

**AJUSTE DE UMA SUPERFÍCIE DE RESPOSTA
NO DELINEAMENTO EM BLOCOS
INCOMPLETOS: ANÁLISE DE
VEROSSIMILHANÇA RESTRITA E
BAYESIANA EM UMA SIMULAÇÃO DE
ADUBAÇÃO EM CITROS**

Claudiney Nunes de Lima

2006

CLAUDINEY NUNES DE LIMA

**AJUSTE DE UMA SUPERFÍCIE DE RESPOSTA NO
DELINEAMENTO EM BLOCOS INCOMPLETOS: ANÁLISE
DE VEROSSIMILHANÇA RESTRITA E BAYESIANA EM
UMA SIMULAÇÃO DE ADUBAÇÃO EM CITROS**

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do Curso de Mestrado em Agronomia, área de concentração em Estatística e Experimentação Agropecuária, para a obtenção do título de Mestre.

Orientador

Prof. Dr. Júlio Sílvio de Sousa Bueno Filho

LAVRAS
MINAS GERAIS-BRASIL

2006

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

Lima, Claudiney Nunes.

Ajuste de uma superfície de resposta no delineamento em blocos incompletos: análise de verossimilhança restrita e bayesiana em uma simulação de adubação em citros / Claudiney Nunes de Lima. - - Lavras: UFLA, 2006.

71p. : il.

Orientador: Júlio Sílvio de Sousa Bueno Filho.

Dissertação (Mestrado) - UFLA.

Bibliografia.

1. Adubação. 2. Amostragem Gibbs. 3. Delineamento em blocos incompletos. 4. REML. I. Universidade Federal de Lavras. II. Título.

CDD-519.5

-631.8

Claudiney Nunes de Lima

**AJUSTE DE UMA SUPERFÍCIE DE RESPOSTA NO
DELINEAMENTO EM BLOCOS INCOMPLETOS: ANÁLISE
DE VEROSSIMILHANÇA RESTRITA E BAYESIANA EM
UMA SIMULAÇÃO DE ADUBAÇÃO EM CITROS**

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do Curso de Mestrado em Agronomia, área de concentração em Estatística e Experimentação Agropecuária, para a obtenção do título de Mestre.

APROVADA em 23 de fevereiro de 2006

Prof. Dr. Augusto Ramalho de Moraes	UFLA
Prof. Dr. Carlos Alberto Silva	UFLA
Prof. Dr. Ruben Delly Veiga	UFLA

Prof. Dr. Júlio Sílvio de Sousa Bueno Filho

UFLA

(Orientador)

LAVRAS

MINAS GERAIS-BRASIL

*Aos meus pais, Roque e Leopoldina: exemplos a serem seguidos,
pelo incondicional apoio e educação,
por compreenderem a minha ausência na vida familiar.*

*De tudo ficarão três coisas:
a certeza de estar sempre começando,
a certeza de que é preciso continuar
e a certeza de ser interrompido antes de terminar.*
(Fernando Sabino)

AGRADECIMENTOS

A Deus, por ter-me dado saúde, força e coragem para a realização deste trabalho.

À Universidade Federal de Lavras, especialmente ao Departamento de Ciências Exatas, pela oportunidade de concluir o Mestrado em Agronomia/Estatística e Experimentação Agropecuária.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (Cnpq), pela bolsa de estudo concedida.

Ao professor e orientador Júlio, pela ajuda, críticas e sugestões.

Aos professores do Departamento de Ciências Exatas, pelos ensinamentos prestados.

Aos professores da minha graduação: Marinês, Olímpio e José Ivo, pelo conhecimento transmitido e pelo incentivo nos estudos.

A toda minha família, especialmente meus pais, que sempre fizeram o possível para as realizações da minha vida.

Ao Adilson (Peteleco), pela revisão do texto e, muito mais do que isso, por ter sido o meu braço direito nesta conquista.

Aos colegas de turma: Charles (“Ô bicho”), Elias (Buchon), Eustáquio (Chefinho), Josi (Peitão), Graziela (Gra), Lívia Bola (Box Plot), Nádia Giareta Biase, Paulo César (Falador), Rejane (“Beleza”), Vanêssa (Baiana) e Verônica da UFLA (Mãe de Família), pela amizade e pelos momentos felizes ao longo do curso.

À minha cozinheira e à minha empregada doméstica, que são colegas de curso (Gra e Baiana), pelas horas de conversa fiada na cozinha, “bafões” e palhaçadas nos tempos vagos.

À Francisca, pela amizade e apoio, e pelo delicioso feijão; e à Dalva, pelo precioso bolinho de angu.

Ao meu amigo Helder, que foi uma das primeiras amizades verdadeiras que fiz em Lavras, e também à sua mãe.

À Luciene e à Patrícia, amigas desde Viçosa, pelo constante companheirismo; e à Marcinha “PRV”, pelas palavras de apoio.

Aos colegas Denismar e Zé Waldemar, pela grande ajuda no desenvolvimento deste trabalho.

Aos funcionários do Departamento de Ciências Exatas: Edila, João Paulo, Maria, Selminha e Vânia, pela simpatia e boa vontade no atendimento.

Aos amigos de Ouro Preto: Roberto, Eli, Solange, Sueli e Rafael, pelo entretenimento e palavras de incentivo durante o curso.

À Dona Cidinha, proprietária do meu primeiro “lar” em Lavras, que me acolheu durante um certo período e com muito carinho.

E aos demais que, direta ou indiretamente, contribuíram para a elaboração deste trabalho.

Sumário

RESUMO	i
ABSTRACT	ii
1 INTRODUÇÃO	1
2 REFERENCIAL TEÓRICO	3
2.1 Delineamento em blocos incompletos	3
2.1.1 Análise de variância intrablocos	5
2.1.2 Delineamentos em blocos incompletos parcialmente ba- lanceados	6
2.2 Teoria de modelos mistos	7
2.3 Superfícies de resposta	9
2.4 Inferência bayesiana	11
2.4.1 Distribuição <i>a posteriori</i>	14
2.4.2 Teorema de Bayes	14
2.4.3 Amostrador de Gibbs	17
3 METODOLOGIA	19
3.1 Material	19
3.2 Modelo da simulação do experimento	22
3.3 Modelo da análise e suas pressuposições	25
3.4 Estimação REML	26
3.5 Análise bayesiana	27
3.5.1 Especificação das prioris	28
3.5.2 Distribuição posteriori conjunta	30
3.5.3 Distribuições condicionais completas	31
3.6 Metodologia empregada para se ajustar a superfície de resposta	34
3.6.1 Superfície: ajuste do modelo para as médias de trata- mentos (REML e bayesiana)	34

3.6.2	A determinação e a análise do ponto crítico	37
3.7	Intervalos de confiança para predições	38
3.8	Erro quadrático médio	39
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	40
4.1	Superfície de resposta - análise REML	40
4.2	Diagnóstico de convergência do algoritmo <i>Gibbs Sampler</i> . . .	48
4.3	Análise bayesiana	51
4.4	Eficiência dos métodos	56
5	CONCLUSÃO	60
6	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	61
	ANEXO	67

Lista de Tabelas

1	Massa de dados simulada	20
2	Plano otimizado obtido com o aplicativo java “DEW”, (Edmondson, 2005)	23
3	Esquema de associação dos tratamentos do PBIB	24
4	Quadro-resumo da análise de variância para a variável res- posta produção do modelo fixo com dados arredondados para números inteiros	41
5	Valores das médias ajustadas (REML) e seus IC(95%), com as suas respectivas amplitudes (A) e valores paramétricos . . .	42
6	Estimativas dos coeficientes de regressão, seus respectivos in- tervalos de confiança da análise REML e seus respectivos va- lores paramétricos	43
7	Estimativas dos indicadores de convergência para os critérios de Gelman & Rubin (1992) e Raftery & Lewis (1992) e do erro de Monte Carlo para cada uma das cadeias dos parâmetros do modelo	50
8	Valores das médias ajustadas pela amostragem Gibbs e seus intervalos de credibilidade (95%) com as suas respectivas am- plitudes (A) e valores paramétricos	52
9	Estimativas dos coeficientes de regressão e seus respectivos intervalos de confiança da análise bayesiana e valores para- métricos	53
10	Valores das médias ajustadas, IC(95%) e os respectivos valo- res paramétricos para a análise usual de modelo fixo	57
11	Quadro-resumo da análise do modelo experimental pela aná- lise bayesiana: média, desvio padrão, intervalos de credibi- lidade com 95% de probabilidade e valores das estimativas pontuais REML dos efeitos do modelo e seus valores paramé- tricos	58

Lista de Figuras

1	Histograma de uma amostra de 100000 valores da distribuição <i>a priori</i> da correlação intraclassa	29
2	Visão de perfil da superfície de resposta para a produção de citros (caixas/ha), em função das doses de nitrogênio (kg/ha) e adubação foliar (mg/l) (Análise REML)	45
3	Curvas de nível para a produção de citros (caixas/ha), em função das doses de nitrogênio (kg/ha) e adubação foliar (mg/l) (Análise REML)	46
4	Ajuste de superfícies para a estimativas das médias dos tratamentos e limites inferiores e superiores do IC para cada média. Prod: produção de citros (caixas/ha); N: doses de nitrogênio (kg/ha); A: doses de adubação foliar (mg/l), (Análise REML)	47
5	Região de 95% de confiança para os níveis ótimos das doses de nitrogênio (kg/ha) e de adubação foliar (mg/l) (Análise REML)	48
6	Visão de perfil da superfície de resposta para a produção de citros (caixas/ha), em função das doses de nitrogênio (kg/ha) e adubação foliar (mg/l) (Análise bayesiana)	54
7	Curvas de nível para a produção de citros (caixas/ha), em função das doses de nitrogênio (kg/ha) e adubação foliar (mg/l) (Análise bayesiana)	54
8	Ajuste de superfícies para as estimativas das médias dos tratamentos e limites inferiores e superiores do IC para cada média. Prod: produção de citros (caixas/ha); N: doses de nitrogênio (kg/ha); A: doses de adubação foliar (mg/l) (Análise bayesiana)	55

9	Regiões de 95% de confiança para os níveis ótimos das doses de nitrogênio (Kg/ha) e de adubação foliar (mg/l). (A elipse interior refere-se à análise REML e a exterior refere-se à análise bayesiana.)	56
---	---	----

RESUMO

LIMA, Claudiney Nunes. **Ajuste de uma superfície de resposta no delineamento em blocos incompletos: análise de verossimilhança restrita e bayesiana em uma simulação de adubação em citros.** Lavras: UFLA, 2006. 71p. Dissertação (Mestrado em Agronomia/ Estatística e Experimentação Agropecuária) - Universidade Federal de Lavras, Lavras, MG.*

A determinação da combinação de doses de nutrientes que dá uma produção máxima é um problema de interesse em ensaios de adubação. No presente trabalho, procurou-se ilustrar as análises de verossimilhança restrita (REML) e bayesiana (GS) de um delineamento em blocos incompletos parcialmente balanceados. Para essa ilustração, foram simulados dados de produção de uma cultura de citros, no primeiro ano de idade, com a combinação de doses de dois nutrientes. Para o ajuste do modelo e o cálculo de suas propriedades estatísticas, foi feita a inferência de verossimilhança restrita (REML) e a inferência bayesiana, usando a amostragem Gibbs, ambas aplicadas a um modelo linear misto. Os resultados demonstram que as duas metodologias são boas ferramentas de ajuste de modelos mistos e devem ser recomendadas para ajustes de superfícies de resposta.

Palavras-chave: adubação, amostragem Gibbs, delineamento em blocos incompletos, REML.

* **Comitê Orientador:** Júlio Sílvio de Sousa Bueno Filho - UFLA. (Orientador)

ABSTRACT

LIMA, Claudiney Nunes. **Fitting a response surface using an incomplete block design: Restricted likelihood and Bayesian analysis in manuring simulation in citrus.** Lavras: UFLA, 2006. 71p. Dissertation (Master's Degree in Agronomy/Statistics and Agriculture Experimentation) - Universidade Federal de Lavras, Lavras, MG.*

Finding the combination of nutrients levels that yields maximum production is an interesting problem in manuring assays. The aim of this work was to illustrate the restricted likelihood analysis (REML) and Bayesian analysis (GS) of a partially balanced incomplete block design. For this illustration, production data for the first year of a citrus culture were simulated, using combinations of levels for two nutrients. To fit the model and calculate its statistical properties, REML and GS were both applied to a mixed linear model. Results from both methodologies are equivalent, indicating that these are good tools for mixed models fitting that should be recommended for the response surfaces.

Key-words: manuring, Gibbs Sampling, incomplete block designs, REML.

* **Guidance Committee:** Júlio Sílvio de Sousa Bueno Filho - UFLA. (Adviser)

1 INTRODUÇÃO

Muitos projetos de pesquisa baseiam-se em experimentos que pretendem avaliar dois ou mais fatores de níveis quantitativos e estudar suas interações. A questão central de pesquisa, nesse tipo de experimento, é a de detectar a presença de níveis ótimos de “ação”, que são os níveis dos fatores que conferem pontos de máximo ou mínimo à superfície de resposta. Embora haja exemplos reais desse tipo de experimento, pretende-se apresentar uma proposta de plano experimental e duas propostas de análise para um exemplo-modelo relativamente complexo, com dados fictícios que permitam a comparação do ajuste aos valores paramétricos simulados.

O problema escolhido, inspirado em Ribeiro et al. (1999), foi o da adubação para plantas de citros no primeiro ano de idade. Supõe-se que, no plantio, tenha sido realizada a correção de fertilidade com calcário calcítico e que foi detectada a necessidade de suprimento de magnésio. Para esse caso, foi proposta a adubação foliar com sulfato de magnésio. Além disso, a cultura recebe cobertura com adubo nitrogenado. A demanda do pesquisador seria estimar os níveis ótimos de adubação nitrogenada e adubação foliar que maximizam a produtividade (medida em toneladas de frutos por hectare). Um problema adicional desse plano experimental é o de que o pesquisador queria determinar o efeito dos níveis médios de tratamentos com duas referências, quais sejam: ausência de adubação e efeito da água na adubação foliar. Tais testemunhas refletem o nível zero para ambos os fatores quantitativos em estudo.

O experimento fatorial para o ajuste de superfícies de resposta envolveu muitos tratamentos e foi instalado em blocos incompletos para um bom controle local. Isso, sabidamente, aumenta a eficiência do experimento, mas, por vezes, complica a análise. Assim, o problema estatístico enfocado é o de ajustar um delineamento em blocos incompletos, com recuperação da informação interblocos, usando duas técnicas consagradas: a Estimação por

Máxima Verossimilhança Restrita (REML), Patterson & Thompson (1971), e a Amostragem Gibbs (GS, do inglês *Gibbs Sampler*, Gelfand & Smith, 1990), para a estimação das médias ajustadas de tratamentos, seguida do ajuste da superfície de resposta correspondente.

O objetivo deste trabalho é ilustrar duas formas de estimação (REML e GS) para ajustar uma superfície de resposta a um experimento idealizado em blocos incompletos com dois fatores quantitativos. Adicionalmente, será feita uma breve comparação dos resultados do ajuste de uma superfície de resposta em um experimento simulado.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

2.1 Delineamento em blocos incompletos

Em certos experimentos, usando delineamentos em blocos casualizados, não se podem alocar todas as combinações dos tratamentos em cada bloco. Situações desse tipo ocorrem, freqüentemente, devido às dificuldades de se encontrarem áreas experimentais que sejam uniformes em toda a sua extensão; suficientes, portanto, para abrigarem blocos que contenham todos os tratamentos a serem avaliados, ou até mesmo pela carência de instrumentos ou aparelhos experimentais.

