



THAIS DESTEFANI RIBEIRO FURTADO

**UTILIZAÇÃO DO MÉTODO BAYESIANO NA DESCRIÇÃO
DA CINÉTICA DE SECAGEM DA POLPA DE JABUTICABA
POR MODELOS DE REGRESSÃO NÃO LINEAR**

**LAVRAS - MG
2019**

THAIS DESTEFANI RIBEIRO FURTADO

**UTILIZAÇÃO DO MÉTODO BAYESIANO NA DESCRIÇÃO
DA CINÉTICA DE SECAGEM DA POLPA DE JABUTICABA
POR MODELOS DE REGRESSÃO NÃO LINEAR**

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

Prof. Dr. Joel Augusto Muniz
Orientador

**LAVRAS - MG
2019**

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

Furtado, Thais Destefani Ribeiro.

Utilização do método bayesiano na descrição da cinética de
secagem da polpa de jaboticaba por modelos de regressão não linear
/ Thais Destefani Ribeiro Furtado. - 2019.

124 p. : il.

Orientador(a): Joel Augusto Muniz.

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

Bibliografia.

1. regressão não linear. 2. inferência bayesiana. 3. secagem de
alimentos. I. Muniz, Joel Augusto. II. Título.

THAIS DESTEFANI RIBEIRO FURTADO

**UTILIZAÇÃO DO MÉTODO BAYESIANO NA DESCRIÇÃO DA CINÉTICA DE
SECAGEM DA POLPA DE JABUTICABA POR MODELOS DE REGRESSÃO NÃO
LINEAR**

**USE OF THE BAYESIAN METHOD IN THE DESCRIPTION OF DRYING
KINETICS OF JABUTICABA PULP BY NON-LINEAR REGRESSION MODELS**

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

APROVADA EM 27 DE FEVEREIRO DE 2019

Prof. Dr. Augusto Ramalho de Morais	(DES/UFLA)
Prof ^a . Dr ^a . Isabel de Sousa Amorim	(DES/UFLA)
Prof. Dr. Sílvio de Castro Silveira	(FEOL)
Prof ^a . Dr ^a . Alessandra Querino da Silva	(UFGD)

Prof. Dr. Joel Augusto Muniz
Orientador

**LAVRAS - MG
2019**

*À minha mãe, Eliane; ao meu pai, José Martins (in memoriam); ao meu irmão,
Otávio; à minha sobrinha, Aira e ao meu marido, Lucas, pelo carinho, amizade, amor e força
em todos os momentos.
Dedico*

AGRADECIMENTOS

A Deus por conduzir meu caminho, guiar meus pensamentos, sem me deixar desistir, mesmo em momentos mais difíceis.

Ao meu orientador, Dr. Joel Augusto Muniz, pelo acolhimento, calma, atenção e paciência na orientação, por estar sempre ajudando e disponível. Pelas experiências compartilhadas nos quase dez anos de orientação.

A todos os professores do Programa de Pós-Graduação em Estatística e Experimentação Agropecuária, pelo conhecimento transmitido e pela contribuição para a minha formação profissional.

À Universidade Federal de Lavras, que me proporcionou a oportunidade de fazer pós-graduação e por oferecer ensino gratuito de qualidade.

O presente trabalho foi realizado com apoio do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) – processo CNPq 147935/2018-0.

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

À minha família: mãe, Eliane, pai, José (*in memoriam*); meu marido Lucas; irmão Otávio; cunhada, Ana e sobrinha querida, Aira; avós Irene e Moacir; tios e tias, primos (as) Gustavo, Tiago e Alexandra e a todos, pelo carinho, compreensão e, principalmente, por sempre acreditarem em mim e me darem força para continuar.

Aos amigos de classe, Leila, Lais e Michele pelos dias de estudo, de apoio uns aos outros, por relembrar prazos de entrega, sempre ajudar em situações diversas e pela companhia em congressos, viagens e passeios.

Aos amigos de orientação, Edilson, Ariana e Jaqueline, por ajudarem a solucionar diversas dúvidas, auxiliar em estudos, compartilhar experiências e também ajudar a utilizar os softwares que, algumas vezes, pareciam muito difíceis.

Aos amigos e colegas do grupo de estudos em Modelos de Regressão Não Linear pela troca de conhecimento, experiências e boas risadas. Que sem dúvidas contribuíram para o presente trabalho. Edilson, Tales, Felipe, Kelly, Victor, Sérgio, Jaqueline.

Aos amigos da salinha de estudo da pós graduação pelo apoio e trocas de informações.

Aos amigos e amigas que são muito importantes, Bethânia, Mariáh, Thais, Izabela, Laissa, Charone, Natália, Maria Augusta, Luciana, Letícia (Lê), Gustavo, Ana Cristina, Renato, Karen, Evelyn e Bel, pelo carinho, amizade e companheirismo em diversas horas.

Aos funcionários e ex-funcionários do DES e DEX, em especial às meninas da secretaria Nádia, Josi e Magali que, de alguma forma, contribuíram e ajudaram na minha caminhada.

A todos que, de alguma maneira, contribuíram e torceram pela realização deste trabalho.

Muito obrigada!

Os livros não são feitos para que alguém acredite neles, mas para serem submetidos à investigação. “Quando consideramos um livro, não devemos perguntar o que diz, mas o que significa.” (Umberto Eco)

RESUMO

A jabuticabeira é nativa da Mata Atlântica no Sul do Brasil, e o seu fruto é muito consumido in natura. No entanto é altamente perecível necessitando de técnicas de conservação adequadas. O processo de secagem é bastante útil, pois além de amenizar as perdas no pós-colheita, agrega valor ao produto final. O objetivo deste trabalho foi avaliar o ajuste de modelos de regressão não linear aos dados de cinética de secagem de polpa de Jabuticaba nas temperaturas de 50 e 60°C via inferência Bayesiana verificando a necessidade do uso de erros autoregressivos de ordem 1 (AR(1)), utilizando-se *prioris* informativas e não informativas, bem como desenvolver as distribuições condicionais completas de interesse para os parâmetros dos modelos avaliados e, ainda apresentar as rotinas desenvolvidas na análise de dados. Os modelos avaliados foram Lewis (L), Henderson e Pabis (HP), Page (P), Exponencial Simples com Três Parâmetros (ESTP), Midilli (M), Dois Termos (DT) e Aproximação da Difusão (AD), obtendo-se o diagnóstico de convergência, estimativas pontuais de média e moda e intervalares (HPD), bem como critérios de seleção, sendo todos os cálculos realizados utilizando-se o software R (versão 3.5.2). Os modelos M, ESTP e AD apresentaram ao menos um problema quanto à convergência, validade das pressuposições dos modelos de regressão e/ou adequabilidade no ajuste aos dados. Os modelos de L, HP e DT com estrutura de erros autoregressivos foram adequados para descrever os dados de Jabuticaba em ambas as temperaturas, sendo que, o HP foi mais indicado na temperatura de 50°C e o de DT em 60°C. Em 50°C a taxa de secagem foi de 0,0078g de água/min variando entre 0,0046 e 0,0122 g de água/min no processo e, em 60°C observou-se a taxa de secagem num primeiro estágio de 0,0143 g de água/min, variando entre 0,0132 e 0,0155 g de água/min, em segundo estágio a taxa foi de 0,0689 g de água/min variando entre 0,0690 e 0,0710 g de água/min. Com o aumento da temperatura de secagem houve a diminuição de cerca de 50% no período de secagem.

Palavras-chave: regressão não linear, secagem de alimentos, modelos estatísticos, Inferência Bayesiana;

ABSTRACT

Jaboticaba is a native tree from the Atlantic Forest in Southern Brazil, and its fruit is widely consumed in the fresh form, but it is highly perishable, requiring conservation techniques. The drying process is very convenient, as well as reduces post-harvest losses, adding value to the final product. The aim of this study was to describe the drying kinetics of Jaboticaba pulp at temperatures of 50 and 60°C. By using nonlinear regression models which were evaluated regarding to the structure of autoregressive dependence errors of first order, using the methods of Bayesian Inference with informative and non-informative priors and getting the complete conditional posterior densities of parameters. We evaluated the models: Henderson and Pabis (HP), Simple Three-Parameter Exponential (ESTP), Lewis (L), Diffusion Approach (AD), Two Terms (DT), Page (P) and Midilli (M), finding the diagnosis of convergence, point estimates of mean and median and intervals (HPD), as well as selection criteria through software R. The M, ESTP and AD models, presented at least one problem regarding to the convergence, validity of the assumptions of the regression models and/or suitability of the fit the data. The models L, HP and DT with structure of first order errors were adequate to describe the data of Jaboticaba pulp on both temperatures; the HP was more indicated at 50 °C and DT at 60 °C. In 50 °C the drying rate was 0.0078g water/min ranging from 0.0046 to 0.0122 g water/min in the process and at 60°C the drying rate was observed in a first stage of 0.0143 g of water/min, changing between 0.0132 and 0.0155 g of water/min, in the second stage the rate was 0.0689 g of water/min ranging from 0.0690 to 0.0710 g of water/min. With the drying temperature increase there was a decrease of about 50% in the drying period.

Key words: nonlinear regression, drying food, statistics models, Bayesian inference;

SUMÁRIO

1.	INTRODUÇÃO	10
2.	REVISÃO DA LITERATURA	12
2.1.	A Cultura de Jabuticaba	12
2.2.	Processos de secagem	14
2.3.	Métodos empíricos e teóricos.....	16
2.4.	Construção de modelos de secagem	17
2.5.	Descrição dos modelos de regressão	20
2.6.	Erros heterogêneos e autocorrelacionados	21
2.7.	Inferência Bayesiana	22
2.7.1.	Distribuição a <i>priori</i>	24
2.7.2.	Distribuição a <i>posteriori</i>	27
2.8.	Método de Monte Carlo via Cadeia de Markov (MCCM), algoritmos Metropolis-Hastings (M-H) e Amostrador de Gibbs	28
2.9.	Verificação da Convergência de cadeias	29
2.10.	Avaliadores e Critérios de seleção de modelos	31
2.10.1.	Comparação e seleção de modelos.....	32
2.10.1.1.	Critérios de informação.....	32
2.10.1.2.	Intervalo Highest Posterior Density (HPD).....	33
3.	MATERIAL E MÉTODOS	34
3.1.	Material.....	34
3.2.	Metodologia.....	34
3.2.1.	Modelos	34
3.2.2.	Distribuições a <i>priori</i>	36
3.2.3.	Distribuições a <i>posteriori</i>	37
3.2.4.	Recursos Computacionais	38
3.2.5.	Comparação dos ajustes dos modelos	38
3.2.6.	Sequencia de análise de dados	39
4.	RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	40
4.1.	Distribuições condicionais	40
4.1.1.	Modelo de Lewis	41
4.1.2.	Modelo de Henderson e Pabis.....	41
4.1.3.	Modelo de Page	42
4.1.4.	Modelo ESTP.....	42

4.1.5	Modelo Midilli.....	43
4.1.6	Modelo Dois Termos	44
4.1.7	Modelo Aproximação da Difusão.....	45
4.2	Análise dos resíduos	47
4.3	Convergência	49
4.4	Estimativas e comparação de modelos	53
5.	CONCLUSÕES	64
	REFERÊNCIAS	65
	ANEXO 1	73
	ANEXO 2	99
	ANEXO 3	115

1. INTRODUÇÃO

Os frutos são de grande importância em todo o mundo, sob os aspectos social, econômico e alimentar, além de serem ideais para uma dieta saudável e balanceada. O Brasil tem importante papel no agronegócio global, sendo o terceiro maior produtor de frutas frescas no mundo, com produção anual acima de 40 milhões de toneladas, atrás apenas da China e da Índia (ANUÁRIO..., 2013). De acordo com Weiss e Santos (2014), os três países, juntos, produzem cerca de 40% da produção mundial de frutas.

A jabuticaba é um fruto nativo do Brasil, com características sensoriais agradáveis além de ser um alimento com grandes qualidades nutricionais. O fruto pode ser consumido in natura, bem como na forma de geleias, licores, bebidas fermentadas e vinagre, tendo alto potencial econômico (CORADIN, SIMISKI, REIS, 2011; VIEIRA et al., 2017; GOBATO; GOBATO; HEIDARI, 2018). Em geral, a comercialização da Jabuticaba é realizada em pequenos estabelecimentos regionais, em más condições de armazenamento, o que compromete a qualidade do fruto e altera suas características. Nestas condições, a Jabuticaba é altamente perecível com vida útil de 2 a 3 dias, acelerando a perda do valor comercial do fruto e assim alcançando altos valores de mercado (ZICKER, 2011; VIEIRA et al., 2017) devido a redução de oferta do fruto.

Considerando a rápida deterioração da Jabuticaba e a dificuldade de conservação, a extração da polpa para secagem gera a valorização do produto na indústria alimentícia, além de facilitar o acesso em períodos de entressafra. Deste modo, o processo de secagem da polpa de Jabuticaba surge como uma alternativa para aumentar o período de conservação, pois proporciona a redução na quantidade de água presente no alimento, ocasionando o prolongamento da vida útil do mesmo, com a diminuição da atividade microbiana.

O processo de secagem é uma solução tecnológica para se reduzir estas perdas no pós-colheita de frutos, que consiste na remoção de água ou de qualquer outro líquido do alimento, na forma de vapor para o ar não saturado (MORAES; RODRIGUES, 2006), além de reduzir custos com transporte e agregar valor ao produto final. A cinética de secagem, obtida no processo de secagem de frutos, representa a velocidade de decréscimo do teor de água presente no produto em função do tempo. Esta perda de água é comumente representada por uma curva sigmoide decrescente, que pode ser expressa por modelos de regressão não linear. Segundo Furtado et al. (2019) e Silva et al. (2016), o emprego de modelos matemáticos para a representação do processo de secagem de produtos agrícolas é de fundamental importância, haja vista que as informações geradas possibilitam a redução do tempo e de custos no

processo, assim como prever os tempos de secagem e desenvolver equipamentos adequados, com a finalidade de obter um produto com maior durabilidade e de qualidade.

Um dos métodos de análise de dados para modelagem estatística é a inferência Bayesiana, que apresenta vantagens como a possibilidade de se trabalhar com pequenas amostras, obtendo resultados confiáveis e precisos (CONGDON, 2006). As técnicas de inferência Bayesiana são usadas em diversas áreas do conhecimento, como em genética, biometria, econometria, entre outras áreas nas quais os modelos não lineares são bem difundidos. No entanto, o estudo envolvendo a cinética de secagem de alimentos é ainda pouco desenvolvido com a aplicação deste método de análises, sendo que, quase não foram encontrados estudos e, o que foi encontrado não apresentou informações concisas sobre a parte inferencial. A inferência Bayesiana se dá a partir da generalização do teorema de Bayes e será apresentado no decorrer do texto.

O presente trabalho teve como objetivo avaliar o ajuste de modelos de regressão não linear aos dados de cinética de secagem de polpa de Jaboticaba nas temperaturas de 50 e 60°C via inferência Bayesiana, utilizando *prioris* informativas e não informativas, bem como desenvolver as distribuições condicionais completas de interesse para os parâmetros dos modelos avaliados e, ainda apresentar as rotinas desenvolvidas na análise de dados. Os modelos avaliados foram Lewis (L), Henderson e Pabis (HP), Page (P), Exponencial Simples com Três Parâmetros (ESTP), Midilli (M), Dois Termos (DT) e Aproximação da Difusão (AD).

2. REVISÃO DA LITERATURA

2.1. A Cultura de Jabuticaba

A jabuticabeira (*Myrciaria* spp. Berg) é uma árvore frutífera nativa da Mata Atlântica no Sul do Brasil, de clima subtropical por origem, que se desenvolve bem em solos com bom suprimento de água, a sua floração ocorre mais de uma vez por ano, entre o fim do inverno e o início da primavera (EMBRAPA FLORESTAS, 2015). De acordo com Alves et al. (2014), a cultura de Jabuticaba é encontrada desde o estado do Pará até o Rio Grande do Sul. Entre as cultivares utilizadas, a que mais ocorre no Brasil é a ‘Sabará’ (NUNES et al., 2014; GOBATO; GOBATO; HEIDARI, 2018). O fruto é preto-arroxeadado quando maduro, com sabor doce devido ao alto teor de açúcares, apresenta ainda a casca lisa, sem machucados quando saudável, a polpa é branca contendo de 1 a 4 sementes, sendo uma baga subglobosa com cerca de 1,6 a 2,2 cm de diâmetro (CEAGESP, 2019).

Figura 1. Fruto da jabuticabeira.



Fonte: <http://www.ceagesp.gov.br/guia-ceagesp/Jabuticaba/>(CEAGESP, 2019)

A Jabuticaba tem valor nutricional considerável por conter teores elevados de carboidratos, vitamina C, fibras e ferro (Fe), entre outros compostos que são necessários para uma dieta saudável. Na Tabela 1 observa-se a composição da Jabuticaba segundo a Tabela Brasileira de Composição de Alimentos (TBCA, 2017). Segundo Costa et al. (2016) é possível utilizar a casca da Jabuticaba para fazer farinhas e incluí-las na produção de pães, doces, pastas e bebidas isotônicas. O fruto pode ser consumido *in natura* ou processado, com boa aceitação dos consumidores de modo geral.

Tabela 1. Composição de Jabuticaba crua por 100 g de parte comestível.

Componente	Quantidade
Umidade (%)	83,60
Energia (kcal)	61,00
Proteína (g)	0,62
Lipídeos (g)	0,13
Colesterol (mg)	0,00
Carboidratos (g)	15,30
Carboidratos disponíveis (g)	13,00
Fibra alimentar (g)	2,30
Cinzas (g)	0,36
Fósforo (mg)	14,60
Vitamina C (mg)	16,20
Cálcio (mg)	8,35
Magnésio (mg)	17,80
Ferro (mg)	0,10
Potássio (mg)	130,00

Fonte: TBCA (2017)

O cultivo de Jabuticaba é comumente realizado em sítios, chácaras e fazendas como uma produção caseira, para atender a domínios familiares. No entanto, o cultivo do fruto vem sendo testado em vários países, e com isso observou-se um aumento na sua comercialização. De acordo com os dados da CEAGESP (2019), em 2017 a Jabuticaba foi o seu 74º produto mais comercializado, com um total de 2.459,91 toneladas e, que as suas principais fornecedoras, foram as cidades de Casa Branca - SP (24%) e Mogi das Cruzes - SP (16%) (CEAGESP, 2019).

Segundo Zicker (2011), em períodos de safra, os frutos da Jabuticaba são comercializados em feiras livres e mercados municipais, em condições que não são adequadas para a pós-colheita, pois são mantidos em caixas de madeira e papelão, e ficam constantemente expostos aos agentes externos, além de serem mantidos sob temperatura ambiente e sem receber nenhum tratamento adequado. Lima, Peixoto e Ledo (2007) reportam que, nessas condições, a maioria dos frutos perde o valor comercial no período de 2 a 3 dias e, com isso, chega a ter altos valores comerciais, devido à sua alta perecibilidade.

Esta alta perecibilidade compromete a qualidade do fruto, altera suas características físicas, causando murchamento, perda de peso, enrugamento da casca, entre outros efeitos. Há também a alteração das características sensoriais, além do escurecimento da polpa, tornando-se um pouco amarga (ZICKER, 2011).

Com a rápida deterioração da Jabuticaba e à dificuldade de conservação, o processamento da polpa gera um valor maior para a indústria alimentícia, facilitando o acesso em períodos de entressafra. Alguns dos produtos industrializados que utilizam a polpa de

Jaboticaba, como polpas congeladas para fazer suco, sucos em pó, iogurte grego sabor Jaboticaba e vinhos de Jaboticaba, demonstram a sua viabilidade e a saída de produtos feitos à base desse fruto.

Silva, Jardine e Matta (1998) sugerem que a extração da polpa gera redução nos custos com transporte e com armazenagem, além de aumentar o tempo de conservação. Sendo assim a secagem da polpa de Jaboticaba representa um importante processo de conservação, pois proporciona redução no seu teor de água, ocasionando um prolongamento da vida útil do mesmo, devido à diminuição da atividade microbiana.

2.2. Processos de secagem

O processo de secagem de alimentos é uma técnica antiga de conservação que remove a água na forma de vapor para ar não saturado (MORAES e RODRIGUES 2006). O processo implica em uma considerável redução de volume e, indiretamente, na redução de custos com transportes, manipulação do produto além de prover um efetivo método de prolongamento de sua vida útil (BRASILEIRO, 1999). A quantidade de água em um alimento é o principal agente de deterioração por micro-organismos, quanto maior o teor de água no produto final seco, maior a maciez, sendo necessário ponderar os dois fatores, para se obter um alimento palatável com qualidade e maior vida útil (CELESTINO, 2010).

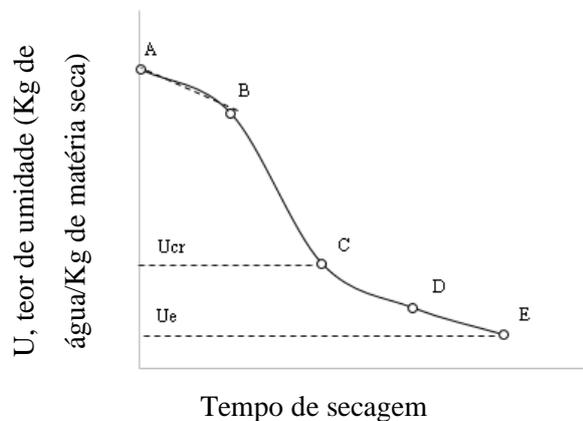
A qualidade no processo de secagem está diretamente associada ao teor de umidade em um alimento, que é medido levando-se em consideração o peso de toda água presente, seja ela livre ou ligada (CELESTINO, 2010). A água livre, também conhecida como atividade de água (a_w), refere-se ao conteúdo de água que não está comprometido com as moléculas constituintes do alimento, ficando susceptível a alterações químicas, físicas e biológicas, sendo ainda um dos fatores de maior influência no desenvolvimento de micro-organismos no alimento. A água livre ou também chamada de água com “mobilidade impedida” está quimicamente ligada aos alimentos, de modo que não fica disponível como solvente, não congela ou evapora em reações (FELLOWS, 2006).

O processo de secagem de alimentos envolve a transferência de calor e massa, que deve ser bem compreendida para alcançar eficiência, a partir de perspectivas técnicas e econômicas (COSTA et al, 2016). Conforme Celestino (2010), a rapidez com que o alimento perde umidade é controlada por suas características moleculares, temperatura, velocidade e umidade do ar de secagem, a este processo se dá o nome de cinética de secagem. Para Prado, Park e Alonso (2000), a evolução das transferências simultâneas de calor e de massa, no curso

da operação de secagem, faz com que esta seja dividida, esquematicamente, em períodos de secagem.

De acordo com Celestino (2010) a variação no conteúdo de umidade de um alimento em um processo de secagem, varia de tempos em tempos e pode ser mostrada esquematicamente, de forma generalizada. Na Figura 2, estão representadas as etapas de secagem dadas pelos segmentos de reta AB, BC, CD e DE, conforme apresentado em Celestino (2010):

Figura 2. Figura representativa do teor de umidade versus o tempo de secagem.



Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Na Figura 2, tem-se:

AB: corresponde à fase inicial de secagem quando o alimento é aquecido desde a temperatura inicial até uma temperatura de equilíbrio T_s (Temperatura do bulbo úmido).

BC: é o período à velocidade constante, que termina quando o alimento atinge o teor de umidade crítico, (U_{cr}).

CD: representa o primeiro período de velocidade decrescente no qual, na maioria dos casos, a velocidade decresce linearmente.

DE: representa o segundo período de velocidade decrescente, nesta fase o alimento atinge o teor de umidade de equilíbrio (U_e). Umidade que permanece no sólido independente do tempo de secagem, desde que as condições de operação não se modifiquem (CELESTINO, 2010).

Segundo Villar (1999), as curvas de secagem à taxa decrescente podem ser côncavas, convexas ou aproximar-se de uma linha reta; podem apresentar um ponto de inflexão, quando ocorre a mudança na forma física do material, como, por exemplo, quando se produz

contração e ruptura, ou quando se forma uma película na superfície do material parcialmente seco. Estas curvas podem aproximar-se de exponenciais, assim como ocorre em modelos não lineares de regressão.

Perez et al. (2013), em estudos com a cinética de secagem de polpa de cupuaçu, observaram em suas curvas de secagem que o período de taxa constante não é detectado e o processo de secagem ocorre na faixa de período de taxa decrescente, sendo assim, a transferência interna de água é quem comanda e fixa a taxa de secagem. A taxa de secagem pode ser acelerada com o aumento da temperatura do ar de secagem e/ou, com o aumento do fluxo de ar que passa pelo produto por unidade de tempo (GOUVEIA et al., 2003).

A quantidade de ar utilizada para a secagem depende de vários fatores, entre os principais cita-se a umidade inicial do produto e a espessura da camada. Alsina, Silva e Santos (1997), estudaram o efeito da temperatura do ar de secagem no intervalo entre 60 e 80°C e velocidade do ar de secagem, variando de 0,7 a 1,5 m/s⁻¹, sobre a cinética de secagem da acerola em monocamada e comprovaram que a velocidade do ar exerce pouca influência na taxa de secagem, entretanto geram um considerável aumento da temperatura do ar.

2.3. Métodos empíricos e teóricos

Segundo Queiroz, Pereira e Melo (1995) e Siqueira, Resende e Chaves (2013) existem métodos comumente utilizados para analisar a secagem de produtos biológicos: o empírico e o teórico. O método empírico consiste em formar grupos físicos adimensionais que podem ser facilmente investigados por experimentos de laboratório e baseia-se nas condições externas, como temperatura, razão da mistura e velocidade do ar de secagem. Entretanto, apesar de poder descrever a curva de secagem para as condições do experimento, não fornece indicação sobre o transporte de energia e de água no interior dos produtos.

Os modelos teóricos utilizam os fundamentos da matemática da difusão e da transferência de calor e massa, podendo descrever de forma aceitável o perfil da distribuição de água no interior de determinado produto agrícola desde que seja possível correlacionar sua forma à geometria de um sólido perfeito. Além da exigência de se estabelecer uma relação funcional entre o coeficiente de difusão, o teor de água e a temperatura de secagem. Sendo assim, é necessário que se considere o valor médio da razão de umidade, quer seja determinado pela solução de uma série truncada ou por integração de um conjunto de pontos discretos distribuídos na matriz do produto, que representam a taxa de secagem de um sólido isolado, qualquer que seja seu formato.

Segundo Rodrigues et al. (2002) existem métodos empíricos, teóricos e semi-teóricos para descrever matematicamente o processo de secagem. O método empírico é utilizado para análise de secagem, usando dados experimentais que podem ser determinados em laboratório e o método semi-teórico funciona como um meio termo entre o método empírico e o teórico.

2.4. Construção de modelos de secagem

Considerando os métodos existentes para descrever o processo de secagem, vistos anteriormente, os mais utilizados são o empírico e semi-teórico, mesmo que estes métodos sejam baseados estritamente em condições experimentais. De acordo com Resende, Ferreira e Almeida (2010), depois de estabelecidas as condições de condução do experimento de secagem, tais como, temperatura, umidade relativa do ar e velocidade do ar, entre outras, são mensurados os teores de água no produto durante o período de secagem. A partir de então são feitos cálculos para obter a razão de umidade e o modelo propriamente dito.

