Smith (2.1), foram estabelecidas:

i) uma priori não informativa (seção 2.3.2) para os parâmetros  $N_0$  e  $k$ , ou seja,

$$p(N_0, k) \propto w. \quad (3.2)$$

Enquanto que, para a precisão  $\tau_e$ ,  $\tau_e = (\sigma_e^2)^{-1}$ , assume-se como priori:

ii) uma distribuição Gama com parâmetros  $(\alpha_e, \beta_e)$ ,

$$p(\tau_e | \alpha_e, \beta_e) \propto \tau_e^{\alpha_e - 1} \exp \{-\beta_e \tau_e\}. \quad (3.3)$$

Supondo que  $e_i \sim iid N(0, \tau_e^{-1})$ , então, a verossimilhança para o modelo (2.1) pode ser escrita da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
L(y | N_0, k, \tau_e, H) &= \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_e^2}} \exp\left\{-\frac{\tau_e}{2} \{y_i - N_0[1 - \exp(-kt_i)]\}^2\right\} \\
L(y | N_0, k, \tau_e, H) &= \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \tau_e^{1/2} \exp\left\{-\frac{\tau_e}{2} \{y_i - N_0[1 - \exp(-kt_i)]\}^2\right\} \\
L(y | N_0, k, \tau_e, H) &\propto \prod_{i=1}^n \tau_e^{1/2} \exp\left\{-\frac{\tau_e}{2} \{y_i - N_0[1 - \exp(-kt_i)]\}^2\right\} \\
L(y | N_0, k, \tau_e, H) &\propto \tau_e^{n/2} \exp\left\{-\frac{\tau_e}{2} \sum_{i=1}^n \{y_i - N_0[1 - \exp(-kt_i)]\}^2\right\} \quad (3.4)
\end{aligned}$$

em que  $i = 1, \dots, n$ ,  $y = \{y_1, y_2, \dots, y_n\}$  e  $H$  são os hiperparâmetros:  $\alpha_e$  e  $\beta_e$ .

Agora de posse da verossimilhança (3.4), das prioris (3.2) e (3.3) e por intermédio do teorema de Bayes (2.5) a distribuição posteriori conjunta do modelo (2.1) pode ser descrita da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
p(N_0, k, \tau_e | y, H) &\propto L(y | N_0, k, \tau_e, H) p(N_0, k, \tau_e | H) \\
p(N_0, k, \tau_e | y, H) &\propto L(y | N_0, k, \tau_e, H) p(N_0, k) p(\tau_e | H) \\
p(N_0, k, \tau_e | y, H) &\propto \tau_e^{n/2} \exp\left\{-\frac{\tau_e}{2} \sum_{i=1}^n \{y_i - N_0[1 - \exp(-kt_i)]\}^2\right\} \times \\
&\quad \times w \times \tau_e^{\alpha_e - 1} \exp\{-\beta_e \tau_e\} \\
p(N_0, k, \tau_e | y, H) &\propto \tau_e^{\frac{n}{2} + \alpha_e - 1} \times \\
&\quad \times \exp\left\{-\frac{\tau_e}{2} \left[2\beta_e + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \{y_i - N_0[1 - \exp(-kt_i)]\}^2\right]\right\}. \quad (3.5)
\end{aligned}$$

### 3.5.2 Posteriori conjunta para o modelo não linear de Marion

De modo análogo, para a obtenção da posteriori conjunta (3.9) do modelo não linear de Marion (2.2), foi estabelecida:

i) uma priori não informativa para os parâmetros  $N_0$ ,  $k$  e  $b$ ,

$$p(N_0, k, b) \propto v. \quad (3.6)$$

Enquanto que, para a precisão  $\tau_e$ ,  $\tau_e = (\sigma_e^2)^{-1}$ , assume-se como priori:

ii) uma distribuição Gama com parâmetros  $(\alpha_e, \beta_e)$ ,

$$p(\tau_e | \alpha_e, \beta_e) \propto \tau_e^{\alpha_e - 1} \exp\{-\beta_e \tau_e\}. \quad (3.7)$$

Dado que  $e_i \sim iid N(0, \tau_e^{-1})$ , então, a verossimilhança para o modelo

(2.2) pode ser escrita da seguinte forma:

$$\begin{aligned} L(y | N_0, k, b, \tau_e, H) &= \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_e^2}} \exp\left\{-\frac{\tau_e}{2} \left\{y_i - N_0 [1 - \exp(-kt_i^b)]\right\}^2\right\} \\ L(y | N_0, k, b, \tau_e, H) &= \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \tau_e^{1/2} \exp\left\{-\frac{\tau_e}{2} \left\{y_i - N_0 [1 - \exp(-kt_i^b)]\right\}^2\right\} \\ L(y | N_0, k, b, \tau_e, H) &\propto \prod_{i=1}^n \tau_e^{1/2} \exp\left\{-\frac{\tau_e}{2} \left\{y_i - N_0 [1 - \exp(-kt_i^b)]\right\}^2\right\} \\ L(y | N_0, k, b, \tau_e, H) &\propto \tau_e^{n/2} \exp\left\{-\frac{\tau_e}{2} \sum_{i=1}^n \left\{y_i - N_0 [1 - \exp(-kt_i^b)]\right\}^2\right\}. \end{aligned} \quad (3.8)$$

em que  $i = 1, \dots, n$ ,  $y = \{y_1, y_2, \dots, y_n\}$  e  $H$  são os hiperparâmetros:  $\alpha_e$  e  $\beta_e$ .

De posse da verossimilhança (3.8), das prioris (3.6) e (3.7) e por intermédio do teorema de Bayes (2.5), a distribuição posteriori conjunta do modelo (2.2) pode ser descrita da seguinte forma:

$$\begin{aligned} p(N_0, k, b, \tau_e | y, H) &\propto L(y | N_0, k, b, \tau_e, H) p(N_0, k, b, \tau_e | H) \\ p(N_0, k, b, \tau_e | y, H) &\propto L(y | N_0, k, b, \tau_e, H) p(N_0, k, b) p(\tau_e | H) \\ p(N_0, k, b, \tau_e | y, H) &\propto \tau_e^{n/2} \exp\left\{-\frac{\tau_e}{2} \sum_{i=1}^n \left\{y_i - N_0 [1 - \exp(-kt_i^b)]\right\}^2\right\} \times \\ &\quad \times v \times \tau_e^{\alpha_e - 1} \exp\{-\beta_e \tau_e\} \end{aligned}$$

$$p(N_0, k, b, \tau_e | y, H) \propto \tau_e^{\frac{n}{2} + \alpha_e - 1} \mathbf{x} \times \exp \left\{ -\frac{\tau_e}{2} \left[ 2\beta_e + \sum_{i=1}^n \left\{ y_i - N_0 [1 - \exp(-kt_i^b)] \right\}^2 \right] \right\}. \quad (3.9)$$

### 3.5.3 Posteriores conjunta para o modelo não linear de Cabrera

Analogamente, para a obtenção da posteriori conjunta (3.13) do modelo não linear de Cabrera (2.3), foram estabelecidas:

i) uma priori não informativa para os parâmetros  $N_1$ ,  $k_1$  e  $k_0$ ,

$$p(N_1, k_1, k_0) \propto z. \quad (3.10)$$

Para a precisão  $\tau_e$ ,  $\tau_e = (\sigma_e^2)^{-1}$ , assume-se como priori:

ii) uma distribuição Gama com parâmetros  $(\alpha_e, \beta_e)$ ,

$$p(\tau_e | \alpha_e, \beta_e) \propto \tau_e^{\alpha_e - 1} \exp\{-\beta_e \tau_e\}. \quad (3.11)$$

Uma vez que  $e_i \sim iid N(0, \tau_e^{-1})$ , então, a verossimilhança para o modelo (2.3) pode ser escrita da seguinte forma:

$$\begin{aligned} L(y | N_1, k_1, k_0, \tau_e, H) &= \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_e^2}} \exp \left\{ -\frac{\tau_e}{2} \left\{ y_i - N_1 [1 - \exp(-k_1 t_i)] - k_0 t_i \right\}^2 \right\} \\ L(y | N_1, k_1, k_0, \tau_e, H) &= \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \tau_e^{1/2} \exp \left\{ -\frac{\tau_e}{2} \left\{ y_i - N_1 [1 - \exp(-k_1 t_i)] - k_0 t_i \right\}^2 \right\} \\ L(y | N_1, k_1, k_0, \tau_e, H) &\propto \prod_{i=1}^n \tau_e^{1/2} \exp \left\{ -\frac{\tau_e}{2} \left\{ y_i - N_1 [1 - \exp(-k_1 t_i)] - k_0 t_i \right\}^2 \right\} \\ L(y | N_1, k_1, k_0, \tau_e, H) &\propto \tau_e^{n/2} \exp \left\{ -\frac{\tau_e}{2} \sum_{i=1}^n \left\{ y_i - N_1 [1 - \exp(-k_1 t_i)] - k_0 t_i \right\}^2 \right\}. \quad (3.12) \end{aligned}$$

em que  $i = 1, \dots, n$ ,  $y = \{y_1, y_2, \dots, y_n\}$  e  $H$  são os hiperparâmetros:  $\alpha_e$  e  $\beta_e$ .



De posse da verossimilhança (3.12), das prioris (3.10) e (3.11) e por intermédio do teorema de Bayes (2.5), a distribuição posteriori conjunta do modelo (2.3) pode ser descrita como:

$$\begin{aligned}
p(N_1, k_1, k_0, \tau_e | y, H) &\propto L(y | N_1, k_1, k_0, \tau_e, H) p(N_1, k_1, k_0, \tau_e | H) \\
p(N_1, k_1, k_0, \tau_e | y, H) &\propto L(y | N_1, k_1, k_0, \tau_e, H) p(N_1, k_1, k_0) p(\tau_e | H) \\
p(N_1, k_1, k_0, \tau_e | y, H) &\propto \tau_e^{n/2} \exp\left\{-\frac{\tau_e}{2} \sum_{i=1}^n \{y_i - N_1[1 - \exp(-k_1 t_i)] - k_0 t_i\}^2\right\} \mathbf{x} \\
&\quad \times z \mathbf{x} \tau_e^{\alpha_e - 1} \exp\{-\beta_e \tau_e\} \\
p(N_1, k_1, k_0, \tau_e | y, H) &\propto \tau_e^{\frac{n}{2} + \alpha_e - 1} \mathbf{x} \\
&\quad \times \exp\left\{-\frac{\tau_e}{2} \left[2\beta_e + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \{y_i - N_1[1 - \exp(-k_1 t_i)] - k_0 t_i\}^2\right]\right\}. \tag{3.13}
\end{aligned}$$

A estimação dos parâmetros foi feita por meio de rotinas elaboradas no freeware R e, para o procedimento de amostragem, utilizou-se o amostrador de Gibbs e o Metropolis Hastings. No processo, foram geradas 450.000 iterações, considerando-se um “burn-in” de 50.000, isto é, as 50.000 primeiras iterações foram descartadas, e um “thin” a cada 100 iterações para assegurar a independência da amostra. Os modelos não lineares (2.1), (2.2) e (2.3) foram comparados por intermédio do Fator de Bayes e do BIC (Paulino et al., 2003). Dessa forma, obteve-se uma amostra de tamanho 4.000 para cada cadeia (parâmetro). O pacote *Bayesian Output Analysis* (BOA) do Sistema Computacional Estatístico R, conforme R Development Core Team (2004), foi utilizado para realizar inferências sobre os parâmetros dos modelos (2.1), (2.2) e (2.3).