O emprego de um delineamento em blocos casualizados completos, nessa situação, faz com que sua eficiência seja sensivelmente prejudicada e diminuída à medida que o número de parcelas por bloco aumenta. A heterogeneidade dentro do bloco tende a aumentar o erro experimental, dificultando, assim, a discriminação dos tratamentos em teste, ou a obtenção de estimativas mais exatas, em razão de uma menor precisão do experimento (Ramalho *et al.*, 2000).

Para contornar esse problema, é necessário fazer uso dos delineamentos em blocos incompletos. Nesses delineamentos, v tratamentos são distribuídos em b blocos de tamanho $k < v$ e o i -ésimo tratamento ($i = 1, 2, \dots, v$) aparece em r unidades experimentais, isto é, têm-se r repetições desse tratamento; o j -ésimo bloco contém k unidades experimentais, das quais n_{ij} recebem o i -ésimo tratamento (John, 1980). Nesse caso, n_{ij} é uma variável indicadora da presença de um tratamento num bloco.

Em tais situações, pode-se, em geral, utilizar duas classes desses delineamentos: a primeira, os chamados blocos incompletos balanceados (BIB), introduzidos por Yates (1936), citado por John (1980), que satisfaçam as seguintes condições:

- (i) o material experimental é dividido em b blocos de k unidades cada, com tratamentos diferentes sendo aplicados às unidades no mesmo bloco;
- (ii) existem t tratamentos, sendo que cada um ocorre em r blocos;
- (iii) quaisquer dois tratamentos ocorrem juntos em exatos λ blocos.

A segunda classe são os delineamentos em blocos incompletos, em que o número de tratamentos é maior do que o número de unidades experimentais por bloco ($\nu > k$). Nesse delineamento, o i -ésimo tratamento ($i = 1, 2, \dots, \nu$) aparece em r unidades experimentais, isto é, têm-se r repetições do tratamento; o j -ésimo bloco contém k unidades experimentais, das quais n_{ij} recebem o i -ésimo tratamento (John, 1980). Nesse caso, n_{ij} é uma variável indicadora da presença de um tratamento num bloco.

Há, ainda, situações em que se recomenda adicionar, em todos os blocos do delineamento, determinado tipo específico de tratamento, como se discute no presente trabalho. Isso ocorre, por exemplo, conforme salienta Ferreira (1980), quando se deseja comparar algumas variedades novas com outras de comportamento já conhecido e que atuam como uma espécie de controle ou testemunha.

Oliveira (1990) determinou, por meio de um exemplo numérico, as expressões para as várias somas de quadrado na análise de variância, as médias de tratamentos ajustadas para blocos e a variância da estimativa de um contraste entre as médias de tratamentos, considerando os métodos de análise intrablocos e com recuperação de informação interblocos para o caso de um ensaio em blocos incompletos parcialmente balanceados (PBIB), aumentado pela adição de tratamentos comuns a todos os blocos.

Os delineamentos em blocos incompletos podem ser classificados em duas categorias, conforme o agrupamento dos seus blocos:

- i) *resolvable designs* - casos em que os blocos podem ser agrupados em repetições;

ii) *non-resolvable designs* - casos em que os blocos não podem ser agrupados em repetições.

Bailey (1999) lembra que as duas principais propriedades dos delineamentos em blocos incompletos são o balanceamento e a solubilidade (*resolvability* - propriedade de ser agrupado em repetições completas). Em um delineamento *resolvable*, r é um múltiplo do número de superblocos (repetições).

2.1.1 Análise de variância intrablocos

Há dois tipos bem diferentes de análises dos experimentos em blocos incompletos:

i) análise intrablocos, em que só comparações entre parcelas do mesmo bloco são usadas nas estimativas dos efeitos dos tratamentos;

ii) análise com recuperação da informação interblocos, em que as comparações entre blocos são também aproveitadas na estimação dos efeitos de tratamentos.

A análise intrablocos pode ser usada para qualquer experimento em blocos incompletos e se baseia em métodos estatísticos exatos. A análise com recuperação da informação interblocos, por outro lado, permite aproveitar melhor os dados, mas usa métodos estatísticos apenas aproximados e só deve ser usada para experimentos com número de graus de liberdade relativamente grande para blocos e para o resíduo (Pimentel Gomes, 2000).

Na análise de variância com recuperação da informação interblocos os efeitos de blocos são tomados como sendo aleatórios, essa informação é combinada com a fornecida pelo contraste de parcelas dentro dos blocos e usada na análise intrablocos, para a obtenção de soluções mais precisas para os efeitos de tratamentos. Os efeitos de blocos são considerados com sendo normais e independentemente distribuídos com média zero e variância σ_b^2 .

2.1.2 Delineamentos em blocos incompletos parcialmente balanceados

Bose & Nair (1939) desenvolveram uma classe de delineamentos em blocos incompletos parcialmente balanceados, para situações em que não é possível montar um delineamento balanceado. De acordo com Nair (1952), um delineamento pertence a essa classe se:

1. há v tratamentos arranjados em b blocos e cada bloco contém k diferentes tratamentos ($k < v$);
2. cada tratamento ocorre em r blocos;
3. fixando-se um tratamento qualquer, os restantes podem ser agrupados em m grupos contendo n_1, n_2, \dots, n_m tratamentos, de modo que os n_i tratamentos do i -ésimo grupo ocorram com esse tratamento λ_i vezes. (Os tratamentos do i -ésimo grupo são chamados de i -ésimos associados do tratamento em questão. Os valores de $n_1, n_2, \dots, n_m, \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$ são independentes do tratamento inicialmente considerado. Alguns dos λ 's podem ser iguais.);
4. o tratamento A é i -ésimo associado de B , o tratamento B é também i -ésimo associado de A . (Se A e B são i -ésimos associados, p_{jk}^i representa o número de tratamentos comuns aos j -ésimos associados de A e k -ésimos associados de B , e são independentes do par de tratamentos que se considera.)

Verificam-se as seguintes relações entre os parâmetros, de acordo com Hinkelmann & Kempthorne (2005):

$$\begin{aligned}
rv &= bk \\
\sum_{i=0}^m n_i &= v \\
\sum_{i=0}^m n_i \lambda_i &= rk \\
\sum_{i=0}^m p_{ij}^k &= n_j \\
p_{ij}^k &= p_{ji}^k \\
n_k p_{ji}^k &= n_i p_{kj}^i = n_j p_{ik}^j
\end{aligned}$$

Os termos $v, b, r, k, n_1, n_2, \dots, n_m, \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$ são chamados de parâmetros de primeiro tipo, enquanto os p_{ij}^k são os parâmetros de segundo tipo.

2.2 Teoria de modelos mistos

A teoria dos modelos mistos foi desenvolvida no final da década de 40 e baseia-se em modelos lineares que contêm efeitos fixos e aleatórios. Sua aplicação é de grande interesse no estudo de relações funcionais entre variáveis, sejam elas de natureza quantitativa ou qualitativa.

Entende-se por modelo fixo aquele que apresenta todos os seus efeitos fixos, com exceção feita ao erro experimental, que é de natureza aleatória. Se apresentar todos os efeitos aleatórios, com exceção de uma constante (média geral), é classificado como modelo aleatório; caso possua efeitos fixos e aleatórios, é denominado modelo misto.

Para se decidir se um conjunto de efeitos será considerado como fixo ou aleatório, tomam-se, como idéia principal, as inferências extraídas do experimento e, portanto, o processo de amostragem. Se os interesses centralizam nos exatos níveis dos tratamentos no experimento, então os tratamentos devem ser considerados efeitos fixos (constantes). Nesse caso, os níveis

dos tratamentos representam a população inteira dos tratamentos para os quais as inferências serão aplicadas. Por outro lado, se as conclusões dos tratamentos são aplicadas a uma população mais ampla, da qual os níveis dos tratamentos de um certo fator no experimento são uma amostra, então o fator é aleatório (White & Hodge,1989).

Ainda segundo os autores mencionados, a definição de um modelo como fixo, aleatório ou misto está associada à possibilidade de se estimarem parâmetros do modelo ou de se prever o comportamento de suas variáveis aleatórias para um conjunto de observações. Isso porque se diz que os parâmetros populacionais (esperanças de efeitos fixos e variâncias populacionais de variáveis aleatórias) são estimáveis, enquanto as variáveis aleatórias podem ser preditas, mas não estimadas, pois não possuem valor fixo *per se*. Mas, numa amostra dos seus possíveis valores, podem-se obter indicadores de sua esperança, conhecendo-se sua distribuição na suposição de o efeito aleatório estar correlacionado ao caráter observado.

Para Anderson & McClean (1974), um dos objetivos da análise do modelo linear é a estimação dos efeitos fixos. Um exemplo desse tipo de análise é a do modelo misto, usualmente empregado para um delineamento em blocos casualizados, em que os blocos são considerados aleatórios e os tratamentos, fixos, mas o objetivo é fazer inferências sobre o conjunto fixo de efeitos dos tratamentos. Os blocos não são de qualquer interesse particular e são considerados aleatórios, para permitir que as inferências sobre os tratamentos sejam aplicadas a uma população mais ampla de blocos, nas quais os tratamentos sejam testados.

Em geral, escreve-se o modelo misto da seguinte maneira:

$$\mathbf{y} = X\boldsymbol{\beta} + Z\mathbf{b} + \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (1)$$

em que:

\mathbf{y} é o vetor de observações de dimensões (nx1); n, o número de observações;

X é a matriz de incidência para efeitos fixos ($n \times p$); p , o número de parâmetros associados aos efeitos fixos;

β o vetor de parâmetros fixos ($p \times 1$);

Z é a matriz de incidência para efeitos aleatórios ($n \times q$); q , o número de parâmetros associados aos efeitos aleatórios;

b é o vetor de parâmetros aleatórios;

ε é o vetor de resíduos ($n \times 1$).

2.3 Superfícies de resposta

A metodologia da superfície de resposta (MSR) é um conjunto de técnicas matemáticas e estatísticas úteis na modelagem e na análise em aplicações em que a resposta de interesse é influenciada por diversas variáveis e o objetivo é otimizar a resposta (Montgomery, 2004). A abordagem geral MSR foi desenvolvida no início da década de 50, tendo sido aplicada inicialmente na indústria química com considerável sucesso. Nos últimos 20 anos, a MSR vem tendo extensa aplicação em uma ampla variedade de contextos industriais, muito além de suas origens em processos químicos, inclusive na fabricação de semicondutores e de artigos eletrônicos, corte de metais e processos de junção, entre outros.

A literatura sobre metodologia de superfície de resposta é extensa, mostrando as aplicações a diferentes campos de pesquisa, bem como o desenvolvimento na área de construção de delineamentos ótimos na análise estatística de superfície.

Segundo Mead & Pike (1975), essas primeiras idéias sobre superfícies de resposta apareceram em estudos que envolviam curvas de crescimento para animais e plantas, na análise de próbites, mas seu maior desenvolvimento ocorreu nas tentativas de relacionamento entre produção de uma determinada cultura e níveis de fertilizantes.

O grande impulso dado na análise de dados experimentais, por meio de superfície de resposta, foi dado pelo trabalho de Box & Wilson (1951), em que os autores desenvolveram métodos de determinação de condições ótimas em pesquisas industriais. Nesse trabalho, os autores introduziram a função polinomial com duas ou mais variáveis independentes, como uma boa aproximação da função de resposta, e apresentaram delineamentos de tratamentos com o objetivo de se encontrar um ponto na região experimental de interesse em que a resposta é máxima, utilizando, para isso, o menor número possível de pontos.

No campo agrônomo, a função polinomial de resposta tem sido largamente empregada em ensaios de adubação. Além da função polinomial, há ainda outros modelos matemáticos de curvas de superfície de resposta que podem ser empregados como, por exemplo, a função polinomial da raiz quadrada inversa, curvas com platô e curvas com exponenciais, como se pode observar nos trabalhos de Vieira (1970).

Heady & Pesek (1954) trabalharam com a aplicação da superfície de resposta em um experimento fatorial de adubação com os nutrientes nitrogênio (N) e fósforo (P) na cultura de milho. Nesse trabalho, foi estudado o comportamento de cada nutriente na presença das doses de 0, 160 e 320 libras/acre na presença do outro, com a organização de gráficos ilustrativos dos cortes realizados. Nesse caso, os estudiosos verificaram que, quando o N foi fixado na dose zero, houve um decréscimo no rendimento.

Morais (1982), com o objetivo de verificar a relação entre a produção e os níveis de adubação, por meio do uso da metodologia de superfície de resposta, estudou um modelo de regressão polinomial quadrático, tendo a preocupação de considerar algumas variáveis auxiliares adicionais ao modelo, com vistas à obtenção de fórmulas que permitissem avaliar o comportamento da produção ante a inclusão dessas últimas. Foi aplicada a metodologia em dados provenientes de um experimento de adubação N-P-K em cafeeiro, em que se considerou a produção como variável dependente, e altura da

planta, diâmetro da copa e número de internódios, como variáveis auxiliares adicionais. Entre outras conclusões, verificou-se que as variáveis auxiliares que mais contribuíram para a redução da variância residual foram a altura da planta e o diâmetro da copa.

Para Khuri & Cornell (1996), os métodos de superfície de resposta são empregados em delineamentos e análise das fases. A fase do delineamento é importante porque define como os dados são coletados e quantos são. Na análise dos dados, o objetivo é fornecer explicações plausíveis da evidência experimental. Assim, o delineamento do experimento e a análise dos dados, em conjunto, ajudam o experimentador a descobrir quais fatores são importantes, qual o papel que cada fator representa no sistema e por que esses fatores são importantes.

2.4 Inferência bayesiana

Pode-se dizer que existem dois enfoques ou duas correntes de pensamento bem distintos para a inferência em Estatística: o enfoque freqüentista e a corrente da chamada inferência bayesiana.

Segundo o enfoque freqüentista, o conceito de probabilidade corresponde ao de freqüência relativa, em que a população é descrita por um modelo probabilístico que é função de constantes (parâmetros) desconhecidas.

Já a inferência bayesiana é o processo pelo qual se encontra um modelo de probabilidade para um conjunto de dados e se resume o resultado por uma distribuição de probabilidade sobre os parâmetros do modelo e sobre quantidades não observadas, tais como predição para novas observações (Gelman et al., 2000). Essa corrente de pensamento não é recente, mas tem alcançado um grande prestígio, num ritmo intenso, nas últimas décadas, em parte devido ao avanço dos recursos computacionais.

Uma das diferenças principais entre a inferência bayesiana e a freqüentista é que, para a primeira, o parâmetro θ é interpretado como variável

aleatória, em função da confiança maior ou menor do pesquisador de que o parâmetro esteja contido em determinados intervalos. Já para a inferência freqüentista, o parâmetro é um valor fixo ou constante, além de não levar em conta a informação disponível *a priori* como a bayesiana faz.

O pesquisador, quando acrescenta um conhecimento prévio que se tenha sobre o parâmetro θ à sua análise, está especificando a densidade *a priori* de θ , $p(\theta)$, a qual, antes da observação de y , contém a distribuição de probabilidade de θ . Nesse caso, é bom lembrar que o parâmetro θ pode ser um escalar ou um vetor de parâmetros.

A distribuição priori é uma parte importante da inferência bayesiana e representa a informação sobre um parâmetro desconhecido θ , isto é, combinado com a distribuição de probabilidade dos novos dados para fornecer a distribuição posteriori, a qual é usada para inferências e decisões futuras envolvendo θ (Gelman, 2002).

Para um melhor esclarecimento, descrevem-se abaixo as principais características de uma e de outra formas de distribuição:

1 - Priori informativa

Quando o pesquisador tem alguma informação prévia sobre o parâmetro em questão, ele pode usar uma priori informativa, descrevendo uma densidade $p(\theta)$, por sua vez, especificada com o auxílio de constantes chamadas de hiperparâmetros, pois são os parâmetros da distribuição dos parâmetros. Inicialmente, os hiperparâmetros são considerados conhecidos e traduzem a informação que se tem sobre o parâmetro, antes da realização da amostra (Silva, 2005).