Dentre os diversos modelos de cinética de secagem existentes na literatura, abaixo são comentados alguns deles, partindo do modelo exponencial simples proposto em 1921. Lewis (1921) em seu artigo sobre a taxa de secagem de materiais sólidos, como algodão, couro, argila e produtos têxteis, propõe apresentar as condições que regem a taxa de secagem por meio de um modelo matemático, caracterizando o que chama de “fuga de umidade”. O autor estabelece a relação entre a evaporação da água na superfície do sólido, com a difusão de umidade no interior do material em formato de folha, como:

$$\frac{\partial^2 y}{L} = - \frac{\partial y}{\partial t} \quad (1)$$

em que y é a concentração média de umidade e L a espessura do material estudado. Foram feitas algumas aproximações em que a diferença de concentração de umidade média pela concentração na superfície do material ($y - y_s$) é inversamente proporcional à distância percorrida ($4/L$) e proporcional a uma constante A . O qual representa a taxa de evaporação na superfície, dada por uma constante R vezes concentração na superfície e, que devem ser iguais à taxa de perda de umidade da “folha”. A quantidade total da umidade no material por unidade de superfície é $w = L/2y$, sendo assim a equação para secagem de sólidos em formato de folha é dada por:

$$- \frac{\partial w}{\partial t} = R y_s = \frac{4A(y - y_s)}{L} \quad (2),$$

desde que:

$$-\frac{\partial w}{\partial t} = \frac{8ARw}{L(4A+RL)} \quad (3)$$

Fazendo-se a separação de variáveis, tem-se que, dw/w é independente da unidade de medida do teor de umidade e, pode ser reescrito como dW/W . Entretanto a equação acima negligencia a existência do teor de umidade de equilíbrio (E) dos materiais. Com isto, Lewis (1921) assume as condições de secagem de um sólido que não reduz expressivamente o seu volume e propõe que a variação no teor de umidade livre, seja dada pela umidade total menos umidade de equilíbrio do sólido no período de avaliação:

$$-\frac{\partial(W-E)}{(W-E)\partial t} = \frac{8.A.R}{L.(4.A+R.L)} \quad (4)$$

De acordo com Lewis (1921) o lado direito da equação refere-se à uma constante, chamada de coeficiente de secagem k , integrando-se as partes para o tempo (t) variando de 0 a n e, para o teor de umidade variando do período inicial para o final com, I em $t=0$ a F em $t=n$:

$$\int_{I,t=0}^{F,t=n} \frac{\partial(W-E)}{(W-E)} = \int_0^n -k \partial t \quad (5)$$

$$\ln[(W-E)_F] - \ln[(W-E)_I] = -kt + \delta \quad (6)$$

em que δ é uma constante de integração. Chamando o conteúdo inicial de umidade de W_0 e de W^* o conteúdo de umidade em F temos que:

$$\ln\left(\frac{W^*-E}{W_0-E}\right) = -kt + \delta \quad (7)$$

e assim:

$$\frac{W^*-E}{W_0-E} = e^{-kt+\delta} \propto RU_t = e^{-kt} \quad (8)$$

em que $\frac{W^*-E}{W_0-E}$ é chamada de razão de umidade RU_t , k faz referência à perda de umidade ao longo do tempo e δ uma constante de integração.

Sherwood (1932), em seus estudos sobre o uso de modelos de difusão de materiais em formato de placas maciças e infinitas, comenta sobre as curvas no período à taxa de secagem constante, serem semelhantes a parábolas. Considerando o experimento realizado com tijolos de argila, apresentou um modelo geral em formato de somas de séries de exponenciais:

$$RU_t = \frac{96}{\pi^4} \left[e^{-k} + \frac{1}{81} e^{-9k} + \frac{1}{625} e^{-25k} + \dots \right], \text{ sendo } p = \frac{V\pi^2 t}{4R^2} \quad (9)$$

em que V é a constante de difusão a umidade.

Segundo Sherwood (1932) os valores multiplicados às series fazem alusão ao formato do material avaliado. Outro modelo bastante difundido na literatura é o de Page (1949), que propôs a relação de perda de umidade ao longo do tempo com base em seu experimento de

secagem de milho com casca, sob a influência de diferentes teores de umidade relativa do ar de secagem. Page (1949) utilizou as relações propostas principalmente por Lewis (1921) e Sherwood (1932) ao avaliar cada fase de secagem no milho com casca. Em seus estudos, considerou-se uma constante c , de modo que:

$$RU_t = e^{-kt^c} \quad (10)$$

sendo que c é adimensional e pode variar de acordo com a umidade relativa de secagem do ar, em seu experimento encontrou os valores de 0,60, 0,65 e 0,83 para umidades relativas do ar de 35%, 50% e 70%, respectivamente.

O modelo de Henderson e Pabis (1961), assim como o de Page, foi criado com base nas considerações de Sherwood (1932) e na equação de Arrhenius para difusividade. Composto por mais um parâmetro, o qual assume a forma:

$$RU_t = k_0 e^{-kt} \quad (11)$$

em que k_0 está associado à forma do material seco e à umidade inicial do alimento. Em 1974, Henderson propôs outro modelo para um secador de grãos, contendo dois termos exponenciais:

$$RU_t = k_0 e^{-k_1 t} + k_2 e^{-k_3 t} \quad (12)$$

em que os valores de k_i estão relacionados ao formato do material no processo de secagem ou à velocidade na perda de umidade (HENDERSON, 1974). Midilli, Kucuk e Yapar (2002) obtiveram um novo modelo para secagem em camada única, o qual também se baseia em modelos anteriores da literatura. Entretanto, leva em consideração uma segunda etapa no processo de secagem que varia com o tempo, seja a expressão:

$$RU_t = k_0 e^{-kt^c} + at \quad (13)$$

em que a é considerado como um parâmetro de ajuste do modelo.

Em geral, os modelos são obtidos por diferenciação e integração, levando-se em consideração a estrutura dos materiais e as restrições adequadas às constantes de secagem. Estes modelos apresentam curvas sigmóides, características dos modelos de regressão não linear e foram usados por diversos autores para descrever o processo de secagem de frutos. Silva et al. (2016) ao estudarem o processo de secagem de carambola através dos modelos não lineares de Henderson e Pabis, Lewis e Page, identificaram o modelo de Page como o mais indicado para caracterizar o fruto. Santos et al. (2016) em seus estudos com a cinética de secagem do fruto de Palma (figo da Índia) observaram que o modelo Logarítmico descreveu melhor o processo de secagem, dentre os modelos avaliados, aproximação da difusão, Midilli, Page e Logarítmico.

Outros autores utilizaram os modelos Henderson e Pabis, Lewis, aproximação da difusão, Midilli, Page e/ou Logarítmico ao investigar a cinética de secagem de feijão-caupi (CAMICIA et al., 2015), secagem de goiabas (RODRIGUES et al., 2002), frutos de pinhão mando (SIQUEIRA; RESENDE; CHAVES, 2013) e a secagem de sementes de maracujá (OLIVEIRA et al., 2014-a).

2.5. Descrição dos modelos de regressão

O estudo da relação entre a variável dependente e uma ou mais variáveis independentes é comum em análises estatísticas, que podem ser feitas por meio de modelos de regressão. Segundo Draper e Smith (1998), os modelos de regressão podem ser classificados basicamente como: modelos lineares (aqueles em que as derivadas parciais da função não dependem dos parâmetros do modelo, ou seja, são lineares em relação aos parâmetros); modelos linearizáveis (aqueles que se tornam lineares por meio de alguma transformação) e modelos não lineares (modelos em, que pelo menos uma das derivadas parciais depende de algum parâmetro do modelo).

Ao ajustar um modelo de regressão, seja ele linear ou não linear, a um conjunto de dados, deseja-se:

- 1) obter “bom ajuste” para fins de representação;
- 2) prever os valores da variável resposta Y para valores fixos de uma ou mais variáveis independente X e estabelecer intervalos de confiança;
- 3) comparar os resultados de diferentes condições experimentais usando, e ou interpretando, os parâmetros (TORNEIRO, 1996).

Sob o ponto de vista da inferência frequentista, para a utilização de modelos lineares, os estimadores de mínimos quadrados apresentam propriedades ótimas, ou seja, são não viesados, normalmente distribuídos e, possuem variância mínima entre qualquer outra classe de estimadores. No entanto, para os modelos não lineares, estas duas propriedades são válidas somente assintoticamente, ou seja, quando o tamanho da amostra é suficientemente grande. Em geral, para pequenas amostras estas propriedades não são satisfeitas. Deste modo, a utilização de inferência Bayesiana surge como uma alternativa quando se trata de pequenas amostras, pois pode garantir maior eficácia nas inferências realizadas quando há uma quantidade reduzida de observações (PAULINO; TURKMAN; MURTEIRA, 2003).

Segundo Hoffmann e Vieira (1998), para modelos mais simples assume-se que os erros sejam independentes, o que não é apropriado quando se trabalha com séries

cronológicas, em que o erro da observação relativa a um período está correlacionado com o erro da observação anterior. Segundo Cassiano e Sáfyadi (2015) e Morettin e Tolo (2004), em geral, a dependência dos resíduos é caracterizada por existir uma variação sistemática dos valores em observações sucessivas, sendo necessário modelar o processo por erros autocorrelacionados. Holffman e Vieira (1998) consideram que, além da autocorrelação residual pode ocorrer heterogeneidade de variâncias.

Souza (1998) cita que, de forma semelhante aos modelos lineares, o processo de estimação de um parâmetro em um modelo não linear, pode ser obtido pela minimização da soma de quadrados dos erros, obtendo-se o sistema de equações normais não lineares, o qual não apresenta uma solução explícita para a estimativa do parâmetro, sendo necessário o uso de processos iterativos.

2.6. Erros heterogêneos e autocorrelacionados

Em algumas situações, os conjuntos de dados observados, que são característicos de modelos de regressão não linear, não atendem necessariamente aos pressupostos utilizados para validar um modelo de regressão. Então, é necessário o uso de testes específicos para verificar estas suposições. O teste estatístico comumente utilizado para verificar a heterocedasticidade dos erros é o de Breusch-Pagan, em que a hipótese nula é de que os resíduos sejam homocedásticos (SOUSA et al., 2014).

O teste de Shapiro-Wilk verifica a pressuposição de normalidade, sendo que, quando não se rejeita a hipótese de normalidade H_0 , pode-se afirmar que os dados são normalmente distribuídos. Os erros autocorrelacionados correspondem aos resíduos relacionados no tempo (SOUSA et al., 2014). O teste de Durbin-Watson (DW) é utilizado para verificar a existência de autocorrelação residual nos dados e, quando houver é necessário modelar o processo autoregressivo. A estatística do teste de DW é calculada e comparada a valores tabelados, sendo o valor calculado é dado por:

$$DW = \frac{\sum_{t=2}^n (e_t - e_{t-1})^2}{\sum_{t=1}^n e_t^2} \quad (14)$$

em que e_t é o resíduo no tempo t e e_{t-1} é o resíduo no tempo $t - 1$.

A decisão pode ser tomada comparando-se o valor de DW com os valores críticos tabelados. Os valores críticos tabelados são os limites, inferior L_I e superior L_S , obtidos com base no número de parâmetros do modelo avaliado e a quantidade de observações, encontrados na Tabela de Durbin-Watson (JUDGE et al., 1985). Desse modo, para os valores:

$0 < DW < L_I$ e $4 - L_I < DW < 4$, há dependência;

$L_I < DW < L_S$ e $4 - L_S < DW < 4 - L_I$, o teste é inconclusivo;

$L_S < DW < 4 - L_S$, há independência.

2.7. Inferência Bayesiana

De acordo com Congdon (2006) a inferência Bayesiana é muito útil em modelagem estatística, possibilitando a aproximação compreensiva na estimação de modelos complexos com o auxílio de recursos computacionais, além de vantagens inferenciais. Com o método de Bayes são obtidos intervalos de credibilidade e probabilidade dos parâmetros que proporcionam uma interpretação coerente. Possibilitam formalizar o uso de informações sobre o processo a ser modelado, considerando informações prévias de especialistas e estudos anteriores, juntamente com os dados experimentais, obtendo-se estimativas confiáveis (CONGDON, 2006).

A inferência Bayesiana baseia-se fundamentalmente no Teorema de Bayes, que utiliza probabilidades condicionadas (PAULINO; TURKMAN; MURTEIRA, 2003). Considerando a amostra de uma população Y_1, \dots, Y_n indexada pelo parâmetro “ θ ” (ou um conjunto de parâmetros). Sob o ponto de vista Bayesiano o parâmetro “ θ ” é uma variável aleatória ou um conjunto de variáveis aleatórias com dada distribuição de probabilidade, enquanto que em inferência frequentista o mesmo parâmetro “ θ ” é uma quantidade fixa e desconhecida.

Os modelos Bayesianos estão comumente preocupados com as inferências sob um conjunto de parâmetros $\theta = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_i)$ de dimensão i , em que os parâmetros são quantidades aleatórias (PRESS, 2003; CONGDON, 2006). Pelo teorema de Bayes, o conhecimento prévio sobre os parâmetros é identificado como, informação *a priori* ou distribuição *a priori*, representado por $p(\theta)$. A informação *a priori* ao ser atualizada com a verossimilhança dos dados $p(Y|\theta)$ ou $L(Y|\theta)$ resulta na distribuição *a posteriori* $p(\theta|Y)$. Pelo teorema de Bayes, tem-se:

$$p(\theta|Y) = \frac{p(Y|\theta)P(\theta)}{\sum p(Y|\theta)P(\theta)} \quad (15)$$

em que, o denominador representa a verossimilhança marginal ($p(Y)$) e, pode ser considerada como constante normalizadora, para garantir que $p(\theta|Y)$ seja uma densidade adequada. Desta maneira o teorema de Bayes pode ser apresentado como:

distribuição *a posteriori* \propto verossimilhança distribuição *a priori*

$$p(\theta|Y) \propto L(Y|\theta)p(\theta) \quad (16)$$

em que α representa proporcionalidade. A partir de então, os resultados são avaliados e validados através da distribuição *a posteriori*, em que, de acordo com alguns autores como Press (2003), Paulino, Turkman e Murteira (2003) e Congdon (2006), a influência relativa gerada pela distribuição *a posteriori* depende do peso que é dado à *priori* e ao tamanho da amostra utilizada.

A distribuição *a priori* é qualquer informação que se tem sobre o “problema” antes da realização do experimento. Segundo Press (2003), pode ser informativa ou não, ou seja, pode carregar alguma informação sobre os dados em estudos anteriores ou simplesmente não conter estas informações, ser subjetiva ou objetiva, entre outras denominações e classificações. Para exemplificar tem-se que se a *priori* for de alguma maneira não informativa assumirá as características de uma distribuição equiprovável, como por exemplo, a distribuição uniforme e, caso contrário, outra distribuição com informações relevantes.

A função verossimilhança, $L(Y|\theta)$, corresponde às informações dos dados amostrados de uma maneira geral. Se a amostra for discreta, a função verossimilhança representa a probabilidade da amostra obtida em função do parâmetro θ . Caso seja contínua, representa a densidade conjunta no ponto (y_1, \dots, y_n) . Por definição, considerando a mesma amostra da população apresentada no início deste tópico, com θ desconhecido, a distribuição conjunta da amostra (Y_1, \dots, Y_n) é dada por $\prod f(y|\theta)$, dado que $Y = y$, a densidade conjunta passa a ser função do parâmetro por: $L(Y|\theta) = \prod f(y|\theta)$ (CASELLA; BERGER, 2010).

A distribuição *a posteriori* refere-se à resposta para a inferência realizada. Esta informação de interesse pode ser uma medida pontual como a média, mediana e a moda, ou intervalar como o intervalo de credibilidade. A *posteriori* é proporcional à *priori* com a verossimilhança (equação 16). Deste modo, se um novo conjunto de dados se torna disponível, a distribuição *a posteriori* associada ao antigo conjunto de dados deve ser usada como informação para a obtenção de uma nova *posteriori* atualizada (PRESS, 2003).

No entanto, muitas vezes não é fácil realizar a inferência sob a *posteriori*, pois a função densidade de probabilidade gerada pode ser muito complexa por depender de integrais de difícil resolução, ou então, possuir uma forma desconhecida. No caso “multiparamétrico”, em que se deseja inferir sobre as distribuições marginais de cada parâmetro, os problemas se tornam ainda mais complexos, sendo necessário o uso dos métodos de Monte Carlo via Cadeia de Markov (CARVALHO, 2016) e de algoritmos como amostrador de Gibbs e Metropolis-Hastings, objetivando gerar amostras da distribuição marginal da *posteriori*.

Em se tratando de cinética de secagem de polpas sob abordagem Bayesiana, há poucas pesquisas relacionadas, sendo que as existentes dão pouca ênfase para a parte inferencial.

Alguns resultados com pesquisas semelhantes, entretanto, com pouca informação sobre as inferências realizadas, foram encontrados em Oliveira et al. (2014-a e 2014-b) que estudaram os modelos semi-empíricos para a secagem de semente de maracujá e Carvalho (2016) que descreveram as curvas de isotermas de adsorção de metais-traços contaminantes em cascas de alimentos utilizando o modelo não linear de adsorção de Langmuir sob análise Bayesiana. A técnica Bayesiana vem sendo bastante usada no ajuste de modelos de regressão não linear, por ser um método efetivo de ajuste e obtenção de resultados, bem como por apresentar desempenho satisfatório em pequenas amostras. Em geral, nestas análises são necessárias simulações de dados que acabam por utilizar métodos numéricos de estimação.

Há um consenso dos autores que trabalham com ajuste de modelos não lineares na descrição de processos biológicos. No entanto, ainda faltam estudos na área de secagem de alimentos sob abordagem Bayesiana, que possibilitam obter inferências de qualidade com pequenas amostras que são comuns nestes estudos.

2.7.1. Distribuição *a priori*

Segundo Congdon (2006) o conhecimento da distribuição *a priori* sob o parâmetro de interesse é uma importante etapa do processo de inferência, e pode apresentar influência significativa na obtenção da *posteriori* dependendo de como for estabelecida. A distribuição *a priori* trata-se de uma distribuição de probabilidade do parâmetro (ou conjunto de parâmetros) de interesse, θ , antes da realização do experimento, em que θ é uma variável aleatória (PAULINO; TURKMAN; MURTEIRA, 2003).

Para Paulino, Turkman e Murteira, (2003), Congdon (2006) e Gelman et al. (2003) a distribuição *a priori* pode ser classificada basicamente como informativa ou não informativa. Os conceitos lógicos ou objetivos e subjetivos de probabilidade representam graus de crença, condicionados às informações disponíveis numa perspectiva mais ampla, como um conjunto de afirmações sobre o problema em estudo e cabe ao pesquisador concatenar as informações de modo probabilístico sob o parâmetro de interesse (PRESS, 2003; PAULINO; TURKMAN; MURTEIRA, 2003).

A utilização de *prioris* informativas é útil quando realmente há alguma informação relevante sobre o assunto. No entanto, a elicitação destas informações deve ser realizada com cautela, pois informações equivocadas podem levar a resultados também equivocados (SOUZA et al., 2016), além de apresentarem maior impacto quando o número de observações n for pequeno. Podendo assumir qualquer distribuição desde que tenha sido cuidadosamente

proposta, como exemplo, θ pode assumir uma distribuição Normal como média μ e variância σ^2 , $\theta \sim N(\mu, \sigma^2)$, distribuição beta com parâmetros α e β , $\theta \sim Beta(\alpha, \beta)$, binomial $\theta \sim Bin(n, \mu)$ entre tantas outras.

Uma particularidade interessante que pode auxiliar no cálculo da *posteriori* é a utilização de famílias conjugadas, que ocorre quando a distribuição a *posteriori* segue a mesma distribuição da *priori* (GELMAN et al., 2003; PAULINO; TURKMAN; MURTEIRA, 2003). Segundo Gelman et al. (2003) a utilização destas *prioris* conjugadas são matematicamente convenientes, uma vez que a distribuição a *posteriori* segue uma forma paramétrica conhecida e os cálculos computacionais tornam-se mais simples.

A conjugação da distribuição a *priori* é formalmente definida por Gelman et al (2003) e Paulino, Turkman e Murteira, (2003). Se \mathcal{F} é uma classe de distribuições $p(y|\theta)$, e \mathcal{H} é uma classe de distribuições a *priori* de θ , assim a classe \mathcal{H} é conjugada por \mathcal{F} se

$$p(y|\theta) \in \mathcal{H} \text{ para todo } p(\cdot|\theta) \in \mathcal{F} \text{ e } p(\cdot) \in \mathcal{H} \quad (17)$$

De maneira prática esta forma da conjugação é genérica e, para se ter utilidade prática deve-se considerar que \mathcal{H} acomoda a família de todas as distribuições amostradas. Partindo disto há um interesse maior em se obter a família conjugada natural das distribuições a *priori*, as quais surgem tomando \mathcal{H} como o conjunto de todas as densidades, assim possuem a mesma forma funcional da verossimilhança (GELMAN et al., 2003). Paulino, Turkman e Murteira (2003), dizem que a família conjugada natural de \mathcal{F} existe se \mathcal{F} admite estatísticas suficientes de dimensionalidade fixa, independentemente do tamanho da amostra. De acordo com os mesmos autores, uma das subclasses mais importantes de famílias de distribuições é a família exponencial (j-paramétrica) que possui distribuição a *priori* conjugada natural.

A família exponencial será útil no presente estudo, pois os modelos de regressão não linear de cinética de secagem de alimentos são na realidade modelos exponenciais com suas particularidades, deste modo torna-se interessante revisar a distribuição a *priori* conjugada natural da família exponencial. Para isto, são consideradas as abordagens de Paulino, Turkman e Murteira (2003) e Gelman et al. (2003) com um conjunto de dados y_i e parâmetros θ . A classe \mathcal{F} é uma família exponencial se todos os termos assumirem a seguinte forma:

$$p(y_i|\theta) = f(y_i)g(\theta)e^{\{\phi(\theta)^T u(y_i)\}} \quad (18)$$

em que $\theta \in \mathbb{R}^k$ tal que $g(\theta)$ é finito, e os fatores $\phi(\theta)$ e $u(y_i)$ são em geral vetores de mesma dimensão de θ , onde $\phi(\theta)$ é o parâmetro natural da família exponencial \mathcal{F} . Considerando uma amostragem aleatória, a função de verossimilhança é dada por:

$$p(y|\theta) = [\prod_{i=1}^n f(y_i)]g(\theta)^n e^{\{\phi(\theta)^T \sum_{i=1}^n u(y_i)\}} \quad (19)$$

Para todos os valores admissíveis de n e y ,

$$p(y|\theta) \propto g(\theta)^n e^{(\phi(\theta)^T t(y))} \text{ onde } t(y) = \sum_{i=1}^n \mathbf{u}(y_i) \quad (20)$$

a quantidade $t(y)$ é dita estatística suficiente para θ , pois a função verossimilhança depende apenas de y através dos valores de $t(y)$. Assim se a distribuição a *priori* é especificada como

$$p(\theta) \propto g(\theta)^n \exp(\phi(\theta)^T v) \quad (21)$$

a densidade a *posteriori* é dada por

$$p(y|\theta) \propto g(\theta)^{n+n} \exp(\phi(\theta)^T (v + t(y))) \quad (22)$$

De acordo com Gelman et al. (2003) a família exponencial é, em geral, a única classe de distribuições que possui distribuição a *priori* conjugada natural.

Há ainda as *prioris* não informativas, usadas quando não existem informações concisas, ou seja, o conhecimento prévio sobre o assunto a ser estudado é pouco ou quase nenhum, de modo que não é suficientemente relevante. Para Paulino, Turkman e Murteira (2003) com o uso destas *prioris* vagas ou não informativas o(s) parâmetro(s) θ pode assumir, de modo equiprovável, qualquer valor no espaço paramétrico Θ , sendo ainda uma maneira de comparar o peso da utilização de *prioris* informativas e não informativas, bem como os resultados com a inferência frequentista.

Para Press (2003) e Paulino, Turkman e Murteira (2003) há diversas maneiras de expressar a informação a *priori* vaga ou não informativa. Dentre elas se destacam, o princípio da razão de insuficiência de Laplace ou chamado de método de Bayes-Laplace, o princípio de insuficiência de Jefreys ou método de Jefreys ou assumir um valor constante para o parâmetro de interesse. A seguir serão apresentados alguns destes métodos.

De acordo com princípio da insuficiência de Laplace, a falta de informações relevantes a *priori* é tomada com probabilidade igual para a ocorrência do evento θ . Segundo Press (2003), quando o parâmetro de interesse está em um intervalo finito, a distribuição uniforme serve como uma *priori* objetiva e, se ao menos um ponto no domínio do espaço paramétrico não estiver em um intervalo finito, diz-se que é uma *priori* objetiva imprópria. No caso em que Θ é finito, $\Theta = (\theta_1, \dots, \theta_k)$, a distribuição não informativa gerada é a distribuição Uniforme discreta (MOOD; GRAYBILL; BOES, 1974):

$$p(\theta) = \frac{1}{k}, I_{[1, \dots, k]} \theta \text{ sendo que } \theta \in \Theta \text{ e } k = 1, 2, \dots \quad (23)$$

Os dados avaliados no presente estudo foram tomados no tempo e, de acordo com Cassiano e Sáfyadi (2015), este tipo de dados são comumente correlacionados. Neste caso, há

de se ter uma atenção especial com a informação *a priori* para o(s) coeficiente(s) autoregressivo(s). De acordo com Congdon (2006) e Zellner (1996), em inferência Bayesiana as aproximações para φ_1 , que é o parâmetro autoregressivo de ordem 1, do processo autoregressivo Ar(1), não necessariamente estarão entre -1 e 1. Assim, se aplicam tanto aos casos não estacionários, como estacionários. A monitoração dos valores de φ_1 que excedem a banda de estacionariedade pode ser testada sem impor a *priori*, desde que o operador φ_1 do processo seja avaliado a cada amostragem, em forma de probabilidades estabelecidas em um círculo unitário de monitoramento, com base em um algoritmo funcional. De acordo com Congdon (2006), este algoritmo para $\varphi_i > 1$ pode ser derivado do Teorema de Schur's, usado para testar a estacionariedade em simulações de Monte Carlo via Cadeias de Markov, na resolução das equações.

Entretanto, quando não há informações sobre a estacionariedade do processo, pode-se usar as *prioris* não informativas, ou *prioris* irrestritas para $\varphi = (\varphi_1, \dots, \varphi_p)$. De acordo com Congdon (2006) considerando um modelo Ar(1), pode-se usar uma *priori* do tipo:

$$p(\varphi, \sigma) \propto \frac{1}{\sigma} \quad (24)$$

permitindo a amostragem direta da densidade condicional completa sob o parâmetro φ . Outra forma para a *priori*, que pode favorecer a região de estacionariedade, é assumir que a distribuição *a priori* segue distribuição Normal, $p(\varphi_i) \sim N(0, \omega)$, $i \geq 1$, em que ω varia entre 0,5 e 1. Há ainda outras *prioris* apresentadas por Congdon (2006) para os coeficientes autoregressivos, no entanto, não serão mostradas aqui.

2.7.2. Distribuição *a posteriori*

A distribuição *a posteriori* é o resultado da aplicação do teorema de Bayes, como foi apresentado anteriormente com as equações 15 e 16, sendo proporcional à multiplicação da verossimilhança dos dados amostrados pela distribuição *a priori*. Espera-se que por levar em consideração as informações dos dados, a distribuição *a posteriori* seja menos variável que a distribuição *a priori*, sendo expressas por:

$$E(\theta) = E(E(\theta|y)) \quad (25)$$

e

$$var(\theta) = E(var(\theta|y)) + var(E(\theta|y)) \quad (26)$$

A equação 25 representa a média da *posteriori* de θ , ou seja, é a média de todos os possíveis valores da *posteriori* em relação a distribuição dos dados, e a equação 26 representa

a variância a *posteriori*, a qual espera-se que seja em média menor que a variância da *priori* (GELMAN et al., 2003). No entanto, em casos que a variância média da *posteriori* é igual ou maior que a da *priori*, pode-se dizer que houve conflito entre a amostragem e a distribuição a *priori* apresentada.

Toda informação atualizada sobre o parâmetro está contida na distribuição a *posteriori*, que pode ser apresentada sob a forma pontual ou intervalar. Se for pontual, são dadas as medidas de posição como a média, mediana e moda da distribuição, dependendo da interpretação do pesquisador. A estimação intervalar é dada a partir de um intervalo de credibilidade definido numericamente, englobando os valores aceitáveis de θ . Segundo Paulino, Turkman e Murteira (2003), o uso da informação a *priori* informativa gera intervalos de credibilidade mais estreitos comparados com a utilização de *prioris* não informativas. Uma das vantagens em se utilizar as aproximações Bayesianas, como a implementação de simulações, é a possibilidade de obter resultados resumidos e precisos após transformações complexas (GELMAN et al., 2003).

De maneira geral, a inferência sobre os parâmetros visa obter a *posteriori* conjunta do modelo, com interesse na distribuição marginal do parâmetro θ , fazendo-se a integral da *posteriori* conjunta em relação a todos os outros parâmetros. No entanto, estes cálculos podem tornar-se muito complexos e, de acordo com Paulino, Turkman e Murteira (2003), uma alternativa é utilizar os métodos numéricos de Monte Carlo via Cadeias de Markov (MCCM) para obter as distribuições condicionais a *posteriori* para cada parâmetro de interesse e, com isto, as marginais dos θ_i .

2.8. Método de Monte Carlo via Cadeia de Markov (MCCM), algoritmos Metropolis-Hastings (M-H) e Amostrador de Gibbs

O Método de Monte Carlo via cadeias de Markov (MCCM) é um método de simulação que possibilita estimar integrais múltiplas e, solucionar problemas complexos computacionalmente no espaço \mathbb{R}^n , problemas estes que não são possíveis de serem resolvidos manualmente (PRESS, 2003; CARVALHO, 2016). De acordo com Paulino, Turkman e Murteira (2003) a ideia básica do método consiste em transformar um problema de natureza estática em dinâmica, construindo um efeito estocástico temporal artificial, que seja de fácil simulação. Com a simulação iterativa baseada em cadeias de Markov, o método gera amostras dependentes, que convergem para a distribuição marginal do parâmetro θ e, logo, com uma distribuição condicional aproximada do parâmetro de interesse. A convergência é

estabelecida quando ocorre a aproximação das distribuições à marginal de θ repetidas vezes, podendo ser estabelecido um critério de convergência com um intervalo pequeno de erro. Apesar de serem frequentemente usados em inferência Bayesiana, os métodos de simulação via cadeias de Markov podem ser usados em inferência frequentista sem restrições, amostrando a função de verossimilhança (PRADO; SAVIAN; MUNIZ, 2013).