## 4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

### 4.1 Obtenção das posteriores condicionais completas para o modelo de Stanford & Smith

De acordo com a equação (2.7), na seção (2.3.1), a posteriori condicional completa para o parâmetro  $N_0$  do modelo (2.1), segundo a sua posteriori conjunta (3.5), é dada por:

$$p(N_0 | k, \tau_e, y, H) = \frac{p(N_0, k, \tau_e | y, H)}{\int p(N_0, k, \tau_e | y, H) dN_0}$$

$$p(N_0 | k, \tau_e, y, H) \propto \exp \left\{ -\frac{\tau_e}{2} \sum_{i=1}^n \{y_i - N_0 [1 - \exp(-kt_i)]\}^2 \right\}. \quad (4.1)$$

Considerando-se  $a_i = 1 - \exp(kt_i)$  e  $a$  como vetor dos elementos  $a_i$  para o tempo  $i$ , com  $i = 1, 2, \dots, n$  e  $y = \{y_1, y_2, \dots, y_n\}$  pode-se definir (4.1) como:

$$\begin{aligned} p(N_0 | k, \tau_e, y, H) &\propto \exp \left\{ -\frac{\tau_e}{2} (y - N_0 a)' (y - N_0 a) \right\} \\ &\propto \exp \left\{ -\frac{\tau_e}{2} [y' y - y' N_0 a - a' N_0' y + a' N_0' N_0 a] \right\} \\ &\propto \exp \left\{ -\frac{\tau_e}{2} [y' y - y' N_0 a - a' N_0 y + N_0^2 a' a] \right\} \\ &\propto \exp \left\{ -\frac{\tau_e}{2} [N_0 - (a' a)^{-1} a' y]' (a' a) [N_0 - (a' a)^{-1} a' y] \right\} \end{aligned}$$

que é o núcleo de uma distribuição normal. Portanto, a posteriori condicional completa para  $N_0$  é uma normal, ou seja,

$$(N_0 | k, \tau_e, y, H) \sim N \left( (a' a)^{-1} a' y, \tau_e (a' a)^{-1} \right), \quad (4.2)$$

em que

$$a'a = \sum_i [1 - \exp(-kt_i)]^2 \quad \text{e} \quad (a'a)^{-1}a'y = \frac{\sum_i [1 - \exp(-kt_i)]y_i}{\sum_i [1 - \exp(-kt_i)]^2}.$$

Logo, a posteriori condicional completa para  $N_0$  pode ser reescrita da seguinte forma:

$$(N_0 | k, \tau_e, y, H) \sim N \left( \frac{\sum_i [1 - \exp(-kt_i)]y_i}{\sum_i [1 - \exp(-kt_i)]^2}, \frac{\tau_e}{\sum_i [1 - \exp(-kt_i)]^2} \right). \quad (4.3)$$

Portanto, neste caso, utiliza-se o amostrador de Gibbs, pois a distribuição (4.3) possui uma forma fechada, ou seja, a distribuição a posteriori condicional (4.3) é conhecida.

Agora, a posteriori condicional completa para o parâmetro  $k$  do modelo (2.1) segundo a sua posteriori conjunta (3.5) com base na equação (2.7), é:

$$p(k | N_0, \tau_e, y, H) = \frac{p(N_0, k, \tau_e | y, H)}{\int p(N_0, k, \tau_e | y, H) dk}$$

$$p(k | N_0, \tau_e, y, H) \propto \exp \left\{ -\frac{\tau_e}{2} \sum_{i=1}^n \{y_i - N_0 [1 - \exp(-kt_i)]\}^2 \right\}. \quad (4.4)$$

A distribuição (4.4) não possui uma forma fechada, então, para o parâmetro  $k$ , não é possível chegar a uma distribuição posteriori condicional conhecida e, portanto, é necessário se utilizar o algoritmo de Metropolis-Hastings para se amostrar desta distribuição.

Analogamente, baseando-se na equação (2.7), a condicional completa para o parâmetro  $\tau_e$  do modelo (2.1), segundo a sua posteriori conjunta (3.5), é:

$$p(\tau_e | N_0, k, y, H) = \frac{p(N_0, k, \tau_e | y, H)}{\int p(N_0, k, \tau_e | y, H) d\tau_e}$$

$$p(\tau_e | N_0, k, y, H) \propto \tau_e^{\frac{n}{2} + \alpha_e - 1} \mathbf{x} \exp \left\{ -\frac{\tau_e}{2} \left[ 2\beta_e + \sum_{i=1}^n \{y_i - N_0 [1 - \exp(-kt_i)]\}^2 \right] \right\}. \quad (4.5)$$

Por inspeção e comparação com a distribuição Gama, tem-se:

$$\alpha_e^* = \frac{n}{2} + \alpha_e \text{ e } \beta_e^* = \beta_e + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \{y_i - N_0 [1 - \exp(-kt_i)]\}^2.$$

Logo, a distribuição a posteriori condicional completa para  $\tau_e$  é uma Gama, ou seja,

$$(\tau_e | N_0, k, y, H) \sim G \left( \alpha_e^* = \frac{n}{2} + \alpha_e, \beta_e^* = \beta_e + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \{y_i - N_0 [1 - \exp(-kt_i)]\}^2 \right). \quad (4.6)$$

Portanto, neste caso, utiliza-se o amostrador de Gibbs, pois a distribuição (4.6) possui uma forma fechada, ou seja, a distribuição a posteriori condicional (4.6) é conhecida.

#### 4.2 Obtenção das posteriores condicionais completas para o modelo de Marion

Utilizando a mesma linha de raciocínio apresentada anteriormente para o modelo (2.1), a posteriori condicional completa para o parâmetro  $N_0$  do modelo (2.2), segundo a sua posteriori conjunta (3.9), baseado na equação (2.7), é dada por:

$$p(N_0 | k, b, \tau_e, y, H) = \frac{p(N_0, k, b, \tau_e | y, H)}{\int p(N_0, k, b, \tau_e | y, H) dN_0}$$

$$p(N_0 | k, b, \tau_e, y, H) \propto \exp \left\{ -\frac{\tau_e}{2} \sum_{i=1}^n \{y_i - N_0 [1 - \exp(-kt_i^b)]\}^2 \right\}. \quad (4.7)$$

Considerando-se  $c_i = 1 - \exp(-kt_i^b)$  e  $c$  como vetor dos elementos  $c_i$  para o tempo  $i$ , com  $i=1,2,\dots,n$  e  $y = \{y_1, y_2, \dots, y_n\}$ , pode-se definir (4.7) como:

$$\begin{aligned} p(N_0 | k, b, \tau_e, y, H) &\propto \exp\left\{-\frac{\tau_e}{2}(y - N_0 c)'(y - N_0 c)\right\} \\ &\propto \exp\left\{-\frac{\tau_e}{2}[y' y - y' N_0 c - c' N_0 y + c' N_0' N_0 c]\right\} \\ &\propto \exp\left\{-\frac{\tau_e}{2}[y' y - y' N_0 c - c' N_0 y + N_0^2 c' c]\right\} \\ &\propto \exp\left\{-\frac{\tau_e}{2}[N_0 - (c' c)^{-1} c' y]'(c' c)[N_0 - (c' c)^{-1} c' y]\right\} \end{aligned}$$

que é o núcleo de uma distribuição normal. Portanto, a posteriori condicional completa para  $N_0$  é uma normal, ou seja,

$$(N_0 | k, b, \tau_e, y, H) \sim N\left((c' c)^{-1} c' y, \tau_e (c' c)^{-1}\right), \quad (4.8)$$

em que

$$c' c = \sum_i [1 - \exp(-kt_i^b)]^2 \quad \text{e} \quad (c' c)^{-1} c' y = \frac{\sum_i [1 - \exp(-kt_i^b)] y_i}{\sum_i [1 - \exp(-kt_i^b)]^2}.$$

Assim, a distribuição posteriori condicional completa para  $N_0$  do modelo (2.2) é uma normal, ou seja,

$$(N_0 | k, b, \tau_e, y, H) \sim N\left(\frac{\sum_i [1 - \exp(-kt_i^b)] y_i}{\sum_i [1 - \exp(-kt_i^b)]^2}, \frac{\tau_e}{\sum_i [1 - \exp(-kt_i^b)]^2}\right). \quad (4.9)$$

Portanto, neste caso utiliza-se o amostrador de Gibbs, pois a distribuição (4.9) possui uma forma fechada, ou seja, a distribuição a posteriori condicional (4.9) é conhecida.

As posteriores condicionais completas dos parâmetros  $k$  e  $b$  do modelo (2.2), segundo a sua posteriori conjunta (3.9) por meio da equação (2.7), são, respectivamente:

$$p(k | N_0, b, \tau_e, y, H) = \frac{p(N_0, k, b, \tau_e | y, H)}{\int p(N_0, k, b, \tau_e | y, H) dk}$$

$$p(k | N_0, b, \tau_e, y, H) \propto \exp\left\{-\frac{\tau_e}{2} \sum_{i=1}^n \left\{y_i - N_0 [1 - \exp(-kt_i^b)]\right\}^2\right\}, \quad (4.10)$$

$$p(b | N_0, k, \tau_e, y, H) = \frac{p(N_0, k, b, \tau_e | y, H)}{\int p(N_0, k, b, \tau_e | y, H) db}$$

$$p(b | N_0, k, \tau_e, y, H) \propto \exp\left\{-\frac{\tau_e}{2} \sum_{i=1}^n \left\{y_i - N_0 [1 - \exp(-kt_i^b)]\right\}^2\right\}. \quad (4.11)$$

As distribuições (4.10) e (4.11) não possuem formas fechadas então não é possível chegar a uma distribuição condicional conhecida para os parâmetros  $k$  e  $b$  e, portanto, é necessário utilizar o algoritmo de Metropolis-Hastings para se amostrar destas distribuições.

Novamente, por intermédio da equação (2.7), a posteriori condicional completa para o parâmetro  $\tau_e$  do modelo (2.2), segundo a sua posteriori conjunta (3.9), é:

$$p(\tau_e | N_0, k, b, y, H) = \frac{p(N_0, k, b, \tau_e | y, H)}{\int p(N_0, k, b, \tau_e | y, H) d\tau_e}$$

$$p(\tau_e | N_0, k, b, y, H) \propto \tau_e^{\frac{n}{2} + \alpha_e - 1} \times \exp\left\{-\frac{\tau_e}{2} \left[2\beta_e + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \left\{y_i - N_0 [1 - \exp(-kt_i^b)]\right\}^2\right]\right\}. \quad (4.12)$$

Por inspeção e comparação com a distribuição Gama, tem-se:

$$\alpha_e^{**} = \frac{n}{2} + \alpha_e \text{ e } \beta_e^{**} = \beta_e + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \left\{y_i - N_0 [1 - \exp(-kt_i^b)]\right\}^2.$$

Sendo assim, a distribuição posteriori condicional completa para  $\tau_e$  é uma Gama, ou seja,

$$(\tau_e | N_0, k, b, y, H) \sim G\left(\alpha_e^{**} = \frac{n}{2} + \alpha_e, \beta_e^{**} = \beta_e + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \{y_i - N_0 [1 - \exp(-kt_i^b)]\}^2\right). \quad (4.13)$$

Portanto, neste caso, utiliza-se o amostrador de Gibbs, pois a distribuição (4.13) possui uma forma fechada, ou seja, a distribuição a posteriori condicional (4.13) é conhecida.