2 - Priori não informativa

Quando se tem pouca ou nenhuma informação sobre o parâmetro ou a verossimilhança é dominante, tende-se a pensar em todos os possíveis valores para θ como igualmente prováveis, ou seja, com uma distribuição *a priori* uniforme:

$$p(\theta) \propto k,$$

em que θ é limitado em um intervalo real.

Distribuições prioris não informativas são planejadas para se fazer inferência bayesiana aos parâmetros desconhecidos, além dos dados incluídos na análise em mãos (Gelman, 2005). Quando o valor de um parâmetro é desconhecido, Jefreys (1961) propõe duas regras para a escolha da distribuição *a priori*, as quais, segundo ele, atingem os casos mais comuns. Assim, fica estabelecido que:

1 - se o parâmetro pode assumir qualquer valor em um domínio finito ou $(-\infty, \infty)$, uma distribuição *a priori* deve ser considerada como uma distribuição uniforme. No caso de o parâmetro pertencer ao intervalo $(-\infty, \infty)$, essa distribuição não será própria no sentido de que sua integral no domínio não será 1 (um);

2 - no caso em que o parâmetro só pode assumir valores positivos, isto é, no intervalo $(0, \infty)$, a distribuição *a priori* do seu logaritmo deverá ser considerada como uniforme, também, em $(-\infty, \infty)$.

Uma classe de prioris não informativas é proposta pelo autor. Nela se emprega a medida de informação esperada de Fisher de θ mediante y :

$$I(\theta) = E[(d^2 \log\{p(y|\theta)\}/d\theta^2|\theta].$$

Box & Tiao (1992) afirmam haver duas regras a serem consideradas: 1-*Regra de Jeffreys para o caso uniparamétrico*: a distribuição *a priori* para um único parâmetro θ é aproximadamente não informativa se for proporcional à raiz quadrada da medida de informação de Fisher:

$$p(\theta) \propto [I(\theta)]^{1/2}.$$

2-*Regra de Jeffreys para o caso multiparamétrico*: a distribuição *a priori* para um conjunto de parâmetros é proporcional à raiz quadrada do determinante da matriz de informação de Fisher:

$$p(\theta) \propto \det|I(\theta)|^{1/2}.$$

2.4.1 Distribuição *a posteriori*

De acordo com Gelman (2002), a distribuição posteriori resume o estado atual de conhecimento sobre todas as quantidades incertas (incluindo parâmetros não observáveis, bem como dados potenciais não observáveis, latentes ou ausentes) na análise bayesiana. Analiticamente, a densidade posteriori é o produto da densidade priori e a verossimilhança. Em uma análise complexa, a distribuição posteriori pode ser resumida por um conjunto de L simulações obtidas a partir do vetor de quantidades incertas w_1, \dots, w_J , como ilustrado na seguinte matriz:

l	w_1	w_2	\dots	w_J
1	.	.	\dots	.
2	.	.	\dots	.
\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots
L	.	.	\dots	.

A distribuição marginal posteriori para qualquer quantidade desconhecida w_l pode ser determinada por sua coluna das L simulações obtidas. Em muitos exemplos, não é necessário construir toda tabela previamente. Ao contrário, criam-se L vetores de simulações posterioris para os parâmetros do modelo e, então, usam-se estes para construir simulações posterioris para outras quantidades desconhecidas de interesse (predição), conforme seja necessário.

2.4.2 Teorema de Bayes

A natureza da inferência bayesiana, reconhecendo-se a subjetividade no processo de busca do conhecimento, está assentada em uma reunião do que os dados (amostra) têm de informação e no conhecimento pré-existente (subjetivo) a respeito dos parâmetros. Essa reunião torna-se possível por meio do Teorema de Bayes, daí o termo inferência bayesiana.

A reunião dos dados da amostra com o conhecimento anterior é possível pelo Teorema de Bayes, que é dado por:

$$P[A_i|B] = \frac{P[B|A_i]P[A_i]}{\sum_{i=1}^n P[B|A_i]P[A_i]},$$

em que os eventos A_i perfazem uma partição disjunta do espaço amostral, e B é um evento do espaço amostral. Dessa forma, tem-se, igualmente, que:

$$\sum_{i=1}^n P[B|A_i]P[A_i] = P[B].$$

A reunião do conhecimento anterior com os dados pode ser feita interpretando-se:

A como parâmetros populacionais desconhecidos;

B como variáveis aleatórias correspondentes à amostra.

Dessa forma, $P[B|A]$ nada mais é do que a função de verossimilhança, pois corresponde ao modelo que descreve a distribuição probabilística dos dados, fixado certo valor para o(s) parâmetro(s) da população. A interpretação de $P[A]$ corresponde exatamente à distribuição acerca de A , ou seja, quantifica (expressa) o conhecimento anterior que se tenha acerca do parâmetro desconhecido, mediante um modelo probabilístico. Finalmente, $P[A|B]$ corresponde à distribuição *a posteriori*, ao conhecimento atualizado que se obteve dos parâmetros, depois da observação da amostra, ou seja, é o comportamento probabilístico que se credita aos parâmetros, dado que a amostra ocorreu. A partir dessa distribuição atualizada, é possível mapear as probabilidades para valores em todo o domínio dos parâmetros, tendo a quantificação da experiência do pesquisador como referência.

Em geral, a priori é uma função de densidade $p(\theta)$, em que θ é contínuo. Então, a densidade *a posteriori* $p(\theta|y)$ é dada pelo Teorema de Bayes:

$$p(\theta|y) = \frac{L(Y|\theta)p(\theta)}{\int L(Y|\theta)p(\theta)d\theta},$$

em que $Y = \{y_1, y_2, \dots, y_n\}$.

O denominador não traz nenhuma nova informação a respeito de θ , servindo antes como um “padronizador”, também chamado de “constante normalizadora”. Assim, o teorema pode ser reescrito como:

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

ou seja, a distribuição para θ posterior aos dados é proporcional ao produto da distribuição *a priori* para θ e a verossimilhança de θ , dado y (Box & Tiao, 1992).

Assim realizaram-se as inferências sobre as distribuições de probabilidade conjunta *a posteriori* e, na maioria dos casos, deseja-se encontrar uma distribuição para um parâmetro específico. A forma de encontrar tal distribuição, chamada distribuição marginal, está na integração da distribuição posteriori conjunta, obtendo uma função dessa integral para o parâmetro de interesse θ_i , isto é,

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

em que θ_{-i} é o conjunto complementar de parâmetros para θ_i (Silva, 2004).

Acontece que, em muitas ocasiões, a resolução dessa integral, analiticamente, é impraticável, devido à sua forma complexa. Nessas situações, a amostragem Gibbs é uma boa alternativa para a obtenção de $f(\theta_i)$, método inicialmente utilizado por Gelfand & Smith (1990), na Estatística, e anteriormente elaborado por Geman & Geman (1984). Tal método consiste em um processo iterativo que gera valores convergentes para a densidade marginal, sem se que conheça a sua expressão.

Além disso, ocorre que, se a distribuição condicional completa *a posteriori* não for uma densidade conhecida, podem-se utilizar outros métodos de simulação, tais como: a amostragem por importância (Paulino et al., 2003), o *slice sampling* proposto por Neal (2003), a amostragem por aceitação e rejeição e o *Metropolis-Hastings* (Chib & Greenberg, 1995; Hastings, 1970).

2.4.3 Amostrador de Gibbs

O amostrador de Gibbs é, essencialmente, um esquema iterativo de amostragem de uma cadeia de Markov, cujo núcleo de transição é formado pelas distribuições condicionais completas (Gamerman, 1996). Trata-se de uma técnica para gerar variáveis aleatórias de uma distribuição marginal sem que se conheça a sua densidade. A idéia do método de Monte Carlo via Cadeia de Markov consiste em simular um passeio aleatório no espaço do parâmetro θ , o qual converge para uma distribuição estacionária, que é a distribuição *a posteriori* $P(\theta|Z_v)$, em que Z_v é o vetor de observações. Essa distribuição é dita estacionária porque não sofre alterações caracterizadas por picos ou por tendências direcionais, constituindo, assim, uma base estável, ou confiável, para o processo de estimação.

Suponha-se uma distribuição $\pi(\theta)$, em que $\theta = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_p)$. No contexto da inferência bayesiana, o interesse está em amostrar valores das densidades condicionais completas *a posteriori* $\pi_i(\theta_i|\theta_{-i}), i = 1, \dots, p$.

O algoritmo do amostrador de Gibbs pode ser descrito mediante os seguintes passos:

1 - inicia-se o contador de iterações da cadeia $j = 1$ e arbitram-se valores iniciais $\theta^{(0)} = (\theta_1^{(0)}, \dots, \theta_p^{(0)})$;

2 - obtém-se um novo valor $\theta^{(j)} = (\theta_1^{(j)}, \dots, \theta_p^{(j)})$ a partir de $\theta^{(j-1)}$, por meio de sucessivas gerações de valores:

$$\begin{aligned}\theta_1^{(j)} &\sim \pi(\theta_1|\theta_2^{(j-1)}, \dots, \theta_p^{(j-1)}) \\ \theta_2^{(j)} &\sim \pi(\theta_2|\theta_1^{(j)}, \theta_3^{(j-1)}, \dots, \theta_p^{(j-1)}) \\ &\vdots \\ \theta_p^{(j)} &\sim \pi(\theta_p|\theta_1^{(j)}, \dots, \theta_{p-1}^{(j)}); \end{aligned}$$

3 - muda-se o contador j para $j+1$ e retorna-se ao passo 2 até a convergência ser alcançada.

À medida que o número j de iterações aumenta, a seqüência de valores gerados se aproxima da distribuição de equilíbrio, ou seja, da densidade marginal desejada, quando se assume que a convergência foi atingida.

3 METODOLOGIA

3.1 Material

Neste trabalho, foi simulado um experimento em blocos incompletos, parcialmente balanceados, sendo constituído por 16 tratamentos regulares (nitrogênio e adubação foliar) e 2 comuns (testemunhas), com uma variável resposta fictícia, produção dos citros (caixas/ha), chamada de “Produção” na massa de dados apresentada na Tabela 1.

O modelo para a superfície de resposta foi:

$$S_{ijl} = 100 + (1 - \theta)(0,8N_i - 0,005N_i^2 + 0,5A_j - 0,001A_j^2 + 0,0005N_iA_j) + \theta\tau_l, \quad (2)$$

em que:

S_{ijl} são os valores simulados da variável resposta produção observada no nível i de N e j de A ;

N_i é o valor da dose i de nitrogênio, sendo atribuídos os seguintes valores: 0, 30, 60, 90, 120 Kg/ha;

A_j é o valor da dose j de adubação foliar, com os seguintes valores: 0, 90, 180, 270, 360 mg/l solução de magnésio;

θ é a variável indicadora que recebe o valor 1 para as testemunhas e 0 para os demais tratamentos;

τ_l é o efeito das testemunhas: $l = 17$ para a testemunha sem água e $l = 18$ para a testemunha com água.

Tabela 1: Massa de dados simulada

Rep.	Bloco	Trat.	Test.	Nitrogênio	Ad. Foliar	Produção
1	1	1	0	30	90	158,04
1	1	6	0	60	180	190,59
1	1	11	0	90	270	204,02
1	1	16	0	120	360	203,16
1	1	17	1	0	0	93,40
1	2	2	0	30	180	180,09
1	2	7	0	60	270	201,75
1	2	12	0	90	360	201,26
1	2	13	0	120	90	163,71
1	2	18	1	0	0	101,21
1	3	3	0	30	270	181,39
1	3	8	0	60	360	185,82
1	3	9	0	90	90	173,18
1	3	14	0	120	180	190,48
1	3	18	1	0	0	102,72
1	4	4	0	30	360	173,02
1	4	5	0	60	90	170,32
1	4	10	0	90	180	194,93
1	4	15	0	120	270	198,21
1	4	17	1	0	0	99,49
2	5	4	0	30	360	161,66
2	5	7	0	60	270	195,27
2	5	10	0	90	180	196,18
2	5	13	0	120	90	165,29
2	5	18	1	0	0	97,28
2	6	3	0	30	270	188,93
2	6	6	0	60	180	201,47

...continua...

Tabela 1: Cont.

Rep.	Bloco	Trat.	Test.	Nitrogênio	Ad. Foliar	Produção
2	6	9	0	90	90	175,00
2	6	16	0	120	360	196,88
2	6	17	1	0	0	98,51
2	7	2	0	30	180	181,95
2	7	5	0	60	90	177,94
2	7	12	0	90	360	188,57
2	7	15	0	120	270	208,48
2	7	17	1	0	0	94,53
2	8	1	0	30	90	161,50
2	8	8	0	60	360	192,10
2	8	11	0	90	270	197,15
2	8	14	0	120	180	198,00
2	8	18	1	0	0	105,87
3	9	1	0	30	90	153,01
3	9	7	0	60	270	204,67
3	9	10	0	90	180	208,34
3	9	16	0	120	360	197,33
3	9	17	1	0	0	97,17
3	10	3	0	30	270	183,38
3	10	6	0	60	180	183,89
3	10	12	0	90	360	199,81
3	10	13	0	120	90	157,38
3	10	17	1	0	0	99,39
3	11	2	0	30	180	180,15
3	11	8	0	60	360	192,16
3	11	9	0	90	90	174,54
3	11	15	0	120	270	198,89
3	11	18	1	0	0	102,36

...continua...

Tabela 1: Cont.

Rep.	Bloco	Trat.	Test.	Nitrogênio	Ad. Foliar	Produção
3	12	4	0	30	360	182,23
3	12	5	0	60	90	172,67
3	12	11	0	90	270	211,61
3	12	14	0	120	180	191,21
3	12	18	1	0	0	100,97

3.2 Modelo da simulação do experimento

O modelo experimental adotado consiste em um PBIB (em português, Delineamento em Blocos Incompletos Parcialmente Balanceados), cujas equação e ilustração da distribuição dos tratamentos, de acordo com o delineamento, são dadas a seguir:

$$y_{ijkl} = S_{ijl} + b_k + \varepsilon_{ijkl}, \quad (3)$$

em que:

y_{ijkl} é a resposta observada da variável produção no nível i de N e j de A ou l de testemunha para o bloco k ;

S_{ijl} são os valores simulados;

b_k é o efeito do k -ésimo bloco simulado de uma distribuição $N(0, 9)$;

ε_{ijkl} é o erro experimental simulado de uma distribuição $N(0, 25)$.

O delineamento resultante ($v^* = 18$ tratamentos) é a composição de um PBIB resolvido, otimizado para um fatorial 4×4 , triplo, aumentado de 1 testemunha por bloco, com $v = 16$ tratamentos em $r = 3$ superblocos (repetições), 4 blocos por superblocos, num total de $b = 12$ blocos e $k = 4$ unidades experimentais por bloco, sendo que, em cada um, foi adicionada uma testemunha (com ou sem água). *

*É importante salientar que não foi simulado o efeito de repetição, mas ele será levado em conta na análise.