O algoritmo de Metropolis-Hastings consiste em uma técnica de amostragem direcionada à função densidade de probabilidade (fdp) de interesse. Este método, essencialmente, modifica a cadeia de Markov garantindo que ocorra a convergência para a distribuição de interesse a *posteriori*. De acordo com Press (2003), este algoritmo possui uma função geradora de candidatos ($q(\theta', \theta|y)$) com o objetivo de construir a cadeia de Markov que converge para a densidade a *posteriori* ($p(\theta|y)$), seguindo dois passos basicamente: i) amostrar θ^i da função geradora de candidatos com uma probabilidade de aceitação; ii) passo de transição, caso ocorra aceitação do parâmetro θ^i amostrado, este parâmetro/distribuição amostrado e aleatorizado é obtido e substitui-se o θ anterior; o processo é repetido até que seja necessário e ocorra a convergência.

Caso o parâmetro θ possua grande dimensão, torna-se difícil proceder com o algoritmo em apenas um bloco ou seção. Portanto nestas situações utilizam-se o algoritmo de M-H multi-blocos, ou seja, o parâmetro θ é seccionado em “n” vetores de blocos e, com isto, os passos de M-H tornam-se condicionados aos multi-blocos até que ocorra a convergência para as “n” densidades condicionais completas à *posteriori* ($p(\theta_1|y, \theta_2, \dots, \theta_n), \dots, p(\theta_n|y, \theta_1, \dots, \theta_{n-1})$). Pelo teorema de Bayes cada uma destas densidades é proporcional à densidade conjunta a *posteriori* ($p(\theta_1|y, \theta_2, \dots, \theta_n) \propto p(\theta_1 \dots \theta_n|y)$) (PRESS, 2003).

Já o algoritmo Amostrador de Gibbs, em inferência Bayesiana, é considerado um caso particular do algoritmo M-H multi-blocos quando os núcleos dos blocos são conjuntos de densidades condicionais completas (PRESS, 2003). O processo de amostragem segue os passos do algoritmo de M-H multi-blocos com a atualização do parâmetro a cada conjunto de passos, simulando a distribuição a *posteriori*. Esta é uma técnica que pode gerar variáveis aleatórias de uma distribuição (marginal) sem que se conheça a sua densidade (CARVALHO, 2016).

2.9. Verificação da Convergência de cadeias

A análise da convergência das cadeias em simulações MCMC é de grande interesse, pois dão maior confiabilidade e validade às respostas obtidas. Essa verificação tem a

capacidade de indicar valores para descarte e saltos nas cadeias, a fim de minimizar os efeitos de valores iniciais e, ainda garantir a independência entre os valores gerados na amostra. Os indícios de estacionariedade de uma cadeia podem ser avaliados utilizando alguns métodos difundidos na literatura, bem como a análise gráfica. Nogueira, Sáfyadi e Ferreira (2004) sugeriram os seguintes passos, para análise da convergência:

- i) aplicar o teste de Raftery e Lewis (1992) em uma amostra piloto e determinação do tamanho ideal da sequência;
- ii) monitorar a convergência das sequências nas proximidades do tamanho ideal, indicado pelo critério de Raftery e Lewis (1992), por meio do critério de Geweke (1992);
- iii) determinar o tamanho do *burn-in*, ou seja, do número de iterações desprezadas para se retirar o efeito dos valores iniciais do parâmetro, pelo critério de Heidelberger e Welch (1983).

A metodologia proposta por Raftery e Lewis (1992) tem como objetivo, indicar a quantidade mínima de iterações de interesse para a convergência da cadeia, utilizando-se o valor de descarte estimado para a amostra piloto (*burn-in*) e, o número de iterações sequenciais, ou seja, a distância entre uma amostra e outra para que não haja dependência entre os valores simulados (*thin*). Raftery e Lewis (1992) basearam-se em um valor estimado (Fator de Dependência), em que se este valor for muito maior que 1, há indícios de não estacionariedade. Os autores obtiveram ainda como valor máximo de referência o número 5, sendo que, para valores superiores a 5 ($FD > 5$), sugere-se que não há estacionariedade da cadeia, entretanto essa condição pode ser contornada utilizando-se as informações sugeridas, como o tamanho da amostra gerada, descarte dos valores iniciais (*burn-in*) e o salto dentro da cadeia (*thin*), realizando-se novamente o teste após as modificações.

O teste de Heidelberger e Welch (1983) baseia-se na teoria de pontes Brownianas, que basicamente estabelece um padrão com intervalos conhecidos e eventos condicionados chamado de movimento padrão Browniano. O teste investiga o problema de transição inicial dos dados, estabelecendo a hipótese de que, há estacionariedade nas cadeias. Se a hipótese for rejeitada o teste indica o descarte inicial de 10% das iterações, realizando-se o teste novamente e, se ainda for rejeitada a hipótese de estacionariedade, faz-se o descarte progressivo de mais 10%, chegando até no máximo à 50% de descarte dos valores iniciais.

Após este procedimento, se houver a rejeição da hipótese nulidade, há indícios de falha na convergência da cadeia, sugerindo um número maior de iterações. Entretanto, caso não se rejeite a hipótese de estacionariedade, deve-se usar o valor indicado para o descarte de valores iniciais (*burn-in*). Segundo Heidelberger e Welch (1983), amostras com tamanhos

pequenos são diretamente influenciadas pelos valores iniciais. Complementando o teste, é apresentada uma estatística chamada de “*half-width*”, a qual estabelece um intervalo de confiança com base na média da amostra considerando o descarte, de modo que, passará no teste se o valor calculado estiver entre 0 e 1.

De acordo com Geweke (1992), as amostras geradas com o algoritmo de Gibbs e outros métodos, em geral, não são independentes e identicamente distribuídas, o que dificulta a análise da convergência das cadeias e gera aproximações numéricas de baixa precisão para o valor esperado das distribuições a *posteriori*. Deste modo, propõe-se a análise da convergência com base na teoria espectral. O teste de Geweke (1992), basicamente, estabelece a comparação de duas partes da cadeia, dividindo-a entre a parte 1 composta por 10% da sequência inicial da amostra gerada e, a parte 2, com os 50% finais da sequência. Partindo disto, as médias das partes estabelecidas são comparadas, via teste de hipótese baseando-se na estimativa do valor-p (PEREIRA et al., 2009). Se não houver evidências para rejeitar a hipótese de que as médias são semelhantes, há indícios da estabilização da cadeia. O resultado gráfico para o teste de Geweke, com os valores tabelados de Z também pode ser usado para auxiliar na monitoração da convergência das cadeias.

Existem ainda outros métodos gráficos de convergência, que são considerados informais. Entretanto esses métodos são capazes de fornecer uma ideia geral da convergência das cadeias e podem corroborar os testes apresentados anteriormente. Entre estes gráficos estão o traço da cadeia, apresentação dos histogramas e densidades para as distribuições condicionais completas a *posteriori*, o acompanhamento das médias ergóticas. Este último foi usado por Nogueira, Sáfiadi e Ferreira (2004) concomitante à análise formal da convergência. Martins-Filho et al. (2008) utilizaram das técnicas gráficas de construção do traço da cadeia, em que é possível observar os valores gerados a cada iteração e as densidades para as condicionais completas. Raftery e Lewis (1992) utilizaram também as análises gráficas de traço das cadeias MCMC e os gráficos das funções de autocorrelação para o parâmetro de interesse avaliado. Prado, Savian e Muniz (2013), em seus estudos com curvas de crescimento de frutos, utilizaram os critérios de Raftery e Lewis, Heidelberger e Welch e Geweke para analisar a convergência das cadeias obtidas por meio dos algoritmos iterativos MCMC.

2.10. Avaliadores e Critérios de seleção de modelos

Depois de obtidas as estimativas dos parâmetros de cada modelo, e verificada a convergência das cadeias, é necessário que sejam definidos os critérios utilizados para avaliar

a qualidade de ajuste dos modelos, bem como os critérios de seleção para poder comparar e indicar o que melhor descreve o fenômeno em estudo.

2.10.1. Comparação e seleção de modelos

Existem diversos métodos para fazer a comparação e a seleção dos modelos de regressão não linear, entre eles destacam-se, o critério de informação de Akaike (AIC) (AKAIKE, 1974), o critério de informação Bayesiano (BIC) (SCHWARZ, 1978) e o critério de informação Deviance (DIC) (SPIEGELHALTER et al., 2002), que são estatísticas muito utilizadas em inferência Bayesiana. Estes métodos servem como medidas de comparação quanto à qualidade do ajuste de modelos baseados no máximo da função de verossimilhança, sendo dependentes do número de observações e dos parâmetros do modelo em estudo, ou ainda na dificuldade de ajuste do modelo (SOUSA et al., 2014).

Sousa et al. (2014) utilizaram os critérios de AIC e BIC para indicar o modelo mais correto na descrição de curvas de germinação de café. Fernandes et al. (2014) e Fernandes et al. (2015) utilizaram o critério de AIC, as medidas de curvatura de Bates e Wates e o intervalo de credibilidade HPD para curvas de crescimento de frutos de cafeeiro. Barossi-Filho, Achcar e Souza (2010), utilizaram o critério DIC na seleção de modelos de volatilidade estocástica aplicados à IBOVESPA. Utilizaram, ainda, o critério de AICc (AIC corrigido) para dados de altura de árvores, assim como Prado, Savian e Muniz (2013), com curvas de crescimento de frutos de coqueiro.

2.10.1.1. Critérios de informação

Os critérios de informação de Akaike (AIC), Bayesiano (BIC) e Deviance (DIC) são utilizados para a comparação dos modelos estimados. Quanto menor o valor de AIC, DIC e/ou BIC, melhor o modelo, ou seja, mais indicado é o modelo para descrever o fenômeno estudado. Os critérios partem de princípios semelhantes, baseados no máximo da função de verossimilhança. Eles levam em consideração a quantidade de parâmetros dos modelos e têm como característica evitar modelos superparametrizados. Os critérios de informação de Akaike (AIC) (AKAIKE, 1974), critério de informação Bayesiano (BIC) (SCHWARZ, 1978) e o critério de informação Deviance (SPIEGELHALTER et al., 2002) são dados, respectivamente, por

$$AIC = -2 \log L(\hat{\theta}) + 2p \quad (27)$$

$$BIC = -2 \log L(\hat{\theta}) + p \log(n) \quad (28)$$

$$DIC = D(\bar{\theta}) + 2p_D \quad (29)$$

em que $L(\hat{\theta})$ corresponde à função de verossimilhança, p é a quantidade de parâmetros do modelo, n é o número de observações utilizadas no ajuste e \log é o operador matemático logaritmo natural, $p_D = \bar{D}(\theta) - D(\bar{\theta})$, para $D(\theta) = -2 \cdot \log L(\hat{\theta}) + V$, sendo, V uma constante que se cancela e, portanto não precisa ser conhecida e $\bar{D}(\theta) = E[D(\theta)]$.

2.10.1.2. Intervalo Highest Posterior Density (HPD)

Após obtida a informação a *posteriori* sob o parâmetro θ é importante obter um intervalo de estimativas prováveis com certo grau de confiabilidade e assim, eliminando o peso de uma estimativa pontual. Esta região/intervalo de credibilidade é similar ao intervalo de confiança da inferência frequentista. Por definição, uma região de credibilidade R com grau de credibilidade $\gamma = 100(1 - \alpha)\%$ é tal que $P(\theta \in R) \geq 1 - \alpha$ (FERNANDES et al., 2015). Depois de obtido este intervalo de credibilidade, interessa selecionar aquele com o menor comprimento possível e que contenha todos os valores de θ mais plausíveis. Ou seja, os valores na região R determinada representam os valores mais plausíveis para serem utilizados, sendo então, o intervalo de máxima densidade a *posteriori*, do inglês Highest Posterior Density - HPD. O intervalo de menor amplitude representa a densidade da distribuição a *posteriori* de maior confiança sob a estimativa do parâmetro.

Por definição, um intervalo de credibilidade R , com grau de credibilidade de $\gamma = 100(1 - \alpha)\%$ para θ é um HPD se: $R = \{\theta \in R: P(\theta|y) \geq k(a)\}$ em que $k(a)$ é a constante de maior valor tal que $P(\theta \in R) \geq 1 - \alpha$.

3. MATERIAL E MÉTODOS

Nesta seção são apresentadas as características dos dados analisados e as informações sobre o experimento, ao qual foram obtidos os dados, bem como a metodologia de descrição desses dados por meio de modelos não lineares via metodologia de inferência Bayesiana.

3.1. Material

Para a realização do presente trabalho, foram utilizados parte dos dados referentes à secagem de polpa de Jaboticaba obtidos por Nunes et al. (2014). O experimento foi realizado no Laboratório de Armazenamento e Processamento de Produtos Agrícolas (LAPPA), na Unidade Acadêmica de Engenharia Agrícola (UAEA) da Universidade Federal de Campina Grande (UFCG), localizada em Campina Grande, PB. Conforme descrito pelos autores, primeiramente, os frutos, adquiridos em uma feira local, foram higienizados, fez-se a extração da polpa e a sua homogeneização. Após estes procedimentos, as amostras seguiram para o processo de secagem em camada fina, realizada em estufa com circulação forçada de ar, nas temperaturas de 50°C e 60°C. O teor de umidade das amostras foi medido até que se atingisse o teor de umidade de equilíbrio, chegando à 1074 min com 28 medições e 550 min com 23 medições, nas temperaturas de 50°C e 60°C, respectivamente.

3.2. Metodologia

A seguir será abordada a metodologia para análise de dados, contento os modelos de regressão não linear, a especificação das informações a *priori* utilizadas, o caminho para obtenção das distribuições condicionais completas, bem como, os critérios de convergência das cadeias, os critérios de seleção e avaliação dos modelos.

3.2.1. Modelos

Os modelos de regressão não linear, apresentados na Tabela 2 foram ajustados aos dados experimentais de cinética de secagem de polpa de jaboticaba.

Tabela 2. Modelos ajustados aos dados de cinética de secagem de polpa de Jabuticaba em diferentes temperaturas.

Modelo	Referência
Lewis (L)- Lewis (1921)	$RU_i = e^{(-kt_i)} + u_i$ (30)
Page (P) - Page (1949)	$RU_i = e^{(-kt_i^c)} + u_i$ (31)
Henderson e Pabis (HP) - Henderson e Pabis (1961)	$RU_i = k_0 e^{(-kt_i)} + u_i$ (32)
Dois Termos (DT) - Henderson (1974)	$RU_i = k_0 e^{(-k_1 t_i)} + k_2 e^{(-k_3 t_i)} + u_i$ (33)
Exponencial Simples com Três Parâmetros (ESTP)-Ertekin e Yaldiz (2004)	$RU_i = k_0 e^{(-kt_i)} + a + u_i$ (34)
Midilli – Midilli, Kucuk e Yapar (2002)	$RU_i = k_0 e^{(-kt_i^c)} + at_i + u_i$ (35)
Aproximação da difusão (AD) – Santos et al. (2016)	$RU_i = k_0 e^{(-kt_i)} + (1 - k_0) e^{(-kbt_i)} + u_i$ (36)

Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Com relação aos modelos apresentados na Tabela 2, tem-se que, $i = 1, 2, \dots, n$, sendo $n = 28$ na temperatura de 50°C e $n = 23$ na temperatura de 60°C, os tempos em que foram realizadas as medições no teor de umidade na polpa de Jabuticaba; $u_i = \varphi_1 u_{i-1} + \dots + \varphi_p u_{i-p} + \varepsilon_i$, sendo u_i o resíduo do ajuste no i -ésimo tempo; φ_1 o parâmetro autoregressivo de ordem 1; u_{i-1} é o resíduo do ajuste do tempo imediatamente anterior à i -ésima medida; φ_p é o parâmetro autoregressivo de ordem p ; u_{i-p} é o resíduo do ajuste em p tempos anterior à i -ésima medida; ε_i é o ruído branco, com distribuição normal $N(0, \sigma^2)$. Quando os resíduos forem independentes, os parâmetros φ_i serão nulos e, em consequência, $u_i = \varepsilon_i$ (FURTADO et al., 2019; MAZZINI et al., 2005; GUEDES et al., 2004). Cassiano e Sáfadi (2015) em estudo com modelos não lineares de crescimento enfatizam que, conjuntos de dados ordenados no tempo são comumente autocorrelacionados e, essa autocorrelação deve ser considerada e modelada para garantir maior precisão nas estimativas, com maior qualidade no ajuste dos modelos.

Nas equações (30) a (36), RU_i descreve o valor médio da razão de umidade (adimensional) da polpa de Jabuticaba no tempo i em dias; k_0 corresponde à condição inicial do fruto, sendo próximo de 1 por representar 100% da umidade inicial da polpa; k_1 é a razão da taxa de secagem, que pode ser também obtida por diferenciação e refere-se à variação da perda de umidade pelo tempo do processo, com valores entre 0 e 1, pois a perda de umidade é sempre menor que o período de secagem; k_2 corresponde a um parâmetro adimensional de ajuste do modelo, associado à forma do material estudado (HENDERSON, 1974); a e b não possuem interpretação direta, entretanto estão associados à segunda etapa de secagem; k_3 está relacionado à taxa de secagem em segundo estágio, mas não apresenta uma interpretação

direta; c é um parâmetro adimensional associado à umidade relativa do ar; e é a base do logaritmo neperiano e t_i o tempo (minutos) de análise da variável dependente para a medição da umidade no fruto.

3.2.2. Distribuições a priori

As distribuições a priori foram selecionadas com base no conhecimento sobre o processo de secagem, obtidas a partir do estudo da secagem da polpa de Jabuticaba por modelos de regressão via inferência frequentista de Furtado et al. (2019), ou ainda, propostas de acordo com as características dos parâmetros. Quando não havia informação suficiente foram usadas distribuições a priori não informativas.

Considerando as características dos parâmetros dos modelos de regressão não linear e as informações sobre o processo, k_0 , k_1 , k_2 , k_3 e c são as *prioris* informativas, usadas em ambas as temperaturas e a e b *prioris* não informativas, considerando:

$$p(k_0; 50 \text{ e } 60^\circ\text{C}) \sim N(1; 0,01)$$

$$p(k_1; 50^\circ\text{C}) = p(k_{50^\circ\text{C}}) \sim N(0,004; 0,05)$$

$$p(k_1; 60^\circ\text{C}) = p(k_{60^\circ\text{C}}) \sim N(0,0055; 0,06)$$

$$p(k_2; 50^\circ\text{C}) \sim N(0,5; 0,01)$$

$$p(k_2; 60^\circ\text{C}) \sim N(0,5; 0,01)$$

$$p(k_3; 50^\circ\text{C}) \sim N(0,004; 0,05)$$

$$p(k_3; 60^\circ\text{C}) \sim N(0,005; 0,06)$$

$$p(a_{50 \text{ e } 60^\circ\text{C}}) \sim U(-1,1)$$

$$p(b_{50 \text{ e } 60^\circ\text{C}}) \sim U(0,1)$$

$$p(c_{50 \text{ e } 60^\circ\text{C}}) \sim N(1; 0,01)$$

$$p(\varepsilon_i; 50 \text{ e } 60^\circ\text{C}) \sim N(0; \sigma^2)$$

$$(\sigma^2)^{-1} \propto \tau, \text{ para a precisão } \tau \text{ assumiu-se que, } p(\tau_{50 \text{ e } 60^\circ\text{C}}) \sim \text{Gama}(1,5; 1)$$

$p(\varphi_{1; 50 \text{ e } 60^\circ\text{C}}) \propto N(0; \omega)$, para todo $0,5 \leq \omega \leq 1$ e $-1 \leq \varphi_1 \leq 1$ (CONGDON, 2006).

As equações (37) a (39), representam, de forma geral, as distribuições a priori ($p(\theta)$), com os hiperparâmetros representados por $N(\mu; \sigma^2)$, $\text{Gama}(\alpha; \beta)$ e $U(x; z)$.

$$p(\theta) \propto \frac{1}{\sqrt{(2\pi)\sigma}} e^{\left[\frac{1(\theta-\mu)^2}{2\sigma^2} \right]} \quad (37)$$

$$p(\theta) \propto \frac{\beta^\alpha}{\Gamma(\alpha)} \theta^{\alpha-1} e^{-\beta \cdot \theta} \quad (38)$$

$$p(\theta) \propto \frac{1}{z-x}, I_{[0,1]} \theta \quad (39)$$

3.2.3. Distribuições a posteriori

Para a obtenção da distribuição a posteriori conjunta dos parâmetros dos modelos apresentados na Tabela 2, foram consideradas as distribuições a priori com os hiperparâmetros e a verossimilhança dos dados. Para facilitar a notação, será assumido que RU_i é o mesmo que y_i

Para o modelo de Lewis (eq. 30), ao considerar erros independentes $y_i = e^{(-kt_i)} + \varepsilon_i$ e, ao considerar a dependência residual $y_i = e^{(-kt_i)} + \varphi_1 y_{i-1} + \varepsilon_i$, temos respectivamente, $\varepsilon_i = y_i - e^{(-kt_i)}$ e $\varepsilon_i = y_i - e^{(-kt_i)} - \varphi_1 y_{i-1}$. Supondo que $\varepsilon_i \sim N(0; \sigma^2)$, são independentes e identicamente distribuídos (i.i.d.), lembrando que $(\sigma^2)^{-1} \propto \tau$, para a precisão τ assumiu-se que, $\tau \sim \text{Gama}(\alpha; \beta)$ e que $\varphi_1 \sim N(0; \omega)$.

A verossimilhança para o modelo sem estrutura de erros é dada por:

$$L(Y|k, \tau, \alpha, \beta) \propto \tau^{\frac{n}{2}} e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=1}^n [y_i - e^{(-kt_i)} - 0]^2 \right\}} \quad (40)$$

em que $Y = (\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \dots, \mathbf{y}_n)$.

Para o modelo com estrutura de erros, fez-se uma aproximação de acordo com as propostas de Congdon (2006), quando aborda o assunto de modelos autoregressivos nas observações. O autor sugere uma aproximação, pois o primeiro termo do que se torna um somatório é uma constante, assim o somatório inicia-se em $i = 2$ e, tem-se:

$$L(Y|k, \tau, \alpha, \beta, \rho_1) \propto \tau^{\frac{n-1}{2}} e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [y_i - e^{(-kt_i)} - \varphi_1 y_{i-1} - 0]^2 \right\}} \quad (41)$$

Suposições semelhantes foram feitas por Morettin e Toloi (2006) com a análise de séries temporais com estrutura de erros dependentes. Por meio do teorema de Bayes, como na equação (16), a distribuição a posteriori conjunta é dada por, respectivamente:

$$p(k, \tau, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k | Y) \propto \tau^{\frac{n}{2}} e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=1}^n [y_i - e^{(-kt_i)}]^2 \right\}} \tau^{\alpha-1} e^{(-\beta \cdot \tau)} e^{\left\{ -\frac{1}{2\sigma_k^2} [k - \mu_k]^2 \right\}} \quad (42)$$

E fazendo-se uma aproximação quando se tem a estrutura de erros AR(1):

$$p(k, \tau, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \varphi_1, \omega | Y) \propto \tau^{\frac{n-1}{2}} e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [y_{t_i} - e^{(-kt_i)} - \varphi_1 y_{t_{i-1}}]^2 \right\}} \tau^{\alpha-1} e^{(-\beta \cdot \tau)} e^{\left\{ -\frac{1}{2\sigma_k^2} [k - \mu_k]^2 \right\}} \quad (43)$$

Foi considerado o mesmo procedimento para todos os modelos (ANEXO 1). A partir das distribuições a posteriori conjuntas dos parâmetros foram obtidas as condicionais

completas com forma conhecida quando possível. Sendo que, quando as condicionais apresentam forma conhecida, pode-se usar o Amostrador de Gibbs, caso contrário, é necessária a utilização do algoritmo de Metropolis-Hastings.

3.2.4. Recursos Computacionais

O software estatístico R (versão 3.5.2) (R DEVELOPMENT CORE TEAM, 2018) foi utilizado para gerar as amostras das marginais via cadeias de Markov e obter os resultados de interesse deste trabalho. Considerando a metodologia proposta por Nogueira, Sáfadi e Ferreira (2004), inicialmente foi avaliada uma amostra piloto de tamanho 5.000 iterações para a implementação dos algoritmos de Amostrador de Gibbs e Metropolis-Hastings. Com base nos resultados da amostra piloto, em geral, foi sugerido que as amostras fossem geradas partindo de 100.000 iterações das quais, foram eliminadas as 1000 primeiras (*burn-in*) para evitar os efeitos dos valores iniciais, o espaçamento de 10 (*thin*), afim de garantir a independência da amostra, dando um total de 9901 iterações avaliadas. O mesmo procedimento foi adotado para todos os modelos, exceto para o modelo de Midilli (equação 35) que necessitou de um espaçamento de 23 iterações, obtendo-se uma amostra de tamanho 4.305 iterações.

A análise dos resíduos dos modelos foi realizada utilizando-se os pacotes “car” (FOX; WEISBERG, 2018), “qpcR” (SPIESS, 2018) e “lmtest” (HOTHORN et al., 2018), para a avaliação da convergência das cadeias foi utilizando o pacote “boa” (SMITH, 2007), na obtenção dos intervalos HPD o pacote “TeachDemos” (SNOW, 2016) e para o calculo da moda a *posteriori* o pacote “stringr” (WICKHAM, 2019). As rotinas utilizadas estão disponíveis no ANEXO 3.

3.2.5. Comparação dos ajustes dos modelos

Foram verificadas as pressuposições exigidas para validade do modelo estatístico aplicando-se o teste de Durbin-Watson, a fim de avaliar a existência de autocorrelação residual. E os testes de Shapiro-Wilk (SW) e Breush-Pagan (BP) para inferir sobre a normalidade e homogeneidade dos resíduos, respectivamente. Posteriormente foi avaliada a estimação dos parâmetros dos modelos, com base na precisão do ajuste fornecido. Utilizando-se dos Critérios de informação de Akaike (AIC), Bayesiano (BIC) e Deviance (DIC), elegendo como melhor modelo, aquele que apresentar os menores valores de AIC, BIC e DIC.

Utilizando o intervalo HPD em que, o modelo que apresentar os intervalos mais “curtos” para os parâmetros, apresenta maior qualidade no ajuste.

3.2.6. Sequencia de análise de dados

Partindo das distribuições a *posteriori* conjuntas, foram obtidas as distribuições condicionais completas para os parâmetros de cada modelo, como pode ser visto no ANEXO 1. Assim, os algoritmos foram devidamente gerados e as análises realizadas sequencialmente. Primeiramente, fez-se a análise dos resíduos para o ajuste dos modelos de Lewis (L), Henderson e Pabis (HP), Page (P), Exponencial Simples com Três Parâmetros (ESTP), Dois Termos (DT), Midilli (M) e Aproximação da Difusão (AD) aos dados de cinética de secagem de polpa de Jaboticaba nas temperaturas de 50 e 60°C, com base nos testes de Durbin-Watson (DW), Shapiro-Wilk (SW) e Breush-Pagan (BP).

Em seguida foi realizada a análise da convergência das amostras obtidas para cada modelo ajustado, com base nos resultados dos testes de Raftery e Lewis (1992), Heidelberg e Welch (1983) e Geweke (1992) e, mediante a análise gráfica da convergência. Após essas análises, foram obtidas, as estimativas de média, mediana e moda a *posteriori* de cada parâmetro, bem como o intervalo HPD, critérios de avaliação e gráficos de ajuste dos modelos.

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

A seguir são apresentadas as distribuições condicionais, bem como as análises e estimativas para os modelos.

4.1. Distribuições condicionais

As distribuições condicionais completas de cada parâmetro foram obtidas a partir das distribuições a *posteriori* conjuntas, para se chegar às aproximações das distribuições marginais dos parâmetros. Em seguida são apresentadas as distribuições condicionais de cada parâmetro, os detalhes são apresentados no ANEXO 1.

Para facilitar a compreensão, a notação para a representação da distribuição condicional completa, será apresentada de forma que o parâmetro de interesse dado os demais parâmetros e os dados serão representados por: $p(\text{Parâmetro de interesse}|\theta, Y)$, em que θ refere-se à todos os demais parâmetros e Y aos valores observados. No ANEXO 1 as expressões estão completas.