### 4.3 Obtenção das posterioris condicionais completas para o modelo de Cabrera

Por meio da equação (2.7), a posteriori condicional completa para o parâmetro  $N_1$  do modelo (2.3), segundo a sua posteriori conjunta (3.13), é dada por:

$$p(N_1 | k_1, k_0, \tau_e, y, H) = \frac{p(N_1, k_1, k_0, \tau_e | y, H)}{\int p(N_1, k_1, k_0, \tau_e | y, H) dN_1}$$

$$p(N_1 | k_1, k_0, \tau_e, y, H) \propto \exp\left\{-\frac{\tau_e}{2} \sum_{i=1}^n \{y_i - N_1 [1 - \exp(-k_1 t_i)] - k_0 t_i\}^2\right\}. \quad (4.14)$$

Considerando-se  $y = \{y_1, y_2, \dots, y_n\}$ ,  $y_i^* = y_i - k_0 t_i$ ,  $y^*$  como vetor dos elementos  $y_i^*$ ,  $d_i = 1 - \exp(k_1 t_i)$  e  $d$  como vetor dos elementos  $d_i$  para o tempo  $i$ , com  $i = 1, 2, \dots, n$  pode-se definir (4.14) como:

$$p(N_1 | k_1, k_0, \tau_e, y, H) \propto \exp\left\{-\frac{\tau_e}{2} (y^* - N_1 d)' (y^* - N_1 d)\right\}$$

$$\propto \exp\left\{-\frac{\tau_e}{2} [y^{*'} y^* - y^{*'} N_1 d - d' N_1 y^* + d' N_1' N_1 d]\right\}$$

$$\propto \exp\left\{-\frac{\tau_e}{2} [y^{*'} y^* - y^{*'} N_1 d - d' N_1 y^* + N_1^2 d' d]\right\}$$

$$p(N_1 | k_1, k_0, \tau_e, y, H) \propto \exp \left\{ -\frac{\tau_e}{2} \left[ N_1 - (d'd)^{-1} d'y^* \right]' (d'd) \left[ N_1 - (d'd)^{-1} d'y^* \right] \right\}$$

que é o núcleo de uma distribuição normal. Portanto, a posteriori condicional completa para  $N_1$  é uma normal, ou seja,

$$(N_1 | k_1, k_0, \tau_e, y, H) \sim N \left( (d'd)^{-1} d'y^*, \tau_e (d'd)^{-1} \right), \quad (4.15)$$

em que

$$d'd = \sum_i [1 - \exp(-k_1 t_i)]^2 \quad \text{e} \quad (d'd)^{-1} d'y^* = \frac{\sum_i [1 - \exp(-k_1 t_i)] (y_i - k_0 t_i)}{\sum_i [1 - \exp(-k_1 t_i)]^2}.$$

De acordo com (4.15), a distribuição posteriori condicional completa para  $N_1$  do modelo (2.3) pode ser reescrita como:

$$(N_1 | k_1, k_0, \tau_e, y, H) \sim N \left( \frac{\sum_i [1 - \exp(-k_1 t_i)] (y_i - k_0 t_i)}{\sum_i [1 - \exp(-k_1 t_i)]^2}, \frac{\tau_e}{\sum_i [1 - \exp(-k_1 t_i)]^2} \right). \quad (4.16)$$

Portanto, neste caso, utiliza-se o amostrador de Gibbs, pois a distribuição (4.16) possui uma forma fechada, ou seja, a distribuição a posteriori condicional (4.16) é conhecida.

Baseando-se, novamente, na equação (2.7), a posteriori condicional completa para o parâmetro  $k_1$  do modelo (2.3), segundo a sua posteriori conjunta (3.13), é dada por:

$$p(k_1 | N_1, k_0, \tau_e, y, H) = \frac{p(N_1, k_1, k_0, \tau_e | y, H)}{\int p(N_1, k_1, k_0, \tau_e | y, H) dk_1}$$

$$p(k_1 | N_1, k_0, \tau_e, y, H) \propto \exp \left\{ -\frac{\tau_e}{2} \sum_{i=1}^n \left\{ y_i - N_1 [1 - \exp(-k_1 t_i)] - k_0 t_i \right\}^2 \right\}. \quad (4.17)$$

A distribuição (4.17) não possui uma forma fechada, então, para o parâmetro  $k_1$  não é possível chegar a uma distribuição condicional conhecida e,



portanto, é necessário se utilizar o algoritmo de Metropolis-Hastings para se amostrar desta distribuição.

Analogamente, com base na equação (2.7), a posteriori condicional completa para o parâmetro  $k_0$  do modelo (2.3), segundo a sua posteriori conjunta (3.13), é dada por:

$$p(k_0 | N_1, k_1, \tau_e, y, H) = \frac{p(N_1, k_1, k_0, \tau_e | y, H)}{\int p(N_1, k_1, k_0, \tau_e | y, H) dk_0}$$

$$p(k_0 | N_1, k_1, \tau_e, y, H) \propto \exp \left\{ -\frac{\tau_e}{2} \sum_{i=1}^n \{y_i - N_1[1 - \exp(-k_1 t_i)] - k_0 t_i\}^2 \right\}. \quad (4.18)$$

Considerando-se  $y = \{y_1, y_2, \dots, y_n\}$ ,  $y_i^* = y_i - N_1[1 - \exp(-k_1 t_i)]$ ,  $y^*$  como vetor dos elementos  $y_i^*$  e  $t$  como um vetor dos tempos, pode-se definir (4.18) como:

$$\begin{aligned} p(k_0 | N_1, k_1, \tau_e, y, H) &\propto \exp \left\{ -\frac{\tau_e}{2} (y^* - k_0 t)' (y^* - k_0 t) \right\} \\ &\propto \exp \left\{ -\frac{\tau_e}{2} [y^{*'} y^* - y^{*'} k_0 t - t' k_0 y^* + t' k_0' k_0 t] \right\} \\ &\propto \exp \left\{ -\frac{\tau_e}{2} [y^{*'} y^* - y^{*'} k_0 t - t' k_0 y^* + k_0^2 t' t] \right\} \\ &\propto \exp \left\{ -\frac{\tau_e}{2} [k_0 - (t' t)^{-1} t' y^*]' (t' t) [k_0 - (t' t)^{-1} t' y^*] \right\} \end{aligned}$$

que é o núcleo de uma distribuição normal. Portanto, a posteriori condicional completa para  $k_0$  é uma normal, ou seja,

$$(k_0 | k_1, N_1, \tau_e, y, H) \sim N \left( (t' t)^{-1} t' y^*, \tau_e (t' t)^{-1} \right), \quad (4.19)$$

em que

$$t' t = \sum_i t_i^2 \quad \text{e} \quad (t' t)^{-1} t' y^* = \frac{\sum_i t_i \{y_i - N_1[1 - \exp(-k_1 t_i)]\}}{\sum_i t_i^2}.$$

Logo, a distribuição posteriori condicional completa para  $k_0$  pode ser reescrita como:

$$(k_0 | N_1, k_1, \tau_e, y, H) \sim N \left( \frac{\sum_i t_i \{y_i - N_1 [1 - \exp(-k_1 t_i)]\}}{\sum_i t_i^2}, \frac{\tau_e}{\sum_i t_i^2} \right). \quad (4.20)$$

Portanto, neste caso utiliza-se o amostrador de Gibbs, pois a distribuição (4.20) possui uma forma fechada, ou seja, a distribuição a posteriori condicional (4.20) é conhecida.

Analogamente, com base na equação (2.7), a condicional completa para o parâmetro  $\tau_e$  do modelo (2.3), segundo a sua posteriori conjunta (3.13), é:

$$p(\tau_e | N_1, k_1, k_0, y, H) = \frac{p(N_1, k_1, k_0, \tau_e | y, H)}{\int p(N_1, k_1, k_0, \tau_e | y, H) d\tau_e}$$

$$p(\tau_e | N_1, k_1, k_0, y, H) \propto \tau_e^{\frac{n}{2} + \alpha_e - 1} \times \exp \left\{ -\frac{\tau_e}{2} \left[ 2\beta_e + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \{y_i - N_1 [1 - \exp(-k_1 t_i)] - k_0 t_i\}^2 \right] \right\}. \quad (4.21)$$

Por inspeção e comparação com a distribuição Gama tem-se:

$$\alpha_e^{***} = \frac{n}{2} + \alpha_e \text{ e } \beta_e^{***} = \beta_e + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \{y_i - N_1 [1 - \exp(-k_1 t_i)] - k_0 t_i\}^2.$$

Logo, a distribuição posteriori condicional completa para  $\tau_e$  é uma Gama, ou seja,

$$(\tau_e | N_1, k_1, k_0, y, H) \sim G \left( \alpha_e^{***} = \frac{n}{2} + \alpha_e, \beta_e^{***} = \beta_e + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \{y_i - N_1 [1 - \exp(-k_1 t_i)] - k_0 t_i\}^2 \right). \quad (4.22)$$

Portanto, neste caso, utiliza-se o amostrador de Gibbs, pois a distribuição (4.22) possui uma forma fechada, ou seja, a distribuição a posteriori condicional (4.22) é conhecida.

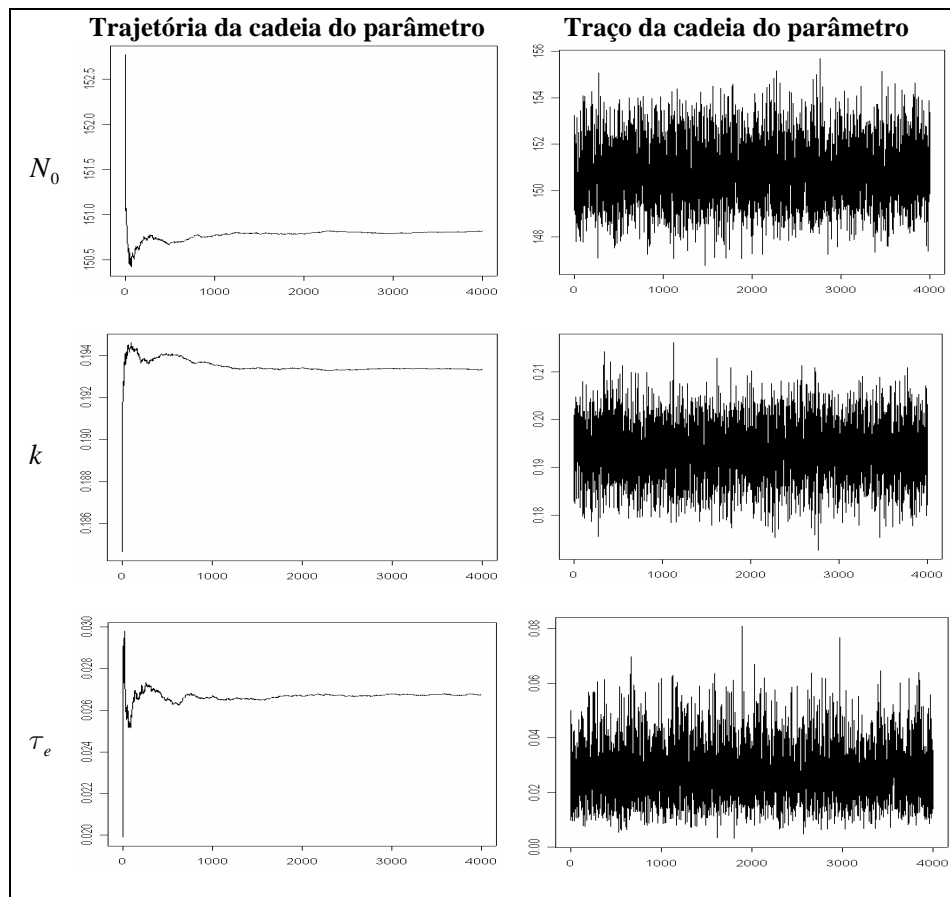
#### 4.4 Análise dos dados

No presente trabalho, a monitoração da convergência das cadeias foi realizada por meio de métodos formais e informais (seção 3.3). A monitoração formal foi realizada por meio do critério de Geweke e do critério de Raftery & Lewis. Para o critério de Geweke, existirão evidências contra a convergência da cadeia, se o p-valor estimado for menor que um nível de significância pré-fixado pelo pesquisador, enquanto que, no critério de Raftery & Lewis, caracterizam como não convergência da cadeia se o fator de dependência (FD) apresentar valor maior que “cinco”. Com base na Tabela 1, pode-se verificar que o critério de Geweke não apresentou nenhuma evidência contra a convergência dos parâmetros dos modelos, a 5% e, com relação ao critério de Raftery & Lewis observa-se que os fatores de dependência para cada parâmetro dos modelos são inferiores a “cinco”, o que caracteriza a convergência das cadeias. Portanto, os modelos (2.1). (2.2) e (2.3) convergiram.