Tabela 2: Plano otimizado obtido com o aplicativo java “DEW”, (Edmondson, 2005)

Blocos	Trat. Regulares	Test	Rep
1	1,6,11,16	17	
2	2,7,12,13	18	I
3	3,8,9,14	18	
4	4,5,10,15	17	
5	4,7,10,13	18	
6	3,6,9,16	17	II
7	2,5,12,15	17	
8	1,8,11,14	18	
9	1,7,10,16	17	
10	3,6,12,13	17	III
11	2,8,9,15	18	
12	4,5,11,14	18	

Nota-se que, nesse delineamento, tomando-se um tratamento qualquer, é possível agrupar os demais em três grupos distintos, de modo que os tratamentos do primeiro grupo ocorram juntos com o dado tratamento, em um bloco do experimento, havendo repetição. Caso não haja, esses tratamentos pertencem ao segundo grupo e, por fim, ao terceiro grupo correspondem os tratamentos que não ocorram juntos em nenhum bloco com o tratamento dado. Os tratamentos dos três grupos são chamados, respectivamente, de *primeiros*, *segundos* e *terceiros associados* do tratamento em questão e todos os tratamentos, com suas respectivas classes de associados do exemplo em estudo, estão apresentados na Tabela 3:

Tabela 3: Esquema de associação dos tratamentos do PBIB

Trat	1 ^{os} associados	2 ^{os} associados	3 ^{os} associados
1	11,16	6,7,8,10,14	2,3,4,5,9,12,13,15
2	12,15	5,7,8,9,13	1,3,4,6,10,11,14,16
3	9,6	8,12,13,14,16	1,2,3,4,5,7,10,11,15
4	5,10	7,11,13,14,15	1,2,3,6,8,9,12,16
5	4,15	2,10,11,12,14	1,3,5,6,7,8,9,13,16
6	3,16	1,9,11,12,13	2,4,5,7,8,10,14,15
7	10,13	1,2,4,12,16	3,5,6,8,9,11,14,15
8	9,14	1,2,3,11,15	4,5,6,7,10,12,13,16
9	8,3	2,6,14,15,16	1,4,5,7,10,11,12,13
10	4,7	1,5,13,15,16	2,3,6,8,9,11,12,14
11	1,14	4,5,6,8,16	2,3,7,9,10,12,13,15
12	2,13	3,5,6,7,15	1,4,8,9,10,11,14,16
13	7,12	2,3,4,6,10	1,5,8,9,11,14,15,16
14	8,11	1,3,4,5,9	2,6,7,10,12,13,15,16
15	2,5	4,8,9,10,12	1,3,6,7,11,13,14,16
16	1,6	3,7,9,10,11	2,4,5,8,12,13,14,15

Vê-se que, para cada tratamento, há 2 primeiros associados, 5 segundos associados e 8 terceiros associados. Não foram incluídas na tabela as testemunhas, pois possuem alto grau de associação, sendo, assim, primeiras associadas com todos os tratamentos. Isso se deve ao fato de que há repetição em cada bloco.

Dessa forma, os parâmetros de primeiro tipo são:

$$n_0 = 1, \quad \lambda_0 = 3,$$

$$n_1 = 2, \quad \lambda_1 = 2,$$

$$n_2 = 5, \quad \lambda_2 = 1,$$

$$n_3 = 8, \quad \lambda_3 = 0.$$

3.3 Modelo da análise e suas pressuposições

A teoria de modelos mistos, desenvolvida em 1949 por Henderson, baseia-se em modelos lineares que contêm efeitos fixos e aleatórios. Assim:

$$\mathbf{y} = X\boldsymbol{\beta} + Z\mathbf{b} + \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (4)$$

em que:

- \mathbf{y} é um vetor de dimensões (nx1) das observações, n é o número de observações;
- $\boldsymbol{\beta}$ é o vetor de dimensões (px1) dos parâmetros de efeitos fixos, p é o número de parâmetros associados aos efeitos fixos. Nesse caso específico, $\boldsymbol{\beta} = (\beta_0, r_2, r_3, t_2, \dots, t_{18})$, sendo que β_0 é uma constante experimental associada ao intercepto ($\mu + r_1 + t_1$) para o modelo superparametrizado, em que μ é a média geral, r_1 é o efeito da repetição 1 e t_1 é o efeito do tratamento 1;
- \mathbf{b} é o vetor de dimensões (qx1) dos parâmetros de efeitos aleatórios, q é o número de parâmetros associados aos efeitos aleatórios;
- $\boldsymbol{\varepsilon}$ é o vetor de resíduos (nx1);
- X é a matriz nxp de incidência dos efeitos fixos;
- Z é a matriz nxq de incidência dos efeitos aleatórios.

A par de tais considerações, os vetores definidos acima seguem as seguintes distribuições:

$$\begin{aligned} \mathbf{y} &\sim N(X\boldsymbol{\beta}, I\sigma_e^2); \\ \mathbf{b} &\sim N(\boldsymbol{\phi}, I\sigma_b^2); \\ \boldsymbol{\varepsilon} &\sim N(\boldsymbol{\phi}, I\sigma_e^2); \end{aligned}$$

sendo que $\boldsymbol{\phi}$ representa um vetor nulo de dimensão igual à do vetor considerado.

3.4 Estimação REML

A equação matricial para a análise do modelo misto é definida pela equação (5) e o método adotado para se estimarem as componentes de variância foi a função *lme* do software R[®] v.2.1.1 (R, 2005), que, como padrão, executa 25 passos de EM e ao menos 1 passo final de Newton Raphson (Pinheiro & Bates, 2000). Para detalhes de implementação de ambos os algoritmos, pode-se consultar a revisão de Searle (1992). Alguns passos do algoritmo EM úteis na determinação das matrizes de variância e covariância das estimativas serão apresentadas, apenas por questões didáticas e de continuidade com outros elementos do texto.

Tomando-se valores iniciais para a estimativa da componente de variância σ_b^2 , relativa a \mathbf{b} e um valor inicial para a variância do erro σ_e^2 . tem-se que as soluções de β^0 e $\hat{\mathbf{b}}$ são dadas pela seguinte relação matricial:

$$\begin{pmatrix} \beta^0 \\ \hat{\mathbf{b}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X'X & X'Z \\ Z'X & Z'Z + \frac{\sigma_e^2}{\sigma_b^2}I \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} X'\mathbf{y} \\ Z'\mathbf{y} \end{pmatrix}, \quad (5)$$

em que X' e X^- representam a transposta e a inversa generalizada de X , respectivamente.

As equações contidas nessa relação matricial compõem o chamado Sistema de Equações do Modelo Misto de Henderson (Henderson, 1953). Em posse dessa solução de β e \mathbf{b} , as componentes de variância são reestimadas por:

$$\hat{\sigma}_e^2 = \frac{\mathbf{y}'\mathbf{y} - \beta^{0'}X'\mathbf{y} - \hat{\mathbf{b}}'Z'\mathbf{y}}{n - r(X)};$$

$$\hat{\sigma}_b^2 = \frac{\hat{\mathbf{b}}' + tr(C_{22})\hat{\sigma}_e^2}{p};$$

em que:

$r(X)$ é o posto da matriz X ;

n é a dimensão do vetor \mathbf{y} ;

$tr(C_{22})$ representa o traço de C_{22} , correspondente à parte $Z'Z + \frac{\sigma_e^2}{\sigma_b^2}I$ da matriz:

$$V = \begin{pmatrix} X'X & X'Z \\ Z'X & Z'Z + \frac{\sigma_e^2}{\sigma_b^2}I \end{pmatrix}^{-1}. \quad (6)$$

Tais estimativas atualizadas das componentes são novamente substituídas nas equações de Henderson e, assim, sucessivamente, até a convergência.

3.5 Análise bayesiana

Nessa forma de análise, todos os parâmetros do modelo são considerados como variáveis aleatórias, conforme o conceito subjetivo de probabilidade (O'Hagan, 1994). Empregando-se uma generalização do teorema de Bayes, informações *a priori* sobre os parâmetros são utilizadas em associação com os dados amostrais (representados no teorema pela função de verossimilhança), o que possibilita uma inferência *a posteriori* sobre os parâmetros (Box & Tiao, 1992). Elementos necessários para uma análise bayesiana do modelo linear misto estão descritos a seguir, conforme Sorensen (1996).

Seja a distribuição condicional dos dados \mathbf{y} uma normal multivariada:

$$\mathbf{y}|\boldsymbol{\beta}, \mathbf{b}, \sigma_e^2, \sigma_b^2 \sim N(X\boldsymbol{\beta} + Z\mathbf{b}, I\sigma_e^2).$$

Assim, a função de verossimilhança é dada por:

$$L(\mathbf{y}|\boldsymbol{\beta}, \mathbf{b}, \sigma_e^2, \sigma_b^2) = \left(\frac{1}{2\pi\sigma_e^2}\right)^{\frac{n}{2}} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma_e^2}(\mathbf{y} - X\boldsymbol{\beta} - Z\mathbf{b})'(\mathbf{y} - X\boldsymbol{\beta} - Z\mathbf{b})\right\}. \quad (7)$$

O passo seguinte corresponde à definição das distribuições *a priori* dos diferentes parâmetros do modelo.

3.5.1 Especificação das prioris

É comum encontrar-se, na literatura, a suposição de que não haja informação prévia a respeito dos efeitos fixos β . Assim, pode-se definir uma priori não informativa por meio de uma distribuição constante ou uniforme, o que é uma maneira de caracterizar total desconhecimento da distribuição de β , segundo Sorensen (1996). Ou seja:

$$p(\beta) \propto K,$$

em que K é uma constante.

Dessa forma, adotou-se essa abordagem não informativa para fins de comparação com a análise REML.

Para manter a consistência, ao se supor que os efeitos fixos tenham distribuição vaga, é razoável supor, também, que as componentes da variância terão distribuição correspondentemente pouco informativas. Assim, neste estudo, foi assumida uma priori Qui-Quadrado Inversa Escalada para as componentes da variância, diversificando os valores dos hiperparâmetros, pois são eles que vão fornecer a informação prévia que se tem em cada caso. Então, neste estudo, foram consideradas, para as componentes da variância, σ_e^2 e σ_b^2 , conforme se apresenta a seguir:

$$\sigma_e^2 \sim Inv - \chi^2(2, 5);$$

$$\sigma_b^2 \sim Inv - \chi^2(2, 5).$$

Para tais distribuições *a priori* das componentes da variância, a distribuição *a priori* da correlação intraclasse $\frac{\sigma_b^2}{\sigma_b^2 + \sigma_e^2}$ fica sendo uniforme, conforme se apresenta na Figura 1.

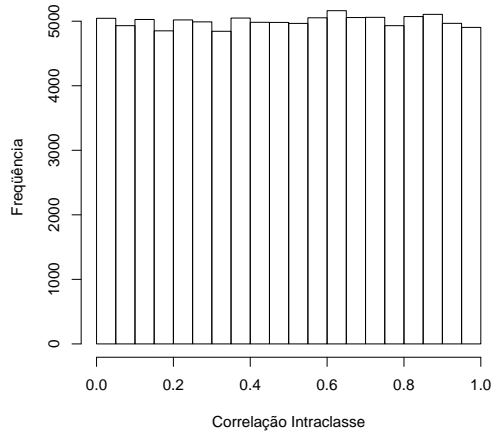


Figura 1: Histograma de uma amostra de 100000 valores da distribuição *a priori* da correlação intraclass

O uso de uma distribuição Qui-quadrado Inversa Escalada não ocorreu por mero acaso e, sim, por razões matemáticas, já que ela conduz a uma integral de fácil resolução e a uma posteriori de natureza semelhante, ou seja, tem-se um caso de uma priori conjugada. Prioris conjugadas pouco informativas são uma maneira conveniente de se comparar a análise bayesiana à análise de verossimilhança correspondente (Bernardo & Smith, 1994).

Não existe nenhum obstáculo, do ponto de vista teórico, para o uso de prioris não-conjugadas, pois o problema consiste em casos em que a integral possa não ter solução explícita, fazendo com que métodos numéricos de integração sejam buscados.

Finalmente, para os efeitos aleatórios, empregou-se a distribuição normal, como se segue:

$$\mathbf{b} \sim N(\phi, A\sigma_b^2),$$

em que:

ϕ é o vetor nulo de mesma dimensão do aleatório;

A é a matriz de parentesco genético, a qual possui elementos que descrevem os coeficientes das covariâncias entre os efeitos aleatórios genéticos e que, nesse caso, será tratada como a matriz identidade (I).

3.5.2 Distribuição posteriori conjunta

A distribuição *a posteriori* conjunta, na maioria das vezes, é muito complexa, sendo difícil a obtenção analítica das distribuições marginais de interesse na análise. Segundo Sorensen (1996), a marginalização é a maior dificuldade técnica na implementação bayesiana, sendo, como lembra Gianola (1996), praticamente impossível essa obtenção analítica, mesmo por métodos usuais de integração.

Para a obtenção da posteriori conjunta de todos os parâmetros, dado que a amostra aleatória foi realizada, fez-se o produto de todas as distribuições *a priori* dadas anteriormente e a verossimilhança, que, nessa situação, é uma normal, ou seja, $y|\boldsymbol{\beta}, \mathbf{b}, \boldsymbol{\sigma}_b^2, \sigma_e^2 \sim N(X\boldsymbol{\beta} + Z\mathbf{b}, I\boldsymbol{\sigma}_e^2)$. Portanto, a distribuição conjunta *a posteriori*, supondo-se independência entre os parâmetros, é dada pela seguinte expressão:

$$\begin{aligned}
 p(\boldsymbol{\beta}, \mathbf{b}, \sigma_b^2, \sigma_e^2, \mathbf{y}) &\propto \left(\frac{1}{\sigma_b^2}\right)^{\frac{J}{2}} \exp\left\{-\frac{1}{2} \frac{\mathbf{b}' A^{-1} \mathbf{b}}{\sigma_b^2}\right\} (\sigma_b^2)^{-(\frac{\nu_b}{2}+1)} \\
 &\exp\left\{-\frac{\nu_b s_b^2}{2\sigma_b^2}\right\} (\sigma_e^2)^{-(\nu/2+1)} \exp\left\{-\frac{\nu s^2}{2\sigma_e^2}\right\} \\
 &\left(\frac{1}{\sigma_e^2}\right)^{\frac{n}{2}} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma_e^2}(\mathbf{y} - X\boldsymbol{\beta} - Z\mathbf{b})'(\mathbf{y} - X\boldsymbol{\beta} - Z\mathbf{b})\right\}. \quad (8)
 \end{aligned}$$

Não se deve perder de vista que a inferência sobre cada parâmetro é feita com as distribuições marginais. Para tanto, a partir dessa posteriori conjunta (8), foram obtidas as distribuições *a posteriori* condicionais completas para cada parâmetro, a fim de implementar o algoritmo do Amostrador de Gibbs, o qual permite obter aproximações das distribuições marginais.