4.1.1. Modelo de Lewis

Para o modelo de Lewis foram obtidas as seguintes respostas para as distribuições condicionais completas dos parâmetros:

$$p(\tau|\theta, Y) \sim \text{Gama} \left(\frac{n+2\alpha-1}{2}, \beta + \frac{1}{2} \sum_{i=2}^n \left[y_i^2 + e^{(-kt_i)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_i e^{(-kt_i)} + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{(-kt_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i \right] \right) \quad (44)$$

$$p(\varphi_1|\theta, Y) \sim N \left(\frac{(\tau \sum_{i=2}^n \{-y_{i-1} e^{(-kt_i)} + y_{i-1} y_i\})}{(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega})}, \frac{1}{\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega}} \right) \quad (45)$$

$$p(k|\theta, Y) \propto e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n \left[e^{(-kt_i)^2} - 2y_i e^{(-kt_i)} + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{(-kt_i)} \right] \right\}} e^{\left\{ -\frac{1}{2\sigma_k^2} [k - \mu_k]^2 \right\}} \quad (46)$$

Sendo assim, para as condicionais dos parâmetros φ_1 e τ foi possível utilizar o algoritmo do Amostrador de Gibbs e para k Metropolis-Hastings.

4.1.2 Modelo de Henderson e Pabis

Para o modelo de Henderson e Pabis foram obtidas as seguintes respostas para as distribuições condicionais completas dos parâmetros:

$$p(\tau|\theta, Y) \sim \text{Gama} \left(\frac{n+2\alpha-1}{2}, \beta + \frac{1}{2} \sum_{i=2}^n \left[y_i^2 + k_0^2 e^{(-kt_i)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_i k_0 e^{(-kt_i)} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i \right] \right) \quad (47)$$

$$p(\varphi_1|\theta, Y) \sim N \left(\frac{(\tau \sum_{i=2}^n \{-y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} + y_{i-1} y_i\})}{(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega})}, \frac{1}{\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega}} \right) \quad (48)$$

$$p(k_0|\theta, Y) \sim N \left(\frac{(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1} e^{(-kt_i)} - \varphi_1 y_{i-1} e^{(-kt_i)}\} + \frac{\mu_0}{\sigma_0^2})}{(\tau \sum_{i=2}^n \{e^{(-kt_i)^2}\} + \frac{1}{\sigma_0^2})}, \frac{1}{\tau \sum_{i=2}^n \{e^{(-kt_i)^2}\} + \frac{1}{\sigma_0^2}} \right) \quad (49)$$

$$p(k|\theta, Y) \propto e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n \left[k_0 e^{(-kt_i)^2} - 2y_i k_0 e^{(-kt_i)} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} \right] \right\}} e^{\left\{ -\frac{1}{2\sigma_k^2} [k - \mu_k]^2 \right\}} \quad (50)$$

Para as condicionais dos parâmetros φ_1 , k_0 e τ foi possível utilizar o algoritmo do Amostrador de Gibbs e para k Metropolis-Hastings.

4.1.3 Modelo de Page

Para o modelo de Page foram obtidas as seguintes respostas para as distribuições condicionais completas dos parâmetros:

$$p(\tau|\theta, Y) \sim \text{Gama} \left(\frac{n+2\alpha-1}{2}, \beta + \frac{1}{2} \sum_{i=2}^n \left(y_i^2 + e^{(-kt_i^c)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_i e^{(-kt_i^c)} + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{(-kt_i^c)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i \right) \right) \quad (51)$$

$$p(\varphi_1|\theta, Y) \sim N \left(\frac{(\tau \sum_{i=2}^n \{-y_{i-1} e^{(-kt_i^c)} + y_{i-1} y_i\})}{(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega})}, \frac{1}{\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega}} \right) \quad (52)$$

$$p(k|\theta, Y) \propto e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n \left[e^{(-kt_i^c)^2} - 2y_i e^{(-kt_i^c)} + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{(-kt_i^c)} \right] \right\}} e^{\left\{ -\frac{1}{2\sigma_k^2} [k - \mu_k]^2 \right\}} \quad (53)$$

$$p(c|\tau\theta, Y) \propto e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n \left[e^{(-kt_i^c)^2} - 2y_i e^{(-kt_i^c)} + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{(-kt_i^c)} \right] \right\}} e^{\left\{ -\frac{1}{2\sigma_c^2} [c - \mu_c]^2 \right\}} \quad (54)$$

Para as condicionais dos parâmetros φ_1 e τ foi possível utilizar o algoritmo do Amostrador de Gibbs e para k e c Metropolis-Hastings.

4.1.4 Modelo ESTP

Para o modelo de ESTP foram obtidas as seguintes respostas para as distribuições condicionais completas dos parâmetros:

$$p(\tau|\theta, Y) \sim \text{Gama} \left(\frac{n+2\alpha-1}{2}, \beta + \frac{1}{2} \sum_{i=2}^n \left(y_i^2 + k_0^2 e^{(-kt_i)} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 + a^2 - 2y_i k_0 e^{(-kt_i)} - 2y_i a + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} + 2k_0 e^{(-kt_i)} a - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i + 2\varphi_1 y_{i-1} a \right) \right) \quad (55)$$

$$p(\varphi_1|\theta, Y) \sim N\left(\frac{(\tau \sum_{i=2}^n \{-y_{i-1}k_0 e^{(-kt_i)} + y_{i-1}y_i - y_{i-1}a\})}{(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega})}, \frac{1}{\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega}}\right) \quad (56)$$

$$p(k_0|\theta, Y) \sim N\left(\frac{(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}e^{(-kt_i)} - \varphi_1 y_{i-1}e^{(-kt_i)} - e^{(-kt_i)}a\} + \frac{\mu_0}{\sigma_0^2})}{(\tau \sum_{i=2}^n \{e^{(-kt_i)^2}\} + \frac{1}{\sigma_0^2})}, \frac{1}{\tau \sum_{i=2}^n \{e^{(-kt_i)^2}\} + \frac{1}{\sigma_0^2}}\right) \quad (57)$$

$$p(a|\theta, Y) \sim N\left(\frac{(\sum_{i=2}^n \{y_i - k_0 e^{(-kt_i)} - \varphi_1 y_{i-1}\})}{(n-1)}, \frac{1}{\tau(n-1)}\right) \quad (58)$$

$$p(k|\theta, Y) \propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [k_0^2 e^{(-kt_i)^2} - 2y_i k_0 e^{(-kt_i)} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} + 2k_0 e^{(-kt_i)} a]\right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\sigma_k^2} [k - \mu_k]^2\right\}} \quad (59)$$

Para as condicionais dos parâmetros φ_1 , k_0 , a e τ foi possível utilizar o algoritmo do Amostrador de Gibbs e para k Metropolis-Hastings.

4.1.5 Modelo Midilli

Com o modelo de Midilli foram obtidas as seguintes respostas para as distribuições condicionais completas dos parâmetros:

$$p(\tau|\theta, Y) \sim Gama\left(\frac{n+2\alpha-1}{2}, \left[\beta + \frac{1}{2} \sum_{i=2}^n \left(y_i^2 + k_0^2 e^{(-kt_i)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 + a^2 t_i^2 - 2y_i k_0 e^{(-kt_i)} - 2y_i a t_i + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} + 2k_0 e^{(-kt_i)} a t_i - 2\varphi_1 y_{i-1} y_{t_i} + 2\varphi_1 y_{i-1} a t_i\right)\right]\right) \quad (60)$$

$$p(\varphi_1|\theta, Y) \sim N\left(\frac{(\tau \sum_{i=2}^n \{-y_{i-1}k_0 e^{(-kt_i)} + y_{i-1}y_i - y_{i-1}a t_i\})}{(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega})}, \frac{1}{\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega}}\right) \quad (61)$$

$$p(k_0|\theta, Y) \sim N\left(\frac{(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}e^{(-kt_i)} - \varphi_1 y_{i-1}e^{(-kt_i)} - e^{(-kt_i)}a t_i\} + \frac{\mu_0}{\sigma_0^2})}{(\tau \sum_{i=2}^n \{e^{(-kt_i)^2}\} + \frac{1}{\sigma_0^2})}, \frac{1}{\tau \sum_{i=2}^n \{e^{(-kt_i)^2}\} + \frac{1}{\sigma_0^2}}\right) \quad (62)$$

$$p(a|\theta, Y) \sim N\left(\frac{\left(\sum_{i=2}^n (y_i t_i - k_0 e^{-kt_i}) t_i - \varphi_1 y_{i-1} t_i\right)}{\sum_{i=2}^n (t_i^2)}, \frac{1}{\tau \sum_{i=2}^n (t_i^2)}\right) \quad (63)$$

$$p(k|\theta, Y) \propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n \left[k_0^2 e^{-kt_i} - 2y_i k_0 e^{-kt_i} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{-kt_i} + 2k_0 e^{-kt_i} a t_i \right]\right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\sigma_k^2} [k - \mu_k]^2\right\}} \quad (64)$$

Para as condicionais dos parâmetros φ_1 , k_0 , a e τ foi possível utilizar o algoritmo do Amostrador de Gibbs e para k Metropolis-Hastings.

4.1.6 Modelo Dois Termos

Para o modelo Dois Termos, foram obtidas as seguintes respostas para as distribuições condicionais completas dos parâmetros:

$$p(\tau|\theta, Y) \sim \text{Gama}\left(\frac{n+2\alpha-1}{2}, \beta + \frac{1}{2} \sum_{i=2}^n \left(y_i^2 + k_0^2 e^{-k_1 t_i} + k_2^2 e^{-k_3 t_i} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_i k_0 e^{-k_1 t_i} - 2y_i k_2 e^{-k_3 t_i} + 2k_0 k_2 e^{-t_i(k_1+k_3)} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{-k_1 t_i} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_2 e^{-k_3 t_i} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i \right)\right) \quad (65)$$

$$p(\varphi_1|\theta, Y) \sim N\left(\frac{\left(\tau \sum_{i=2}^n \{-y_{i-1} k_0 e^{-k_1 t_i} - y_{i-1} k_2 e^{-k_3 t_i} + y_{i-1} y_i\}\right)}{\left(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega}\right)}, \frac{1}{\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega}}\right) \quad (66)$$

$$p(k_0|\theta, Y) \sim N\left(\frac{\left(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1} e^{-k_1 t_i} - k_2 e^{-t_i(k_1+k_3)} - \varphi_1 y_{i-1} e^{-k_1 t_i}\} + \frac{\mu_0}{\sigma_0^2}\right)}{\left(\tau \sum_{i=2}^n \{e^{-k_1 t_i}\} + \frac{1}{\sigma_0^2}\right)}, \frac{1}{\tau \sum_{i=2}^n \{e^{-k_1 t_i}\} + \frac{1}{\sigma_0^2}}\right) \quad (67)$$

$$p(k_2|\theta, Y) \sim N\left(\frac{\left(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1} e^{-k_3 t_i} - k_0 e^{-t_i(k_1+k_3)} - \varphi_1 y_{i-1} e^{-k_3 t_i}\} + \frac{\mu_2}{\sigma_2^2}\right)}{\left(\tau \sum_{i=2}^n \{e^{-k_3 t_i}\} + \frac{1}{\sigma_2^2}\right)}, \frac{1}{\tau \sum_{i=2}^n \{e^{-k_3 t_i}\} + \frac{1}{\sigma_2^2}}\right) \quad (68)$$

$$p(k_3|\theta, Y) \propto \exp\left\{-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n \left[k_2 e^{-k_3 t_i} - 2y_i k_2 e^{-k_3 t_i} + 2k_0 k_2 e^{-t_i(k_1+k_3)} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_2 e^{-k_3 t_i} \right]\right\} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma_3^2} [k_3 - \mu_3]^2\right\} \quad (69)$$

$$p(k_1|\theta, Y) \propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n \left[k_0 e^{(-k_1 t_i)^2} - 2y_{t_i} k_0 e^{(-k_1 t_i)} + 2k_0 k_2 e^{[-t_i(k_1+k_3)]} + 2\varphi_1 y_{t_{i-1}} k_0 e^{(-k_1 t_i)} \right] \right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\sigma_k^2} [k_1 - \mu_k]^2 \right\}} \quad (70)$$

Para as condicionais dos parâmetros φ_1 , k_0 , k_2 , a e τ foi possível utilizar o algoritmo do Amostrador de Gibbs e para k_1 e k_3 Metropolis-Hastings.

4.1.7 Modelo Aproximação da Difusão

Para o modelo Aproximação da Difusão foram obtidas as seguintes respostas para as distribuições condicionais completas dos parâmetros:

$$p(\tau|\theta, Y) \sim \text{Gama} \left(\frac{n+2\alpha-1}{2}, \beta + \frac{1}{2}\sum_{i=2}^n \left(y_i^2 + k_0^2 e^{(-kt_i)^2} + e^{(-k.b.t_i)^2} + k_0^2 e^{(-bkt_i)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_i k_0 e^{(-kt_i)} - 2y_i e^{(-kbt_i)} + 2y_i k_0 e^{[-t_i bk]} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i + 2k_0 e^{[-kt_i(1+b)]} - 2k_0^2 e^{[-kt_i(1+b)]} - 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} - 2k_0 e^{(-kt_i)^2} + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{(-kbt_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kbt_i)} \right) \right) \quad (71)$$

$$p(\varphi_1|\theta, Y) \sim N \left(\frac{\left(\tau \sum_{i=2}^n \{ y_{i-1} y_i + y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} - y_{i-1} e^{(-kbt_i)} + y_{i-1} k_0 e^{(-kbt_i)} \} \right)}{\left(\tau \sum_{i=2}^n \{ y_{i-1}^2 \} + \frac{1}{\omega} \right)}, \frac{1}{\tau \sum_{i=2}^n \{ y_{i-1}^2 \} + \frac{1}{\omega}} \right) \quad (72)$$

$$p(k_0|\theta, Y) \sim N \left(\frac{\left(\tau \sum_{i=2}^n \{ y_i e^{(-kt_i)} - y_i e^{[-t_i bk]} - e^{[-kt_i(1+b)]} + \varphi_1 y_{i-1} e^{(-kt_i)} + e^{(-kt_i)^2} + \varphi_1 y_{i-1} e^{(-kbt_i)} \} + \frac{\mu_0}{\sigma_0^2} \right)}{\left(\tau \sum_{i=2}^n \{ e^{(-kt_i)^2} + e^{(-bkt_i)^2} - 2e^{[-kt_i(1+b)]} \} + \frac{1}{\sigma_0^2} \right)}, \frac{1}{\tau \sum_{i=2}^n \{ e^{(-kt_i)^2} + e^{(-bkt_i)^2} - 2e^{[-kt_i(1+b)]} \} + \frac{1}{\sigma_0^2}} \right) \quad (73)$$

$p(k|\theta, Y)$

$$\propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n \left[k_0^2 e^{(-kt_i)^2} + e^{(-k.b.t_i)^2} + k_0^2 e^{(-bkt_i)^2} - 2y_i k_0 e^{(-kt_i)} - 2y_i e^{(-kbt_i)} + 2y_i k_0 e^{[-t_i bk]} + 2k_0 e^{[-kt_i(1+b)]} - 2k_0^2 e^{[-kt_i(1+b)]} - 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} - 2k_0 e^{(-kt_i)^2} + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{(-kbt_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kbt_i)} \right] \right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\sigma_k^2} [k - \mu_k]^2 \right\}} \quad (74)$$

$$p(b|\theta, Y) \propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n \left[e^{(-k \cdot b \cdot t_i)^2} + k_0^2 e^{(-bkt_i)^2} - 2y_i e^{(-kbt_i)} + 2y_i k_0 e^{[-t_i b k]} + 2k_0 e^{[-kt_i(1+b)]} - 2k_0^2 e^{[-kt_i(1+b)]} + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{(-kbt_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kbt_i)} \right] \right\}} \quad (75)$$

Deste modo, para as condicionais dos parâmetros φ_1 , k_0 e τ foi possível utilizar o algoritmo do Amostrador de Gibbs e para k e b Metropolis-Hastings.

4.2 Análise dos resíduos

Na Tabela 3, são apresentados os testes de Shapiro-Wilk, Breuch-Pagan e Durbin-Watson, com suas respectivas significâncias e comparações para os modelos: Lewis (L), Henderson e Pabis (HP), Page (P), Exponencial Simples com Três Parâmetros (ESTP), Dois Termos (DT), Midilli (M) e Aproximação da Difusão (AD) com e sem estrutura de erros, em relação ao ajuste dos dados de cinética de secagem de polpa de Jabuticaba nas temperaturas de 50 e 60°C. O teste de Durbin-Watson, em geral, indicou autocorrelação residual ($0 < DW < L_I$) em ambas as temperaturas, ou seja, houve dependência residual ao longo do tempo. O resultado era esperado, pois as medidas tomadas no tempo foram realizadas em um mesmo material de polpa de Jabuticaba homogeneizada, sendo que concordam com a análise via inferência frequentista feita por Furtado et al. (2019).

Tabela 3. Valores-p para os testes de Shapiro-Wilk (SW) e Breuch-Pagan (BP) e estatísticas de Durbin-Watson (DW) com suas respectivas significâncias na análise dos resíduos estimados após o ajuste dos modelos de Lewis (L), Henderson e Pabis (HP), Page (P), Exponencial Simples com Três Parâmetros (ESTP), Dois Termos (DT), Midilli (M) e Aproximação da Difusão (AD) com e sem estrutura de erros (Ar(1)) aos dados de cinética de secagem de polpa de Jabuticaba, nas temperaturas de 50 e 60 °C.

50°C							
Modelo	LI	DW	LS	SW	BP	SW Ar(1)	BP Ar(1)
L	1,1000	0,1620	1,2400	0,6522	0,4348	0,5968	0,3491
HP	1,0300	0,1040	1,3200	0,3710	0,0501	0,2330	0,0506
P	1,0300	0,0730	1,3200	0,0073*	0,0048*	0,3899	0,0502
ESTP	0,9600	0,1360	1,4100	0,0851	0,0132*	0,9889	0,0329*
DT	0,9000	0,2090	1,5100	0,0074*	0,0453*	0,0498*	0,0517
Mi	0,9000	0,1420	1,5100	0,1529	0,0404*	0,2815	0,8486
AD	0,9600	0,1470	1,4100	0,0046*	0,0015*	0,0008*	0,0178*
60°C							
Modelo	LI	DW	LS	SW	BP	SW Ar(1)	BP Ar(1)
L	1,1040	0,0754	1,2440	0,7556	0,3302	0,1770	0,7715
HP	1,0360	0,0623	1,3250	0,1685	0,2946	0,5398	0,1663
P	1,0360	0,1223	1,3250	0,0478*	0,8423	0,2822	0,6555
ESTP	0,9690	0,1018	1,4140	0,0624	0,8007	0,0937	0,4360
DT	0,9010	0,1669	1,5120	0,0808	0,2940	0,1088	0,1943
Mi	0,9010	0,3384	1,5120	0,1621	0,0022*	0,0718	0,4956
AD	0,9690	0,0248	1,4140	0,0026*	0,0024*	0,0057*	0,1569

* Significativo ao nível de 5% de probabilidade pelos respectivos testes de SW e BP; LS ; LI- Limites superior e inferior para o teste de DW com base no número de parâmetros e observações.

Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Em estudos com crescimento de frutos, foram encontrados resultados semelhantes por Muniz, Nascimento e Fernandes (2017), Muianga et al. (2016) e Ribeiro et al. (2018a), que

observaram a presença de erros autocorrelacionados no ajuste de modelos de regressão não linear para a descrição do crescimento de frutos de cacaueteiro, cajueiro e de pera asiática, respectivamente. Segundo os mesmos autores, sempre que for observada dependência residual, essa correlação deve ser modelada por processo autoregressivo. Resultados diferentes foram encontrados por Ribeiro et al. (2018b) com o crescimento de frutos de pequi, pois não observaram dependência residual devido às medidas biométricas terem sido feitas em frutos diferentes em cada idade.

Após o estudo sobre a dependência residual, verificou-se que os testes de Breuch-Pagan na temperatura de 50°C foram, em sua maioria, significativos indicando heterogeneidade de variâncias exceto para L e HP. Os modelos P, DT e AD não apresentaram normalidade de acordo com o teste de SW. Na temperatura de 60°C, os modelos P, Mi e AD apresentaram ao menos algum problema em relação à normalidade dos resíduos e/ou heterogeneidade de variâncias. Segundo Fernandes et al. (2015), as verificações das pressuposições para os modelos de regressão são muito importantes, uma vez que, se não forem atendidas, o modelo pode ser incorreto e, deve-se corrigir ou considerar uma nova estrutura para o modelo. Houve a inclusão do erro autoregressivo de ordem 1, para corrigir a dependência residual e assim os modelos foram reavaliados quanto à normalidade e homogeneidade de variâncias (Tabela 3).

Após a consideração da dependência residual, os testes de Shapiro-Wilk e Breuch-Pagan foram, em geral, não significativos em ambas às temperaturas, podendo-se afirmar que os valores residuais são normalmente distribuídos com variância homogênea, exceto para os modelos ESTP e DT na temperatura de 50°C e para o modelo Aproximação da Difusão em ambas as temperaturas. Partindo disto, o modelo ESTP na temperatura de 50°C e o AD em ambas as temperaturas, não foram considerados adequados para descrever os dados. Com base nos resultados da Tabela 3, ao considerar a estrutura de erros nos modelos houve melhora em relação à normalidade e homocedasticidade dos resíduos. Para os modelos que violaram ao menos uma das suposições, observou-se em geral, a não violações das mesmas suposições após a incorporação da estrutura de erros. Furtado et al. (2019) observaram resultados semelhantes, pois ao considerar a estrutura de erros nos modelos de cinética de secagem, as pressuposições foram atendidas quanto à normalidade, homogeneidade de variâncias e independência residual.

4.3 Convergência

A verificação da convergência foi realizada com base nos testes de Raftery e Lewis (1992), Heidelberg e Welch (1983) e Geweke (1992), para todos os modelos considerados adequados, de acordo com a avaliação dos resíduos. Na Tabela 4 podem ser vistos os resultados em relação à temperatura de 50°C, para os modelos Lewis (L), Henderson e Pabis (HP), Page (P), Dois Termos (DT) e Midilli (M) em relação aos testes de Raftery e Lewis (1992), Heidelberg e Welch (1983) e Geweke (1992). A análise gráfica foi realizada com base no traço da cadeia e função de autocorrelação da cadeia, como pode ser visto nas Figuras 7-16 do ANEXO 2.

Tabela 4. Valores do Fator de Dependência (FD) para o teste de Raftery e Lewis e valores-p para os testes de Heidelberg e Welch (HW) e Geweke (Ge), em relação à convergência dos modelos de Lewis (L), Henderson e Pabis (HP), Page (P) e Midilli (M) para os dados de cinética de secagem de polpa de Jabuticaba, na temperatura de 50°C.

Modelo	Parâmetro	Raftery e Lewis (FD)	Heidelberg e Welch (HW)	Geweke (Ge)
Lewis (L)	k	0,9925	0,2297	0,8326
	τ	1,0005	0,2045	0,2548
	φ	1,0001	0,1391	0,3643
Henderson e Pabis (HP)	k	1,0344	0,1014	0,3638
	k_0	1,0511	0,0914	0,1930
	τ	1,0090	0,1655	0,7888
Page (P)	φ_1	1,0173	0,4348	0,0678
	k	0,9762	0,0816	0,5117
	c	0,9925	0,0769	0,7370
	τ	0,9842	0,0743	0,7047
Midilli (M)	φ_1	1,0090	0,3341	0,3957
	k	45,5061	0,0445*	0,7619
	k_0	3,5942	0,2140	0,7627
	k_2	41,4097	0,1274	0,0077*
	c	0,5579	0,0739	0,0000*
Dois Termos (DT)	τ	1,0258	0,0756	0,3731
	φ_1	19,3761	0,0401 *	0,0447*
	k_0	1,0090	0,1430	0,0272*
	k_1	1,0258	0,1782	0,1856
	k_2	1,0005	0,1603	0,8587
Dois Termos (DT)	k_3	0,9842	0,0299	0,7476
	τ	0,9925	0,2540	0,0320*
	φ_1	0,9842	0,0599	0,6698

* Significativo ao nível de 5% de probabilidade para os testes de HW e Ge.

Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Os testes de Raftery e Lewis obtiveram em geral resultados satisfatórios em relação à convergência, pois ficaram abaixo de 5 e, próximos de 1, exceto para o modelo de Midilli, que obteve resultados acima de 5 para os parâmetros k , k_2 e φ_1 . De acordo com Raftery e Lewis (1992), sempre que forem obtidos valores da estatística do teste (FD) inferiores a 5, há indícios de convergência das cadeias avaliadas. Os critérios de Heidelberg e Welch e Geweke, apresentaram em geral, valores-p não significativos, ou seja, há indícios de estacionariedade das cadeias, assim como observado com o critério de Raftery e Lewis, exceto para os parâmetros k , k_2 , c e φ_1 do modelos de Midilli. Os parâmetros k_0 e τ no modelo DT, foram significativos para o teste de Geweke, indicando não convergência, mesmo que os demais critérios tenham indicado a convergência da cadeia gerada.

Ao utilizar o critério de convergência de Geweke, Prado, Savian e Muniz (2013) encontraram valores-p não significativos ao avaliarem a convergência de cadeias MCCM para curvas de crescimento de coqueiro anão, por modelos e regressão não linear. Nas Figuras de 7 a 11 (ANEXO 2) podem ser vistos os traços das cadeias geradas.

Considerando o traço das cadeias geradas, com base nos modelos de Lewis, Henderson e Pabis, Page e Dois Termos, pode-se dizer que indicam a convergência das cadeias, devido às amplitudes pequenas e constância nos valores gerados. Corroborando os resultados obtidos para os testes apresentados na Tabela 4 para os modelos L, HP e P, e ainda, confirmando a convergência dos parâmetros do modelo DT, mesmo que um dos avaliadores tenha apresentado indícios de não convergência. Entretanto, para o modelo de Midilli, observou-se que os traços das cadeias de alguns dos parâmetros são descontínuos, logo há indícios de não convergência da cadeia, concordando com os resultados apresentados na Tabela 4. De acordo com Nogueira (2004) a convergência de um modelo só é alcançada quando todos os parâmetros apresentam convergência. Em seu estudo, dentre os modelos avaliados, utilizou um modelo autoregressivo de médias móveis (2,2) (ARMA (2,2)) com total de 7 parâmetros e verificou-se a convergência, com base nos testes de Raftery e Lewis, Geweke, Heidelberg e Welch e de Gelman, juntamente com os métodos gráficos.

Partindo do princípio de Nogueira (2004), o modelo de Midilli não apresentou convergência na temperatura de 50°C, pois além de apresentaram indícios de não convergência com pode ser visto na Tabela 4, a Figura 10 indicou a não convergência para os parâmetros k , k_2 , c e φ_1 . De acordo com Raftery e Lewis (1992) a utilização de cadeias correlacionadas pode influenciar diretamente nas estimativas de interesse. Com relação aos gráficos da função de autocorrelação, apresentados nas Figuras de 12 a 16 (ANEXO 2), pode-se ver que, para os modelos de Lewis, Henderson e Pabis, Page e Dois Termos os parâmetros

apresentaram cadeias não correlacionadas, garantindo maior confiabilidade nas respostas obtidas indicando assim que os valores de *burn-in* e *thin* utilizados para gerar as amostras foram eficientes. O modelo de Midilli apresentou cadeias altamente correlacionadas como pode ser visto na Figura 15. A utilização de amostras com presença de autocorrelação entre os valores é um problema, pois a estimativa do erro padrão da média torna-se viesada, devido à variância da média ser viesada (NOGUEIRA, 2004). Graficamente pode-se observar a presença de autocorrelação nas cadeias, quando no gráfico da função de autocorrelação das cadeias apresenta mais de uma barra vertical acima dos limites presentes no gráfico.

Na Tabela 5 são mostrados os resultados para os testes de Raftery e Lewis (1992), Heidelberg e Welch (1983) e Geweke (1992) em relação aos ajustes dos modelos: Lewis (L), Henderson e Pabis (HP), Page (P), Exponencial Simples com Três Parâmetros (ESTP), Midilli (M) e Dois Termos (DT), aos dados de cinética de polpa de Jaboticaba na temperatura de 60°C. A análise gráfica foi realizada com base no traço da cadeia e função de autocorrelação da cadeia, de acordo com as Figuras 17 a 28 do ANEXO 2.