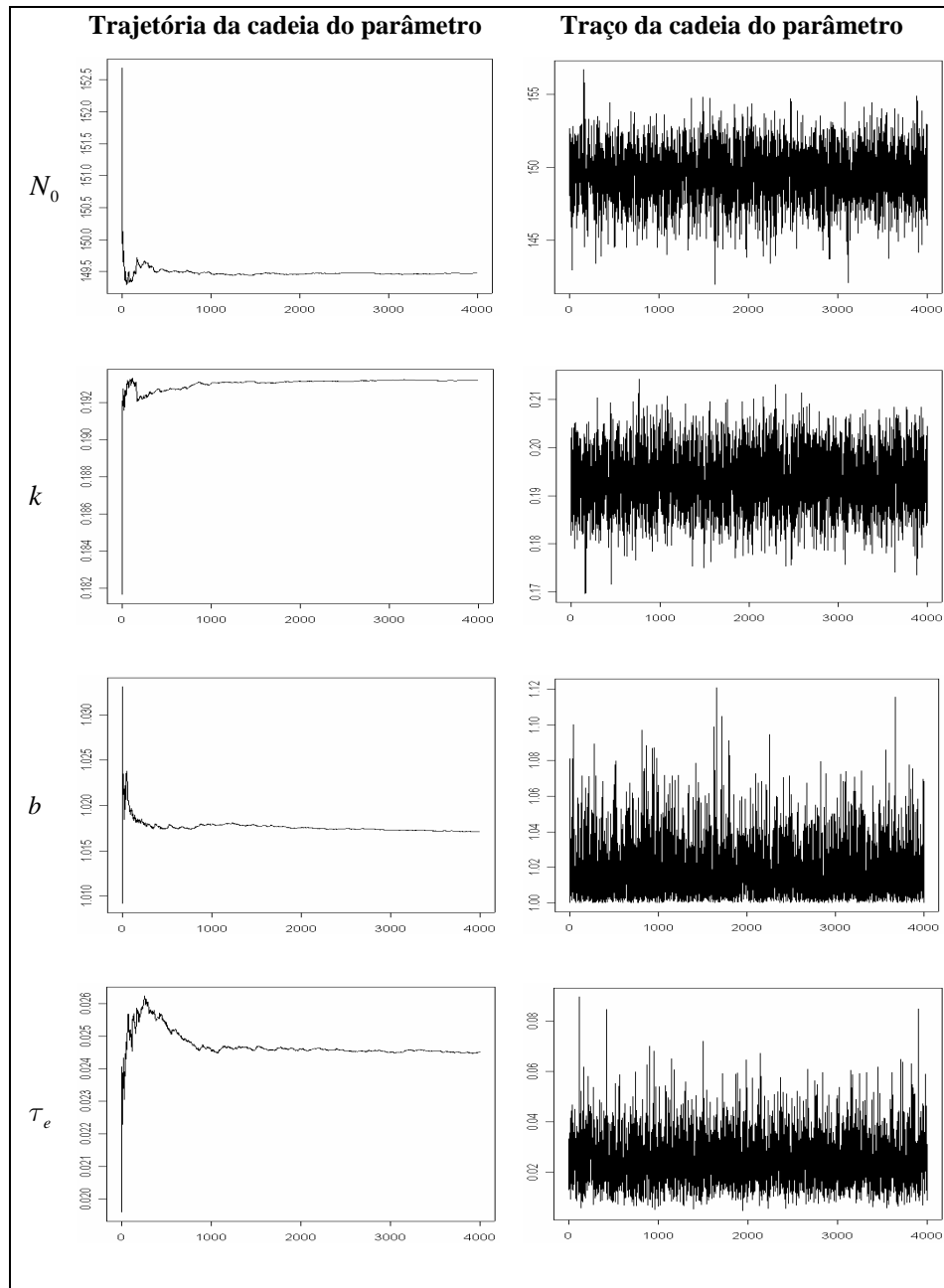
**TABELA 1** – Fator de dependência do critério de Raftery & Lewis (FD) e p-valor do critério de Geweke dos modelos (2.1), (2.2) e (2.3).

Modelo	Parâmetro	FD	Geweke p-valor
Stanford & Smith	$N_0$	1,0109	0,0636
	$k$	1,0534	0,9899
	$\tau_e$	0,9907	0,9982
Marion	$N_0$	1,0109	0,9565
	$k$	2,5056	0,9925
	$b$	1,0320	0,9845
	$\tau_e$	0,9907	0,9834
Cabrera	$N_1$	1,1439	0,8953
	$k_1$	0,9704	0,9991
	$k_0$	1,0109	0,9552

A monitoração informal da convergência da cadeia de cada parâmetro dos modelos (2.1), (2.2) e (2.3) se realizou por meio de técnicas gráficas baseadas nas trajetórias (*Running Mean*) e traços das cadeias. Analisando-se as Figuras 2, 3 e 4, verifica-se que todas as cadeias convergiram, pois, ao observar-se a trajetória das cadeias ao longo das iterações, verifica-se que os gráficos, após um período inicial, apresentam, repetidamente, o mesmo comportamento qualitativo e quantitativo. Nas Figuras 2, 3 e 4, por intermédio do traço, observa-se que as cadeias se encontram num estado de equilíbrio, ou seja, as cadeias convergiram. Portanto, os modelos (2.1), (2.2) e (2.3) atingiram a convergência.

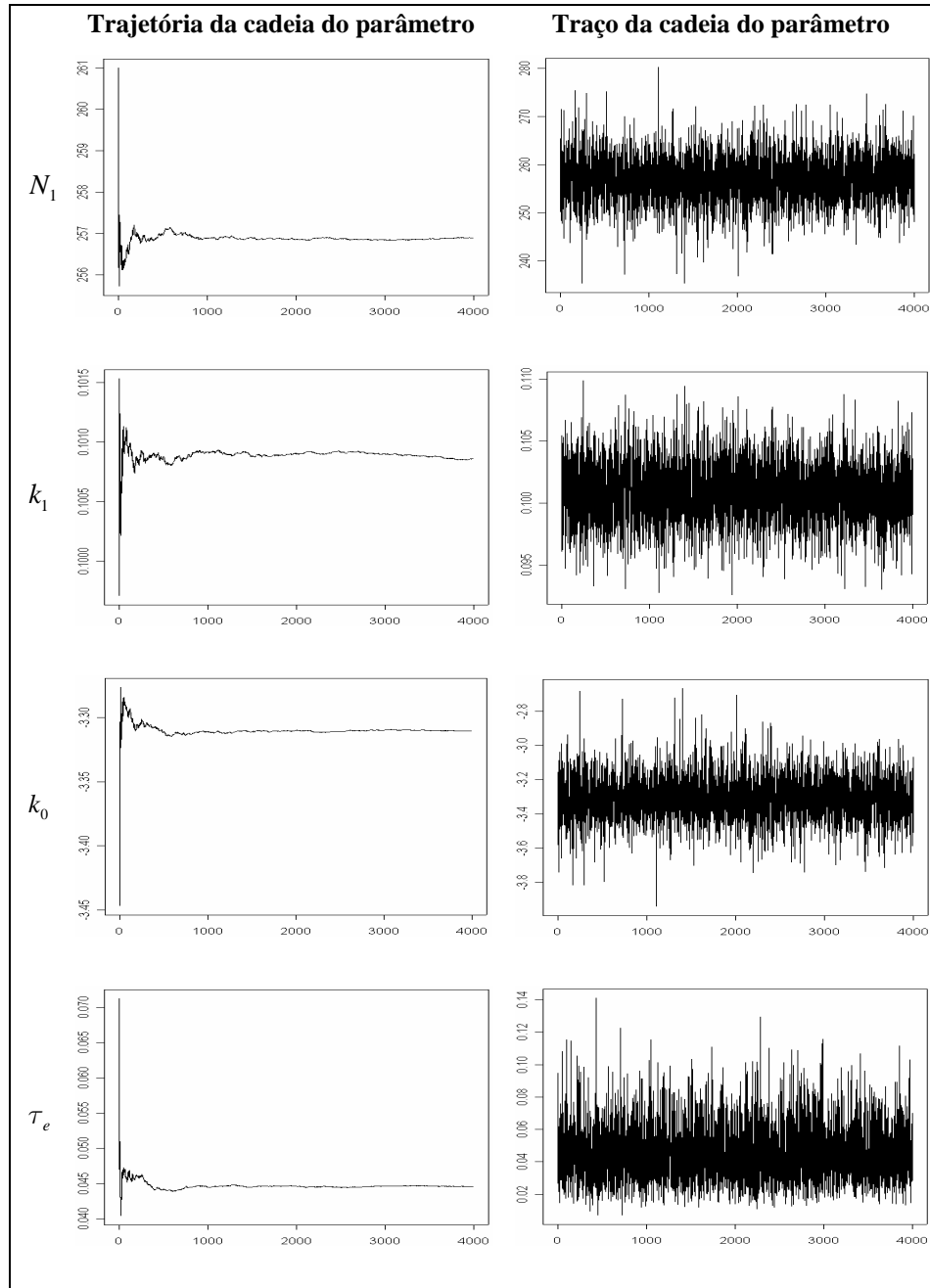


**FIGURA 2:** Trajetórias e traços das cadeias dos parâmetros  $N_0, k$  e  $\tau_e$  do modelo de Stanford & Smith.



**FIGURA 3:** Trajetórias e traços das cadeias dos parâmetros  $N_0, k, b$  e  $\tau_e$  do

modelo de Marion.



**FIGURA 4:** Trajetórias e traços das cadeias dos parâmetros  $N_1, k_1, k_0$  e  $\tau_e$  do modelo de Cabrera.

Os resultados descritivos das posteriores obtidos no processo de ajuste dos modelos não lineares estão apresentados na Tabela 2. De acordo com a Tabela 2, pode-se afirmar que as estimativas dos intervalos HPD mostraram-se adequadas ao ajuste dos modelos, pois foram obtidas a partir da distribuição empírica dos parâmetros. Observa-se também que todos os parâmetros dos modelos (2.1), (2.2) e (2.3) foram significativos, pois seus respectivos intervalos HPD não continham o valor zero em sua extensão. Pode-se notar, ainda, que os erros de Monte Carlo apresentaram valores baixos, confirmando a boa qualidade das estimativas dos parâmetros.

**TABELA 2** – Média e desvio padrão a posteriori dos parâmetros (Par.) dos modelos (2.1), (2.2) e (2.3), com seus respectivos intervalos HPD 95%, erro de Monte Carlo (Erro MC).