3.5.3 Distribuições condicionais completas

A distribuição condicional completa *a posteriori* para os efeitos fixos (média e tratamentos), segundo a equação (8), é dada por:

$$\begin{aligned}
p(\boldsymbol{\beta}|\mathbf{b}, \sigma_b^2, \sigma_e^2, \mathbf{y}) &\propto \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_e^2} (\mathbf{y} - X\boldsymbol{\beta} - Z\mathbf{b})' (\mathbf{y} - X\boldsymbol{\beta} - Z\mathbf{b}) \right\} \\
&\propto \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_e^2} \left[(\mathbf{y} - Z\mathbf{b})' - (X\boldsymbol{\beta})' \right] \left[(\mathbf{y} - Z\mathbf{b}) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - (X\boldsymbol{\beta}) \right] \right\} \\
&\propto \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_e^2} \left[(\mathbf{y} - Z\mathbf{b})' (\mathbf{y} - Z\mathbf{b}) - (\mathbf{y} - Z\mathbf{b})' (X\boldsymbol{\beta}) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - (X\boldsymbol{\beta})' (\mathbf{y} - Z\mathbf{b}) + (X\boldsymbol{\beta})' (X\boldsymbol{\beta}) \right] \right\} \\
&\propto \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_e^2} \left[-(\mathbf{y} - Z\mathbf{b})' X\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}' X' (\mathbf{y} - Z\mathbf{b}) + \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \boldsymbol{\beta}' X' (X\boldsymbol{\beta}) \right] \right\} \\
&\propto \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_e^2} \left[\boldsymbol{\beta} - (X'X)^{-1} X' (\mathbf{y} - Z\mathbf{b}) \right]' (X'X) \right. \\
&\quad \left. \left[\boldsymbol{\beta} - (X'X)^{-1} X' (\mathbf{y} - Z\mathbf{b}) \right] \right\} \\
&\quad \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_e^2} \left[-(\mathbf{y} - Z\mathbf{b})' X (X'X)^{-1} X' (\mathbf{y} - Z\mathbf{b}) \right] \right\} \\
&\propto \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_e^2} \left[\boldsymbol{\beta} - (X'X)^{-1} X' (\mathbf{y} - Z\mathbf{b}) \right]' (X'X) \right. \\
&\quad \left. \left[\boldsymbol{\beta} - (X'X)^{-1} X' (\mathbf{y} - Z\mathbf{b}) \right] \right\}. \tag{9}
\end{aligned}$$

Portanto:

$$\boldsymbol{\beta} | (\mathbf{b}, \sigma_e^2, \sigma_b^2, \mathbf{y}) \sim N \left((X'X)^{-1} X' (\mathbf{y} - Z\mathbf{b}), \sigma_e^2 (X'X)^{-1} \right). \tag{10}$$

A posteriori condicional completa para os efeitos aleatórios (blocos) pode ser encontrada de maneira análoga à distribuição condicional completa *a posteriori* dos efeitos fixos, ou seja, dada a posteriori conjunta (8), tem-se:

$$p(\mathbf{b}|\boldsymbol{\beta}, \sigma_e^2, \sigma_b^2, \mathbf{y}) \propto \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_e^2} \left(\frac{\mathbf{b}' A^{-1} \sigma_e^2 \mathbf{b}}{\sigma_b^2} + (\mathbf{y} - X\boldsymbol{\beta} - Z\mathbf{b})' (\mathbf{y} - X\boldsymbol{\beta} - Z\mathbf{b}) \right) \right\}. \quad (11)$$

Sendo $\gamma = \sigma_e^2/\sigma_b^2$, tem-se:

$$\begin{aligned} p(\mathbf{b}|\boldsymbol{\beta}, \sigma_e^2, \sigma_b^2, \mathbf{y}) &\propto \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_e^2} \left(\mathbf{b}' \gamma A^{-1} \mathbf{b} + (\mathbf{y} - X\boldsymbol{\beta} - Z\mathbf{b})' (\mathbf{y} - X\boldsymbol{\beta} - Z\mathbf{b}) \right) \right\} \\ &\propto \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_e^2} \left(\mathbf{b}' \gamma A^{-1} \mathbf{b} + [(\mathbf{y} - X\boldsymbol{\beta})' - (Z\mathbf{b})'] [(\mathbf{y} - X\boldsymbol{\beta}) - (Z\mathbf{b})] \right) \right\} \\ &\propto \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_e^2} \left(\mathbf{b}' \gamma A^{-1} \mathbf{b} + (\mathbf{y} - X\boldsymbol{\beta})' (\mathbf{y} - X\boldsymbol{\beta}) - (\mathbf{y} - X\boldsymbol{\beta})' (Z\mathbf{b}) - (Z\mathbf{b})' (\mathbf{y} - X\boldsymbol{\beta}) + (Z\mathbf{b})' (Z\mathbf{b}) \right) \right\} \\ &\propto \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_e^2} \left(\mathbf{b}' \gamma A^{-1} \mathbf{b} - (\mathbf{y} - X\boldsymbol{\beta})' (Z\mathbf{b}) - (Z\mathbf{b})' (\mathbf{y} - X\boldsymbol{\beta}) + (Z\mathbf{b})' (Z\mathbf{b}) \right) \right\} \\ &\propto \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_e^2} \left[\mathbf{b} - (Z'Z + \gamma A^{-1})^{-1} Z' (\mathbf{y} - X\boldsymbol{\beta}) \right]' (Z'Z + \gamma A^{-1}) \left[\mathbf{b} - (Z'Z + \gamma A^{-1})^{-1} Z' (\mathbf{y} - X\boldsymbol{\beta}) \right] \right\}. \quad (12) \end{aligned}$$

Logo,

$$\mathbf{b} | (\boldsymbol{\beta}, \sigma_e^2, \sigma_b^2, \mathbf{y}) \sim N \left((Z'Z + \gamma A^{-1})^{-1} Z'(\mathbf{y} - X\boldsymbol{\beta}), (Z'Z + \gamma A^{-1})^{-1} \sigma_e^2 \right). \quad (13)$$

A distribuição condicional completa para a componente da variância σ_e^2 , em (8), é dada a seguir:

$$p(\sigma_e^2 | \boldsymbol{\beta}, \sigma_b^2, \mathbf{b}, \mathbf{y}) \propto (\sigma_e^2)^{-(\frac{n+\nu}{2}+1)} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_e^2} \left[(\mathbf{y} - X\boldsymbol{\beta} - Z\mathbf{b})' (\mathbf{y} - X\boldsymbol{\beta} - Z\mathbf{b}) + \nu s^2 \right] \frac{(n+\nu)}{(n+\nu)} \right\}, \quad (14)$$

ou seja, uma Qui-Quadrado Inversa Escalada para a componente da variância

$$\sigma_e^2 | (\boldsymbol{\beta}, \sigma_b^2, \mathbf{b}, \mathbf{y}) \sim Inv - \chi^2 \left(n + \nu, \frac{(\mathbf{y} - X\boldsymbol{\beta} - Z\mathbf{b})' (\mathbf{y} - X\boldsymbol{\beta} - Z\mathbf{b})}{n + \nu} + \frac{\nu s^2}{n + \nu} \right). \quad (15)$$

Da mesma forma, para a componente da variância σ_b^2 , pode-se obter sua distribuição condicional completa por meio de (8), como se segue:

$$p(\sigma_b^2 | \boldsymbol{\beta}, \sigma_e^2, \mathbf{b}, \mathbf{y}) \propto (\sigma_b^2)^{-(\frac{J+\nu_b}{2}+1)} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_b^2} \left(\frac{\mathbf{b}' A^{-1} \mathbf{b} + \nu_b s_b^2}{J + \nu_b} \right) (J + \nu_b) \right\}, \quad (16)$$

que é também uma Qui-Quadrado Inversa Escalada:

$$\sigma_b^2 | (\boldsymbol{\beta}, \sigma_e^2, \mathbf{b}, \mathbf{y}) \sim Inv - \chi^2 \left(J + \nu_b, \frac{\mathbf{b}' A^{-1} \mathbf{b} + \nu_b s_b^2}{J + \nu_b} \right). \quad (17)$$

3.6 Metodologia empregada para se ajustar a superfície de resposta

O desenvolvimento da metodologia do modelo de superfície polinomial de resposta linear nos parâmetros está baseado principalmente em definições, fórmulas e conceitos extraídos de Box & Draper (1987) e Draper & Smith (1998).

3.6.1 Superfície: ajuste do modelo para as médias de tratamentos (REML e bayesiana)

A função polinomial quadrática com duas variáveis X_1, X_2 é considerada como uma representação da função de produção verdadeira η , dentro da região experimental de interesse. Considerando-se, então, as produções estimadas y_1, y_2, \dots, y_n nos n tratamentos

$$\mathbf{X}_i = (X_{1i}, X_{2i})', i = 1, 2, \dots, n$$

escolhidos pelo pesquisador, o modelo matemático de regressão para y_i é dado por:

$$\bar{y}_i = \beta_0 + \beta_1 X_{1i} + \beta_2 X_{2i} + \beta_{11} X_{1i}^2 + \beta_{22} X_{2i}^2 + \beta_{12} X_{1i} X_{2i} + e_i,$$

sendo e_i o erro de estimação correspondente à média \bar{y}_i , supondo-se que e_i , com $i = 1, 2, \dots, n$, é correlacionado com a matriz de covariância C_{11} , dada pela inversa da componente em $X'X$ na equação (5).

Para o desenvolvimento da metodologia, adotou-se o seguinte modelo linear:

$$y_{ijk} = \mu + r_j + b(r)_{k(j)} + \beta_1 N_i + \beta_2 A_i + \beta_3 N_i^2 + \beta_4 A_i^2 + \beta_5 (NA)_i + e_{ijk}, \quad (18)$$

em que:

y_{ijk}	representa o valor observado no i-ésimo nível dos fatores, na j-ésima repetição, k-ésimo bloco ;
μ	representa uma constante inerente a todas as observações;
r_j	representa o efeito da j-ésima repetição;
$b(r)_{k(j)}$	representa o efeito do k-ésimo bloco dentro da j-ésima repetição;
β_1	representa o efeito linear do nitrogênio;
N_i	representa o valor quantitativo do i-ésimo nível do nitrogênio;
β_2	representa o efeito linear da adubação foliar;
A_i	representa o valor quantitativo do i-ésimo nível da adubação foliar;
β_3	representa o efeito quadrático de nitrogênio;
β_4	representa o efeito quadrático de adubação foliar;
β_5	representa o efeito da interação linear x linear entre os efeitos de nitrogênio e adubação foliar;
$(NA)_i$	representa o valor quantitativo da i-ésima interação;
e_{ijk}	representa o erro experimental associado ao modelo, sendo que $\varepsilon \sim N(\phi, C_{11})$.

Uma outra maneira de apresentar o modelo (18), que descreve a relação funcional das respostas observadas e as variáveis independentes no experimento, está na forma matricial, de acordo com a equação (4) e, assim, obtêm-se suas estimativas mediante o Sistema de Equações do Modelo Misto de Henderson, conforme descrito na seção 3.3.

Para o caso da análise bayesiana, ajustou-se o modelo linear para as distribuições *a posteriori* das médias dos tratamentos, que também pode ser apresentado na seguinte forma matricial:

$$\mathbf{y} = X\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (19)$$

em que:

- \mathbf{y} é o vetor das observações;
- X é a matriz de incidência dos parâmetros;
- $\boldsymbol{\beta}$ é o vetor dos parâmetros de efeitos fixos;
- $\boldsymbol{\varepsilon}$ é o vetor dos erros aleatórios correspondentes às observações.

É bom notar que, nesse caso, as amostras da posteriori para tratamentos é que foram utilizadas. Dessa forma, pode-se assumir o modelo tradicional de superfície de resposta.

Assim, os vetores $\mathbf{y}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\varepsilon}$ e a matriz X podem ser dados por:

$$\begin{aligned} \mathbf{y} &= (y_1, y_2, \dots, y_n)'; \\ \boldsymbol{\beta} &= (\beta_0, \beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_4, \beta_5)'; \\ \boldsymbol{\varepsilon} &= (\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n)'; \\ X &= \begin{pmatrix} 1 & X_{11} & X_{21} & X_{11}^2 & X_{21}^2 & X_{11}X_{21} \\ 1 & X_{12} & X_{22} & X_{12}^2 & X_{22}^2 & X_{12}X_{22} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & X_{1n} & X_{2n} & X_{1n}^2 & X_{2n}^2 & X_{1n}X_{2n} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Considere-se o modelo (19), em que o vetor de médias e a matriz de covariâncias dos erros $\boldsymbol{\varepsilon}$ são dados por:

$$E(\boldsymbol{\varepsilon}) = \boldsymbol{\phi} \quad \text{e} \quad \text{Var}(\boldsymbol{\varepsilon}) = I\sigma_e^2,$$

respectivamente, em que $\boldsymbol{\phi}$ é um vetor nulo, I é a matriz identidade de ordem n , σ_e^2 é um número real positivo.

Nessas condições, utilizando-se o método dos mínimos quadrados, obtém-se o sistema de equações normais:

$$X'X\boldsymbol{\beta} = X'\mathbf{y}.$$

Dado que a matriz X possua posto coluna completo, então $X'X$ é positiva definida, logo possui inversa clássica e a solução do sistema é única:

$$\hat{\beta} = (X'X)^{-1}X'y,$$

em que $(X'X)^{-1}$ é a inversa de $X'X$.

Dentre as propriedades do estimador $\hat{\beta}$, tem-se, finalmente, que:

$$E(\hat{\beta}) = \beta \quad \text{e} \quad V(\hat{\beta}) = (X'X)^{-1}\sigma_e^2.$$

3.6.2 A determinação e a análise do ponto crítico

Após as estimativas de mínimos quadrados e REML serem alcançadas, considerando-se um delineamento apropriadamente escolhido e conduzido em uma região experimental de interesse, obtém-se a equação de regressão e, dessa forma, pode-se encontrar a combinação ótima dos níveis dos fatores (ponto crítico). O ponto crítico pode ser: (a) ponto de máximo; (b) ponto de mínimo; (c) ponto de sela, que é, ao mesmo tempo, ponto de máximo e de mínimo, representando uma situação de difícil solução e aplicação prática; e (d), uma indeterminação.

Para a obtenção dos pontos críticos (a, b) de uma função $z = f(x, y)$ de duas variáveis, iniciou-se a resolução do sistema de equações formado pelas derivadas parciais:

$$\begin{cases} \frac{\partial z}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial z}{\partial y} = 0 \end{cases}$$

Convém ressaltar que, se uma ou ambas derivadas parciais não existirem no ponto (a, b) , tem-se, também, um ponto crítico da função $f(x, y)$.

Para descobrir se a solução obtida desse sistema é um ponto de máximo, mínimo, sela ou uma indeterminação, faz-se o teste da segunda derivada. Para isso, verifica-se a continuidade das derivadas parciais de segunda ordem em algum círculo centrado em um ponto crítico (a, b) .

Seja D o determinante da matriz das segundas derivadas parciais:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial x^2} & \frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial x \partial y} \\ \frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial x \partial y} & \frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial y^2} \end{pmatrix},$$

sendo $D = f_{xx}(a, b)f_{yy}(a, b) - f_{xy}^2(a, b)$.

Para estudar a natureza do ponto crítico, estuda-se o sinal do determinante e, se necessário, o das derivadas de segunda ordem.

Então, se

1. $D > 0$ e $f_{xx}(a, b) > 0$, tem-se um ponto de mínimo relativo em (a, b) ;
2. $D > 0$ e $f_{xx}(a, b) < 0$, tem-se um ponto de máximo relativo em (a, b) ;
3. $D < 0$, tem-se um ponto de sela em (a, b) ;
4. $D = 0$, nenhuma conclusão pode ser obtida.

3.7 Intervalos de confiança para predições

Nesta seção, serão apresentados resultados-padrão para inferência em modelos fixos. Para um estudo atualizado sobre o tema, recomenda-se Faraway (2005).

Existem dois tipos de predição: de resposta média e de observações futuras, sendo que, neste trabalho, adotou-se somente a primeira. No modelo fixo, a estimativa da combinação linear $\boldsymbol{\lambda}'\boldsymbol{\beta}$ é dada por $\boldsymbol{\lambda}'\hat{\boldsymbol{\beta}}$ e sua variância é dada por $\boldsymbol{\lambda}'(X'X)^{-1}\boldsymbol{\lambda}\sigma^2$. No modelo misto, $(X'X)^{-1}\sigma^2$ é substituída por V^{-1} da equação (6). Note-se que o vetor $\boldsymbol{\lambda}$ não precisa necessariamente ser observado, $\boldsymbol{\lambda}$ é um vetor de pesos para os parâmetros, tal que $\boldsymbol{\lambda}'\boldsymbol{\beta}$ é uma combinação linear de interesse, não necessariamente observada em algum tratamento do experimento. Então, a variância do estimador do vetor de parâmetros é dada por:

$$V(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = (V)^{-1}. \quad (20)$$

O estimador dessa variância é obtido substituindo-se a variância paramétrica pelo estimador da variância ($S^2 = \text{QMresíduo}$). Assim, tem-se o estimador da variância do estimador dos parâmetros dado por:

$$\hat{V}(\hat{\beta}) = (V)^{-1}. \quad (21)$$

Dessa forma, o estimador do erro padrão da predição para o intervalo de confiança para a combinação linear $\lambda'\theta$ é dado por:

$$S(\hat{Y}_i) = \sqrt{\lambda'(V)^{-1}\lambda}. \quad (22)$$

Por fim, o intervalo de confiança para predição da média é:

$$\hat{Y}_i \pm t_{n-p}^{(\frac{\alpha}{2})} S(\hat{Y}_i), \quad (23)$$

em que n é o tamanho da amostra e p é o número de parâmetros do modelo.