Os resultados para os testes apresentados na Tabela 5, em relação aos modelos de Lewis, Henderson e Pabis, Page, ESTP e Dois Termos foram, em geral, satisfatórios, indicando a estacionariedade e convergência das cadeias geradas para os parâmetros, exceto para o parâmetro τ do modelo DT. Os valores do FD de Raftery e Lewis ficaram abaixo de 5, e os testes de Geweke e Heidelberg e Welch foram em geral não significativos, indicando a estacionariedade das cadeias. No entanto, o parâmetro τ do modelo DT foi significativo, ou seja, rejeitou-se a hipótese para o teste de HW assumindo a possibilidade de não convergência. O modelo de Midilli apresentou fortes indícios de não convergência, pois os valores obtidos para o teste de Raftery e Lewis foram, em sua maioria, acima de 5, o teste de HW foi significativo para todos os parâmetros e o teste de Geweke foi significativo para k_2 , c e φ_1 . De acordo com as considerações de Nogueira (2004) sobre a convergência de parâmetros de um modelo, podemos dizer que o modelo de Midilli não apresentou convergência.

Ao observar os traços das cadeias geradas para os parâmetros ajustados aos modelos de Lewis, Henderson e Pabis, Page, ESTP e Dois Termos, Figuras 17 a 21, pode-se afirmar que, os modelos apresentam convergência, pois as cadeias são uniformes e contínuas para todos os parâmetros, corroborando os resultados obtidos com os testes apresentados e, indicando convergência do parâmetro τ do modelo DT. Prado, Savian e Muniz (2013) e Martins-Filho (2008) utilizaram também os gráficos de traço das cadeias dos parâmetros para afirmar sobre a convergência das cadeias. Em relação aos modelos de Midilli, Figura 20, foi

observada, a falta de uniformidade nas cadeias geradas para os parâmetros a , c e φ_1 , além de pontos de descontinuidade, indicando a convergência apenas por parte das cadeias geradas, corroborando os resultados da Tabela 5 que indicam a não convergência do modelo.

Tabela 5. Valores do Fator de Dependência (FD) para o teste de Raftery e Lewis e valores-p para os testes de Heidelberger e Welch (HW) e Geweke (Ge), em relação à convergência dos modelos de Lewis (L), Henderson e Pabis (HP), Page (P), Exponencial Simples com Três Parâmetros (ESTP), Midilli (M) e Dois Termos (DT) para os dados de cinética de secagem de polpa de Jaboticaba, na temperatura de 60°C.

Modelo	Parâmetro	Raftery e Lewis (FD)	Heidelberger e Welch (HW)	Geweke (Ge)
Lewis (L)	k	1,0090	0,0875	0,5821
	τ	1,0173	0,1407	0,1897
	φ_1	1,0258	0,3138	0,6994
Henderson e Pabis (HP)	k	1,0173	0,1046	0,6036
	k_0	0,9762	0,1598	0,1695
	τ	1,0173	0,3959	0,7333
	φ_1	1,0091	0,4422	0,3760
Page (P)	k	1,0258	0,0926	0,9785
	c	0,9682	0,0671	0,3518
	τ	1,0005	0,4000	0,7940
	φ_1	1,0173	0,4502	0,2200
Exponencial Simples com Três Parâmetros (ESTP)	k	4,6585	0,2396	0,5017
	k_0	0,9538	0,1101	0,3664
	a	3,5221	0,3209	0,2481
	τ	1,0290	0,2412	0,8977
	φ_1	2,8067	0,0612	0,5543
Dois Termos (DT)	k_1	0,9842	0,2665	0,4123
	k_0	1,0429	0,0392	0,9380
	k_2	1,0344	0,1098	0,3331
	k_3	1,0344	0,0668	0,4112
	τ	1,0173	0,0342*	0,6054
	φ_1	1,0090	0,1517	0,3886
Midilli (M)	k	48,8587	0,0001*	0,3002
	k_0	5,4484	0,0001*	0,7315
	a	36,3857	0,0001*	0,0077*
	c	4,1243	0,0001*	0,0000*
	τ	1,0389	0,0001*	0,1849
	φ_1	18,8697	0,0001*	0,0148*

* Significativo ao nível de 5% de probabilidade para os testes de HW e Ge.

Fonte: Elaborado pela autora (2019).

De Oliveira, Docê e Barros (2012) utilizaram os critérios de Heidelberg e Welch e Geweke para verificar a convergência de suas cadeias ao estudar o processo de clarificação do suco de maracujá via inferência Bayesiana e encontraram parâmetros não convergentes. Ao

usar modelos de regressão não linear para a mineralização de nitrogênio, via análise Bayesiana, Pereira et al. (2009), observaram a convergência de seus parâmetros com base no critério de Geweke.

Com relação aos gráficos da função de autocorrelação, apresentados nas Figuras de 23 a 28 (ANEXO 2), pode-se verificar que, os modelos de Lewis, Henderson e Pabis, Page e Dois Termos, apresentaram cadeias não correlacionadas, garantindo maior confiabilidade nas respostas obtidas e, ainda, indicando que os valores de *burn-in* e *thin* utilizados para gerar as amostras, foram eficientes. Entretanto, o modelo ESTP apresentou-se em partes correlacionado para o parâmetro k (Figura 26) e o modelo de Midilli, apresentou iterações das cadeias altamente correlacionadas para quase todos os parâmetros (Figura 27). Deste modo, pode-se afirmar que não houve convergência para o modelo de Midilli na temperatura de 60°C, e que, é necessário ter cautela ao ajustar o modelo ESTP nessa mesma temperatura.

4.4 Estimativas e comparação de modelos

Nessa sessão serão apresentados os resultados obtidos para os modelos, que tiveram indícios de convergência, de acordo com a seção anterior. Na Tabela 6, podem ser vistos os resultados obtidos para a análise dos dados de polpa de Jabuticaba na temperatura de 50°C, em relação aos modelos de Lewis, Henderson e Pabis, Page e Dois Termos. Com base nas estimativas do parâmetro k_0 , presentes na Tabela 6, observa-se que os valores da média e moda foram próximos de 1, como esperado, pois referem-se a 100% da umidade inicial da polpa de Jabuticaba. Silva et al. (2016), ao estudar a secagem da polpa de carambola, que encontraram valores próximos a 1 para k_0 ao ajustar o modelo de Henderson e Pabis. De acordo com Savian et al. (2009) sempre que as estimativas de média e moda forem semelhantes, pode-se dizer que a distribuição avaliada é simétrica. Sendo assim, vale ressaltar que as estimativas de média e moda, ficaram quase que sobrepostas, indicando a simetria das distribuições encontradas, o mesmo podem ser vistos nas Figuras 29 e 32, com a densidade de k_0 para os modelos de HP e DT, respectivamente.

As estimativas para o parâmetro k e k_1 , presentes na Tabela 6, ficaram entre 0 e 1, como era esperado, pois referem-se à taxa de secagem do produto, que é dada pela razão entre a variação de umidade e a variação do tempo de secagem. Considerando a média e moda a *posteriori*, tem-se que os valores de k e k_1 , foram próximos para todos os modelos, indicando simetria nas distribuições. As estimativas de k para os modelos L e P, foram semelhantes entre si e próximos aos valores de k_3 do modelo DT, e ainda apresentaram intervalos de

máxima densidade *a posteriori* (HPD) sobrepostos. Os valores obtidos para o parâmetro de taxa de secagem no modelo de HP foi menor em relação à média e moda à *posteriori* que L e HP, mas próximo dos valores do DT e, em relação ao intervalo HPD abrange o resultado obtido por Furtado et al. (2019) com a secagem de polpa de Jaboticaba.

Tabela 6. Estimativas para a moda e média dos parâmetros, com seus respectivos intervalos HPD (LI e LS), para os modelos Lewis (L), Henderson e Pabis (HP) e Page (P) referente aos dados de cinética de secagem de polpa de Jaboticaba, nas temperaturas de 50°C, considerando os erros autoregressivos de primeira ordem.

Modelo	Parâmetro	Moda	Média	HPD LI	HPD LS
Lewis (L)	k	0,0403	0,0401	0,0350	0,0450
	τ	12,4203	11,1000	5,7013	17,2043
	σ^2	0,0838	0,0955	0,0497	0,1425
	φ_1	0,8348	0,8325	0,5448	0,9877
Henderson e Pabis (HP)	k_0	0,9812	0,9830	0,9293	1,0440
	k	0,0078	0,0081	0,0046	0,0122
	τ	11,5239	10,5559	4,7679	16,6092
	σ^2	0,0991	0,1035	0,0512	0,1682
	φ_1	0,5262	0,5482	0,3734	0,7250
Page (P)	k	0,0413	0,0405	0,0330	0,0461
	c	1,0070	0,9994	0,9798	1,0190
	τ	10,6920	11,6924	6,8096	17,9469
	σ^2	0,0856	0,0837	0,0410	0,1439
	φ_1	0,6955	0,7072	0,6611	0,7549
Dois Termos (DT)	k_0	0,7390	0,7404	0,6331	0,8661
	k_1	0,0048	0,0047	0,0035	0,0058
	k_2	0,4256	0,4139	0,3747	0,4518
	k_3	0,0431	0,0433	0,0424	0,0443
	τ	11,1957	7,9726	3,9268	12,3570
	σ^2	0,1204	0,1356	0,0708	0,2191
	φ_1	0,7290	0,7323	0,6919	0,7720

Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Para o modelo de Dois Termos, k_1 refere-se à primeira taxa de secagem no alimento, e espera-se que seja menor que a segunda k_3 , pois na fase inicial de cinética de secagem ocorre uma quantidade menor de perda da umidade em relação às fases subsequentes, como abordado por Celestino (2010) e, apresentado na Figura 2. O modelo de DT foi o que mais se

aproximou dos resultados encontrados na literatura para secagem de polpa de Jaboticaba, entretanto vale ressaltar que os demais modelos apresentam apenas um termo.

As distribuições para φ_1 , k_3 , k_2 e c dos modelos P e/ou DT são simétricos, de acordo com os resultados da média e moda *posteriori* obtidos e os intervalos HPD abrangeram as estimativas para a moda a *posteriori*. O parâmetro k_3 do modelo DT refere-se à taxa de secagem em um segundo momento, como sendo parte do segundo termo da equação 33. A utilização dos erros autoregressivos tem como característica, melhorar a qualidade do ajuste dos modelos quando necessário, fazendo com que os valores estimados tenham maior confiabilidade e apresentou desvio padrão menor (MUNIZ; NASCIMENTO; FERNANDES, 2017; RIBEIRO et al., 2018a). A componente autoregressiva de primeira ordem (φ_1), utilizada para descrever a autocorrelação residual identificada nos dados, foi satisfatória, de modo que se apresentou significativa e, com valores sempre positivos para os modelos apresentados na Tabela 6.

Os resultados indicaram correlação positiva de primeira ordem entre os resíduos, o que corresponde à forte correlação entre as observações ao longo do tempo, reafirmando a necessidade em ser considerado no ajuste dos modelos aos dados. As estimativas da média e moda a *posteriori* de φ_1 , foram semelhantes, assim como observado para o parâmetro k , na Tabela 6. Sendo que o modelo de Lewis apresentou estimativas superiores ao de Henderson e Pabis, entretanto, os intervalos de máxima densidade a *posteriori* assumem os mesmos valores, sobrepondo-se, ou seja, de acordo com o HPD os valores de φ_1 tem igual probabilidade de ocorrer.

O parâmetro c do modelo de Page apresentou estimativas próximas para a média e moda a *posteriori*, assim como ocorreu com os parâmetros anteriores. Furtado et al. (2019), não conseguiram realizar o ajuste dos modelos de Page e aproximação da difusão com dois termos, aos dados de polpa de Jaboticaba, pois sob análise de inferência frequentista o modelo não convergiu, mesmo alterando-se os valores iniciais. As estimativas para as variâncias dos modelos presentes na Tabela 6 foram em geral, na ordem de 10^{-2} , dando maior confiabilidade aos resultados obtidos e, os intervalos HPD apresentaram curta amplitude. No entanto, as estimativas da média e moda a *posteriori* foram distintas, assim como para τ , indicando assimetria das distribuições. Para Mendes (2011) sempre que as estimativas de média e moda a *posteriori* diferirem, é preferível que se use a estimativa da moda a *posteriori*. Deste modo, a estimativa pontual que melhor representa σ^2 , é a moda a *posteriori*.

As Figuras 29 a 32 apresentam as densidades para os parâmetros dos modelos de Lewis, Henderson e Pabis, Page e Dois Termos ajustados aos dados de polpa de Jabuticaba na temperatura de 50°C e corroboram as características de assimetria ou simetria dos parâmetros, em relação à média e moda *a posteriori*. Na Tabela 7, são apresentadas as estimativas dos parâmetros dos modelos de Lewis, Henderson e Pabis, Page, ESTP e Dois Termos para o ajuste aos dados de polpa de Jabuticaba, na temperatura de 60°C. O modelo ESTP apresentou o parâmetro a com intervalo de máxima densidade contendo o valor zero. Deste modo, pode-se afirmar que, o parâmetro pode assumir o valor zero, tornando-o inválido, logo o modelo é inadequado para descrição dos dados de polpa de Jabuticaba na temperatura de 60°C. Os resultados concordam com Furtado et al. (2019), em que, o modelo ESTP, obteve estimativas com intervalos nulos no ajuste aos dados de polpa de Jabuticaba via inferência frequentista.

Os parâmetros k_0 , presentes na Tabela 7, obtiveram estimativas próximas a 1, assim como ocorreu na temperatura de 50°C. Os intervalos de máxima densidade (HPD) foram em geral com pequena amplitude e, englobam os valores de média e moda *a posteriori*. De acordo com Savian et al. (2009), ao utilizarem as estimativas de média e moda *a posteriori*, é possível inferir sobre a simetria da distribuição encontrada e, assim obter melhores resultados. Os valores de k_0 , para a média e moda *a posteriori*, foram semelhantes, evidenciando simetria das distribuições para estes parâmetros, como pode ser visto nas densidades de k_0 das Figuras 34 e 36. O mesmo foi observado com as estimativas pontuais para k , k_1 , k_2 , k_3 e c dos modelos presentes na Tabela 7, que foram semelhantes entre si, indicando simetria para a distribuição dos parâmetros, exceto para o ESTP que apresentou assimetria em k .

Em relação à k , tem-se que as estimativas pontuais dos modelos L, HP e P foram semelhantes entre si e, apresentaram sobreposição dos valores no intervalo HPD. Assim como ocorreu na temperatura de 50°C, o valor de k_3 do modelo DT se aproxima de k para estes modelos. A estimativa de k_1 para o modelo Dois Termos, foi menor que k_3 e que nos demais modelos, levando-se em consideração as características da primeira etapa no processo de secagem. Em geral, os valores em média de k diferiram de Furtado et al. (2019) em seus estudos com a polpa de Jabuticaba.

Para todos os modelos presentes na Tabela 7, a componente autoregressiva, φ_1 , indicou alta correlação positiva nos dados, com intervalos HPD de pequena amplitude, obtendo valores semelhantes aos obtidos por Furtado et al. (2019). Machado et al. (2012), em seus estudos de dados biológicos com o modelo de Michaelis-Menten, obtiveram estimativas para o intervalo HPD, consideravelmente reduzidas em seus tamanhos e, segundo os autores,

o que proporcionou alta precisão nas respostas obtidas. Para φ_1 , as estimativas da média e moda a *posteriori*, foram distintas indicando a assimetria da distribuição. O mesmo pode ser visto com as densidades dos parâmetros φ_1 nas Figuras 33 a 37, corroborando essas características.

Tabela 7. Estimativas para a moda e média dos parâmetros, com seus respectivos intervalos HPD (LI e LS), para os modelos Lewis (L), Henderson e Pabis (HP), Page (P), Exponencial Simples com Três Parâmetros (ESTP) e Dois Termos (DT) referentes aos dados de cinética de secagem de polpa de Jaboticaba, na temperatura de 60°C, considerando os erros autoregressivos de primeira ordem.

Modelo	Parâmetros	Moda	Média	LI	LS
Lewis (L)	k	0,0575	0,0569	0,0491	0,0608
	τ	6,1297	8,3406	3,5827	13,9837
	σ^2	0,0953	0,1312	0,0641	0,2138
	φ_1	0,8448	0,8275	0,6664	0,9859
Henderson e Pabis (HP)	k_0	0,9973	0,9998	0,9349	1,0501
	k	0,0563	0,0561	0,0503	0,0615
	τ	10,3344	8,7323	4,6148	13,0602
	σ^2	0,1132	0,1229	0,0687	0,2034
Page (P)	φ_1	0,7328	0,7279	0,5700	0,8768
	k	0,0538	0,5390	0,0481	0,0590
	c	0,9977	0,9991	0,9707	1,0185
	τ	10,7743	8,6420	4,1675	13,8966
Exponencial Simples com Três Parâmetros (ESTP)	σ^2	0,1008	0,1268	0,0670	0,2067
	φ_1	0,7223	0,7208	0,6744	0,7781
	k_0	0,9939	0,9932	0,9866	0,9979
	k	0,0904	0,0881	0,0411	0,1350
Dois Termos (DT)	a	-0,0414	0,0904	-0,3039	0,5118
	τ	8,2453	7,8412	0,6204	14,9662
	σ^2	0,0958	0,1139	0,0635	0,2002
	φ_1	0,8687	0,8228	0,8278	0,8937
Dois Termos (DT)	k_1	0,0143	0,0143	0,0132	0,0155
	k_0	0,8279	0,8259	0,7294	0,9011
	k_2	0,4062	0,4076	0,3655	0,4474
	k_3	0,0689	0,0709	0,0680	0,0710
	τ	5,6300	5,9941	2,8592	9,9169
	σ^2	0,1462	0,1803	0,0868	0,2959
	φ_1	0,7829	0,7899	0,7631	0,8122

Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Os valores obtidos para a variância dos modelos foram em sua maioria, na ordem de 10^{-1} com intervalos HPD de pequena amplitude, indicando confiabilidade nos resultados para os modelos e assim, pode-se dizer que a distribuição é assimétrica. Resultados semelhantes

foram obtidos por Machado et al. (2012), pois obtiveram estimativas para as variâncias dos modelos divergentes em relação à média e moda a *posteriori* de seus modelos.

As estimativas para o parâmetro c do modelo de Page, foram em torno de 1, se aproximando da forma do modelo de Lewis. A utilização da inferência Bayesiana possibilitou o ajuste de modelos mais complexos, que não haviam apresentado convergência quando utilizada a inferência frequentista. Considerando as taxas de secagem presentes nas Tabelas 6 e 7, pode-se observar com a elevação da temperatura, k , k_1 e k_3 aumentaram, ou seja, a velocidade da perda de umidade da polpa de Jabuticaba ao longo do tempo é maior com o acréscimo na temperatura de secagem. O que corrobora os resultados obtidos por Gouveia et al. (2003) em estudos com a curva de secagem de cajá, pois a temperatura é um dos fatores de maior influência no processo de secagem. Assim quanto maior a temperatura menor o tempo de secagem e, conseqüentemente, mais rápido se atinge o teor de umidade de equilíbrio (U_e) do produto. Resultados semelhantes foram encontrados por Pena e Mendonça (2009) em processos de secagem da fibra residual do maracujá, por Borges et al. (2008) com a cinética de secagem de fatias de abóbora e Silva et al. (2016) com polpa de carambola.

Na Tabela 8, são apresentados os avaliadores na qualidade de ajuste para os modelos considerados adequados para descrever os dados.

Tabela 8. Critérios de seleção para os modelos de Lewis (L), Henderson e Pabis (HP), Page (P) e Dois Termos (DT) com a componente φ_1 , referente aos dados de cinética de secagem de polpa de Jabuticaba, nas temperaturas de 50 e 60 °C.

Modelo	Temperatura	DIC	AIC	BIC
Lewis (L)	50°C	-6,06	-1,65	2,23
	60°C	7,67	4,58	7,86
Henderson e Pabis (HP)	50°C	-69,66	-62,55	-57,61
	60°C	-21,87	-13,63	-11,26
Page (P)	50°C	-15,43	-5,80	0,02
	60°C	-8,17	3,71	8,07
Dois Termos (DT)	50°C	-51,95	-24,09	-16,85
	60°C	-22,25	-7,38	-6,16

Fonte: Elaborado pela autora (2019).

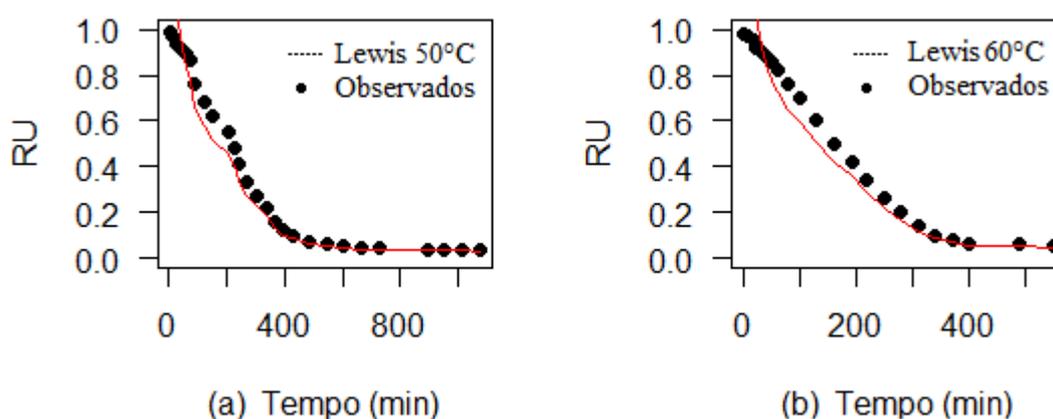
Em relação à utilização da metodologia de inferência Bayesiana, é possível afirmar que obteve resultados satisfatórios. Os valores obtidos para os critérios de AIC, BIC e DIC foram menores para os modelos de Henderson e Pabis e Dois Termos em ambas as temperaturas, ou seja, indicaram que descrevem melhor os dados de polpa de Jabuticaba em ambas as temperaturas. O modelo de Henderson e Pabis apresentou valores menores exceto para o DIC na temperatura de 60°C que foi menor para o modelo DT. De acordo com Ribeiro

et al. (2018b) menores valores dos critérios de seleção AIC indicam o modelo que melhor descreve os dados. Entretanto, é válido ressaltar que o modelo de Dois Termos foi o que mais se aproximou dos resultados obtidos na literatura sendo capaz de inferir sobre as diferenças no processo de secagem quanto às taxas de secagem. Nas Figuras 3 a 6 podem ser vistos os ajustes dos modelos presentes na Tabela 8, em ambas as temperaturas.

Para a seleção dos modelos foram considerados os critérios de seleção Deviance (DIC), Akaike (AIC) e Bayesiano (BIC). Os autores Muniz, Nascimento e Fernandes (2017) e Ribeiro et al. (2018a) utilizaram o critério de seleção de AIC e/ou BIC, para comparar modelos de regressão não linear na descrição do crescimento de frutos de cacau e pera asiática, respectivamente e, observaram que menores valores de AIC e BIC indicaram o modelo de regressão não linear mais adequado para descrever os dados. Mendes (2011) utilizou o critério DIC, ao descrever curvas de crescimento com estrutura de erros dependentes e, Martins-Filho et al. (2008) utilizaram o mesmo critério para descrever curvas de crescimento de feijoeiro por modelos de regressão não linear.

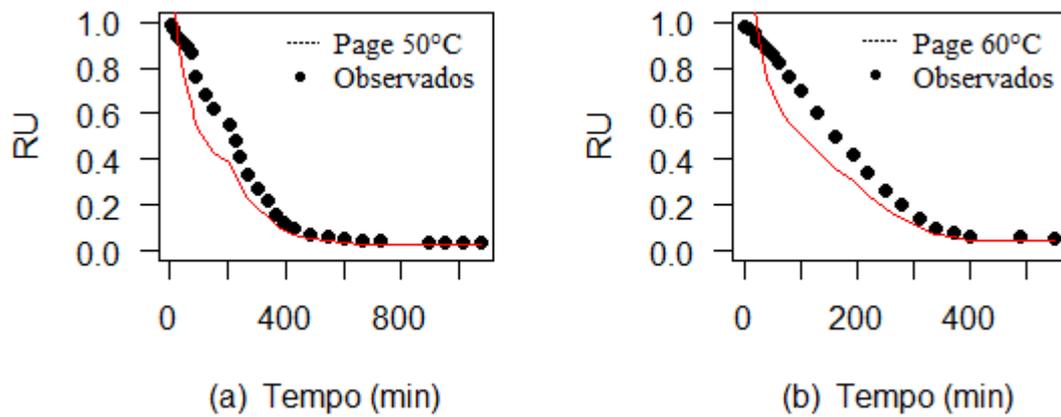
Mesmo que os critérios de AIC, BIC e DIC tenham indicado o modelo mais adequado, é interessante avaliar o ajuste gráfico. Com base nas Figuras 3 a 6, pode-se notar que, o modelo de Lewis (Figura 3) obteve curvas próximas aos valores observados, indicando ajuste adequado aos dados, mesmo que não tenha sido o mais indicado.

Figura 3. Curvas dos ajustes dos modelos de Lewis (L) aos dados de cinética de secagem de polpa de Jaboticaba nas temperaturas de 50°C e 60°C em (a) e (b) respectivamente, com a Razão de Umidade (RU) em função do Tempo (min).



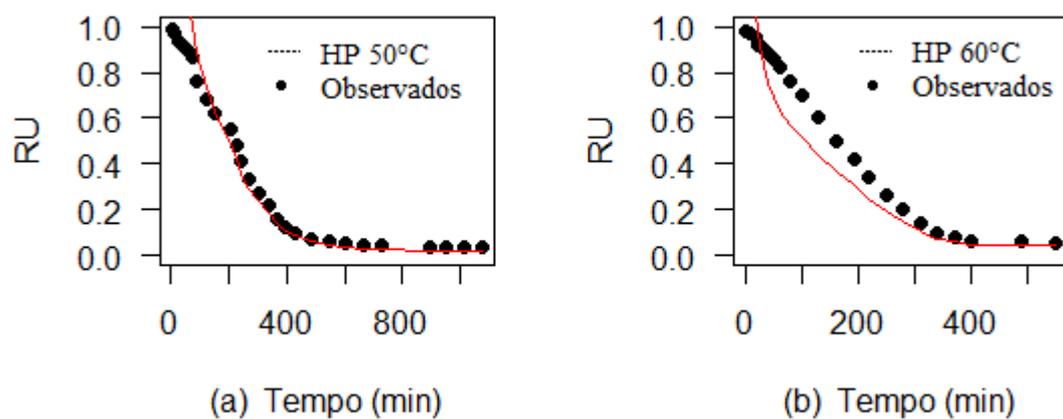
Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Figura 4. Curvas dos ajustes dos modelos de Page (P) aos dados de cinética de secagem de polpa de Jabuticaba nas temperaturas de 50°C e 60°C em (a) e (b) respectivamente, com a Razão de Umidade (RU) em função do Tempo (min).



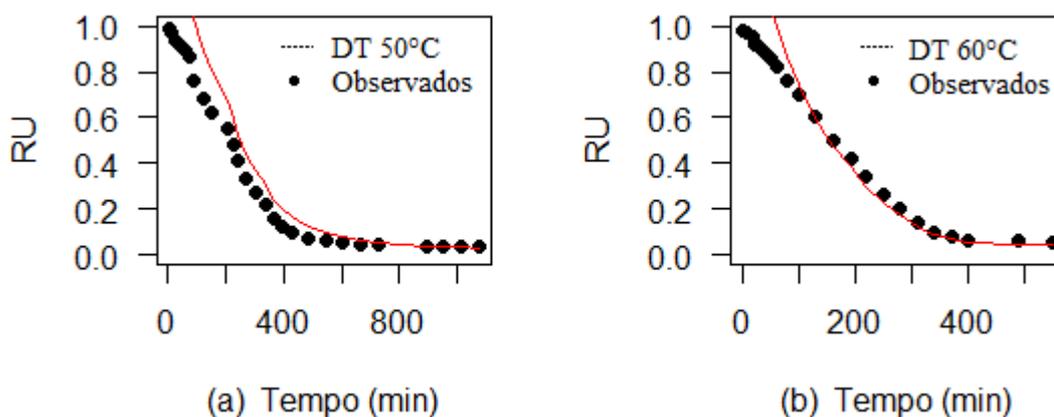
Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Figura 5. Curvas dos ajustes dos modelos de Henderson e Pabis (HP) aos dados de cinética de secagem de polpa de Jabuticaba nas temperaturas de 50°C e 60°C em (a) e (b) respectivamente, com a Razão de Umidade (RU) em função do Tempo (min).



Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Figura 6. Curvas dos ajustes dos modelos de Dois Termos (DT) aos dados de cinética de secagem de polpa de Jabuticaba nas temperaturas de 50°C e 60°C em (a) e (b) respectivamente, com a Razão de Umidade (RU) em função do Tempo (min).



Fonte: Elaborado pela autora (2019).