Modelo	Par.	Média posteriori	HPD 95%		Desvio padrão	Erro MC
			LI	LS		
Stanford & Smith	$N_0$	150,8158	148,2554	153,5245	1,3606	0,01953957
	$k$	0,1933	0,1806	0,2046	0,0062	0,01581145
	$\tau_e$	0,0267	0,0093	0,0486	0,0106	0,01581159
Marion	$N_0$	149,4726	145,8477	152,8670	1,7807	0,02470511
	$k$	0,1932	0,1812	0,2052	0,0062	0,01581146
	$b$	1,0171	1,0000	1,0497	0,0158	0,01581183
	$\tau_e$	0,0245	0,0075	0,0435	0,0101	0,01581158
Cabrera	$N_1$	256,8945	247,5555	265,7531	4,6515	0,2484605
	$k_1$	0,1009	0,0963	0,1057	0,0024	0,0158114
	$k_0$	-3,3107	-3,5531	-3,0576	0,1241	0,01584023
	$\tau_e$	0,0446	0,0141	0,0776	0,0173	0,01581184

Os resultados da comparação dos modelos por meio do Fator de Bayes encontram-se na Tabela 3. Se o Fator de Bayes for maior que 1, o modelo 1 é mais plausível ou verossímil do que o modelo 2, então, opta-se por escolher o modelo 1 para prever o fenômeno em questão. Por intermédio do Fator de

Bayes (Tabela 3), compararam-se os modelos de Stanford & Smith vs Cabrera e Marion vs Cabrera os resultados foram, 0,0507 e 0,0307, respectivamente. Com isso, pode-se afirmar que o modelo de Cabrera se mostrou melhor que os demais no ajuste aos dados. O Fator de Bayes para a comparação Stanford & Smith vs Marion apresentou resultado de 1,6504, isto é, o modelo de Stanford & Smith é mais plausível ou verossímil que o modelo de Marion. Portanto, o modelo que melhor se ajustou aos dados de mineralização de nitrogênio foi o modelo de Cabrera, seguido pelo modelo de Stanford & Smith e, por último, o de Marion.

**TABELA 3** – Fator de Bayes (FB) dos modelos (2.1), (2.2) e (2.3).

Modelos confrontados	FB
Stanford & Smith vs Marion	1,6504
Stanford & Smith vs Cabrera	0,0507
Marion vs Cabrera	0,0307

A comparação de modelos, por meio do BIC consiste na escolha do modelo que apresentar o maior valor de BIC. Portanto, com base nos resultados apresentados na Tabela 4, o modelo que melhor se ajustou ao conjunto de dados de mineralização do nitrogênio foi o modelo de Cabrera, seguido pelo modelo de Stanford & Smith e, por último, o de Marion.

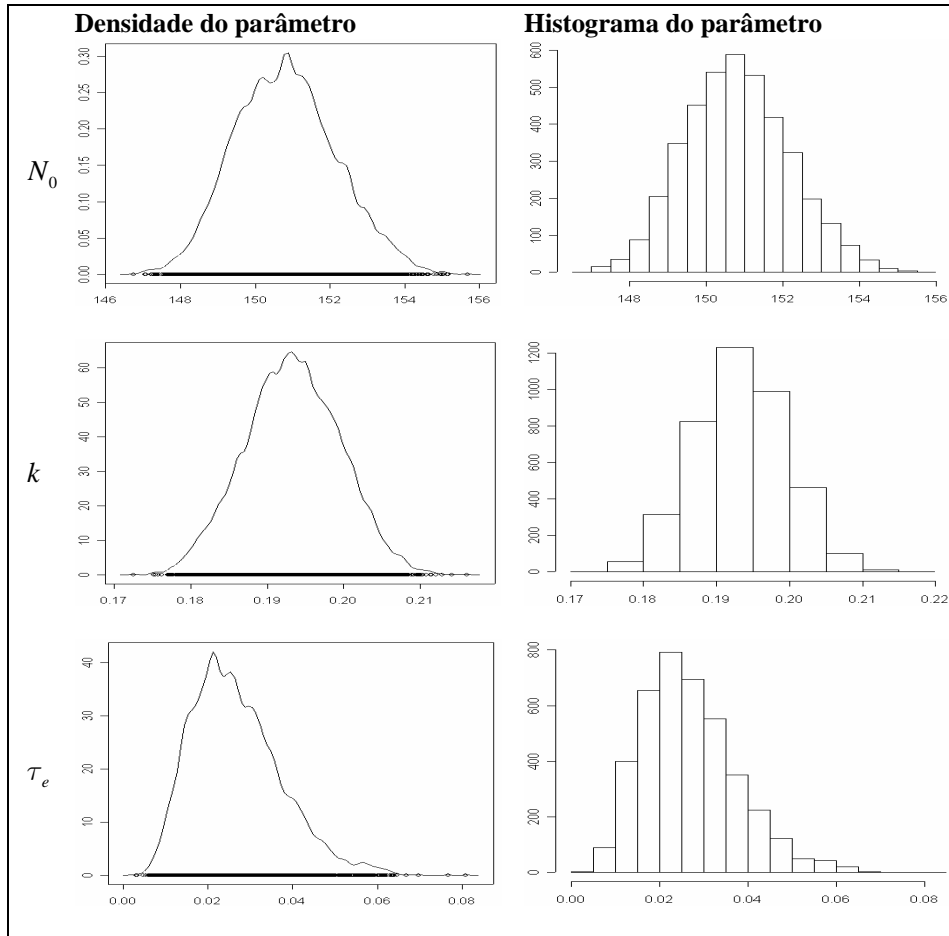
**TABELA 4** – Critério de Informação Bayesiano (BIC) dos modelos (2.1), (2.2) e (2.3).

Modelos	BIC
Stanford & Smith	-58,77588
Marion	-62,17582
Cabrera	-55,20933

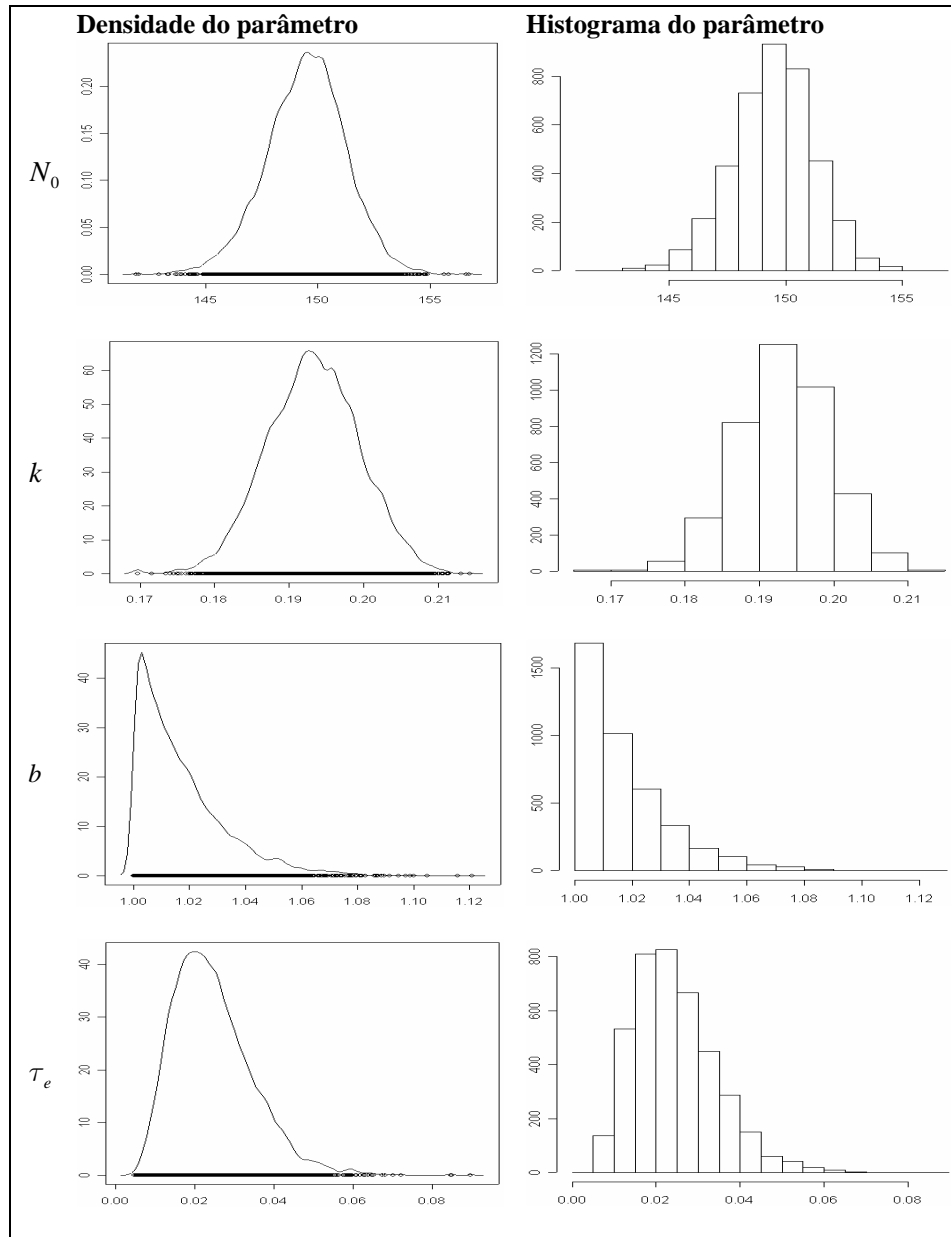
Nas Figuras 5, 6 e 7 são apresentados, respectivamente, as densidades e os histogramas dos parâmetros dos modelos (2.1), (2.2) e (2.3). Com base na simetria das densidades e dos histogramas podem-se propor novas prioris para



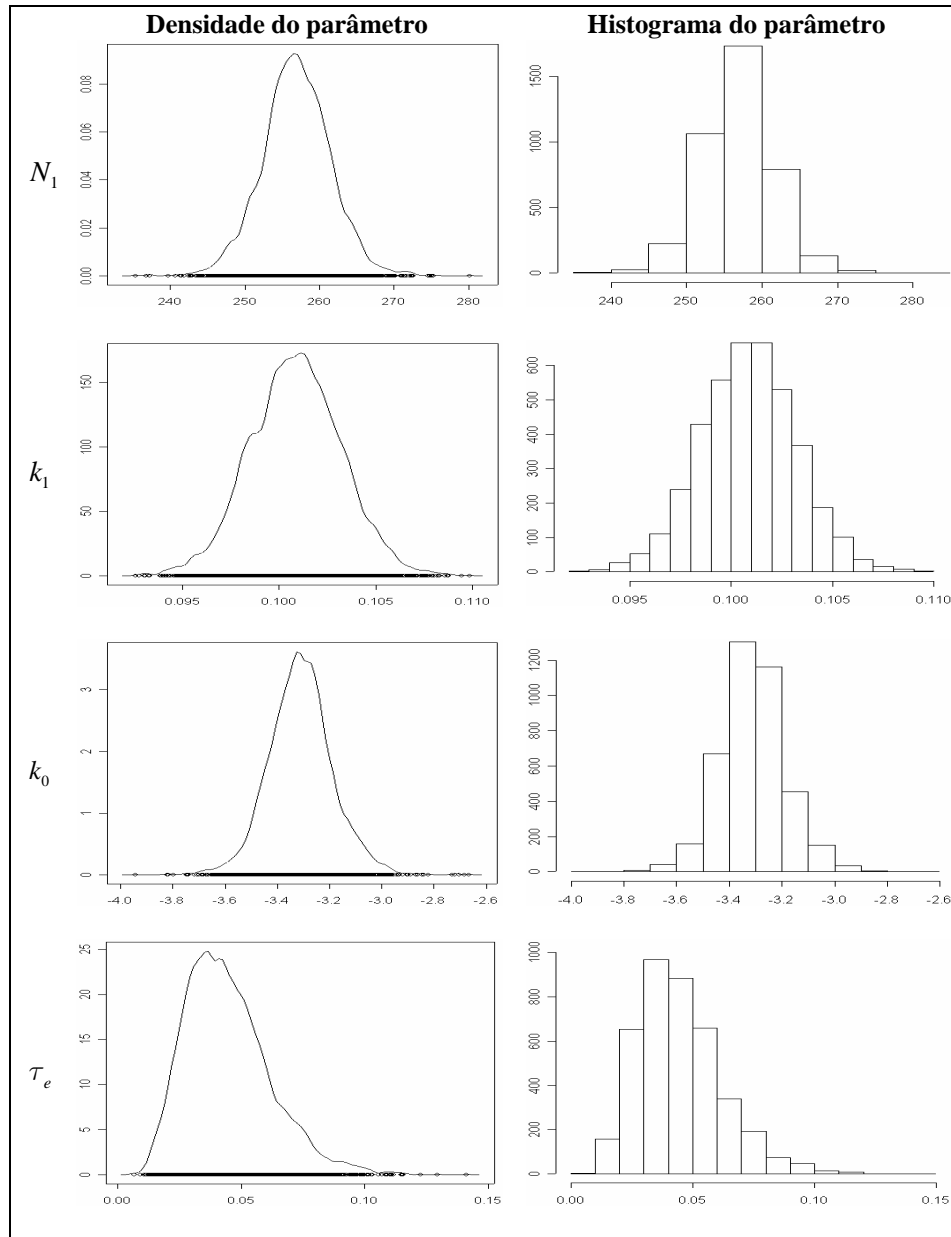
estudos futuros. Para os histogramas e densidades simétricas pode-se sugerir a distribuição Normal ou a distribuição t de Student e, para as assimétricas poderia-se propor a distribuição Gama.