3.8 Erro quadrático médio

Casella & Berger (1990) definem o EQM de um estimador W de um parâmetro θ como sendo a função de θ definida por $E_{\theta}(W - \theta)^2$. Segundo os autores, essa medida tem pelo menos duas vantagens em relação a outras medidas de distância: primeiro, ela é bastante “tratável” analiticamente; segundo, possui a interpretação $E_{\theta}(W - \theta)^2 = \text{Var}_{\theta}W + (\text{Viés}_{\theta}W)^2$, em que o viés de um estimador pontual W , de um parâmetro θ , é a diferença entre o valor esperado de W e θ . Portanto, o EQM incorpora dois componentes, um medindo a variabilidade do estimador (precisão) e o outro medindo seu viés (acurácia).

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 Superfície de resposta - análise REML

Inicialmente, é importante destacar que todas as análises estatísticas desenvolvidas nesta seção foram realizadas utilizando-se o software R[®] v.2.1.1(R, 2005). A análise de variância da Tabela 4 refere-se à massa de dados provenientes da Tabela 1. A parte superior da tabela da análise de variância (obtida pelos modelos 1 e 2, como descrito no Anexo A) revelou efeito não significativo da interação entre os fatores dose de nitrogênio e adubação foliar para a variável produção.

Como o interesse deste estudo foi analisar os fatores conjuntamente, considerando-se que seus níveis são quantitativos, ajustou-se um modelo de regressão de acordo com a equação (24), citada a seguir, para os níveis de dose de nitrogênio e de adubação foliar por meio da superfície de resposta.

Ilustrou-se a aplicação da superfície de resposta usando-se a REML para a estimação das médias de tratamentos ajustadas apresentada na Tabela 5, juntamente com a análise de variância. Tal análise (obtida pelo modelo.3, como descrito no Anexo A), com a decomposição dos efeitos de tratamentos sob a forma de superfície de resposta, encontra-se apresentada na parte inferior da Tabela 4.

Tabela 4: Quadro-resumo da análise de variância para a variável resposta produção do modelo fixo com dados arredondados para números inteiros

FV	GL	SQ	QM	F_c	$Pr > F$
R	2	15	8	0,30	0,7421
R/B	9	286	32	1,3	0,3008
Trat	17	82514	4854	191,4	2×10^{-16}
Test	1	230	230	9,2	0,00486
FAT	15	9623	641,5	25,7	$2,4 \times 10^{-13}$
N	3	2725	908	34,4	$3,899 \times 10^{-10}$
A	3	6555	2185	82,8	$3,582 \times 10^{-15}$
N*A	9	343	38	1,4	0,21038
T vs FAT	1	72661	72661	2865,4	$2,2 \times 10^{-16}$
n	1	47658	47658	1946,3	$2,2 \times 10^{-16}$
a	1	19880	19880	811,9	$2,2 \times 10^{-16}$
n*a	1	273	273	11,7	0,001
n ²	1	10005	10005	408,6	$2,2 \times 10^{-16}$
a ²	1	4312	4312	176,1	$2,2 \times 10^{-16}$
Falta de ajuste	12	386	32,2	1,3	0,27
Resíduo	31	786	25		
Total	59	83601			

Observa-se que, pela Tabela 4, a variável analisada (produção) mostrou-se significativamente influenciada pelas fontes de variação: efeito linear da dose de nitrogênio, efeito linear da dose de adubação foliar e efeito linear da interação entre as duas doses. Tal fato leva à conclusão da existência de efeitos das doses de nitrogênio e das doses de adubação foliar, como também de um comportamento diferenciado da aplicação dos níveis de nitrogênio nas diversas combinações com os níveis da adubação foliar.

Tabela 5: Valores das médias ajustadas (REML) e seus IC(95%), com as suas respectivas amplitudes (A) e valores paramétricos

Trat.	Médias Ajust.	LI	LS	A	Val. Paramétrico
t ₁	157,17	151,07	163,27	12,20	157,75
t ₂	180,59	174,49	186,69	12,20	179,8
t ₃	184,66	178,56	190,76	12,20	185,65
t ₄	172,69	166,59	178,79	12,20	175,3
t ₅	173,51	167,41	179,61	12,20	169,6
t ₆	191,85	185,75	197,95	12,20	193
t ₇	200,79	194,69	206,89	12,20	200,2
t ₈	190,06	183,96	196,17	12,21	191,2
t ₉	174,16	168,06	180,26	12,20	172,45
t ₁₀	200,37	194,27	206,47	12,20	197,2
t ₁₁	203,76	197,66	209,86	12,20	205,75
t ₁₂	196,58	190,48	202,68	12,20	198,1
t ₁₃	162,68	156,58	168,78	12,20	166,3
t ₁₄	192,95	186,85	199,06	12,21	192,4
t ₁₅	202,04	195,94	208,14	12,20	202,3
t ₁₆	198,66	192,56	204,77	12,21	196
t ₁₇	97,03	92,71	101,36	8,65	100
t ₁₈	101,79	97,46	106,11	8,65	105

A equação de regressão ajustada, seguindo um modelo misto, com blocos aleatórios, e os demais componentes como fixos, como descrito na equação (18), é dada por:

$$\hat{y}_{ij} = 98,897 + 0,86364N_i - 0,00575N_i^2 + 0,49425A_j - 0,00104A_j^2 + 0,00075N_iA_j, \quad (24)$$

que é análoga a uma função f de duas variáveis (N e A), por meio da qual podem-se estimar as produções (imagem) para quaisquer combinações dos níveis dos fatores doses de nitrogênio $0 \leq N_i \leq 120$ e doses de adubação foliar $0 \leq A_j \leq 360$, que são o domínio da função f .

Nesse exemplo, os p-valores do teste t de Student para as hipóteses do tipo $H_0 : \beta_i = 0, i = 0, 1, 2, \dots, m$ foram todos inferiores ao nível nominal de significância de 5%. Daí se conclui que, dessa forma, ambas as variáveis tem efeito significativamente diferente de zero na variação de y . A mesma conclusão pode ser obtida também pelos intervalos de confiança apresentados na Tabela 6, com o mesmo nível de significância para cada parâmetro, visto que cada um dos intervalos não contém a origem, além disso, estão bem estimados, pois os valores paramétricos estão contidos em seus respectivos intervalos.

Tabela 6: Estimativas dos coeficientes de regressão, seus respectivos intervalos de confiança da análise REML e seus respectivos valores paramétricos

Parâmetro	Estimativa	LI	LS	Valor Paramétrico
μ	98.897	95.411	102.38	100
β_1	0,8636	0,6848	1,0425	0,8
β_2	0,4943	0,4347	0,5539	0,5
β_3	-0,00575	-0,00707	-0,00441	-0,005
β_4	-0,00104	-0,00119	-0,00089	-0,001
β_5	0,00075	0,00039	0,00112	0,0005

A estimativa do parâmetro R^2 , o qual mede a proporção da variação total dos dados explicada pelo modelo de regressão, foi igual a 99,7%. Outro parâmetro de fundamental importância é o coeficiente de determinação ajustado (R_{aj}^2). Esse ajuste, feito para o número de parâmetros no modelo, fornece uma medida mais adequada para se compararem modelos com diferentes quantidades de parâmetros, se o valor foi igual a 99,5%.

Para a obtenção dos pontos críticos dessa função, tem-se o sistema de equações formado pelas derivadas parciais de primeira ordem das produções estimadas \hat{y}_{ij} , em relação às doses de nitrogênio e de adubação:

$$\begin{cases} \frac{\partial \hat{y}}{\partial N} = 0,86364 - 0,0115N + 0,00075A = 0 \\ \frac{\partial \hat{y}}{\partial A} = 0,49425 - 0,00208A + 0,00075N = 0. \end{cases}$$

A solução desse sistema de equações fornece os níveis ótimos das duas doses mencionadas anteriormente, $N = 92,78$ Kg/ha e $A = 271,07$ mg/l (ponto crítico), os quais proporcionam uma produção de 205,95 caixas/ha:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial^2 \hat{y}}{\partial N^2} & \frac{\partial^2 \hat{y}}{\partial N \partial A} \\ \frac{\partial^2 \hat{y}}{\partial N \partial A} & \frac{\partial^2 \hat{y}}{\partial A^2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0,0115 & 0,00075 \\ 0,00075 & -0,00208 \end{pmatrix}.$$

Como as derivadas parciais de segunda ordem são contínuas num círculo com centro em (92,78; 271,07), calculou-se o determinante (D) da matriz acima estudando o seu sinal, juntamente com alguma das segundas derivadas parciais da diagonal principal. Assim, tem-se.

$$D = 0,0000005625 > 0 \quad \text{e} \quad \frac{\partial^2 \hat{y}}{\partial N^2} < 0.$$

Então, pelo teste da segunda derivada, conclui-se que há um ponto de máximo relativo, o qual, mediante a Figura 2, pode-se observar, trata-se de um máximo local.

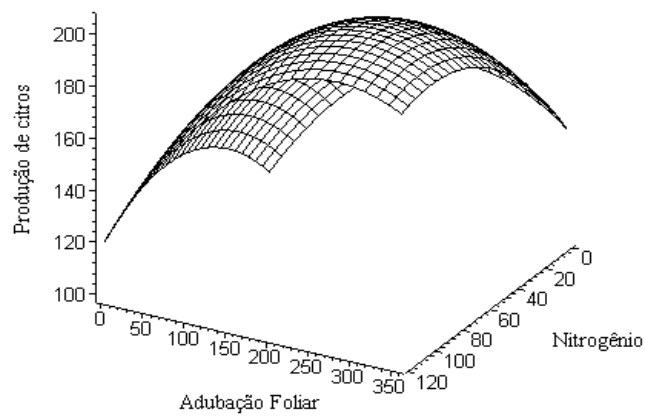


Figura 2: Visão de perfil da superfície de resposta para a produção de citros (caixas/ha), em função das doses de nitrogênio (kg/ha) e adubação foliar (mg/l) (Análise REML)

A representação gráfica da superfície de resposta, ajustada para os dados de produção, de acordo com a equação de regressão estimada, pode ser vista por nessa mesma figura, como também por meio de curvas de nível, na Figura 3.

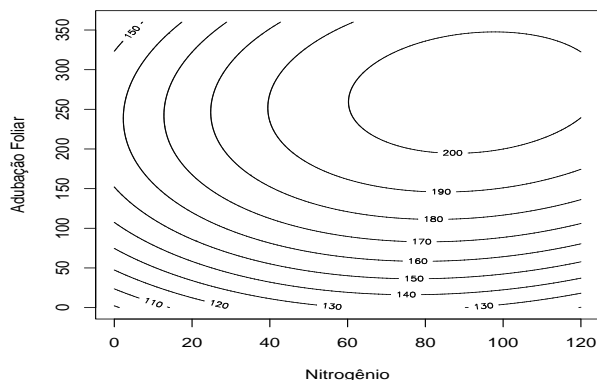


Figura 3: Curvas de nível para a produção de citros (caixas/ha), em função das doses de nitrogênio (kg/ha) e adubação foliar (mg/l) (Análise REML)

Observa-se que, de maneira geral, houve influência de doses de nitrogênio e de adubação foliar sobre a produção, indicando que maiores produtividades foram obtidas com as combinações das doses nas faixas de $60 \leq N_i \leq 100$ e $250 \leq A_j \leq 300$ para nitrogênio e adubação foliar, respectivamente. Além disso, nota-se que houve um maior efeito das doses de adubação foliar, se comparadas com os efeitos das doses de nitrogênio, pois as curvas com uma tendência quadrática em função das doses de adubação foliar são bem mais visíveis do que aquelas em função das doses de nitrogênio.

Na Figura 4, tem-se, para a superfície ajustada (a curva situada na região central), o intervalo de confiança dos preditores da resposta média, sendo as curvas acima e abaixo dessa as superfícies de resposta superiores e inferiores, que correspondem aos limites superiores e inferiores de um intervalo de confiança. A obtenção das equações dessas superfícies de confiança, dadas a seguir, foi feita mediante o ajuste de alguns pontos que se situavam tanto na região superior como na inferior. Assim:

	Superfícies de resposta
Inferior	$\hat{y}_{ij} = 96,297 + 0,8652N_i - 0,005792N_i^2 + 0,4943A_j - 0,001042A_j^2 + 0,0007763N_iA_{ij}$
Superior	$\hat{y}_{ij} = 102,9 + 0,8625N_i - 0,005769N_i^2 + 0,4944A_j - 0,001043A_j^2 + 0,000778N_iA_j$

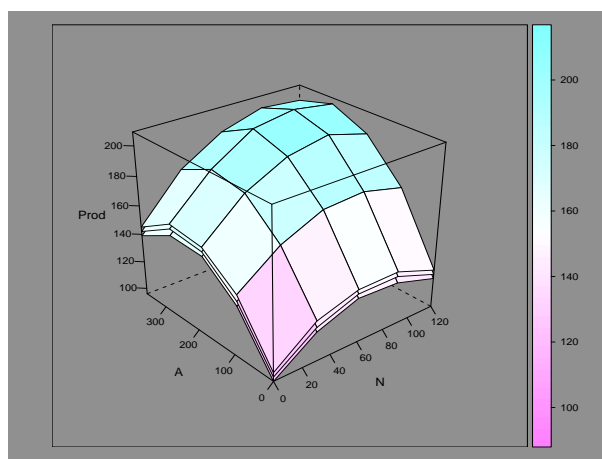


Figura 4: Ajuste de superfícies para a estimativas das médias dos tratamentos e limites inferiores e superiores do IC para cada média. Prod: produção de citros (caixas/ha); N: doses de nitrogênio (kg/ha); A: doses de adubação foliar (mg/l), (Análise REML)

Para o cálculo da elipse de confiança, que pode ser vista nas Figuras 5 e 9, elevou-se o plano formado pelos eixos (N, A) , de modo que ficasse tangente ao ponto de máximo $(205,95)$, que passou a ser a origem do novo sistema. Igualando-se a superfície de resposta superior a essa origem, encontrou-se a equação da elipse de confiança projetada no plano (N, A) , para os níveis ótimos de nitrogênio e de adubação foliar. Convém destacar que tal metodologia foi criada especificamente para desenvolvimento deste trabalho.

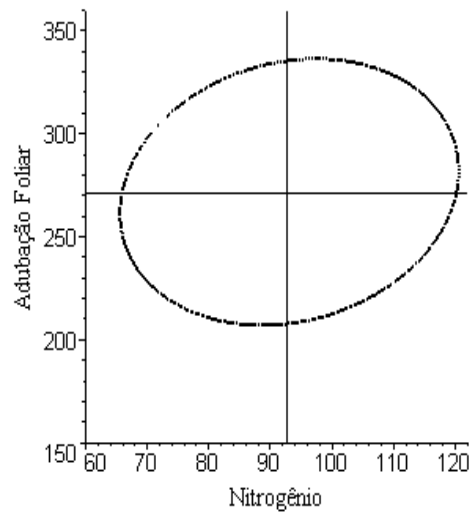


Figura 5: Região de 95% de confiança para os níveis ótimos das doses de nitrogênio (kg/ha) e de adubação foliar (mg/l) (Análise REML)

4.2 Diagnóstico de convergência do algoritmo *Gibbs Sampler*

No processo de verificação de convergência, utilizou-se o pacote BOA (Bayesian Output Analysis), executado no software R[®] v.2.1.1(R, 2005).

Inicialmente, foi gerada uma cadeia de 4000 iterações para todos os parâmetros, com o objetivo de obter uma referência de tamanhos de “queima” das primeiras observações e “pulo” entre as observações, calculados pelo critério de Raftery & Lewis (1992), o qual indicou, dentre todos os parâmetros, os maiores valores de 2 e 1 para queima e pulo, respectivamente.