O modelo de Page apresentou curvas distantes dos valores observados em ambas às temperaturas (Figura 4), quando comparado aos demais modelos, corroborando os resultados apresentados na Tabela 8. Em relação ao modelo de Henderson e Pabis, pode-se notar que superestimou parte dos valores iniciais em ambas as temperaturas, mas mesmo assim na temperatura de 50°C o modelo apresentou uma curva ajustada próxima aos dados reais (Figura 6 (a)), na temperatura de 60°C (Figura 6 (b)) a curva ajustada ficou distante dos valores observados e, próximos à segunda e terceira etapas do processo de secagem.

O modelo de Dois Termos (Figura 6 - a) superestimou os valores observados na temperatura de 50°C, mesmo que tenha sido indicado como um dos mais adequados para descrever os dados, sendo assim não representa devidamente a curva de secagem de polpa de Jabuticaba na temperatura de 50°C. Em 60°C (Figura 6 (b)), o modelo DT superestimou parte dos valores iniciais, mas em geral apresentou-se próximo aos valores observados indicando qualidade no ajuste aos dados, assim como indicado na Tabela 8. Levando-se em consideração os resultados obtidos na Tabela 8 e a representação gráfica dos modelos, pode-se afirmar que o modelo de Lewis apresentou ajuste satisfatório em ambas às temperaturas, sendo que o Henderson e Pabis foi o mais adequado na temperatura de 50°C e o Dois Termos na temperatura de 60°C.

Com base nos modelos mais adequados para descrever os dados de cinética de polpa de Jabuticaba e nos resultados apresentados nas Tabelas 6 e 7, pode-se afirmar que, na

temperatura de 50°C a taxa de secagem k foi em média de 0,0078 g de água/min, podendo variar no processo de acordo com o HPD entre 0,0046 g de água/min à 0,0122 g de água por min, o que é esperado pois a razão da taxa de secagem é modificada ao longo do processo de acordo com as fases de secagem. O resultado obtido concorda com as estimativas obtidas por Furtado et al. (2019), que encontraram em média 0,0048 g de água/min para a taxa de secagem de polpa de Jabuticaba na mesma temperatura.

Segundo o modelo de Dois Termos em 60°C, tem-se que no período inicial k_1 a perda de umidade é de 0,0143 g de água /min variando entre 0,0132 g de água/min e 0,0155g de água/min, o qual se refere principalmente à fase inicial no processo de secagem. Passando para as etapas seguintes no processo de secagem, de velocidade constante e decrescente de perda de umidade, o modelo DT indica a taxa de secagem em um segundo estágio k_3 de 0,0689 g de água/min, variando entre 0,0690 g de água/min e 0,0710 g de água/min. Era esperado que a velocidade da perda de umidade fosse maior em um segundo estágio, pois após a fase inicial a perda de umidade é mais acelerada até que se estabiliza (CELESTINO, 2010).

É possível notar nas Figuras 5 (a) e 6 (b), as fases dos processos de secagem, que se iniciam no tempo 0 segundos. Em 5(a), com até, aproximadamente, 160 minutos, o produto atinge a temperatura de equilíbrio com o meio, seguido pelas demais fases de secagem, sendo estas, a perda de umidade constante e perda de umidade à taxa decrescente, até que, ao final do processo, atinge um teor de umidade de equilíbrio com cerca de 1000 minutos e é observado até 1.074 minutos, sem que se alterasse significativamente. Na Figura 6 (b), é possível observar a fase inicial de secagem em que o produto atinge a temperatura de equilíbrio em cerca de 80 minutos, seguida pelas fases de secagem, passando pela taxa decrescente e a estabilização da umidade de equilíbrio ao final do processo com aproximadamente 500 minutos e é observado até 550 minutos sem que se alterasse significativamente. No processo em 60°C a curva de secagem apresenta-se mais acentuada que em 50°C.

Observou-se que com o aumento em 10°C na temperatura houve a diminuição de 50% no tempo de secagem. Resultados semelhantes foram obtidos por Madureira et al. (2011) com a secagem da polpa de figo-da-Índia com adição de amido modificado, pois com o aumento em 10°C na temperatura de secagem de 50°C para 60°C houve a diminuição de cerca de 30% no tempo de secagem. Os autores avaliaram o processo de secagem nas temperaturas de 50°C e 60°C até os tempos de aproximadamente 630 minutos e 440 minutos, respectivamente, nas condições descritas. Gouveia et al. (2003) em seus estudos com a curva de secagem do cajá,

observaram também, a perda de umidade mais rápida no início do processo e após um determinado período a desaceleração nesta perda, sendo que, o período total na determinação da curva de secagem na temperatura de 50°C foi de 38 horas e em 80°C de 9 horas, indicando a temperatura como principal fator para essa diminuição no tempo de secagem.

Nas fases de secagem com perda de umidade constante, pode-se notar que o aumento da temperatura reduz essa fase, indicando que uma quantidade significativa de água se apresenta na forma livre na polpa de Jaboticaba e a outra porção interage com os sólidos solúveis. Resultados semelhantes foram encontrados por Pena e Mendonça (2009) em seus estudos com a secagem da fibra residual do maracujá. A diminuição do tempo de secagem deve-se ao aumento da temperatura e, em termos econômicos, seria melhor para o produtor, pois otimiza o processo, além de diminuir o gasto com o processo de produção. No entanto, para se decidir qual a melhor temperatura de secagem, é necessário realizar também análises químicas, físicas e biológicas no produto final.

5. CONCLUSÕES

- As distribuições condicionais completas dos parâmetros dos modelos de Lewis (L), Henderson e Pabis (HP), Page (P), Midilli (M), Exponencial Simples com Três Parâmetros (ESTP), Aproximação da Difusão (AD) e Dois Termos (DT) apresentaram formas conhecidas para a maioria parâmetros.

- Em todos os modelos, o parâmetro τ obteve o núcleo de uma distribuição gama, φ_1 o núcleo de uma distribuição normal e, k e k_1 não apresentaram forma conhecida. Para o parâmetro k_0 dos modelos de HP, DT, ESTP, M e AD foi encontrado o núcleo de uma distribuição normal, k_2 do modelo DT e a dos modelos ESTP e M obtiveram também o núcleo de uma distribuição normal. O parâmetro c do modelo de P e M e, k_3 do DT não apresentaram forma conhecida.

- O uso da estrutura de erros autoregressivos de ordem 1 (φ_1), apresentou melhores resultados quando verificadas as pressuposições dos modelos de regressão em relação à normalidade e homogeneidade de variâncias, dando maior confiabilidade aos resultados.

- A utilização da metodologia de inferência Bayesiana para análise de dados de cinética de secagem, apresentou resultados satisfatórios, possibilitando o ajuste de modelos simples e complexos com qualidade.

- Os modelos Aproximação da Difusão, Midilli e Exponencial Simples com Três Parâmetros apresentaram problemas com a convergência das cadeias, e/ou com o ajuste, sendo considerados inadequados para descrever os dados de Jabuticaba.

- Os modelos de Lewis, Henderson e Pabis e Dois Termos apresentaram ajustes de qualidade aos dados, sendo que o de Henderson e Pabis o que melhor descreveu os dados de cinética de polpa de Jabuticaba na temperatura de 50°C e, na temperatura de 60°C o modelo de Dois Termos.

- Na temperatura de 50°C a taxa de secagem k_1 foi em média de 0,0078 g de água/min, variando entre 0,0046 g de água/min à 0,0122 g de água por min no processo. Na temperatura de 60°C, a taxa de secagem no período inicial k_1 foi de 0,0143 g de água /min variando entre 0,0132 g de água/min e 0,0155g de água/min e, em um segundo estágio k_3 foi de 0,0689 g de água/min, variando entre 0,0690 g de água/min e 0,0710 g de água/min.

- O aumento em 10°C na temperatura implicou na diminuição de 50% no tempo de secagem.

REFERÊNCIAS

AKAIKE, H. A new look at the statistical model identification. **IEEE Transactions on Automatic Control**, Boston, v. 19, n. 6, p. 716-723, 1974.

ALSINA, O.L. S.; SILVA, O.S.E.; SANTOS, J.M. Efeitos das condições operacionais na cinética de secagem de fatias de bananas. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA AGRÍCOLA, 26., 1997, Campina Grande. **Anais...** Campina Grande: Sociedade Brasileira de Engenharia Agrícola, 1997. 1 CD-ROM.

ALVES, A. P. C. et al. Physicochemical properties of jaboticaba skin flour stored at room temperature. **Revista B. CEPPA**, Curitiba, v. 32, n. 2, p. 271-280, jul./dez. 2014. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.5380/cep.v32i2.39046>>. Acesso em: 05 dez. 2017.

ANUÁRIO Brasileiro de Fruticultura 2014. Santa Cruz do Sul: Gazeta, 2013. Disponível em: <<http://www.grupogaz.com.br/editora/anuarios/show/4333.html>>. Acesso em: 22 jan. 2019.

BAROSSO-FILHO, M.; ACHCAR, J. A.; SOUZA, R. M. de. Modelos de volatilidade estocástica em séries financeiras: uma aplicação para o IBOVESPA. **Econ. Apl.**, Ribeirão Preto, v. 14, n. 1, p. 25-40, Mar. 2010. Available from <http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1413-80502010000100002&lng=en&nrm=iso>. access on 25 Jan. 2019. <http://dx.doi.org/10.1590/S1413-80502010000100002>.

BORGES, S. V.; et al. Secagem de fatias de abóboras (*Cucurbita moschata*, L.) por convecção natural e forçada. **Ciência e Tecnologia de Alimentos**, Campinas, v. 28, supl. p. 245-251, dez. 2008. Disponível em: <http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0101-20612008000500037&lng=en&nrm=iso>. Acesso em: 01 mai. 2018. doi:10.1590/s0101-20612008000500037.

BRASILEIRO, I.M.N. **Cinética de secagem de acerola in natura em monocamada**. 1999. 80 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Agrícola) - Universidade Federal da Paraíba, Campina Grande, 1999.

CAMICIA R. G. da. M. et al. Modelagem do processo de secagem de sementes de feijão-caupi. **Revista Caatinga** [Internet]. Fap UNIFESP (SciELO); 2015 Set; 28(3):206-14. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1590/1983-21252015v28n323rc>>.

CARVALHO, D. T. **Abordagem Bayesiana de Langmuir**. Alfena/MG (UNIFAL), 2016. 77p. (Dissertação de Mestrado)

CASELLA, G.; BERGER, R. L. **Inferência Estatística**. Tradução da 2ª edição. São Paulo: Cengage Learning. 2010. 588 p. ISBN13: 9788522108947, ISBN10: 8522108943.

CASSIANO, F. R.; SÁFADI, T. Modelos de crescimento animal para tempos irregulares. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**. Brasília, v. 50, n. 11, p. 1114-1119. Nov 2015. Disponível em <http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0100-

204X2015001101114&lng=en&nrm=iso>. Acesso em: 12, mar de 2019.
<http://dx.doi.org/10.1590/S0100-204X2015001100015>.

CEAGESP. **Jaboticaba**. Site. Disponível em: <<http://www.ceagesp.gov.br/guia-ceagesp/Jaboticaba/>>. Acesso em: 20 de janeiro de 2019.

CELESTINO, S. M. C. Princípios de Secagem de Alimentos – Planaltina, DF: **Embrapa Cerrados**, 51 p. 2010. ISSN 1517-5111, ISSN online 2176-5081; 276. Disponível em: <<http://ainfo.cnptia.embrapa.br/digital/bitstream/item/77765/1/doc-276.pdf>>. Acesso em: 11 de jan de 2019.

CONGDON, P. **Bayesian Statistical Modelling**. 2 ed. John Wiley & Sons, Ltd, 2006.

CORADIN, L.; SIMINSKI A.; REIS, A. **Espécies nativas da flora brasileira de valor econômico atual ou potencial: plantas para o futuro: região Sul**. Brasília: MMA, 2011. 934p.

COSTA, C. F. et al.. Mathematical modeling and determination of thermodynamic properties of Jaboticaba peel during the drying process. R. Bras. Eng. Agríc. Ambiental, v.20, n.6, p.576-580, 2016. ISSN 1807-1929. Disponível em: < <https://doi.org/10.1590%2F1807-1929%2Fagriambi.v20n6p576-580> >. Acesso em: 12 de mar. 2019

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

DE OLIVEIRA, R. C.; DOCÊ, R. C.; de BARROS, S. T. D. Clarification of passion fruit juice by microfiltration: Analyses of operating parameters, study of membrane fouling and juice quality. **Journal of Food Engineering** [Internet]. Elsevier BV; 2012 Jul; v. 111, n. 2; p.432–9. Disponível em:< <http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2012.01.021>>. Acesso em: 12 de mar. 2019.

EMBRAPA FLORESTAS – Empresa Brasileira de Agropecuária. Valor **Nutricional da Jaboticaba**. Colombo – PR, 2015. Disponível em:< https://www.embrapa.br/florestas/busca-de-publicacoes/-/publicacao/1027136/valor_nutricional-da-Jaboticaba>. Acesso em: 08 dez 2017

ERTEKIN, C.; YALDIZ, O. Drying of eggplant and selection of a suitable *thin* layer drying model. **Journal of Food Engineering**, Essex, v.63, n.1, p.349-359, 2004.

FELLOWS P. J. **Food processing technology: Principles and Practice**. 2. ed. Florida: CRC Press LLC, 2006. p. 311-323.

FERNANDES, T. J. et al. Parameterization effects in nonlinear models to describe growth curves. **Acta Scientiarum Technology**, Maringá, v.37, n. 4, p. 397-402, Out.-Dec., 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.4025%2Factascitechnol.v37i4.27855>>. Acesso em: 17 de nov, 2017. doi: <https://doi.org/10.4025%2Factascitechnol.v37i4.27855>.

FERNANDES, T. J.et al. Seleção de modelos não lineares para a descrição das curvas de crescimento do fruto do cafeeiro. **Coffee Science**, Lavras, v. 9, n. 2, p. 207-215, abr./jun. 2014.

FOX, J.; WEISBERG, S. “**car: Companion to Applied Regression**”. R package version: 3.0-2. 2018. Thousand Oaks (CA). Disponível em: <<https://CRAN.R-project.org/package=car>>. Acesso em: 1 de jan. 2019.

FURTADO, T. D. R. et al. Drying kinetics of Jaboticaba pulp by regression models. **Rev. Bras. Frutic.**, Jaboticabal , v. 41, n. 1, e-097, 2019 . Disponível em: <http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0100-29452019000100903&lng=en&nrm=iso>. Acesso em: 10 Feb. 2019. E-pub Feb 07, 2019. <http://dx.doi.org/10.1590/0100-29452019097>.

GELMAN, A. et al. **Bayesian Data Analysis**. 2 ed. Boca Raton: Chapman and Hall/CRC, 2003.

GEWEKE, J. Evaluating the accuracy of sampling-based approaches to the calculation of posterior moments. N: BERNARDO, J. M.; BERGER, J. O.; DAWID, A. P.; SMITH, A. F. M. (Ed.). **Bayesian Statistics 4**. New York: Oxford University Press, 1992. p. 625-631.

GOBATO, M. R. S.; GOBATO, R.; HEIDARI, A. Planting of Jaboticaba Trees for Landscape Repair of Degraded Area. **Landscape Architecture and Regional Planning**. Vol. 3, No. 1, 2018, pp. 1-9. Disponível em: <<http://www.sciencepublishinggroup.com/journal/paperinfo?journalid=241&doi=10.11648/j.larp.20180301.11>>. Acesso em: mai, 09, 2018. doi: 10.11648/j.larp.20180301.11

GOUVEIA, J. P. G. de et al. Determinação das curvas de secagem de cajá. **Revista Brasileira de Produtos Agroindustriais**, Campina Grande, n.1, p.65-68, 2003. Volume especial.

GUEDES, M. H. P. et al. Estudo das curvas de crescimento de cordeiros das raças santa inês e bergamácia considerando heterogeneidade de variâncias. **Ciênc. agrotec.**, Lavras , v. 28, n. 2, p. 381-388, Apr. 2004. Disponível em: <http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1413-70542004000200019&lng=en&nrm=iso>. Acesso em: July, 03, 2018. <http://dx.doi.org/10.1590/S1413-70542004000200019>.

HEIDELBERGER, P.; WELCH, P. Simulation run length control in the presence of an initial transient. **Operations Research**, Landing, v. 31, n. 6, p. 1109-44, 1983.

HENDERSON, S. M. **Progress in developing the thin layer drying equation**. Transactions of the ASAE, v.17, n.6, p.1167-1172, 1974.

HENDERSON, S. M.; PABIS, S. Grain drying theory I: temperature effect on drying coefficient. **Journal of Agricultural Engineering Research**, Silsoe, v.6, n.3, p.169-174, 1961.

HOFFMANN, R.; VIEIRA, S. **Análise de regressão: uma introdução à econometria**. 3. ed. São Paulo: Hucitec, 1998. 379 p.

HOTHORN, T. et al. “**lmtest: Testing Linear Regression Models**”. R package version: 0.9-36, 2018. Disponível em: < <https://cran.r-project.org/web/packages/lmtest/lmtest.pdf>>. Acesso em: 2 de jan. 2019.

JUDGE, G. G. et al. **The theory and practice of econometrics**. 2nd ed. New York: Wiley, 1985. 1050 p.

LEWIS, K. W. The rate of drying of solid materials. **Industrial & Engineering Chemistry**, Washington, v. 13, n. 1, p. 427, 1921.

LIMA, J. F. de; PEIXOTO, C. P.; LEDO, C. A. da S. Índices fisiológicos e crescimento inicial de mamoeiro (*CaricapapayaL.*) em casa de vegetação. **Ciência e Agrotecnologia**, Lavras, v. 31, n. 5, out. 2007. Disponível em: <http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1413-70542007000500013&lng=en&nrm=iso>. Acesso em: 5 fev. 2015.

MACHADO, E. J, et al. Estimação de um modelo de espécies de macroinvertebrados bentônicos via análise Bayesiana do modelo de Michaelis-Menten. **Revista Brasileira de Biometria**, São Paulo, v. 30, p. 106-123, 2012

MADUREIRA, I. A. et al. Cinética de secagem da polpa do figo-da-índia. **Revista Brasileira de Produtos Agroindustriais**, Campina Grande, v. 13, n. Especial, p. 345-354, 2011. ISSN 1517-8595. Disponível em: < <http://www.deag.ufcg.edu.br/rbpa/rev13e/Art13E3.pdf>>. Acesso em: 26 de mar. 2018.

MARTINS-FILHO, S. et al. Abordagem Bayesiana das curvas de crescimento de duas cultivares de feijoeiro. **Ciência Rural** [Internet]. Fap UNIFESP (SciELO); vol. 38; n. 6; p. 1516–21; Set. 2008. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1590/s0103-84782008000600004>>. Acesso em: 12 de mar. 2019.

MAZZINI, A. R. de A. et al. Curva de crescimento de novilhos Hereford: heterocedasticidade e resíduos autoregressivos. **Ciência Rural**, Santa Maria, v. 35, n. 2, p. 422-427, mar./abr. 2005.

MENDES, P. N. **Ajuste dos modelos Gompertz e logístico na descrição das curvas de crescimento de tomates: uma abordagem Bayesiana**. 2011. 82 p. Tese (Doutorado em Estatística e Experimentação Agropecuária) - Universidade Federal de Lavras, Lavras, 2011.

MIDILLI, A.; KUCUK, H.; YAPAR, Z. A new model for single layer drying. **Drying Technology**, vol. 20; n. 7; p. 1503–1513; 2002. Disponível em: < <https://doi.org/10.1081%2Fdrt-120005864>>. Acesso em: 12 de mar. 2019.

MOOD A. M.; GRAYBILL, F.A.; BOES, D.C. **Introduction to the theory of statistics**, 3^a ed. New York, McGraw Hill, 1974.

MORAES, S. O.; RODRIGUES, V. C. **Secagem de alimentos**. Piracicaba: Universidade Federal de São Paulo, 2006. 5 p.

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

MUIANGA, C. A. et al. Descrição da curva de crescimento de frutos do cajueiro por modelos não lineares. **Revista Brasileira de Fruticultura**, Jaboticabal, v. 38, n. 1, p. 022-032, 2016.

Disponível em:< <https://doi.org/10.1590%2F0100-2945-295%2F14>>. Acesso: nov, 17, 2017. doi: 10.1590/0100-2945-295/14.

MUNIZ, J. A.; NASCIMENTO, M da S.; FERNANDES, T. J. Nonlinear models for description of cacao fruit growth with assumption violations. **Revista Caatinga**, Mossoró, v. 30, n. 1, p. 250-257, 2017. Disponível em::< <https://doi.org/10.1590%2F1983-21252017v30n128rc>>. Acesso em: 17 de nov. 2017. doi: 10.1590/1983-21252017v30n128rc

NOGUEIRA, D. A. **Proposta e avaliação de critérios de convergência para o método de Monte Carlo via Cadeias de Markov: casos uni e multivariados**. Tese. Lavras : UFLA, 2004. 121 p. : il.

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

NUNES, J. S. et al. Descrição da cinética de secagem de Jabuticaba usando modelos empíricos. **Revista Verde**, Mossoró, v. 9, n. 1, p. 20-25, jan./mar. 2014. Disponível em: <<http://www.gvaa.com.br/revista/index.php/RVADS/article/view/2593/2001>>. Acesso em: 10 set. 2017.

OLIVEIRA, R. C. de et al. Adjustment of non-linear models for drying in *thin* layer by Bayesian inference. **Acta Scientarum (Maringá-PR)**. v. 36 , n. 2 , p.263 – 269, Abr-Jun, 2014 (a).

OLIVEIRA, R. C. de et al. Evaluation of semi-empirical and non-linear drying models by Bayesian inference. **Acta Scientarum (Maringá-PR)**. v. 36 , n. 4 , p.635 – 641, Out-Dez, 2014 (b).

PABIS, S.; HENDERSON, S. M. Grain drying theory. II. A critical analysis of the drying curve for shelled maize. **J. of Agr. Engr. Res.** vol. 6; n. 4; p. 272-277, 1961.

PAGE, G. E. **Factors influencing the maximum rates of air drying shelled corn in *thin* layers**. Unpublished M.S. thesis, Purdue University, West Lafayette, 1949.

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

PENA, R. S.; MENDONÇA, N. B. Secagem em camada delgada da fibra residual do maracujá. **Revista B. CEPPA**, Curitiba, v. 27, n. 2, p. 257-270, jul./dez. 2009. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.5380/cep.v27i2.22036>>. Acesso em: 08 fev. 2017. doi:10.5380/cep.v27i2.22036.

PEREIRA, J. M. et al. Comparação entre modelos para predição do nitrogênio mineralizado: uma abordagem Bayesiana. **Ciência e Agrotecnologia** (Lavras), v. 33, p. 1792-1797, 2009.

PEREZ, L. G. et al. Cinética de secagem da polpa cupuaçu (*Theobroma grandiflorum*) pré desidratada por imersão-impregnação. **Revista Ciência Agronômica**, v. 44, n. 1, p. 102-106, jan/mar. 2013

PRADO, M. E. T.; PARK, K. J.; ALONSO, L. F. T. Shrinkage of dates (*Phoenix Dactylifera*L.) During Drying. **Drying Technology**, New York, v.18, n.1/2, p. 295-310, 2000. Disponível em: < <https://doi.org/10.1080%2F07373930008917705>>. Acesso em: 12 de mar. 2019.

PRADO, T. K. L. do; SAVIAN, T. V.; MUNIZ, J. A. Ajuste dos modelos Gompertz e Logístico aos dados de crescimento de frutos de coqueiro anão verde. **Ciência Rural**, Santa Maria, v. 43, n. 5, mai 2013. Disponível em: <http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0103-84782013000500008&lng=en&nrm=iso>. Acesso em: 23 de jan. 2015.

PRESS, S. J. **Subjective and Objective Bayesian Statistics: Principles, Models, and Applications**, *Second edition* , revised and expanded, New York: John Wiley and Sons, Inc. 2003.

QUEIROZ, D. M.; PEREIRA, J. A. M.; MELO, E. C. **Modelos matemáticos de simulação de secagem de grãos**. Viçosa: Centro Nacional de Treinamento em Armazenagem, 1995. 59p.

R DEVELOPMENT CORE TEAM. R, (3.5.2): a language and environment for statistical computing. Vienna: R Foundation for Statistical Computing, 2018.

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.

RESENDE, O.; FERREIRA, L. U.; ALMEIDA, D. P. Modelagem matemática para descrição da cinética de secagem do feijão Adzuki (*Vigna angularis*). **Revista Brasileira de Produtos Agroindustriais**, Campina Grande, v.12, n.2, p.171-178, 2010.

RIBEIRO, T. D. et al. The use of the nonlinear models in the growth of pears of ‘Shinseiki’ cultivar. **Ciência Rural**, Santa Maria, v. 48, n. 01, e20161097, jan. 2018 (a). Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1590/0103-8478cr20161097>. Acesso em: 16 de jan. 2018.

RIBEIRO, T. D. et al. Description of the growth of pequi fruits by nonlinear models. **Revista Brasileira de Fruticultura**, Jaboticabal, v. 40, n.3 , p. , 2018 (b). Disponível em: < <http://dx.doi.org/10.1590/0100-29452018949> > Acesso em: 05 nov. 2018.

RODRIGUES, M. E. de A. et al. de. Avaliação da temperatura e velocidade do ar na secagem de goiaba. **Revista Brasileira de Produtos Agroindustriais**, Campina Grande, v.4, n.2, p.141-147, 2002.

SANTOS, A. E. dos et al. Modelagem matemática para descrição da cinética de secagem do fruto da Palma (*Opuntia fícus indica*). **Revista Verde de Agrotecnologia e Desenvolvimento Sustentável (Pombal-PB)**. v. 11, n.1, p. 01-06, 2016.

SAVIAN, T. V. et al. Análise Bayesiana para modelos de degradabilidade ruminal. **Ciência Rural** (Santa Maria), v. 39, p. 2169-2177, 2009.

SCHWARZ, G. Estimating the dimensional of a model. **Annals of Statistics**, Hayward, v.6, n.2, p.461-464, Mar. 1978.

SHERWOOD, T. K. **The Drying of Solids-IV Industrial and Engineering Chemistry**, v. 24, n. 3, 1932.

SILVA R. B. et al. Estudo da cinética de secagem de polpa de carambola. **Revista Brasileira de Tecnologia Agroindustrial**. Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR); 2016 Nov 7;10. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.3895/rbta.v10n2.3261>>. Acesso em: 26 de mar. 2018

SILVA, F.T.; JARDINE, J.G.; MATTA, V. M. Concentração de suco de laranja (*Citrus sinensis*) por osmose inversa. **Ciência e Tecnologia de Alimentos**, Campinas, v. 18, n.1, p. 99-104, 1998.

SIQUEIRA, V. C.; RESENDE, O.; CHAVES, T. H. Mathematical modelling of the drying of jatropha fruit: an empirical comparison. **Rev. Ciênc. Agron.**, 2013, vol.44, n.2, p.278-285, abr-jun, 2013.

SMITH, B. J. “**boa: An R Package for MCMC Output Convergence Assessment and Posterior Inference**”. Journal of Statistical Software [Internet]. Foundation for Open Access Statistic; vol. 21; n. 11; 2007. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.18637/jss.v021.i11>>. Acesso em 12 de mar. 2019.

SNOW, G. “**Teaching Demos: Demonstrations for Teaching and Learning**”. R package version: 2.10. 2016. Disponível em: < C:/Users/Usuario/R/win-library/3.5/TeachingDemos/Meta/package.rds >. Acesso em: 1 de jan. 2019.

SOUSA, I. F. et al. Fitting nonlinear autoregressive models to describe coffee seed germination. **Ciência Rural**, Santa Maria, v.44, n. 11, p. 2016-2021, nov. 2014.

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

SOUZA, L. A. et al. Curvas de crescimento em bovinos da raça Indu brasil criados no estado de Sergipe. **Ciência e Agrotecnologia**, Lavras, v. 41, n. 4, p. 2016.

SPIEGELHALTER, D. J. et al. Bayesian measures of model complexity and fit (with discussion). **J. R. Statist. Soc. B**, vol. 64; p. 583–639; 2002.

SPIESS, A. N. “**qpcR: Modelling and Analysis of Real-Time PCR Data**”. R package version: 1.4-1, 2018. Disponível em: < <https://cran.r-project.org/web/packages/qpcR/index.html>>. Acesso em: 2 de jan. 2019.

TBCA: **Tabela Brasileira de Composição de Alimentos (TBCA)**. Universidade de São Paulo (USP). Food Research Center (FoR C). Versão 6.0. São Paulo, 2017. Acesso em: 21 de dezembro de 2018. Disponível em: <<http://www.fcf.usp.br/tbca/>>.