**FIGURA 5:** Densidades e histogramas dos parâmetros  $N_0, k$  e  $\tau_e$  do modelo de Stanford & Smith.



**FIGURA 6:** Densidades e histogramas dos parâmetros  $N_0, k, b$  e  $\tau_e$  do modelo de Marion.



**FIGURA 7:** Densidades e histogramas dos parâmetros  $N_1, k_1, k_0$  e  $\tau_e$  do modelo de Cabrera.

Outro aspecto de grande importância relacionado ao algoritmo de Metropolis Hastings é a taxa de aceitação, estimada em 0,44 para todos os modelos que, de acordo com Gelman et al. (2003), deve ser em torno de 0,23 e 0,44, dependendo do número de parâmetros.

Do ponto de vista prático, podem-se prever as quantidades de N mineralizadas ao longo do tempo, em solos sob diferentes sistemas de manejo, com o objetivo de levantar informação sobre o índice de mineralização de solos representativos de uma região qualquer. Todas essas informações são importantes para definir com maior precisão a quantidade de adubos nitrogenados e orgânicos, de modo a obter produtividades maiores das culturas e aumentar a eficiência de uso de  $\text{N-NO}_3^-$  (nitrato) e  $\text{N-NH}_4^+$  (amônia) no solo. Isso implica na possibilidade de se evitar a contaminação dos mananciais com resíduos de  $\text{N-NO}_3^-$  e  $\text{N-NH}_4^+$ , uma vez que, em excesso (acima de 10 e 0,02  $\text{mgL}^{-1}$ , respectivamente), essas formas de nitrogênio causam danos à saúde dos homens e dos animais.

A precisão na predição de N potencialmente mineralizável, de fato, representa uma maior possibilidade de se definir com precisão a dose de N a ser adicionado ao solo para as culturas. Isso implica em economia, uso racional de recursos escassos e possibilidade de melhoria na qualidade ambiental.

## 5 CONCLUSÕES

Diante dos resultados obtidos, pode-se concluir que:

- a)** Nas condições em que foram realizados os estudos (tipo de solo, região, presença de calagem, etc.), o modelo que proporcionou melhor qualidade de ajuste ao conjunto de dados de mineralização de nitrogênio foi o modelo de Cabrera, tanto utilizando o Fator de Bayes quanto o Critério de Informação Bayesiano.
- b)** Nas condições em que foram realizados os estudos (tipo de solo, região, presença de calagem, etc), o modelo que proporcionou pior qualidade de ajuste ao conjunto de dados de mineralização de nitrogênio foi o modelo de Marion, tanto utilizando o Fator de Bayes quanto o Critério de Informação Bayesiano.
- c)** A metodologia bayesiana mostrou-se de fácil aplicação e compreensão. As estatísticas descritivas das distribuições marginais são facilmente obtidas para cada parâmetro, como, por exemplo, no cálculo de intervalos de credibilidades.
- d)** A inferência bayesiana é uma metodologia de grande potencial para o estudo da mineralização do nitrogênio, pois considera a incerteza existente sobre todos os parâmetros dos modelos estudados, além de possibilitar a inclusão de informações por meio do uso de distribuições a priori informativas.

Em estudos futuros, pretende-se levantar informação sobre o índice de mineralização do nitrogênio em solos representativos da região do Sul de Minas Gerais, procurando quantificar os estoques de nitrogênio, a fim de determinar se há necessidade ou não de adubação nitrogenada no solo. Pode-se assim, avaliar a qualidade do solo com base no estoque de nitrogênio e na composição da matéria orgânica do solo. Outro fato a ser verificado nestes estudos seria definir práticas de manejo ou, melhor, definir doses e ou aporte de nitrogênio em solo que melhora a qualidade e aumenta o estoque de matéria orgânica em solo e, conseqüentemente, avaliar o impacto ambiental do nitrogênio no que diz respeito à qualidade do solo e suas inter-relações com a matéria orgânica do solo.

No tocante à inferência bayesiana, pretende-se propor novas distribuições a priori (informativa) para os parâmetros dos modelos presentes na literatura.

## 6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BERKHOF, J.; MECHELEN, I. V.; GELMAN, A. A bayesian approach to the selection and testing of mixture models. **Statistica Sinica**, Taipei, v. 13, n. 2, p. 423-442, Apr. 2003.

BLACK, C. A. **Soil-plant relationships**. New York: John Wiley, 1968. 792 p.

BOX, G. E. P.; TIAO, G. C. **Bayesian inference in statistical analysis**. New York: John Wiley & Sons, 1992. 588 p.

BROADBENT, F. E. Empirical modeling of soil nitrogen mineralization. **Soil Science**, Baltimore, v. 141, n. 3, p. 208-213, Mar. 1986.

CABRERA, M. L. Modeling the flush of nitrogen mineralization caused by drying and rewetting soils. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v. 57, n. 1, p. 63-66, Jan. /Feb. 1993.

CAMARGO, F. A. de O.; GIANELLO, C.; TEDESCO, M. J.; RIBOLDI, J.; MEURER, E. J.; BISSANI, C. A. Empirical models to predict soil nitrogen mineralization. **Ciência Rural**, Santa Maria, v. 32, n. 3, p. 393-399, maio/jun. 2002.

CASELLA, G.; GEORGE, E. Explaining the gibbs sampler. **The American Statistician**, Alexandria, v. 46, n. 3, p. 167-174, Aug. 1992.

CARLIN, B. P.; LOUIS, T. A. **Bayes and empirical bayes methods for data analysis**. 2. ed. London: Chapman and Hall, 2000. 419 p.

CHEN, M. H.; SHAO, Q. M. Monte Carlo estimation of Bayesian credible and HPD intervals. **Journal of Computational and Graphical Statistics**, Alexandria, v. 8, n. 1, p. 69-92, Mar. 1999.

CHEW, W. Y.; WILLIAMS, C. N.; JOSEPH, K. T.; RAMLI, K. Studies on the availability to plants of soil nitrogen in Malaysian tropical oligotrophic peat. I – Effect of liming and pH. **Tropical Agriculture**, London, v. 53, p. 9-78, Jan. 1976.

CHIB, S.; GREENBERG, E. Understanding the Metropolis-Hastings algorithm. **The American Statistician**, Alexandria, v. 49, n. 4, p. 327-335, Nov. 1995.

COWLES, M. K.; CARLIN, B. P. Markov chain Monte Carlo convergence diagnostics: a comparative review. **Journal of the American Statistical Association**, Alexandria, v. 91, n. 434, p. 883-904, June 1996.

DRAPER, N. R.; SMITH, H. **Applied regression analysis**. 3. ed. New York: John Wiley e Sons, 1998. 706 p.

EHLERS, R. S. **Introdução à inferência bayesiana**. 2. ed. Curitiba, 2003. 68 p.

FERGUSON, R. B.; SHAPIRO, C. A.; HERGERT, G. W.; KRANZ, W. L.; KLOCKE, N. L.; KRULL, D. H. Nitrogen and irrigation management practices to minimize nitrate leaching from irrigate corn. **Journal of Production Agriculture**, Madison, v. 4, n. 2, p. 186-192, Apr./June 1991.

GAMERMAN, D. **Markov Chain Monte Carlo: Stochastic Simulation For Bayesian Inference**. Londres: Chapman & Hall, 1997. 245 p.

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

GELMAN, A.; CARLIN, J. B.; STERN, H. S.; RUBIN, D. B. **Bayesian data analysis**. London: Chapman and Hall, 2003. 668 p.

GELMAN, A.; RUBIN, D. B. Inference from iterative simulation using multiple sequences. **Statistical Science**, Hayward, v. 7, n. 4, p. 457-511, Nov. 1992.

GEMAN, S.; GEMAN, D. Stochastic relaxation, Gibbs distributions and the Bayesian restoration of images. **IEEE Transactions on pattern Analysis and Machine Intelligence**, Los Alamitos, v. 6, n. 6, p. 721-741, 1984.

GEWEKE, J. Evaluating the accuracy of sampling-based approaches to the calculation of posterior moments. *N*: BERNARDO, J. M.; BERGER, J. O.; DAWID, A. P.; SMITH, A. F. M. (Ed. ). **Bayesian Statistics 4**. New York: Oxford University Press, 1992. 526 p.

GUPTA, U. C.; REUSZER, H. W. Effect of plant species on the aminoacid content and nitrification of soil organic matter. **Soil Science**, Baltimore, v. 104, n. 6, p. 395-400, 1967.



Han, C.; Carlin, B. MCMC methods for computing Bayes Factors: a comparative review. **Journal of the American Statistical Association**, Alexandria, v. 96, n. 455, p. 1122-1132, Sept. 2001.

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

HEIDELBERGER, P.; WELCH, P. Simulation run length control in the presence of an initial transient. **Operations Research**, Landing, v. 31, n. 6, p. 1109-1144, 1983.

INOBUCHI, K.; WADA, H.; TAKAI, Y. Easily decomposable organic matter in paddy soil. VI. Kinetics of nitrogen mineralization in submerged soils. **Soil Science and Plant Nutrition**, Tokyo, v. 31, n. 4, p. 563-572, Dec. 1985.

JONES, A. Estimation of an active fraction soil nitrogen. **Communications in Soil Science and Plant Analysis**, New York, v. 15, n. 1, p. 23-32, 1984.

JUMA, N. G.; PAUL, E. A.; MARY, B. Kinetic analysis of net mineralization in soil. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v. 48, n. 4, p. 465-472, July/Aug. 1984.

MARION, G. M.; KUMMEROW, J.; MILLER, P. C. Predicting nitrogen mineralization in chaparral soils. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v. 45, n. 5, p. 956-961, Sept./Oct. 1981.

METROPOLIS, N.; ROSENBLUTH, A. W.; ROSENBLUTH, M. N.; TELLER, A. H.; TELLER, E. Equations of state calculations by fast computing machines. **Journal of Chemical Physics**, Woodbury, v. 21, n. 6, 1087-1092, 1953.

MOLINA, J. A. E.; CLAPP, C. E.; LARSON, W. E. Potentially mineralizable nitrogen in soil: the simple exponential model does not apply for the first 12 weeks of incubation. **Soil Science Society of American Journal**, Madison, v. 44, n. 2, p. 442-443, Mar./Apr. 1980.

PAULINO, C. D.; TURKMAN, A. A.; MURTEIRA, B. **Estatística Bayesiana**, Lisboa: Fundação Calouste Gulbenkian, 2003. 446 p.

PEREIRA, J. M. **Predição do nitrogênio mineralizado em latossolo pelo uso de modelos não lineares**. 2004. 82 p. Dissertação (Mestrado em Estatística e Experimentação Agropecuária) – Universidade Federal de Lavras, Lavras, MG.