Para garantir a segurança do processo amostral, a partir de duas cadeias de 150000 iterações em paralelo, foram obtidas duas amostras de tamanho igual a 4000, de cada uma dessas cadeias, levando-se em conta o descarte das 50000 primeiras iterações, para reduzir a influência dos valores iniciais. Além disso, numa frequência de 25, ou seja, a cada 25 observações,

retirava-se um valor de cada parâmetro para tentar diminuir a autocorrelação existente.

De acordo com Gelman et al. (2000), a “queima” e o número de iterações utilizados em processos de geração aleatória que utilizam a técnica MCMC devem ser definidos de forma que não haja dúvidas quanto à estabilização do processo, pois da escolha destes dependem todos os resultados obtidos na análise.

A verificação da convergência das duas cadeias resultantes, para cada parâmetro, foi feita por meio do critério de convergência de Gelman & Rubin (1992), observando-se se os valores do fator de redução de escala potencial (\hat{R}), da sigla inglesa PSRF, estavam próximos ao valor unitário. Gelman (1995) sugere aceitar, como garantia de convergência, valores de \hat{R} menores que 1,1 ou 1,2.

Pode-se observar que os valores para o fator de redução de escala potencial, do último critério citado, para todos os parâmetros estimados (efeitos fixos e componentes da variância) estão apresentados na Tabela 7. A avaliação da convergência indicou que o algoritmo *Gibbs Sampler* convergiu para todos os parâmetros, em ambas as amostras, uma vez que os valores de \hat{R} ficaram muito próximos do valor unitário, havendo diferenças apenas de algumas casas decimais, situação que exprime, segundo Gelman & Rubin (1992), a convergência do processo iterativo envolvido na análise. Dessa forma, pode-se ter plena confiança de que as estimativas dos parâmetros são verdadeiramente as médias das distribuições marginais, pois essas distribuições encontram-se em uma situação estável, ou seja, sob a condição de estacionaridade.

Tabela 7: Estimativas dos indicadores de convergência para os critérios de Gelman & Rubin (1992) e Raftery & Lewis (1992) e do erro de Monte Carlo para cada uma das cadeias dos parâmetros do modelo

Parâmetro	Raftery & Lewis		Gelman & Rubin		Erro MC
	Descarte	Pulo	0,975	R	
σ_e^2	1	2	0,9998829	1,0001888	0,0884011
σ_b^2	1	2	0,9998054	0,9998877	0,07271616
μ	1	2	0,9998723	1,000242	0,06229866
r_2	1	2	0,9998575	1,0001362	0,06840015
r_3	1	2	1,00004	1,0001372	0,06700255
t_2	1	2	1,00051	1,001617	0,0656974
t_3	1	2	0,9999823	1,0004186	0,06719994
t_4	1	2	0,9999449	1,0000252	0,07902311
t_5	1	2	0,9998854	1,0000639	0,0677919
t_6	1	2	0,999934	0,9999436	0,06249842
t_7	1	2	0,9997844	0,999811	0,07538871
t_8	1	2	1,0005208	1,00082	0,13567047
t_9	1	2	0,999881	0,9999046	0,05300587
t_{10}	1	2	1,0001211	1,0014557	0,06540558
t_{11}	1	2	0,9999944	1,0008425	0,06307528
t_{12}	1	2	1,000746	1,0037092	0,05663703
t_{13}	1	2	1,0001651	1,0003743	0,05771956
t_{14}	1	2	1,0007476	1,0023839	0,04784242
t_{15}	1	2	1,0006552	1,0039859	0,05578633
t_{16}	1	2	1,000105	1,0011513	0,06662412
t_{17}	1	2	1,0008658	1,0022488	0,06608614
t_{18}	1	2	1,0003092	1,0023457	0,07057838

...continua...

Tabela 7: Cont.

Parâmetro	Raftery & Lewis		Gelman & Rubin		Erro MC
	Descarte	Pulo	0,975	R	
b ₁	1	2	1,0001676	1,0010881	0,04997043
b ₂	1	2	0,9998995	1,0003638	0,05092744
b ₃	1	2	1,0000013	1,0006943	0,05515476
b ₄	1	2	0,9998014	0,9998241	0,0559402
b ₅	1	2	1,0001638	1,0014523	0,06276761
b ₆	1	2	1,0004749	1,0022157	0,07314327
b ₇	1	2	1,0005969	1,0036355	0,05631986
b ₈	1	2	1,0001085	1,0009586	0,07491498
b ₉	1	2	1,0001777	1,0001834	0,07824042
b ₁₀	1	2	0,9999209	0,999933	0,06997551
b ₁₁	1	2	1,0000903	1,0001401	0,07408732
b ₁₂	1	2	1,000002	1,000013	0,06412052

Também pela Tabela 7, podem-se notar, pelo critério de Raftery & Lewis (1992), aplicado na amostra válida, indicações para pulo e queima mínimos para a retirada do efeito de dependência entre os valores amostrados, tornando o processo amostral estável e independente.

Como era esperado, os valores indicados pelo critério de Raftery & Lewis (1992), não foram tão expressivos, pois, na amostra válida, já haviam sido rejeitados 50000 valores iniciais e realizados pulos de 25 observações.

4.3 Análise bayesiana

Para o ajuste da superfície de resposta da análise bayesiana foram tomadas as médias ajustadas dos tratamentos, demonstradas na Tabela 8 a seguir, das distribuições *a posteriori* e, pelo método dos mínimos quadrados, encontraram-se as estimativas dos coeficientes de regressão, cuja equação

ajustada é:

$$\hat{y}_{ij} = 100,9 + 0,8607N_i - 0,0055N_i^2 + 0,4943A_j - 0,00102A_j^2 + 0,00063N_iA_j. \quad (25)$$

Tabela 8: Valores das médias ajustadas pela amostragem Gibbs e seus intervalos de credibilidade (95%) com as suas respectivas amplitudes (A) e valores paramétricos

Trat.	Médias Ajust.	LI	LS	A	Valor Paramétrico
t ₁	157,61	145,62	169,28	23,66	157,75
t ₂	182,00	169,89	193,59	23,80	179,80
t ₃	186,19	174,72	198,42	23,70	185,65
t ₄	175,05	162,98	187,11	24,13	175,30
t ₅	174,74	163,42	186,70	23,28	169,60
t ₆	192,83	180,76	204,34	23,58	193,00
t ₇	203,01	191,71	215,76	24,05	200,20
t ₈	191,29	179,71	203,36	23,65	191,20
t ₉	175,15	163,18	186,87	23,69	172,45
t ₁₀	203,11	191,60	215,42	23,82	197,2
t ₁₁	203,80	191,99	215,62	23,63	205,75
t ₁₂	198,33	185,75	209,48	23,73	198,10
t ₁₃	165,62	153,68	177,28	23,60	166,30
t ₁₄	193,57	181,49	205,13	23,64	192,40
t ₁₅	203,81	192,44	216,42	23,98	202,30
t ₁₆	198,97	186,90	210,59	23,69	196,00
t ₁₇	98,27	87,84	109,61	21,77	100,00
t ₁₈	103,38	91,82	114,07	22,25	105,00

Da mesma forma que na análise REML, foi verificado, também, que os p-valores para o teste t de Student para a hipótese nula $H_0 : \beta_i = 0, i = 0, 1, 2, \dots, m$ foram todos menores do que 0,05, que é o nível nominal de significância pré-determinado. Conclui-se, daí, que ambas as variáveis tem efeito significativamente diferente de zero na variável resposta “Produção” e que, pelos intervalos de confiança expostos na Tabela 9, chega-se à mesma conclusão, visto que esses intervalos não contêm o zero.

Tabela 9: Estimativas dos coeficientes de regressão e seus respectivos intervalos de confiança da análise bayesiana e valores paramétricos

Parâmetro	Estimativa	LI	LS	Valor Paramétrico
μ	100,9	97,33	104,42	100
β_1	0,8607	0,6902	1,0312	0,8
β_2	0,4943	0,4774	0,551	0,5
β_3	-0,0055	-0,0068	-0,0043	-0,005
β_4	-0,00102	-0,00115	-0,00088	-0,001
β_5	0,00063	0,00029	0,00096	0,0005

As estimativas dos parâmetros, R^2 e R_{aj}^2 , foram aproximadamente iguais ao do modelo anterior, assumindo-se os seguintes valores: 99,58%; 99,41%, respectivamente.

A forma de obtenção dos pontos críticos, juntamente com o estudo da sua natureza, das superfícies (superior e inferior) e da elipse de confiança dos níveis ótimos, é análoga à da REML. Os pontos críticos encontrados para as duas doses são: $N = 93,78$ Kg/ha e $A = 271,27$ mg/l, com um ponto de máximo igual a 208,30 caixas/ha. O esboço da superfície de resposta e o das curvas de nível estão apresentados, respectivamente, nas Figuras 6 e 7.

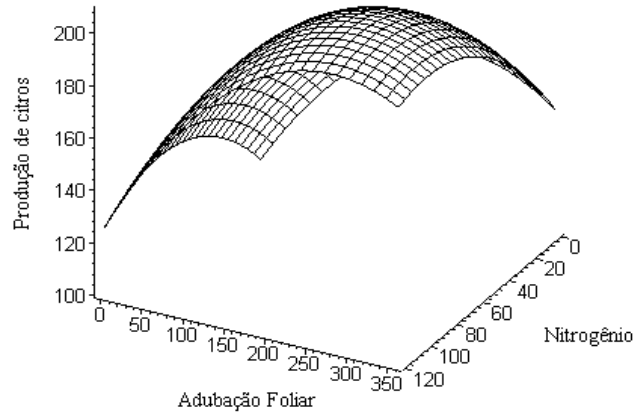


Figura 6: Visão de perfil da superfície de resposta para a produção de citros (caixas/ha), em função das doses de nitrogênio (kg/ha) e adubação foliar (mg/l) (Análise bayesiana)

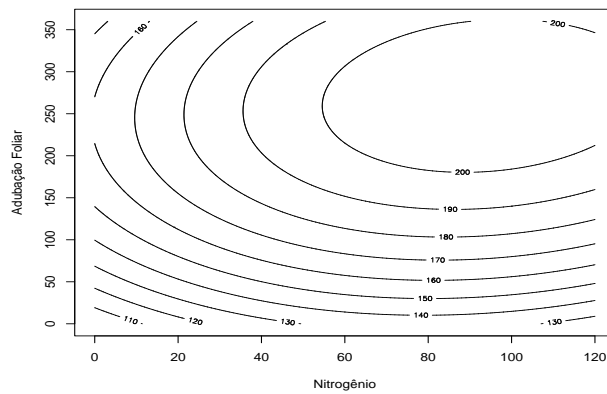


Figura 7: Curvas de nível para a produção de citros (caixas/ha), em função das doses de nitrogênio (kg/ha) e adubação foliar (mg/l) (Análise bayesiana)

Podem-se ver, também, pelas Figuras 8 e 9, os gráficos das superfícies superiores e inferiores (que correspondem aos ajustes das superfícies para os limites inferiores e superiores do IC para cada média dos tratamentos) , cujas equações são dadas abaixo, e da elipse de confiança que representa a região dos níveis ótimos, na combinação das doses dos dois nutrientes em estudo.

Superfícies de resposta	
Inferior	$\hat{y}_{ij} = 97,82 + 0,84N_i - 0,005307N_i^2 + 0,4868A_j - 0,001011A_j^2 + 0,0006172N_iA_{ij}$
Superior	$\hat{y}_{ij} = 103,9 + 0,8815N_i - 0,0058N_i^2 + 0,5017A_j - 0,001028A_j^2 + 0,0006355N_iA_j$

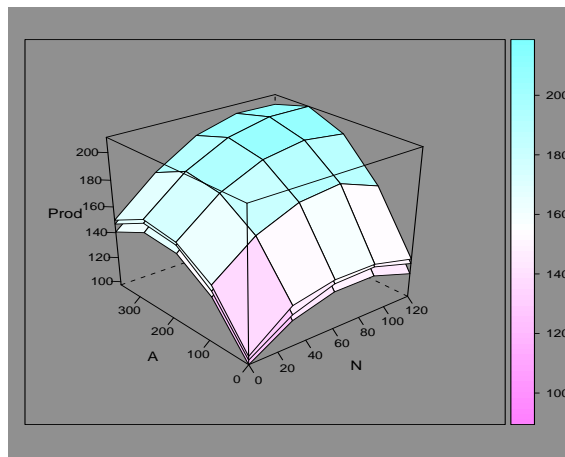


Figura 8: Ajuste de superfícies para as estimativas das médias dos tratamentos e limites inferiores e superiores do IC para cada média. Prod: produção de citros (caixas/ha); N: doses de nitrogênio (kg/ha); A: doses de adubação foliar (mg/l) (Análise bayesiana)

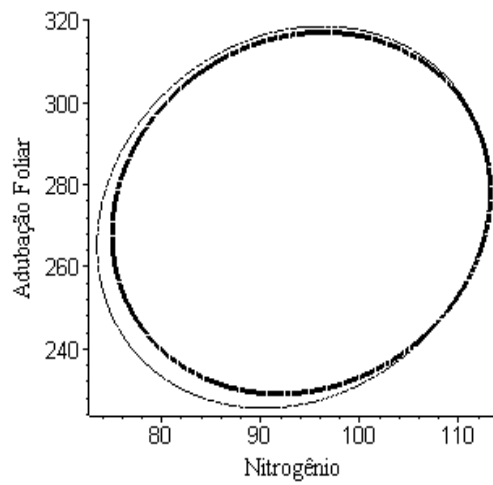


Figura 9: Regiões de 95% de confiança para os níveis ótimos das doses de nitrogênio (Kg/ha) e de adubação foliar (mg/l). (A elipse interior refere-se à análise REML e a exterior refere-se à análise bayesiana.)

4.4 Eficiência dos métodos

Apenas para efeito de comparação entre as estimativas pontuais, apresenta-se a Tabela 10, a seguir, com os valores paramétricos e estimativas de efeito fixo (análise intrablocos) comparada às demais estimativas, visto que seu EQM, que poderá ser observado mais adiante, foi superior aos anteriores, indicando ser uma análise menos favorável.

Tabela 10: Valores das médias ajustadas, IC(95%) e os respectivos valores paramétricos para a análise usual de modelo fixo

Trat.	Médias Ajust.	LI	LS	VP	REML	BAYES
t ₁	157,06	149,84	164,27	157,75	157,17	157,61
t ₂	181,93	172,84	191,03	179,80	180,59	182,00
t ₃	185,97	177,38	194,56	185,65	184,06	186,19
t ₄	175,45	166,49	184,40	175,30	172,69	175,05
t ₅	174,78	165,86	183,71	169,60	173,51	174,74
t ₆	192,39	185,09	199,70	193,00	191,85	192,83
t ₇	203,27	194,45	212,10	200,20	200,79	203,01
t ₈	191,06	182,11	200,00	191,20	190,06	191,29
t ₉	174,99	166,20	183,78	172,45	174,16	175,15
t ₁₀	203,53	194,77	212,29	197,20	200,37	203,11
t ₁₁	203,23	195,78	210,68	205,75	203,76	203,80
t ₁₂	198,40	189,49	207,30	198,10	196,58	198,33
t ₁₃	165,98	157,05	174,91	166,30	162,68	165,62
t ₁₄	193,19	184,35	202,03	192,40	192,95	193,57
t ₁₅	204,07	195,04	213,10	202,30	202,04	203,81
t ₁₆	198,39	191,21	205,56	196,0	198,66	198,97
t ₁₇	98,14	91,74	104,55	100,0	97,03	98,27
t ₁₈	103,32	95,77	110,86	105,0	101,79	103,38

Para verificar-se a eficiência dos dois métodos (REML e bayesiano), empregaram-se o erro quadrático médio e o coeficiente de correlação linear amostral de Pearson r_i , $i = p, r, b$, sendo que os seus subscritos correspondem ao valor paramétrico e às variáveis REML e bayesiana, respectivamente. Logo, tem-se como estimativas:

$$\begin{aligned}
r_{pr} &= 0,99789 & EQM_{REML} &= 4,86 \\
r_{pb} &= 0,99787 & EQM_{BAYES} &= 5,79 \\
r_{rb} &= 0,99965 & EQM_{Fixo} &= 6,14
\end{aligned}$$

Percebe-se que há uma pequena diferença entre os dois primeiros erros e que todos os coeficientes de correlação linear amostral são positivos e estão muito próximos de 1, ou seja, os dois métodos foram eficientes para a análise. De acordo com o terceiro e o último coeficientes, pode-se visualizar, na Tabela 11, o quanto as estimativas dos métodos estão próximas.