TORNEIRO, M. T. T. **Utilização de modelos assintóticos: sigmóides de crescimento multifásico com sazonalidade em estudos zootécnicos.** 1996. 131p. Tese (Doutorado em Zootecnia) - Universidade Estadual Paulista, Botucatu, 1996.

VIEIRA, D. F. et al. Avaliação físico-química e de textura instrumental de geleia mista de Jaboticaba e pitanga. **Revista brasileira de Agrotecnologia** (BRASIL). ISSN: 2317-3114 v. 7, n. 2, pag.: 407 – 410, 2017. Disponível em: <<http://www.gvaa.com.br/revista/index.php/REBAGRO/article/view/5241/407-411>>. Acesso em: 08 dez 2017

VILLAR, C.G. **Estudo do desempenho de um secador convectivo de bandejas para a secagem de bananas: análise da influência das variáveis operacionais.** 1999. 75p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Agrícola) - Universidade Federal da Paraíba, Campina Grande, 1999.

WEISS, C.; SANTOS, M. A logística de distribuição e as perdas ao longo da cadeia produtiva das frutas frescas. In: **CONGRESSO VIRTUAL BRASILEIRO - ADMINISTRAÇÃO**, 11., 2014, São Paulo. **Anais...**São Paulo: COVIBRA, 2014. p. 1-11.

WICKHAM, H. **“stringr: Simple, Consistent Wrappers for Common String Operations”**

R package version: 1.4.0, 2019. Disponível em: < <https://cran.r-project.org/web/packages/stringr/index.html>>. Acesso em: 12 de mar. 2019.

ZELLNER, A. Bayesian method of moments (BMOM) analysis of mean and regression models. In: **J. C. Lee et al (Eds) Modelling Prediction**, pp. 61-74 (new York, Springer), 1996.

ZICKER, M. C. **Obtenção e utilização do extrato aquoso de Jaboticaba (*Myrciaria Jaboticaba* (vell) berg) em leite fermentado: caracterização físicoquímica e sensorial.** 2011. 138p. Dissertação (Mestrado em Ciência dos Alimentos) - Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2011.

ANEXO 1 DISTRIBUIÇÕES CONDICIONAIS COMPLETAS

Modelo de Lewis

Para o modelo de Lewis, ao considerar a dependência residual $y_i = e^{(-kt_i)} + \varphi_1 y_{i-1} + \varepsilon_i$, tem-se, $\varepsilon_i = y_i - e^{(-kt_i)} - \varphi_1 y_{i-1}$. Supondo que $\varepsilon_i \sim N(0; \sigma^2)$, são independentes e identicamente distribuídos (i.i.d.) e, que $(\sigma^2)^{-1} \propto \tau$. Para a precisão τ assumiu-se, $\tau \sim \text{Gama}(\alpha; \beta)$, $\varphi_1 \sim N(0; \omega)$ e $k \sim N(\mu_k; \sigma_k^2)$, com μ_k e σ_k^2 conhecidos.

A verossimilhança dos dados é representada por:

$$L(Y|k, \tau, \alpha, \beta, \varphi_1) = \tau^{\frac{n-1}{2}} \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [y_i - e^{(-kt_i)} - \varphi_1 y_{i-1} - 0]^2 \right\},$$
 em que $Y = (y_1, y_2, \dots, y_n)$, e o somatório inicia-se em 2, pois foi

feita uma aproximação devido à estrutura de erros, seguindo as proposições de Congdon (2006) para modelos autoregressivos nas observações.

Considerando o teorema de Bayes, dado pela equação (16), a distribuição a *posteriori* conjunta é proporcional à:

$$p(k, \tau, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \varphi_1, \omega|Y) \propto \tau^{\frac{n-1}{2}} e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [y_i - e^{(-kt_i)} - \varphi_1 y_{i-1}]^2 \right\}} \tau^{\alpha-1} e^{(-\beta\tau)} e^{\left\{ -\frac{1}{2\sigma_k^2} [k - \mu_k]^2 \right\}} e^{\left\{ -\frac{1}{2\omega} [\varphi_1 - 0]^2 \right\}}$$

Partindo a *posteriori* conjunta a condicional completa de τ é proporcional à seguinte expressão:

$$p(\tau|k, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \varphi_1, \omega, Y) \propto \tau^{\frac{n-1}{2}} \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [y_i - e^{(-kt_i)} - \varphi_1 y_{i-1}]^2 \right\} \tau^{\alpha-1} e^{(-\beta\tau)}$$

Desenvolvendo o quadrado, e fazendo o rearranjo da equação, tem-se que, $p(\tau|k, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \varphi_1, \omega, Y)$ é proporcional:

$$\propto \tau^{\frac{n-1}{2}} e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [y_i^2 + e^{(-2kt_i)} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_i e^{(-kt_i)} + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{(-kt_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i] \right\}} \tau^{\alpha-1} e^{(-\beta\tau)}$$

$$\propto \tau^{\frac{n+2\alpha-1}{2}-1} e^{\left\{ -\tau \left[\frac{1}{2} \sum_{i=2}^n (y_i^2 + e^{(-2kt_i)} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_i e^{(-kt_i)} + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{(-kt_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i) + \beta \right] \right\}}$$

Que representa o núcleo de uma distribuição gama de parâmetros:

$$\alpha^* = \frac{n+2\alpha-1}{2}$$

$$\beta^* = \beta + \frac{1}{2} \sum_{i=2}^n \left(y_i^2 + e^{(-kt_i)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_{i-1} e^{(-kt_i)} + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{(-kt_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i \right)$$

Partindo da *posteriori* conjunta, a condicional completa de φ_1 é proporcional à:

$$p(\varphi_1 | k, \tau, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \omega, Y) \propto e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [y_i - e^{(-kt_i)} - \varphi_1 y_{i-1}]^2 \right\}} e^{\left\{ -\frac{1}{2\omega} [\varphi_1]^2 \right\}}$$

Desenvolvendo o quadrado, e fazendo o rearranjo da equação, tem-se que, $p(\varphi_1 | k, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \tau, \omega, Y)$ é proporcional:

$$\propto e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [y_i^2 + e^{(-kt_i)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_{i-1} e^{(-kt_i)} + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{(-kt_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i] \right\}} e^{\left\{ -\frac{1}{2\omega} [\varphi_1]^2 \right\}}$$

$$\propto e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [\varphi_1^2 y_{i-1}^2 + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{(-kt_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i] \right\}} e^{\left\{ -\frac{1}{2\omega} [\varphi_1]^2 \right\}}$$

$$\propto e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [\varphi_1^2 y_{i-1}^2 + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{(-kt_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i] - \frac{\varphi_1^2}{2\omega} \right\}}$$

Colocando os termos φ_1^2 e φ_1 em evidência:

$$\propto e^{\left\{ \varphi_1^2 \left[-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n (y_{i-1}^2) - \frac{1}{2\omega} \right] - 2\varphi_1 \left[-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [-y_{i-1} e^{(-kt_i)} + y_{i-1} y_i] \right] \right\}}$$

$$\propto e^{\left\{ -\frac{1}{2} \left[\varphi_1^2 \left(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega} \right) - 2\varphi_1 \left(\tau \sum_{i=2}^n \{-y_{i-1} e^{(-kt_i)} + y_{i-1} y_i\} \right) \right] \right\}}$$

$$\propto e^{\left\{ -\frac{1}{2} \left(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} - \frac{1}{\omega} \right) \left[\varphi_1^2 - 2\varphi_1 \frac{\left(\tau \sum_{i=2}^n \{-y_{i-1} e^{(-kt_i)} + y_{i-1} y_i\} \right)}{\left(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega} \right)} \right] \right\}}$$

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

$$\mu = \frac{\left(\tau \sum_{i=2}^n \{-y_{i-1} e^{(-kt_i)} + y_{i-1} y_i\} \right)}{\left(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega} \right)}$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} - \frac{1}{\omega}}$$

Partindo da distribuição *posteriori* conjunta, a condicional completa de k é dada por:

$$p(k | \tau, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \varphi_1, \omega, Y) \propto e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [y_i - e^{(-kt_i)} - \varphi_1 y_{i-1}]^2 \right\}} e^{\left\{ -\frac{1}{2\sigma_k^2} [k - \mu_k]^2 \right\}}$$

$$\propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n \left[e^{(-kt_i)^2} - 2y_i e^{(-kt_i)} + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{(-kt_i)} \right] \right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\sigma_k^2} [k - \mu_k]^2 \right\}}$$

A distribuição condicional completa de k não apresenta uma forma conhecida, quando comparada a distribuições padrão. Deste modo, é necessária a utilização do algoritmo de Metropolis-Hastings para gerar os resultados deste parâmetro.

Modelo de Henderson e Pabis

Para o modelo de Henderson e Pabis, ao considerar a dependência residual $y_i = k_0 e^{(-kt_i)} + \varphi_1 y_{i-1} + \varepsilon_i$, tem-se, $\varepsilon_i = y_i - k_0 e^{(-kt_i)} - \varphi_1 y_{i-1}$. Supondo que $\varepsilon_i \sim N(0; \sigma^2)$, são independentes e identicamente distribuídos (i.i.d.) e, que $(\sigma^2)^{-1} \propto \tau$, para a precisão τ assumiu-se, $\tau \sim \text{Gama}(\alpha; \beta)$, $\varphi_1 \sim N(0; \omega)$, $k \sim N(\mu_k; \sigma^2_k)$, $k_0 \sim N(\mu_0; \sigma^2_0)$ com μ_k , σ^2_k , μ_0 e σ^2_0 conhecidos.

A verossimilhança dos dados, é representada por:

$$L(Y|k, k_0, \tau, \alpha, \beta, \varphi_1) = \tau^{\frac{n-1}{2}} \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [y_i - k_0 e^{(-kt_i)} - \varphi_1 y_{i-1} - 0]^2 \right\}, \text{ em que } Y = (y_1, y_2, \dots, y_n), \text{ e o somatório inicia-se em 2,}$$

pois foi feita uma aproximação devido à estrutura de erros.

Considerando o teorema de Bayes, pela equação (16), a distribuição a *posteriori* conjunta é proporcional à:

$$p(k, k_0, \tau, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \varphi_1, \omega | Y) \propto \tau^{\frac{n-1}{2}} e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [y_i - k_0 e^{(-kt_i)} - \varphi_1 y_{i-1}]^2 \right\}} \tau^{\alpha-1} e^{(-\beta\tau)} e^{\left\{-\frac{1}{2\sigma_k^2} [k - \mu_k]^2 \right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\sigma_0^2} [k_0 - \mu_0]^2 \right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\omega} [\varphi_1 - 0]^2 \right\}}$$

Partindo a *posteriori* conjunta a condicional completa de τ é proporcional a seguinte expressão:

$$p(\tau | k, k_0, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \varphi_1, \omega, Y) \propto \tau^{\frac{n-1}{2}} e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [y_i - k_0 e^{(-kt_i)} - \varphi_1 y_{i-1}]^2 \right\}} \tau^{\alpha-1} e^{(-\beta\tau)}$$

Desenvolvendo o quadrado, e fazendo o rearranjo da equação, tem-se que, $p(\tau | k, k_0, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \varphi_1, \omega, Y)$ é proporcional:

$$\begin{aligned} &\propto \tau^{\frac{n-1}{2}} e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [y_i^2 + k_0^2 e^{(-2kt_i)} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_i k_0 e^{(-kt_i)} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i] \right\}} \tau^{\alpha-1} e^{(-\beta\tau)} \\ &\propto \tau^{\frac{n+2\alpha-1}{2}-1} e^{\left\{-\tau \left[\frac{1}{2}\sum_{i=2}^n (y_i^2 + k_0^2 e^{(-2kt_i)} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_i k_0 e^{(-kt_i)} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i) + \beta \right] \right\}} \end{aligned}$$

Que representa o núcleo de uma distribuição gama de parâmetros:

$$\alpha^* = \frac{n+2\alpha-1}{2}$$

$$\beta^* = \beta + \frac{1}{2} \sum_{i=2}^n \left(y_i^2 + k_0^2 e^{(-kt_i)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_i k_0 e^{(-kt_i)} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i \right)$$

Partindo da *posteriori* conjunta, a condicional completa de φ_1 é proporcional à:

$$p(\varphi_1 | k, k_0, \tau, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \omega, Y) \propto \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [y_i - k_0 e^{(-kt_i)} - \varphi_1 y_{i-1}]^2 \right\} \exp \left\{ -\frac{1}{2\omega} [\varphi_1]^2 \right\}$$

Desenvolvendo o quadrado, e fazendo o rearranjo da equação, tem-se que, $p(\varphi_1 | k, k_0, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \tau, \omega, Y)$ é proporcional:

$$\propto e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [y_i^2 + k_0^2 e^{(-kt_i)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_i k_0 e^{(-kt_i)} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i] \right\}} e^{\left\{ -\frac{1}{2\omega} [\varphi_1]^2 \right\}}$$

$$\propto e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [\varphi_1^2 y_{i-1}^2 + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i] \right\}} e^{\left\{ -\frac{1}{2\omega} [\varphi_1]^2 \right\}}$$

$$\propto e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [\varphi_1^2 y_{i-1}^2 + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i] - \frac{\varphi_1^2}{2\omega} \right\}}$$

Colocando os termos φ_1^2 e φ_1 em evidência:

$$\propto e^{\left\{ \varphi_1^2 \left[-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n (y_{i-1}^2) - \frac{1}{2\omega} \right] - 2\varphi_1 \left[-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [-y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} + y_{i-1} y_i] \right] \right\}}$$

$$\propto e^{\left\{ -\frac{1}{2} \left[\varphi_1^2 \left(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega} \right) - 2\varphi_1 \left(\tau \sum_{i=2}^n \{-y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} + y_{i-1} y_i\} \right) \right] \right\}}$$

$$\propto e^{\left\{ -\frac{1}{2} \left(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega} \right) \left[\varphi_1^2 - 2\varphi_1 \frac{\left(\tau \sum_{i=2}^n \{-y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} + y_{i-1} y_i\} \right)}{\left(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega} \right)} \right] \right\}}$$

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

$$\mu = \frac{\left(\tau \sum_{i=2}^n \{-y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} + y_{i-1} y_i\} \right)}{\left(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega} \right)}$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega}}$$

Partindo da *posteriori* conjunta, a condicional completa de k_0 é proporcional à:

$$p(k_0|k, \varphi_1, \tau, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \omega, Y) \propto \exp\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [y_i - k_0 e^{(-kt_i)} - \varphi_1 y_{i-1}]^2\right\} \exp\left\{-\frac{1}{2\omega} [\varphi_1]^2\right\}$$

Desenvolvendo o quadrado, e fazendo o rearranjo da equação, tem-se que, $p(k_0|k_1, \varphi_1, \tau, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \omega, Y)$ é proporcional:

$$\begin{aligned} &\propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [y_i^2 + k_0^2 e^{(-kt_i)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_i k_0 e^{(-kt_i)} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i]\right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\sigma_0^2} [k_0 - \mu_0]^2\right\}} \\ &\propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [k_0^2 e^{(-kt_i)^2} - 2y_i k_0 e^{(-kt_i)} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)}]\right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\sigma_0^2} [k_0^2 - 2k_0 \mu_0 + \mu_0^2]\right\}} \\ &\propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [k_0^2 e^{(-kt_i)^2} - 2y_i k_0 e^{(-kt_i)} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)}] - \frac{[k_0^2 - 2k_0 \mu_0]}{2\sigma_0^2}\right\}} \end{aligned}$$

Colocando os termos k_0^2 e k_0 em evidência:

$$\begin{aligned} &\propto e^{\left\{k_0^2 \left[-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n (e^{(-kt_i)^2}) - \frac{1}{2\sigma_0^2}\right] - 2k_0 \left[-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n (y_{i-1} e^{(-kt_i)} - \varphi_1 y_{i-1} e^{(-kt_i)}) - \frac{\mu_0}{2\sigma_0^2}\right]\right\}} \\ &\propto e^{\left\{-\frac{1}{2}\left[k_0^2 \left(\tau \sum_{i=2}^n \left\{e^{(-kt_i)^2}\right\} + \frac{1}{\sigma_0^2}\right) - 2k_0 \left(\tau \sum_{i=2}^n \left\{y_{i-1} e^{(-kt_i)} - \varphi_1 y_{i-1} e^{(-kt_i)}\right\} + \frac{\mu_0}{\sigma_0^2}\right)\right]\right\}} \\ &\propto e^{\left\{-\frac{1}{2}\left(\tau \sum_{i=2}^n \left\{e^{(-kt_i)^2}\right\} + \frac{1}{\sigma_0^2}\right) \left[k_0^2 - 2k_0 \frac{\left(\tau \sum_{i=2}^n \left\{y_{i-1} e^{(-kt_i)} - \varphi_1 y_{i-1} e^{(-kt_i)}\right\} + \frac{\mu_0}{\sigma_0^2}\right)}{\left(\tau \sum_{i=2}^n \left\{e^{(-kt_i)^2}\right\} + \frac{1}{\sigma_0^2}\right)}\right]\right\}} \end{aligned}$$

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

$$\mu = \frac{\left(\tau \sum_{i=2}^n \left\{y_{i-1} e^{(-kt_i)} - \varphi_1 y_{i-1} e^{(-kt_i)}\right\} + \frac{\mu_0}{\sigma_0^2}\right)}{\left(\tau \sum_{i=2}^n \left\{e^{(-kt_i)^2}\right\} + \frac{1}{\sigma_0^2}\right)}$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{\tau \sum_{i=2}^n \left\{e^{(-kt_i)^2}\right\} + \frac{1}{\sigma_0^2}}$$

Partindo da distribuição *posteriori* conjunta, a condicional completa de k é dada por:

$$p(k|\tau, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \varphi_1, \omega, Y) \propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [y_i - k_0 e^{(-kt_i)} - \varphi_1 y_{i-1}]^2\right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\sigma_k^2}[k - \mu_k]^2\right\}}$$

$$\propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [k_0 e^{(-kt_i)^2} - 2y_i k_0 e^{(-kt_i)} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)}]\right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\sigma_k^2}[k - \mu_k]^2\right\}}$$

A distribuição condicional completa de k não apresenta uma forma conhecida, quando comparada a distribuições padrão. Deste modo, é necessária a utilização do algoritmo de Metropolis-Hastings para gerar os resultados deste parâmetro.

Modelo de Page

Para o modelo de Page, ao considerar a dependência residual $y_i = e^{(-kt_i^c)} + \varphi_1 y_{i-1} + \varepsilon_i$, tem-se, $\varepsilon_i = y_i - e^{(-kt_i^c)} - \varphi_1 y_{i-1}$. Supondo que $\varepsilon_i \sim N(0; \sigma^2)$, são independentes e identicamente distribuídos (i.i.d.) e, que $(\sigma^2)^{-1} \propto \tau$, para a precisão τ assumiu-se, $\tau \sim Gama(\alpha; \beta)$, $\varphi_1 \sim N(0; \omega)$, $k \sim N(\mu_k; \sigma_k^2)$, $c \sim N(\mu_c; \sigma_c^2)$ com μ_k , μ_c , σ_k^2 e σ_c^2 conhecidos.

A verossimilhança dos dados, é representada por:

$$L(Y|k, c, \tau, \alpha, \beta, \varphi_1) = \tau^{\frac{n-1}{2}} \exp\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [y_i - e^{(-kt_i^c)} - \varphi_1 y_{i-1} - 0]^2\right\}, \text{ em que } Y = (y_1, y_2, \dots, y_n) \text{ e, o somatório inicia-se em 2, pois}$$

foi feita uma aproximação devido à estrutura de erros.

Considerando o teorema de Bayes dada pela equação (16), a distribuição a *posteriori* conjunta é proporcional à:

$$p(k, c, \tau, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_c, \mu_c, \varphi_1, \omega|Y) \propto \tau^{\frac{n-1}{2}} e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [y_i - e^{(-kt_i^c)} - \varphi_1 y_{i-1}]^2\right\}} \tau^{\alpha-1} e^{(-\beta\tau)} e^{\left\{-\frac{1}{2\sigma_k^2}[k - \mu_k]^2\right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\omega}[\varphi_1 - 0]^2\right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\sigma_c^2}[c - \mu_c]^2\right\}}$$

Partindo a *posteriori* conjunta a condicional completa de τ é proporcional a seguinte expressão:

$$p(\tau|k, c, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_c, \mu_c, \varphi_1, \omega, Y) \propto \tau^{\frac{n-1}{2}} e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [y_i - e^{(-kt_i^c)} - \varphi_1 y_{i-1}]^2\right\}} \tau^{\alpha-1} e^{(-\beta\tau)}$$

Desenvolvendo o quadrado, e fazendo o rearranjo da equação, tem-se que, $p(\tau|k_1, c, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_c, \mu_c, \varphi_1, \omega, Y)$ é proporcional:

$$\begin{aligned} &\propto \tau^{\frac{n-1}{2}} e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n \left[y_i^2 + e^{(-kt_i^c)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_i e^{(-kt_i^c)} + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{(-kt_i^c)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i \right] \right\}} \tau^{\alpha-1} e^{(-\beta\tau)} \\ &\propto \tau^{\frac{n+2\alpha-1}{2}} e^{\left\{-\tau \left[\frac{1}{2}\sum_{i=2}^n \left(y_i^2 + e^{(-kt_i^c)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_i e^{(-kt_i^c)} + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{(-kt_i^c)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i \right) + \beta \right] \right\}} \end{aligned}$$

Que representa o núcleo de uma distribuição gama de parâmetros:

$$\alpha^* = \frac{n+2\alpha-1}{2}$$

$$\beta^* = \beta + \frac{1}{2}\sum_{i=2}^n \left(y_i^2 + e^{(-kt_i^c)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_i e^{(-kt_i^c)} + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{(-kt_i^c)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i \right)$$

Partindo da *posteriori* conjunta, a condicional completa de φ_1 é proporcional à:

$$p(\varphi_1|\tau, k, c, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_c, \mu_c, \omega, Y) \propto \exp \left\{ -\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n \left[y_i - e^{(-kt_i^c)} - \varphi_1 y_{i-1} \right]^2 \right\} \exp \left\{ -\frac{1}{2\omega} [\varphi_1]^2 \right\}$$

Desenvolvendo o quadrado, e fazendo o rearranjo da equação, tem-se que, $p(\varphi_1|\tau, k_1, c, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_c, \mu_c, \omega, Y)$ é proporcional:

$$\begin{aligned} &\propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n \left[y_i^2 + e^{(-kt_i^c)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_i e^{(-kt_i^c)} + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{(-kt_i^c)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i \right] \right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\omega} [\varphi_1]^2 \right\}} \\ &\propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n \left[\varphi_1^2 y_{i-1}^2 + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{(-kt_i^c)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i \right] \right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\omega} [\varphi_1]^2 \right\}} \\ &\propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n \left[\varphi_1^2 y_{i-1}^2 + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{(-kt_i^c)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i \right] - \frac{\varphi_1^2}{2\omega} \right\}} \\ &\propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n \left[\varphi_1^2 y_{i-1}^2 + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{(-kt_i^c)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i \right] - \frac{\varphi_1^2}{2\omega} \right\}} \end{aligned}$$

Colocando os termos φ_1^2 e φ_1 em evidência:

$$\begin{aligned} &\propto e^{\left\{ \varphi_1^2 \left[-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n (y_{i-1}^2) - \frac{1}{2\omega} \right] - 2\varphi_1 \left[-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n \left[-y_{i-1} e^{(-kt_i^c)} + y_{i-1} y_i \right] \right] \right\}} \\ &\propto e^{\left\{ -\frac{1}{2} \left[\varphi_1^2 \left(\tau \sum_{i=2}^n \{ y_{i-1}^2 \} + \frac{1}{\omega} \right) - 2\varphi_1 \left(\tau \sum_{i=2}^n \{ -y_{i-1} e^{(-kt_i^c)} + y_{i-1} y_i \} \right) \right] \right\}} \end{aligned}$$

$$\propto e^{\left\{-\frac{1}{2}\left(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega}\right) \left[\varphi_1^2 - 2\varphi_1 \frac{(\tau \sum_{i=2}^n \{-y_{i-1} e^{-kt_i^c} + y_{i-1} y_i\})}{(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega})} \right] \right\}}$$

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

$$\mu = \frac{(\tau \sum_{i=2}^n \{-y_{i-1} e^{-kt_i^c} + y_{i-1} y_i\})}{(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega})}$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega}}$$

Partindo da distribuição *posteriori* conjunta, a condicional completa de k é dada por:

$$p(k|\tau, c, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_c, \mu_c, \varphi_1, \omega, Y) \propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [y_i - e^{-kt_i^c} - \varphi_1 y_{i-1}]^2\right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\sigma_k^2} [k - \mu_k]^2\right\}}$$

$$\propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [e^{(-kt_i^c)^2} - 2y_i e^{-kt_i^c} + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{-kt_i^c}]\right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\sigma_k^2} [k - \mu_k]^2\right\}}$$

Partindo da distribuição *posteriori* conjunta, a condicional completa de c é dada por:

$$p(c|\tau, k, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_c, \mu_c, \varphi_1, \omega, Y) \propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [y_i - e^{-kt_i^c} - \varphi_1 y_{i-1}]^2\right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\sigma_c^2} [c - \mu_c]^2\right\}}$$

$$\propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [e^{(-kt_i^c)^2} - 2y_i e^{-kt_i^c} + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{-kt_i^c}]\right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\sigma_c^2} [c - \mu_c]^2\right\}}$$

As distribuições condicionais completas de k e c , não apresentaram forma conhecida, quando comparadas à distribuições padrão. Deste modo, é necessária a utilização do algoritmo de Metropolis-Hastings para gerar os resultados destes parâmetros.

Modelo Exponencial Simples com Três Parâmetros (ESTP)

Para o modelo de Exponencial Simples com Três Parâmetros (ESTP), ao considerar a dependência residual $y_i = k_0 e^{(-kt_i)} + a + \varphi_1 y_{i-1} + \varepsilon_i$, tem-se, $\varepsilon_i = y_i - k_0 e^{(-kt_i)} - a - \varphi_1 y_{i-1}$. Supondo que $\varepsilon_i \sim N(0; \sigma^2)$, são independentes e identicamente distribuídos (i.i.d.) e, que $(\sigma^2)^{-1} \propto \tau$, para a precisão τ assumiu-se, $\tau \sim \text{Gama}(\alpha; \beta)$, $\varphi_1 \sim N(0; \omega)$, $k \sim N(\mu_k; \sigma_k^2)$, $k_0 \sim N(\mu_0; \sigma_0^2)$, $a \sim U(g, h)$ com μ_k , σ_k^2 , μ_0 e σ_0^2 conhecidos.

A verossimilhança dos dados, é representada por:

$$L(Y|k, k_0, \tau, a, \alpha, \beta, \varphi_1) = \tau^{\frac{n-1}{2}} e^{\left\{-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [y_i - k_0 e^{(-kt_i)} - a - \varphi_1 y_{i-1} - 0]^2\right\}}$$
, em que $Y = (y_1, y_2, \dots, y_n)$, e o somatório inicia-se em 2, pois foi feita uma aproximação devido à estrutura de erros.