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

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

RAIJ, B. van. **Fertilidade do solo e adubação**. Piracicaba: **Ceres**, 1991. 343 p.

R DEVELOPMENT CORE TEAM. **The R Manuals: Current Version: 1.9.1**. 2004. Disponível em: <<http://www.r-project.org>>. Acesso em: 2006.

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

SAINJU, U. M.; SINGH, B. P.; RAHMAN, S.; REDDY, V. R. Soil nitrat-nitrogen under tomato following tillage, cover cropping, and nitrogen fertilization. **Journal of Environmental Quality**, Madison, v. 28, n. 6, p. 1837-1844, Nov./dez. 1999.

SILVA, C. A.; VALE, F. R.; GUILHERME, L. R. Efeito da calagem na mineralização do nitrogênio em solos de Minas Gerais. **Revista Brasileira Ciência do Solo**, Campinas, v. 18, n. 3, p. 471-476, set./dez. 1994.

SORENSEN, D. **Gibbs sampling in quantitative genetics**. Foulun, 1996. 186 p.

STANFORD, G.; SMITH, S. J. Nitrogen mineralization potentials of soil. **Soil Science of America Journal**, Madison, v. 36, n. 3, p. 465-472, May/June 1972.

STANFORD, G.; SMITH, S. J. Estimating potentially mineralizable soil nitrogen from a chemical index of soil nitrogen availability. **Soil Science**, Baltimore, v. 122, n. 2, p. 71-76, 1976.

UNLU, K.; OZENIRLER, G.; YURTERI, C. Nitrogen fertilizer leaching from cropped and irrigated sandy soil in Central Turkey. **European Journal of Soil Science**, Oxford, v. 50, n. 4, p. 609-620, Dec. 1999.

ZEGER, S. L.; KARIM, M. R. Generalized linear models with random effects; a Gibbs sampling approach. **Journal of the American Statistical Association**, Alexandria, v. 86, n. 413, p. 79-86, Mar. 1991.

## 7 ANEXO

<b>PROGRAMAS</b>		<b>Página</b>
<b>PROGRAMA 1</b>	Rotina R para gerar as cadeias via MCMC do modelo de Stanford & Smith.....	57
<b>PROGRAMA 2</b>	Rotina R para realizar o “burn-in” e o “thin” do modelo de Stanford & Smith.....	61
<b>PROGRAMA 3</b>	Rotina R para gerar as cadeias via MCMC do modelo de Marion.....	63
<b>PROGRAMA 4</b>	Rotina R para realizar o “burn-in” e o “thin” do modelo de Marion.....	69
<b>PROGRAMA 5</b>	Rotina R para gerar as cadeias via MCMC do modelo de Cabrera.....	72
<b>PROGRAMA 6</b>	Rotina R para realizar o “burn-in” e o “thin” do modelo de Cabrera.....	77

**Programa 1:** Rotina R para gerar as cadeias via MCMC do modelo de Stanford & Smith.

```
dados<-read.table("arquivo de dados", h=T)
y<-dados$y
t<-dados$t
n<-length(y)

# Definindo valores para os Hiperparâmetros #
alpha=1.5
beta=1

# Definindo contador para a taxa de aceitação #
contk=0
taxak<-0

# Assumindo Prioris #
# teta <- cte #
# tau <- Gama(Alpha e Beta) #

# Definindo o número de iterações #
nit<-450000
No<-matrix(0,nit,1)
k<-matrix(0,nit,1)
tau<-matrix(0,nit,1)

# Pontos iniciais (Chutes) #
No[1,1]<-158
```

```

k[1,1]<-0.2
tau[1,1]<-4
ir<-0

for (ir in 2:nit)
  {
# Condicionais completas #
# Condicional completa para o parâmetro  $N_0$  #
somaal<-0
soma<-0
somab<-0
soma2<-0
i<-0
for (i in 1:n)
  {
    soma=y[i]*(1-exp(-k[ir-1,1]*t[i]))
    soma1=soma1+soma
    somab=(1-exp(-k[ir-1,1]*t[i]))^2
    soma2=soma2+somab
  }
mediaNo<-soma1/soma2
desvNo<-sqrt(tau[ir-1,1]/soma2)

No1<-rnorm(1, mean=mediaNo, sd=desvNo)
No[ir,1]<-No1

# Condicional completa para o parâmetro  $\tau_e$  #
soma<-0

```

```

soma3<-0
i<-0
for (i in 1:n)
  {
    somac=(y[i]-No[ir,1]*(1-exp(-k[ir-1,1]*t[i])))^2
    soma3=soma3+somac
  }
alpha1=(n/2)+alpha
beta1=(beta + 0.5*soma3)

tau1<-rgamma(1, shape = alpha1, scale = 1/beta1)
tau[ir,1]<-tau1

# Metropolis para o parâmetro k #
iii<-0
while (iii<3)
  {
    knew<-rnorm(1,0.2,0.006)
    if(abs(knew)<1) iii<-3 else iii<-1
  }
samacnew=0
soma3new=0
ii<-0
for (ii in 1:n)
  {
    somacnew=(y[ii]-No[ir,1]*(1-exp(-knew*t[ii])))^2
    soma3new=soma3new+samacnew
  }

```

```

somacold=0
soma3old=0
i<-0
for (i in 1:n)
  {
    somacold=(y[i]-No[ir,1]*(1-exp(-k[ir-1,1]*t[i])))^2
    soma3old=soma3old+somacold
  }

knew1<-exp(-(tau[ir,1]/2)*soma3new)
kold1<-exp(-(tau[ir,1]/2)*soma3old)
if(k[ir-1,1]!=0) p<-min(1,(knew1/kold1)) else p<-1
u<-runif(1)
if(u<=p) k1<-knew else k1<-k[ir-1,1]
k[ir,1]<-k1
if(u<=p) contk<-contk+1
  }

# Fim de Amostragem #

# Determinando a taxa de aceitação de k #
taxak<-contk/nit
taxak

# Salvando cadeia de cada Parâmetro #
write(k, "saida_k_Stanford_Smith_450000.txt", ncolumns =1)
write(No, "saida_No_Stanford_Smith_450000.txt", ncolumns =1)
write(tau, "saida_tau_Stanford_Smith_450000.txt", ncolumns =1)

```



**Programa 2:** Rotina R para realizar o “burn-in” e o “thin” do modelo de Stanford & Smith.

```
No<-read.table("arquivo de dados", h=T)
k<-read.table("arquivo de dados", h=T)
tau<-read.table("arquivo de dados", h=T)
No<-as.matrix(No)
k<-as.matrix(k)
tau<-as.matrix(tau)

# Definindo o “burn-in” e o “thin” #
nit<-length(No)
burn<-50000 # descartando as 50.000 primeiras iterações #
pulo<-100 # salto ou pulo a cada 100 iterações #

# Defina os parâmetros #
No<-No[(burn+1):nit,1]
k<-k[(burn+1):nit,1]
tau<-tau[(burn+1):nit,1] # Fim do “burn in” #

# Início do Pulo #
nit_novo<-((nit-burn)%/%pulo)
No_pulo<-matrix(0,nit_novo,1)
k_pulo<-matrix(0,nit_novo,1)
tau_pulo<-matrix(0,nit_novo,1)

# Realizando o “thin” (pulo) individualmente para cada parâmetro #
i<-0
```

```

irr<-0
for (irr in 1:(nit-burn))
  {
    if(irr-(irr%%pulo)*pulo==0) (i<-i+1)
    if(irr-(irr%%pulo)*pulo==0) (No_pulo[i,1]<-No[irr])
  }
i<-0
irr<-0
for (irr in 1:(nit-burn))
  {
    if(irr-(irr%%pulo)*pulo==0) (i<-i+1)
    if(irr-(irr%%pulo)*pulo==0) (k_pulo[i,1]<-k[irr])
  }
i<-0
irr<-0
for (irr in 1:(nit-burn))
  {
    if(irr-(irr%%pulo)*pulo==0) (i<-i+1)
    if(irr-(irr%%pulo)*pulo==0) (tau_pulo[i,1]<-tau[irr])
  }      # Fim do pulo #

# Salvando cadeia de cadeia parâmetro #
write(No_pulo,"saida_No_Stanford_Smith_450000_50000_100_final_4000.txt"
, ncolumns =1)
write(k_pulo, "saida_k_Stanford_Smith_450000_50000_100_final_4000.txt",
ncolumns =1)
write(tau_pulo,"saida_tau_Stanford_Smith_450000_50000_100_final_4000.txt"
, ncolumns =1)

```

**Programa 3:** Rotina R para gerar as cadeias via MCMC do modelo de Marion.

```
dados<-read.table("arquivo de dados", h=T)
y<-dados$y
t<-dados$t
n<-length(y)

# Definindo valores para os Hiperparâmetros #
alpha=1.5
beta=1

# Definindo contador para as taxas de aceitação dos parâmetros k e b #
contk=0
contb=0
taxak<-0
taxab<-0

# Assumindo Prioris #
# teta <- cte #
# tau <- Gama(alpha e Beta) #

# Definindo o número de iterações #
nit<-450000
No<-matrix(0,nit,1)
k<-matrix(0,nit,1)
b<-matrix(0,nit,1)
tau<-matrix(0,nit,1)
# Pontos iniciais (Chutes) #
```

```

No[1,1]<-140
k[1,1]<-0.2
b[1,1]<-1
tau[1,1]<-4
ir<-0

for (ir in 2:nit)
  {
# Condicionais completas #
# Condicional completa para o parâmetro  $N_0$  #
somaa1<-0
somaa<-0
somab<-0
somaa2<-0
iv<-0
for (iv in 1:n)
  {
somaa=y[iv]*(1-exp(-k[ir-1,1]*(t[iv]^b[ir-1,1])))
somaa1=somaa1+somaa
somab=(1-exp(-k[ir-1,1]*(t[iv]^b[ir-1,1])))^2
somaa2=somaa2+somab
}

mediaNo<-somaa1/somaa2
desvNo<-sqrt(tau[ir-1,1]/somaa2)

No1<-rnorm(1, mean=mediaNo, sd=desvNo)
No[ir,1]<-No1

```

```

# Condicional completa para o parâmetro  $\tau_\varepsilon$  #
somac<-0
soma3<-0
v<-0
for (v in 1:n)
  {
    somac=(y[v]-No[ir,1]*(1-exp(-k[ir-1,1]*(t[v]^b[ir-1,1])))^2
    soma3=soma3+somac
  }

alpha1=(n/2)+alpha
beta1=(beta + 0.5*soma3)

tau1<-rgamma(1, shape = alpha1, scale = 1/beta1)
tau[ir,1]<-tau1

# Metropolis para o parâmetro  $k$  #

iii<-0
while (iii<3)
  {
    knew<-rnorm(1,0.2,0.006)
    if(abs(knew)<1) iii<-3 else iii<-1
  }

somacnew=0
soma3new=0

```

```

ii<-0
for (ii in 1:n)
  {
  somacnew=(y[ii]-No[ir,1]*(1-exp(-knew*(t[ii]^b[ir-1,1])))^2
  soma3new=soma3new+somacnew
  }

somacold=0
soma3old=0
i<-0
for (i in 1:n)
  {
  somacold=(y[i]-No[ir,1]*(1-exp(-k[ir-1,1]*(t[i]^b[ir-1,1])))^2
  soma3old=soma3old+somacold
  }

knew1<-exp(-(tau[ir,1]/2)*soma3new)
kold1<-exp(-(tau[ir,1]/2)*soma3old)
if(k[ir-1,1]!=0) p<-min(1,(knew1/kold1)) else p<-1
u<-runif(1)
if(u<=p) k1<-knew else k1<-k[ir-1,1]
k[ir,1]<-k1
if(u<=p) contk<-contk+1

# Metropolis para o parâmetro b #

jjj<-0
while (jjj<3)