Tabela 11: Quadro-resumo da análise do modelo experimental pela análise bayesiana: média, desvio padrão, intervalos de credibilidade com 95% de probabilidade e valores das estimativas pontuais REML dos efeitos do modelo e seus valores paramétricos

Parâmetro	Média	Desvio	IC		REML	Val.Par.
			LI	LS		
σ_e^2	25,04	6,4	14,08	38,03	24,89	25
σ_b^2	17,39	10,84	3,32	38,82	2,33	9
intercepto	155,48	4,27	147,05	163,75	156,51	-
r ₂	0,88	4,25	-7,66	8,87	0,79	-
r ₃	1,26	4,25	-6,81	9,53	1,22	-
t ₂	24,39	4,6	15,45	33,87	23,41	179,8
t ₃	28,57	4,61	19,81	38,1	27,49	185,65
t ₄	17,44	4,57	8,29	26,1	15,52	175,3
t ₅	17,12	4,64	8,56	26,72	16,34	169,6
t ₆	35,22	4,4	26,83	44,14	34,68	193
t ₇	45,4	4,43	36,58	53,57	43,62	200,2

...continua...

Tabela 11: Cont.

Parâmetro	Média	Desvio	IC		REML	Val.Par.
			LI	LS		
t ₈	33,68	4,52	25,17	43,17	32,89	191,2
t ₉	17,54	4,67	8,54	26,81	16,98	172,45
t ₁₀	45,5	4,48	37,3	54,71	43,19	197,2
t ₁₁	46,19	4,27	37,66	54,3	46,59	205,75
t ₁₂	40,72	4,55	31,87	49,54	39,41	198,1
t ₁₃	8,01	4,58	-0,86	17,11	5,5	166,3
t ₁₄	35,96	4,44	27,28	44,67	35,78	192,4
t ₁₅	46,2	4,64	37,4	55,52	44,87	202,3
t ₁₆	41,35	4,3	32,85	49,54	41,49	196
t ₁₇	-59,35	3,78	-66,73	-51,7	-60,14	100
t ₁₈	-54,24	3,94	-62,04	-46,81	-55,39	105

5 CONCLUSÃO

As duas metodologias empregadas neste trabalho, análises bayesiana e de verossimilhança restrita, mostraram-se boas ferramentas para a estimação de parâmetros de um modelo linear misto, visto que os resultados obtidos em ambas não se diferem.

Levar em conta prioris conjugadas que resultassem em pouca informação para a correlação intraclasse não apresentou vantagem em relação à análise de verossimilhança restrita.

Portanto, ambas as formas de análises são recomendadas para ajustes de superfícies de resposta.

6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ANDERSON, V.L; McLEAN, R.A. **Design of experiments: a realistic approach.** New York: Marcel Dekker, 1974. 418p.

BAILEY, R.A. Resolved designs viewed as sets of partitions. In: HOLROYD, F.C, et al. (Ed.) **Combinatorial designs and their applications.** Boca Raton: Chapman & Hall/CRC, 1999. p.17-47. (Research Notes in Mathematics, 403).

BERNARDO, J.M.; SMITH, A.F.M. **Bayesian theory.** New York. J. Wiley & Sons, 1994. 608p.

BOSE, R.C.; NAIR, K.R. Partially balanced incomplete block designs. **Sankhyā**, Calcuttá, v.4, p.337-372, 1939.

BOX, G. E.P.; DRAPER, N. R. **Empirical model buiding and response surfaces.** New York: J. Wiley, 1987. 669p.

BOX, G.E.P.; WILSON K.B.; On the experimental attainment of optimum conditions. **J.R. Statist. Soc. B.**, London, 13, p.1-45, 1951.

BOX, G.E.P.; TIAO, G.C. **Bayesian inference in statistical analysis.** New York: J. Wiley, 1992. 558p.

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

CASELLA, G.; BERGER, R. L. **Statistical inference.** Belmont: Wadsworth. 1990. 650p.

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

EDMONDSON, R. N. **Design of experiments website**. 2005. Disponível em: <<http://biometrics.hri.ac.uk/experimentaldesigns/website/hri.htm>>. Acesso em: mar. 2006.

FARAWAY, J. J. **Linear models with R**. USA: Chapman & Hall/CRC. 2005. 229p.

FERREIRA, J. G. **Análise intrablocos de um experimento em blocos incompletos equilibrados, aumentado pela adição de alguns tratamentos comuns a todos os blocos**. 1980. 57p. Dissertação (Mestrado em Estatística e Experimentação Agronômica). Escola Superior de Agricultura Luiz de Queiroz/USP, Piracicaba, SP.

GAMERMAN, D. Simulação estocástica via cadeias de markov. In: SIMPÓSIO NACIONAL DE PROBABILIDADE E ESTATÍSTICA - SINAPE, 21., 1996, Caxambu. **Anais...** Caxambu: Associação Brasileira de Estatística, 1996. 196p.

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

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

GELMAN, A. et al. **Bayesian data analysis**. London: Chapman and Hall, 2000. 526p.

GELMAN, ANDREW. Prior distribution. **Encyclopedia of Environmetrics**, Chichester, v. 3, p.1634-1637, 2002.

GELMAN, A. Inference and monitoring convergence. In: GILKS, W.R.; RICHARDSON, S.; SPIEGELHALTER, D. J. (Ed). **Markov Chain Monte Carlo in Practice**. New York: Chapman and Hall, 1995. Chap.8.

GELMAN, A. **Prior distributions for variance parameters in hierarchical models.** 2005. Disponível em:

<<http://www.stat.columbia.edu/~gelman/>. Acesso em: mar. 2006.

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

GIANOLA, D. **Bayesian analysis with applications to genetics e biology.** Ribeirão Preto: USP, 1996. Class notes of a course taught at the departament of genetics, Medical School, University of São Paulo at Ribeirão Preto, 1996.

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

HENDERSON, C.R. Estimation of variance and covariance components. **Biometrics**, Washington, v.9, n.2, p.226-252, 1953.

HEADY, E. O.; PESEK, J. **A fertilizer production suface with specification of economic optima for corn grown on calcareous ida silt loam.** **Journal Farm Economics**, Ithaca, v.36, p. 466-482, 1954.

HINKELMANN, K.; KEMPTHORNE. O.**Design and Analysis of Experiments.v.2: Advanced experimental design.** New Jersey: John Wiley & Sons, 2005. 780p.

JEFFREYS. H. **Theory of probability**, 3. ed. Oxford: Claredon Press, 1961. 447p.

JOHN, P.W.M. **Incomplete block designs.** Texas, USA: Marcel Dekker, 1980. v.1, 101p.

KHURI, A. I.; CORNELL. J. A. **Response Surface: Designs and Analyses.** 2. ed., New York: Marcel Dekker, Inc., 1996. 510p.

MEAD, R.; PIKE, D.J. A review of response surface methodology from a biometrics viewpoint. **Biometrics**, Raleigh, v.31, p.803-851, 1975.

MONTGOMERY, D.C.; **Introdução ao controle estatístico da qualidade** 4. ed. Rio de Janeiro: LTC., 2004. 513p.

MORAIS, A. R. de. **Modelo de superfície de resposta com algumas variáveis auxiliares**. 1982. 98p. Dissertação (Mestrado em Estatística e Experimentação Agronômica). Escola Superior de Agricultura Luiz de Queiroz/USP, Piracicaba, SP.

NAIR, K.R. Analysis of partially balanced incomplete block designs illustrated on the simple square and rectangular lattices. **Biometrics**, Raleigh, v.8, p.122-155, 1952.

NEAL, R. M. Slice sampling. **The Annals of Statistics**, v.31, n.3, p.705-767, 2003.

O'HAGAN, A. **Kendall's advanced theory of statistics: Bayesian inference**. [S.1.] : Edward Arnold, 1994. v. 2b.

OLIVEIRA, A. C. Experimentos em blocos incompletos parcialmente balanceados (PBIB) com tratamentos comuns adicionados em cada bloco: **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, Brasília, v.25, n.4, p. 469-490. 1990.

PAULINO, C. D.; TURKMAN, M. A. A.; MURTEIRA, B. **Estatística Bayesiana**. Lisboa: Portugal, 2003. 447p.

PATTERSON, H. D.; THOMPSON, R. Recovery of interblock information when block sizes are unequal. **Biometrika**, London, v.58, n.3, p. 545-554, 1971.

PIMENTEL GOMES, F. **Curso de estatística experimental**. 14.ed. Piracicaba: Livraria Nobel, 2000. 477p.

PINHEIRO, J. C.; BATES, D. M. **Mixed-effects models in S and S-PLUS**. New York: Springer-Verlag, 2000. 528p.

R Development Core Team (2005). **R: A language and environment for statistical computing**. Vienna, Austria: R Foundation for Statistical Computing. Disponível em: <<http://www.R-project.org>>. Acesso em: 2006.

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

RAMALHO, M . A. P.; FERREIRA. D. F.; OLIVEIRA. A. D. **Experimentação em genética e melhoramento de plantas**. Lavras : UFLA, 2000. 326p.

RIBEIRO, A. C.; GUIMARÃES, P. T.; ALVAREZ V. V. H. (Ed.). **Recomendações para o uso de corretivos e fertilizantes em Minas Gerais: 5. Aproximação**. Viçosa: Comissão de Fertilidade do Solo do Estado de Minas Gerais, 1999. 359p.

SEARLE, S. R.; CASELLA, G.; McCULLOCH, C. E. **Variance components**. USA: J. Wiley, 1992. 501p.

SILVA, M. I. S.; **Modelos de herança no melhoramento vegetal: uma abordagem bayesiana**. 2005. 77p. Dissertação (Mestrado em Estatística e Experimentação Agropecuária) - Universidade Federal de Lavras, Lavras, MG.

SILVA, J. W.; **Análise Bayesiana de um modelo linear generalizado misto: emprego no melhoramento de plantas**. 2004. 77p. Dissertação (Mestrado em Estatística e Experimentação Agropecuária) - Universidade Federal de Lavras, Lavras, MG.

SORENSEN, D. **Gibbs sampling in quantitative genetics**. Denmark: Danish Institute of Animal Science, Department of Breeding and Genetics, 1996. n.82, 186p.

VIEIRA, S. **Aspectos das funções de produção ajustadas aos ensaios fatoriais 3^3 de adubação.** 1970. 160p. Dissertação (Mestrado em Estatística e Experimentação Agronômica). Escola Superior de Agricultura Luiz de Queiroz/USP, Piracicaba, SP.

WHITE, T. L.; HODGE, G. R. **Predicting breeding values with applications in forest tree improvement.** Netherlands: Kluwer Academic, 1989. 367p.

ANEXO

Anexo A: Rotina para a implementação da Amostragem Gibbs das distribuições condicionais completas <i>a posteriori</i> e da análise freqüentista	68
---	----

ANEXO A

Rotina para a implementação da Amostragem Gibbs das distribuições condicionais completas *a posteriori* e das demais análises utilizadas neste trabalho

```
# Leitura de dados e definição do delineamento#
valpar <- read.table("arquivo de dados", header=TRUE)
R      <- factor(valpar$Repet)
B      <- factor(valpar$Bloco)
Trat   <- factor(valpar$Trat)
Test   <- factor(valpar$Test)
Nitro  <- factor(valpar$Nitro)
AdFol  <- factor(valpar$AdFol)
Prod   <- valpar$Prod
N      <- valpar$N
A      <- valpar$A
simul  <- data.frame(R,B,Trat,Test,Nitro,N,AdFol,A,Prod)
attach(simul)

# Análise do modelo fixo #
modelo.1 <- lm(Prod ~ R/B + Trat)
modelo.2 <- lm(Prod ~ R/B + Test + Nitro*AdFol)
modelo.3 <- lm(Prod ~ B + N*A + N2 + A2)
anova(modelo.1)
anova(modelo.2)
anova(modelo.3)

# Análise do modelo misto - REML #
library(nlme)
modelo.1.m <- lme(Prod ~ R + Trat, data = simul,
random = ~1| B)
anova(modelo.1.m)
```

```

summary(modelo.1.m)

# Para visualizar o gráficos das interações #
par(mfrow=c(1,2))
interaction.plot(Nitro,AdFol,Prod)
interaction.plot(AdFol,Nitro,Prod)

# Superfície de Resposta #
modelo <- lme(Prod ~ R + N*A + N2 + A2, random = ~ 1 | B)
summary(modelo)
y <- Prod
n <- length(y)
library(MASS)

# Delineamento #
XZ <- model.matrix(modelo.1)
X <- XZ[,1:20]
xz <- matrix(c(rep(1,5),rep(0,55)))
Z <- cbind(xz,XZ[,21],XZ[,24],XZ[,27],XZ[,31],
XZ[,34],XZ[,37],XZ[,40],XZ[,44],XZ[,47],
XZ[,50],XZ[,53])
# As <- svd(X,nu=0) #
# rank.X <- sum(As$d>0.000001*As$d[1]) #
# rank.X #

# Inferência Bayesiana #
iter <- 150000
BI <- 50000
TH <- 25
SS <- (iter-BI)/TH
cadeia <- matrix(0,iter,(2+20+12))
amostra <- matrix(0,SS,(2+20+12))

```

```

# Prioris #
rb      <- 2
sb      <- 5
re      <- 2
se      <- 5

# Pontos iniciais (Chutes) #
b       <- ginv(t(Z)**Z)**t(Z)**y
beta    <- ginv(t(X)**X) ** t(X)** y
e       <- y - (X**beta + Z**b)
vb      <- as.real((t(b)**b)/11)
ve      <- as.real((t(e)**e)/31)
F       <- ginv(t(X)**X)
cF      <- chol(F)

# Agora vamos percorrer a cadeia e gerar todas as amostras. #
# Loop MCMC #
for (i in 1:iter)
{
gamma   <- as.real(ve/vb)
# Sendo A=I #
Ag      <- gamma *diag(12)

# Condicional completa para efeitos fixos #
meanf   <- ginv(t(X)**X)**t(X)**(y-Z ** b)
kf      <- rnorm(20)
beta    <- sqrt(ve) * t(cF) ** kf + meanf

# Condicional completa para efeitos aleatórios #
M       <- ginv(t(Z)**Z + solve(Ag))
meanr   <- M**t(Z)**(y-X**beta)
kr      <- rnorm(12)

```

```

sr      <- sqrt(ve) * chol(M)
b       <- t(sr) %*% kr + meanr

# Condicional completa para variância residual #
e       <- y - X%*%beta-Z%*%b
c1      <- (n+re)/2
c2      <- (t(e)%*%e+re*se)/2
ve      <- rgamma(1,c1,c2)
ve      <- as.real(1/ve)

# Condicional completa para variância de blocos #
c1      <- (12+rb)/2
c2      <- (t(b) %*% b + rb*sb)/2
vb      <- rgamma(1,c1,c2)
vb      <- as.real(1/vb)
cadeia[i,] <- cbind(ve,vb,t(beta),t(b))
for (j in 1:SS)
  {
if (round((i-BI-1)/TH) == j)
  {
amostra[j,] <- cbind(ve,vb,t(beta),t(b))
  }
}
}

```