```

```

{
bnew<-rnorm(1,1,0.06)
if(bnew>1) jjj<-3 else jjj<-1
}

somadnew=0
soma4new=0
jj<-0
for (jj in 1:n)
{
somadnew=(y[jj]-No[ir,1]*(1-exp(-k[ir,1]*(t[jj]^bnew))))^2
soma4new=soma4new+somadnew
}

somadold=0
soma4old=0
j<-0
for (j in 1:n)
{
somadold=(y[j]-No[ir,1]*(1-exp(-k[ir,1]*(t[j]^b[ir-1,1]))))^2
soma4old=soma4old+somadold
}

bnew1<-exp(-(tau[ir,1]/2)*soma4new)
bold1<-exp(-(tau[ir,1]/2)*soma4old)
if(b[ir-1,1]!=0) p<-min(1,(bnew1/bold1)) else p<-1
u<-runif(1)
if(u<=p) b1<-bnew else b1<-b[ir-1,1]

```

```
b[ir,1]<-b1
if(u<=p) contb<-contb+1
    }

# Fim de Amostragem #

# Determinando as taxas de aceitação dos parâmetros  $k$  e  $b$  #
taxak<-contk/nit
taxab<-contb/nit
taxak
taxab

# Salvando cadeia de cada Parâmetro #
write(b, "saida_b_Marion_450000.txt", ncolumns =1)
write(k, "saida_k_Marion_450000.txt", ncolumns =1)
write(No, "saida_No_Marion_450000.txt", ncolumns =1)
write(tau, "saida_tau_Marion_450000.txt", ncolumns =1)
```



**Programa 4:** Rotina R para realizar o “burn-in” e o “thin” do modelo de Marion.

```
No<-read.table("arquivo de dados", h=T)
k<-read.table("arquivo de dados", h=T)
b<-read.table("arquivo de dados", h=T)
tau<-read.table("arquivo de dados", h=T)
No<-as.matrix(No)
k<-as.matrix(k)
b<-as.matrix(b)
tau<-as.matrix(tau)

# Definindo o “burn-in” e o “thin” #
nit<-length(No)
burn<-50000 # descartando as 50.000 primeiras iterações #
pulo<-100 # salto ou pulo a cada 100 iterações #

# Defina os parâmetros #
No<-No[(burn+1):nit,1]
k<-k[(burn+1):nit,1]
b<-b[(burn+1):nit,1]
tau<-tau[(burn+1):nit,1] # Fim do “burn-in” #

# Início do Pulo #
nit_novo<-((nit-burn)%/%pulo)
No_pulo<-matrix(0,nit_novo,1)
k_pulo<-matrix(0,nit_novo,1)
b_pulo<-matrix(0,nit_novo,1)
```

```
tau_pulo<-matrix(0,nit_novo,1)
```

```
# Realizando o “thin” (pulo) individualmente para cada parâmetro #
```

```
  i<-0
  irr<-0
  for (irr in 1:(nit-burn))
    {
      if(irr-(irr%%pulo)*pulo==0) (i<-i+1)
      if(irr-(irr%%pulo)*pulo==0) (No_pulo[i,1]<-No[irr])
    }
  i<-0
  irr<-0
  for (irr in 1:(nit-burn))
    {
      if(irr-(irr%%pulo)*pulo==0) (i<-i+1)
      if(irr-(irr%%pulo)*pulo==0) (k_pulo[i,1]<-k[irr])
    }
  i<-0
  irr<-0
  for (irr in 1:(nit-burn))
    {
      if(irr-(irr%%pulo)*pulo==0) (i<-i+1)
      if(irr-(irr%%pulo)*pulo==0) (b_pulo[i,1]<-b[irr])
    }
  i<-0
  irr<-0
  for (irr in 1:(nit-burn))
    {
```

```
if(irr-(irr%%pulo)*pulo==0) (i<-i+1)
if(irr-(irr%%pulo)*pulo==0) (tau_pulo[i,1]<-tau[irr])
}          # Fim do pulo #
```

```
# Salvando cadeia de cadeia parâmetro #
write(No_pulo, "saida_No_Marion_450000_50000_100_final_4000.txt",
ncolumns =1)
write(k_pulo, "saida_k_Marion_450000_50000_100_final_4000.txt", ncolumns
=1)
write(b_pulo, "saida_b_Marion_450000_50000_100_final_4000.txt", ncolumns
=1)
write(tau_pulo, "saida_tau_Marion_450000_50000_100_final_4000.txt",
ncolumns =1)
```

**Programa 5:** Rotina R para gerar as cadeias via MCMC do modelo de Cabrera.

```
dados<-read.table("arquivo de dados", h=T)
y<-dados$y
t<-dados$t
n<-length(y)

# Definindo valores para os Hiperparâmetros #
alpha=1.5
beta=1

# Definindo contador para as taxas de aceitação dos parâmetros k e b #
contk1=0
taxak1<-0

# Assumindo Prioris #
# teta <- cte #
# tau <- Gama(alpha e beta) #

# Definindo o número de iterações #
nit<-450000
N1<-matrix(0,nit,1)
k1<-matrix(0,nit,1)
ko<-matrix(0,nit,1)
tau<-matrix(0,nit,1)

# Pontos iniciais (Chutes) #
N1[1,1]<-260
```

```

k1[1,1]<-0.1
ko[1,1]<--2
tau[1,1]<-4
ir<-0

      for (ir in 2:nit)
        {
# Condicionais completas #
# Condicional completa para o parâmetro  $N_1$  #
somaal<-0
soma<-0
somab<-0
soma2<-0
iv<-0
for (iv in 1:n)
      {
          somaa=(y[iv]-ko[ir-1,1]*t[iv])*(1-exp(-k1[ir-1,1]*t[iv]))
          somaal=somaal+soma
          somab=(1-exp(-k1[ir-1,1]*t[iv]))^2
          soma2=soma2+somab
      }

mediaN1<-somaal/soma2
desvN1<-sqrt(tau[ir-1,1]/soma2)

N11<-rnorm(1, mean=mediaN1, sd=desvN1)
N1[ir,1]<-N11

```

```

# Condicional completa para o parâmetro  $\tau_\xi$  #
somac<-0
soma3<-0
v<-0
for (v in 1:n)
  {
    somac=(y[v]-N1[ir,1]*(1-exp(-k1[ir-1,1]*t[v]))-ko[ir-1,1]*t[v])^2
    soma3=soma3+somac
  }

alpha1=(n/2)+alpha
beta1=(beta + 0.5*soma3)

tau1<-rgamma(1, shape = alpha1, scale = 1/beta1)
tau[ir,1]<-tau1

#Condicional completa para o parâmetro  $k_0$  #
somad<-0
soma4<-0
somae<-0
soma5<-0
v<-0
for (v in 1:n)
  {
    somad=t[v]*(y[v]-N1[ir,1]*(1-exp(-k1[ir-1,1]*t[v])))
    soma4=soma4+somad
    somae=t[v]^2
    soma5=soma5+somae
  }

```

```

    }

mediako<-soma4/soma5
desvko<-sqrt(tau[ir,1]/soma5)

ko1<-rnorm(1, mean=mediako, sd=desvko)
ko[ir,1]<-ko1

# Metropolis para o parâmetro  $k_1$  #
  iii<-0
  while (iii<3)
  {
    k1new<-rnorm(1,0.1,0.003)
    if(abs(k1new)<1) iii<-3 else iii<-1
  }

  somacnew=0
  soma3new=0
  ii<-0
  for (ii in 1:n)
  {
    somacnew=(y[ii]-N1[ir,1]*(1-exp(-k1new*t[ii]))-ko[ir,1]*t[ii])^2
    soma3new=soma3new+somacnew
  }

  somacold=0
  soma3old=0
  i<-0

```

```

for (i in 1:n)
  {
    somacold=(y[i]-N1[ir,1]*(1-exp(-k1[ir-1,1]*t[i]))-ko[ir,1]*t[i])^2
    soma3old=soma3old+somacold
  }

k1new1<-exp(-(tau[ir,1]/2)*soma3new)
k1old1<-exp(-(tau[ir,1]/2)*soma3old)
if(k1[ir-1,1]!=0) p<-min(1,(k1new1/k1old1)) else p<-1
u<-runif(1)
if(u<=p) k1[ir,1]<-k1new else k1[ir,1]<-k1[ir-1,1]
if(u<=p) contk1<-contk1+1
  }

# Fim de Amostragem #

# Determinando as taxas de aceitação dos parâmetros k e b #
taxak1<-contk1/nit
taxak1

# Salvando cadeia de cadeia parâmetro #
write(N1, "saida_N1_Cabrera_450000.txt", ncolumns =1)
write(k1, "saida_k1_Cabrera_450000.txt", ncolumns =1)
write(ko, "saida_ko_Cabrera_450000.txt", ncolumns =1)
write(tau, "saida_tau_Cabrera_450000.txt", ncolumns =1)

```



**Programa 6:** Rotina R para realizar o “burn-in” e o “thin” do modelo de Cabrera.

```
N1<-read.table("arquivo de dados", h=T)
k1<-read.table("arquivo de dados", h=T)
ko<-read.table("arquivo de dados", h=T)
tau<-read.table("arquivo de dados", h=T)
N1<-as.matrix(N1)
k1<-as.matrix(k1)
ko<-as.matrix(ko)
tau<-as.matrix(tau)

# Definindo o “burn-in” e o “thin” #
nit<-length(N1)
burn<-50000 # descartando as 50.000 primeiras iterações #
pulo<-100 # salto ou pulo a cada 100 iterações #

# Defina os parâmetros #
N1<-N1[(burn+1):nit,1]
k1<-k1[(burn+1):nit,1]
ko<-ko[(burn+1):nit,1]
tau<-tau[(burn+1):nit,1] # Fim do “burn-in” #

# Início do Pulo #
nit_novo<-((nit-burn)%/%pulo)
N1_pulo<-matrix(0,nit_novo,1)
k1_pulo<-matrix(0,nit_novo,1)
ko_pulo<-matrix(0,nit_novo,1)
```

```
tau_pulo<-matrix(0,nit_novo,1)
```

```
# Realizando o “thin” (pulo) individualmente para cada parâmetro #
```

```
  i<-0
  irr<-0
  for (irr in 1:(nit-burn))
    {
      if(irr-(irr%%pulo)*pulo==0) (i<-i+1)
      if(irr-(irr%%pulo)*pulo==0) (N1_pulo[i,1]<-N1[irr])
    }
  i<-0
  irr<-0
  for (irr in 1:(nit-burn))
    {
      if(irr-(irr%%pulo)*pulo==0) (i<-i+1)
      if(irr-(irr%%pulo)*pulo==0) (k1_pulo[i,1]<-k1[irr])
    }
  i<-0
  irr<-0
  for (irr in 1:(nit-burn))
    {
      if(irr-(irr%%pulo)*pulo==0) (i<-i+1)
      if(irr-(irr%%pulo)*pulo==0) (ko_pulo[i,1]<-ko[irr])
    }
  i<-0
  irr<-0
  for (irr in 1:(nit-burn))
    {
```

```

if(irr-(irr%%pulo)*pulo==0) (i<-i+1)
if(irr-(irr%%pulo)*pulo==0) (tau_pulo[i,1]<-tau[irr])
}          # Fim do pulo #

# Salvando cadeia de cadeia parâmetro #
write(N1_pulo, "saida_N1_Cabrera_450000_50000_100_final_4000.txt",
ncolumns =1)
write(k1_pulo, "saida_k1_Cabrera_450000_50000_100_final_4000.txt",
ncolumns =1)
write(ko_pulo, "saida_ko_Cabrera_450000_50000_100_final_4000.txt",
ncolumns =1)
write(tau_pulo, "saida_tau_Cabrera_450000_50000_100_final_4000.txt",
ncolumns =1)

```