Considerando o teorema de Bayes dada pela equação (16), a distribuição a *posteriori* conjunta é proporcional à:

$$p(k, k_0, a, \tau, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \varphi_1, \omega|Y) \propto \tau^{\frac{n-1}{2}} e^{\left\{-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [y_i - k_0 e^{(-kt_i)} - a - \varphi_1 y_{i-1}]^2\right\}} \tau^{\alpha-1} e^{(-\beta\tau)} e^{\left\{-\frac{1}{2\sigma_k^2} [k - \mu_k]^2\right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\sigma_0^2} [k_0 - \mu_0]^2\right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\omega} [\varphi_1 - 0]^2\right\}}$$

Partindo a *posteriori* conjunta a condicional completa de τ é proporcional a seguinte expressão:

$$p(\tau|k, k_0, a, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \varphi_1, \omega, Y) \propto \tau^{\frac{n-1}{2}} e^{\left\{-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [y_i - k_0 e^{(-kt_i)} - a - \varphi_1 y_{i-1}]^2\right\}} \tau^{\alpha-1} e^{(-\beta\tau)}$$

Desenvolvendo o quadrado, e fazendo o rearranjo da equação, tem-se que, $p(\tau|k_1, k_0, \alpha, \beta, a, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \varphi_1, \omega, Y)$ é proporcional:

$$\begin{aligned} &\propto \tau^{\frac{n-1}{2}} e^{\left\{-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [y_i^2 + k_0^2 e^{(-2kt_i)} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 + a^2 - 2y_i k_0 e^{(-kt_i)} - 2y_i a + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} + 2k_0 e^{(-kt_i)} a - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i + 2\varphi_1 y_{i-1} a]\right\}} \tau^{\alpha-1} e^{(-\beta\tau)} \\ &\propto \tau^{\frac{n+2\alpha-1}{2}-1} e^{\left\{-\tau \left[\frac{1}{2} \sum_{i=2}^n (y_i^2 + k_0^2 e^{(-2kt_i)} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 + a^2 - 2y_i k_0 e^{(-kt_i)} - 2y_i a + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} + 2k_0 e^{(-kt_i)} a - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i + 2\varphi_1 y_{i-1} a) + \beta \right]\right\}} \end{aligned}$$

Que representa o núcleo de uma distribuição gama de parâmetros:

$$\alpha^* = \frac{n+2\alpha-1}{2}$$

$$\beta^* = \beta + \frac{1}{2} \sum_{i=2}^n \left(y_i^2 + k_0^2 e^{(-kt_i)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 + a^2 - 2y_i k_0 e^{(-kt_i)} - 2y_i a + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} + 2k_0 e^{(-kt_i)} a - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i + 2\varphi_1 y_{i-1} a \right)$$

Partindo da *posteriori* conjunta, a condicional completa de φ_1 é proporcional à:

$$p(\varphi_1 | k, k_0, \tau, a, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \omega, Y) \propto e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [y_i - k_0 e^{(-kt_i)} - a - \varphi_1 y_{i-1}]^2 \right\}} e^{\left\{ -\frac{1}{2\omega} [\varphi_1]^2 \right\}}$$

Desenvolvendo o quadrado, e fazendo o rearranjo da equação, tem-se que, $p(\varphi_1 | k_1, k_0, a, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \tau, \omega, Y)$ é proporcional:

$$\begin{aligned} &\propto e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [y_i^2 + k_0^2 e^{(-kt_i)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 + a^2 - 2y_i k_0 e^{(-kt_i)} - 2y_i a + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} + 2k_0 e^{(-kt_i)} a - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i + 2\varphi_1 y_{i-1} a] \right\}} e^{\left\{ -\frac{1}{2\omega} [\varphi_1]^2 \right\}} \\ &\propto e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [\varphi_1^2 y_{i-1}^2 + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i + 2\varphi_1 y_{i-1} a] \right\}} e^{\left\{ -\frac{1}{2\omega} [\varphi_1]^2 \right\}} \\ &\propto e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [\varphi_1^2 y_{i-1}^2 + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i + 2\varphi_1 y_{i-1} a] - \frac{\varphi_1^2}{2\omega} \right\}} \end{aligned}$$

Colocando os termos φ_1^2 e φ_1 em evidência:

$$\begin{aligned} &\propto e^{\left\{ \varphi_1^2 \left[-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n (y_{i-1}^2) - \frac{1}{2\omega} \right] - 2\varphi_1 \left[-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [-y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} + y_{i-1} y_i - y_{i-1} a] \right] \right\}} \\ &\propto e^{\left\{ -\frac{1}{2} \left[\varphi_1^2 \left(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega} \right) - 2\varphi_1 \left(\tau \sum_{i=2}^n \{-y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} + y_{i-1} y_i - y_{i-1} a\} \right) \right] \right\}} \\ &\propto e^{\left\{ -\frac{1}{2} \left(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega} \right) \left[\varphi_1^2 - 2\varphi_1 \frac{\left(\tau \sum_{i=2}^n \{-y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} + y_{i-1} y_i - y_{i-1} a\} \right)}{\left(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega} \right)} \right] \right\}} \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} \mu &= \frac{\left(\tau \sum_{i=2}^n \{-y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} + y_{i-1} y_i - y_{i-1} a\} \right)}{\left(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega} \right)} \\ \sigma^2 &= \frac{1}{\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega}} \end{aligned}$$

Partindo da *posteriori* conjunta, a condicional completa de k_0 é proporcional à:

$$p(k_0|k, \varphi_1, \tau, a, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \omega, Y) \propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [y_i - k_0 e^{(-kt_i)} - a - \varphi_1 y_{i-1}]^2\right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\sigma_0^2}[k_0 - \mu_0]^2\right\}}$$

Desenvolvendo o quadrado, e fazendo o rearranjo da equação, tem-se que, $p(k_0|k_1, \varphi_1, \tau, a, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \omega, Y)$ é proporcional à:

$$\begin{aligned} &\propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [y_i^2 + k_0^2 e^{(-2kt_i)} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 + a^2 - 2y_i k_0 e^{(-kt_i)} - 2y_i a + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} + 2k_0 e^{(-kt_i)} a - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i + 2\varphi_1 y_{i-1} a]\right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\sigma_0^2}[k_0 - \mu_0]^2\right\}} \\ &\propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [k_0^2 e^{(-2kt_i)} - 2y_i k_0 e^{(-kt_i)} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} + 2k_0 e^{(-kt_i)} a]\right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\sigma_0^2}[k_0^2 - 2k_0 \mu_0 + \mu_0^2]\right\}} \\ &\propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [k_0^2 e^{(-2kt_i)} - 2y_i k_0 e^{(-kt_i)} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} + 2k_0 e^{(-kt_i)} a] - \frac{[k_0^2 - 2k_0 \mu_0]}{2\sigma_0^2}\right\}} \end{aligned}$$

Colocando os termos k_0^2 e k_0 em evidência:

$$\begin{aligned} &\propto e^{\left\{k_0^2 \left[-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n (e^{(-2kt_i)}) - \frac{1}{2\sigma_0^2}\right] - 2k_0 \left[-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n (y_{i-1} e^{(-kt_i)} - \varphi_1 y_{i-1} e^{(-kt_i)} - e^{(-kt_i)} a) - \frac{\mu_0}{2\sigma_0^2}\right]\right\}} \\ &\propto e^{\left\{-\frac{1}{2}\left[k_0^2 \left(\tau \sum_{i=2}^n \left\{e^{(-2kt_i)}\right\} + \frac{1}{\sigma_0^2}\right) - 2k_0 \left(\tau \sum_{i=2}^n \left\{y_{i-1} e^{(-kt_i)} - \varphi_1 y_{i-1} e^{(-kt_i)} - e^{(-kt_i)} a\right\} + \frac{\mu_0}{\sigma_0^2}\right)\right]\right\}} \\ &\propto e^{\left\{-\frac{1}{2}\left(\tau \sum_{i=2}^n \left\{e^{(-2kt_i)}\right\} + \frac{1}{\sigma_0^2}\right) \left[k_0^2 - 2k_0 \frac{\left(\tau \sum_{i=2}^n \left\{y_{i-1} e^{(-kt_i)} - \varphi_1 y_{i-1} e^{(-kt_i)} - e^{(-kt_i)} a\right\} + \frac{\mu_0}{\sigma_0^2}\right)}{\left(\tau \sum_{i=2}^n \left\{e^{(-2kt_i)}\right\} + \frac{1}{\sigma_0^2}\right)}\right]\right\}} \end{aligned}$$

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

$$\mu = \frac{\left(\tau \sum_{i=2}^n \left\{y_{i-1} e^{(-kt_i)} - \varphi_1 y_{i-1} e^{(-kt_i)} - e^{(-kt_i)} a\right\} + \frac{\mu_0}{\sigma_0^2}\right)}{\left(\tau \sum_{i=2}^n \left\{e^{(-2kt_i)}\right\} + \frac{1}{\sigma_0^2}\right)}$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{\tau \sum_{i=2}^n \left\{e^{(-2kt_i)}\right\} + \frac{1}{\sigma_0^2}}$$

Partindo da *posteriori* conjunta, a condicional completa de a é proporcional à:

$$p(a|k, \varphi_1, k_0, \tau, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \omega, Y) \propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [y_i - k_0 e^{-kt_i} - a - \varphi_1 y_{i-1}]^2\right\}}$$

Desenvolvendo o quadrado, e fazendo o rearranjo da equação, tem-se que, $p(a|k_1, \varphi_1, k_0, \tau, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \omega, Y)$ é proporcional à:

$$\begin{aligned} &\propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [y_i^2 + k_0^2 e^{(-kt_i)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 + a^2 - 2y_i k_0 e^{(-kt_i)} - 2y_i a + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} + 2k_0 e^{(-kt_i)} a - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i + 2\varphi_1 y_{i-1} a]\right\}} \\ &\propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [a^2 - 2y_i a + 2k_0 e^{(-kt_i)} a + 2\varphi_1 y_{i-1} a]\right\}} \\ &\propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2}(a^2(n-1) + \sum_{i=2}^n [-2y_i a + 2k_0 e^{(-kt_i)} a + 2\varphi_1 y_{i-1} a])\right\}} \end{aligned}$$

Colocando os termos a^2 e a em evidência:

$$\begin{aligned} &\propto e^{\left\{a^2\left[-\frac{\tau}{2}(n-1)\right] - 2a\left[-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n (y_i - k_0 e^{(-kt_i)} - \varphi_1 y_{i-1})\right]\right\}} \\ &\propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2}(n-1)\left[a^2 - 2a\frac{\left(\sum_{i=2}^n \{y_i - k_0 e^{(-kt_i)} - \varphi_1 y_{i-1}\}\right)}{(n-1)}\right]\right\}} \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} \mu &= \frac{\left(\sum_{i=2}^n \{y_i - k_0 e^{(-kt_i)} - \varphi_1 y_{i-1}\}\right)}{(n-1)} \\ \sigma^2 &= \frac{1}{\tau(n-1)} \end{aligned}$$

Partindo da distribuição *posteriori* conjunta, a condicional completa de k é dada por:

$$p(k|\tau, a, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \varphi_1, \omega, Y) \propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [y_i - k_0 e^{(-kt_i)} - a - \varphi_1 y_{i-1}]^2\right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\sigma_k^2}[k - \mu_k]^2\right\}}$$

$$\propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n \left[k_0^2 e^{(-kt_i)^2} - 2y_i k_0 e^{(-kt_i)} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} + 2k_0 e^{(-kt_i)} a \right]\right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\sigma_k^2} [k - \mu_k]^2\right\}}$$

A distribuição condicional completa de k não apresenta uma forma conhecida, quando comparada a distribuições padrão. Deste modo, é necessária a utilização do algoritmo de Metropolis-Hastings para gerar os resultados deste parâmetro.

Modelo de Midilli

Para o modelo de Midilli, ao considerar a dependência residual $y_i = k_0 e^{(-kt_i^c)} + at_i + \varphi_1 y_{i-1} + \varepsilon_i$, tem-se, $\varepsilon_i = y_i - k_0 e^{(-kt_i^c)} - at_i - \varphi_1 y_{i-1}$. Supondo que $\varepsilon_i \sim N(0; \sigma^2)$, são independentes e identicamente distribuídos (i.i.d.) e, que $(\sigma^2)^{-1} \propto \tau$, para a precisão τ assumiu-se, $\tau \sim \text{Gama}(\alpha; \beta)$, $\varphi_1 \sim N(0; \omega)$, $k \sim N(\mu_k; \sigma_k^2)$, $k_0 \sim N(\mu_0; \sigma_0^2)$, $a \sim U(g, h)$ com μ_k , σ_k^2 , μ_0 e σ_0^2 conhecidos.

A verossimilhança dos dados, é representada por:

$$L(Y|k, k_0, \tau, a, \alpha, \beta, \varphi_1) = \tau^{\frac{n-1}{2}} e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [y_i - k_0 e^{(-kt_i^c)} - at_i - \varphi_1 y_{i-1} - 0]^2\right\}}, \text{ em que } Y = (y_1, y_2, \dots, y_n), \text{ e o somatório inicia-se em 2, pois foi}$$

feita uma aproximação devido à estrutura de erros.

Considerando o teorema de Bayes dada pela equação (16), a distribuição a *posteriori* conjunta é proporcional à:

$$p(k, k_0, a, \tau, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \varphi_1, \omega|Y) \propto \tau^{\frac{n-1}{2}} e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [y_i - k_0 e^{(-kt_i^c)} - at_i - \varphi_1 y_{i-1}]^2\right\}} \tau^{\alpha-1} e^{(-\beta\tau)} e^{\left\{-\frac{1}{2\sigma_k^2} [k - \mu_k]^2\right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\sigma_0^2} [k_0 - \mu_0]^2\right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\omega} [\varphi_1 - 0]^2\right\}}$$

Partindo a *posteriori* conjunta a condicional completa de τ é proporcional a seguinte expressão:

$$p(\tau|k, k_0, a, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \varphi_1, \omega, Y) \propto \tau^{\frac{n-1}{2}} e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [y_i - k_0 e^{(-kt_i^c)} - at_i - \varphi_1 y_{i-1}]^2\right\}} \tau^{\alpha-1} e^{(-\beta\tau)}$$

Desenvolvendo o quadrado, e fazendo o rearranjo da equação, tem-se que, $p(\tau|k_1, k_0, \alpha, \beta, a, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \varphi_1, \omega, Y)$ é proporcional:

$$\propto \tau^{\frac{n-1}{2}} e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [y_i^2 + k_0^2 e^{(-kt_i^c)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 + a^2 t_i^2 - 2y_i k_0 e^{(-kt_i^c)} - 2y_i a t_i + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i^c)} + 2k_0 e^{(-kt_i^c)} a t_i - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i + 2\varphi_1 y_{i-1} a t_i]\right\}} \tau^{\alpha-1} e^{(-\beta\tau)}$$

$$\propto \tau^{\frac{n+2\alpha-1}{2}-1} e^{\left\{-\tau \left[\frac{1}{2} \sum_{i=2}^n \left(y_i^2 + k_0^2 e^{(-kt_i^c)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 + a^2 t_i^2 - 2y_i k_0 e^{(-kt_i^c)} - 2y_i a t_i + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i^c)} + 2k_0 e^{(-kt_i^c)} a t_i - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i + 2\varphi_1 y_{i-1} a t_i \right) + \beta \right] \right\}}$$

Que representa o núcleo de uma distribuição gama de parâmetros:

$$\alpha^* = \frac{n+2\alpha-1}{2}$$

$$\beta^* = \beta + \frac{1}{2} \sum_{i=2}^n \left(y_i^2 + k_0^2 e^{(-kt_i^c)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 + a^2 t_i^2 - 2y_i k_0 e^{(-kt_i^c)} - 2y_i a t_i + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i^c)} + 2k_0 e^{(-kt_i^c)} a t_i - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i + 2\varphi_1 y_{i-1} a t_i \right)$$

Partindo da *posteriori* conjunta, a condicional completa de φ_1 é proporcional à:

$$p(\varphi_1 | k, k_0, \tau, a, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \omega, Y) \propto e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [y_i - k_0 e^{(-kt_i^c)} - a t_i - \varphi_1 y_{i-1}]^2 \right\}} e^{\left\{ -\frac{1}{2\omega} [\varphi_1]^2 \right\}}$$

Desenvolvendo o quadrado, e fazendo o rearranjo da equação, tem-se que, $p(\varphi_1 | k, k_0, a, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \tau, \omega, Y)$ é proporcional:

$$\propto e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [y_i^2 + k_0^2 e^{(-kt_i^c)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 + a^2 t_i^2 - 2y_i k_0 e^{(-kt_i^c)} - 2y_i a t_i + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i^c)} + 2k_0 e^{(-kt_i^c)} a t_i - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i + 2\varphi_1 y_{i-1} a t_i] \right\}} e^{\left\{ -\frac{1}{2\omega} [\varphi_1]^2 \right\}}$$

$$\propto e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [\varphi_1^2 y_{i-1}^2 + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i^c)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i + 2\varphi_1 y_{i-1} a t_i] \right\}} e^{\left\{ -\frac{1}{2\omega} [\varphi_1]^2 \right\}}$$

$$\propto e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [\varphi_1^2 y_{i-1}^2 + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i^c)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i + 2\varphi_1 y_{i-1} a t_i] - \frac{\varphi_1^2}{2\omega} \right\}}$$

Colocando os termos φ_1^2 e φ_1 em evidência:

$$\propto e^{\left\{ \varphi_1^2 \left[-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n (y_{i-1}^2) - \frac{1}{2\omega} \right] - 2\varphi_1 \left[-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [-y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i^c)} + y_{i-1} y_i - y_{i-1} a t_i] \right] \right\}}$$

$$\propto e^{\left\{ -\frac{1}{2} \left[\varphi_1^2 \left(\tau \sum_{i=2}^n \{ y_{i-1}^2 \} + \frac{1}{\omega} \right) - 2\varphi_1 \left(\tau \sum_{i=2}^n \{ -y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i^c)} + y_{i-1} y_i - y_{i-1} a t_i \} \right) \right] \right\}}$$

$$\propto e^{\left\{ -\frac{1}{2} \left(\tau \sum_{i=2}^n \{ y_{i-1}^2 \} + \frac{1}{\omega} \right) \left[\varphi_1^2 - 2\varphi_1 \frac{\left(\tau \sum_{i=2}^n \{ -y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i^c)} + y_{i-1} y_i - y_{i-1} a t_i \} \right)}{\left(\tau \sum_{i=2}^n \{ y_{i-1}^2 \} + \frac{1}{\omega} \right)} \right] \right\}}$$

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

$$\mu = \frac{(\tau \sum_{i=2}^n \{-y_{i-1} k_0 e^{-kt_i^c} + y_{i-1} y_i - y_{i-1} a t_i\})}{(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega})}$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega}}$$

Partindo da *posteriori* conjunta, a condicional completa de k_0 é proporcional à:

$$p(k_0 | k, \varphi_1, \tau, a, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \omega, Y) \propto e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [y_i - k_0 e^{-kt_i^c} - a t_i - \varphi_1 y_{i-1}]^2 \right\}} e^{\left\{ -\frac{1}{2\sigma_0^2} [k_0 - \mu_0]^2 \right\}}$$

Desenvolvendo o quadrado, e fazendo o rearranjo da equação, tem-se que, $p(k_0 | k_1, \varphi_1, \tau, a, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \omega, Y)$ é proporcional à:

$$\propto e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [y_i^2 + k_0^2 e^{-kt_i^c} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 + a^2 t_i^2 - 2y_i k_0 e^{-kt_i^c} - 2y_i a t_i + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{-kt_i^c} + 2k_0 e^{-kt_i^c} a t_i - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i + 2\varphi_1 y_{i-1} a t_i] \right\}} e^{\left\{ -\frac{1}{2\sigma_0^2} [k_0 - \mu_0]^2 \right\}}$$

$$\propto e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [k_0^2 e^{-kt_i^c} - 2y_i k_0 e^{-kt_i^c} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{-kt_i^c} + 2k_0 e^{-kt_i^c} a t_i] \right\}} e^{\left\{ -\frac{1}{2\sigma_0^2} [k_0^2 - 2k_0 \mu_0 + \mu_0^2] \right\}}$$

$$\propto e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [k_0^2 e^{-kt_i^c} - 2y_i k_0 e^{-kt_i^c} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{-kt_i^c} + 2k_0 e^{-kt_i^c} a t_i] - \frac{[k_0^2 - 2k_0 \mu_0]}{2\sigma_0^2} \right\}}$$

Colocando os termos k_0^2 e k_0 em evidência:

$$\propto e^{\left\{ k_0^2 \left[-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n (e^{-kt_i^c}) - \frac{1}{2\sigma_0^2} \right] - 2k_0 \left[-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n (y_{i-1} e^{-kt_i^c} - \varphi_1 y_{i-1} e^{-kt_i^c} - e^{-kt_i^c} a t_i) - \frac{\mu_0}{2\sigma_0^2} \right] \right\}}$$

$$\propto e^{\left\{ -\frac{1}{2} \left[k_0^2 \left(\tau \sum_{i=2}^n \{e^{-kt_i^c}\} + \frac{1}{\sigma_0^2} \right) - 2k_0 \left(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1} e^{-kt_i^c} - \varphi_1 y_{i-1} e^{-kt_i^c} - e^{-kt_i^c} a t_i\} + \frac{\mu_0}{\sigma_0^2} \right) \right] \right\}}$$

$$\propto e^{\left\{ -\frac{1}{2} \left(\tau \sum_{i=2}^n \{e^{-kt_i^c}\} + \frac{1}{\sigma_0^2} \right) \left[k_0^2 - 2k_0 \frac{\left(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1} e^{-kt_i^c} - \varphi_1 y_{i-1} e^{-kt_i^c} - e^{-kt_i^c} a t_i\} + \frac{\mu_0}{\sigma_0^2} \right)}{\left(\tau \sum_{i=2}^n \{e^{-kt_i^c}\} + \frac{1}{\sigma_0^2} \right)} \right] \right\}}$$

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

$$\mu = \frac{\left(\tau \sum_{i=2}^n \{ y_{i-1} e^{(-kt_i^c)} - \varphi_1 y_{i-1} e^{(-kt_i^c)} - e^{(-kt_i^c)} a t_i \} + \frac{\mu_0}{\sigma_0^2} \right)}{\left(\tau \sum_{i=2}^n \{ e^{(-kt_i^c)^2} \} + \frac{1}{\sigma_0^2} \right)}$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{\tau \sum_{i=2}^n \{ e^{(-kt_i^c)^2} \} + \frac{1}{\sigma_0^2}}$$

Partindo da *posteriori* conjunta, a condicional completa de a é proporcional à:

$$p(a|k, \varphi_1, k_0, \tau, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \omega, Y) \propto \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [y_i - k_0 e^{(-kt_i^c)} - a t_i - \varphi_1 y_{i-1}]^2 \right\}$$

Desenvolvendo o quadrado, e fazendo o rearranjo da equação, tem-se que, $p(a|k, \varphi_1, k_0, \tau, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \omega, Y)$ é proporcional à:

$$\begin{aligned} &\propto e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [y_i^2 + k_0^2 e^{(-kt_i^c)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 + a^2 t_i^2 - 2y_i k_0 e^{(-kt_i^c)} - 2y_i a t_i + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i^c)} + 2k_0 e^{(-kt_i^c)} a t_i - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i + 2\varphi_1 y_{i-1} a t_i] \right\}} \\ &\propto e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [a^2 t_i^2 - 2y_i a t_i + 2k_0 e^{(-kt_i^c)} a t_i + 2\varphi_1 y_{i-1} a t_i] \right\}} \\ &\propto e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} (a^2 \sum_{i=2}^n (t_i^2) + \sum_{i=2}^n [-2y_i a t_i + 2k_0 e^{(-kt_i^c)} a t_i + 2\varphi_1 y_{i-1} a t_i]) \right\}} \end{aligned}$$

Colocando os termos a^2 e a em evidência:

$$\begin{aligned} &\propto e^{\left\{ a^2 \left[-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n (t_i^2) \right] - 2a \left[-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n (y_i t_i - k_0 e^{(-kt_i^c)} t_i - \varphi_1 y_{i-1} t_i) \right] \right\}} \\ &\propto e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n (t_i^2) \cdot \left[a^2 - 2a \frac{\left(\sum_{i=2}^n (y_i t_i - k_0 e^{(-kt_i^c)} t_i - \varphi_1 y_{i-1} t_i) \right)}{\sum_{i=2}^n (t_i^2)} \right] \right\}} \end{aligned}$$

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

$$\mu = \frac{\left(\sum_{i=2}^n (y_i t_i - k_0 e^{(-kt_i^c)} t_i - \varphi_1 y_{i-1} t_i) \right)}{\sum_{i=2}^n (t_i^2)}$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{\tau \sum_{i=2}^n (t_i^2)}$$

Partindo da distribuição *posteriori* conjunta, a condicional completa de k é dada por:

$$p(k|\tau, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \varphi_1, \omega, Y) \propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [y_i - k_0 e^{(-kt_i^c)} - at_i - \varphi_1 y_{i-1}]^2\right\}} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma_k^2}[k - \mu_k]^2\right\}$$

$$\propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [k_0^2 e^{(-kt_i^c)^2} - 2y_i k_0 e^{(-kt_i^c)} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i^c)} + 2k_0 e^{(-kt_i^c)} at_i]\right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\sigma_k^2}[k - \mu_k]^2\right\}}$$

A distribuição condicional completa de k não apresenta uma forma conhecida, quando comparada a distribuições padrão. Deste modo, é necessária a utilização do algoritmo de Metropolis-Hastings para gerar os resultados deste parâmetro.

Modelo de Dois Termos

Para o modelo de Dois Termos, ao considerar a dependência residual $y_i = k_0 e^{(-k_1 t_i)} + k_2 e^{(-k_3 t_i)} + \varphi_1 y_{i-1} + \varepsilon_i$, tem-se, $\varepsilon_i = y_i - k_0 e^{(-k_1 t_i)} - k_2 e^{(-k_3 t_i)} - \varphi_1 y_{i-1}$. Supondo que $\varepsilon_i \sim N(0; \sigma^2)$, são independentes e identicamente distribuídos (i.i.d.) e, que $(\sigma^2)^{-1} \propto \tau$, para a precisão τ assumiu-se, $\tau \sim \text{Gama}(\alpha; \beta)$, $\varphi_1 \sim N(0; \omega)$, $k_1 \sim N(\mu_k; \sigma_k^2)$, $k_0 \sim N(\mu_0; \sigma_0^2)$, $k_2 \sim N(\mu_2; \sigma_2^2)$, $k_3 \sim N(\mu_3; \sigma_3^2)$ com $\mu_k, \mu_2, \mu_3, \sigma_2^2, \sigma_3^2, \sigma_k^2, \mu_0$ e σ_0^2 conhecidos.

A verossimilhança dos dados, é representada por:

$$L(Y|k_1, k_0, k_2, k_3, \tau, \alpha, \beta, \varphi_1) = \tau^{\frac{n-1}{2}} e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [y_i - k_0 e^{(-k_1 t_i)} - k_2 e^{(-k_3 t_i)} - \varphi_1 y_{i-1} - 0]^2\right\}}, \text{ em que } Y = (y_1, y_2, \dots, y_n), \text{ e o somatório inicia-se em}$$

2, pois foi feita uma aproximação devido à estrutura de erros.

Considerando o teorema de Bayes, dado pela equação (16), a distribuição a *posteriori* conjunta é proporcional à:

$$p(k_1, k_0, k_2, k_3, \tau, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \varphi_1, \omega|Y) \propto$$

$$\tau^{\frac{n-1}{2}} e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [y_i - k_0 e^{(-k_1 t_i)} - k_2 e^{(-k_3 t_i)} - \varphi_1 y_{i-1}]^2\right\}} \tau^{\alpha-1} e^{(-\beta\tau)} e^{\left\{-\frac{1}{2\sigma_k^2}[k_1 - \mu_k]^2\right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\sigma_0^2}[k_0 - \mu_0]^2\right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\omega}[\varphi_1 - 0]^2\right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\sigma_2^2}[k_2 - \mu_2]^2\right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\sigma_3^2}[k_3 - \mu_3]^2\right\}}$$

Partindo a *posteriori* conjunta a condicional completa de τ é proporcional a seguinte expressão:

$$p(\tau|k_1, k_0, k_2, k_3, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \varphi_1, \omega, Y) \propto \tau^{\frac{n-1}{2}} e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [y_i - k_0 e^{(-k_1 t_i)} - k_2 e^{(-k_3 t_i)} - \varphi_1 y_{i-1}]^2\right\}} \tau^{\alpha-1} e^{(-\beta\tau)}$$

Desenvolvendo o quadrado, e fazendo o rearranjo da equação, tem-se que, $p(\tau|k_1, k_0, k_2, k_3, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \varphi_1, \omega, Y)$ é proporcional:

\propto

$$\tau^{\frac{n-1}{2}} e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [y_i^2 + k_0^2 e^{(-k_1 t_i)^2} + k_2^2 e^{(-k_3 t_i)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_i k_0 e^{(-k_1 t_i)} - 2y_i k_2 e^{(-k_3 t_i)} + 2k_0 k_2 e^{[-t_i(k_1+k_3)]} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-k_1 t_i)} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_2 e^{(-k_3 t_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i]\right\}} \tau^{\alpha-1} e^{(-\beta\tau)}$$

\propto

$$\tau^{\frac{n+2\alpha-1}{2}-1} e^{\left\{-\tau\left[\frac{1}{2}\sum_{i=2}^n (y_i^2 + k_0^2 e^{(-k_1 t_i)^2} + k_2^2 e^{(-k_3 t_i)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_i k_0 e^{(-k_1 t_i)} - 2y_i k_2 e^{(-k_3 t_i)} + 2k_0 k_2 e^{[-t_i(k_1+k_3)]} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-k_1 t_i)} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_2 e^{(-k_3 t_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i) + \beta\right]\right\}}$$

Que representa o núcleo de uma distribuição gama de parâmetros:

$$\alpha^* = \frac{n+2\alpha-1}{2}$$

$$\beta^* =$$

$$\beta + \frac{1}{2}\sum_{i=2}^n \left(y_i^2 + k_0^2 e^{(-k_1 t_i)^2} + k_2^2 e^{(-k_3 t_i)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_i k_0 e^{(-k_1 t_i)} - 2y_i k_2 e^{(-k_3 t_i)} + 2k_0 k_2 e^{[-t_i(k_1+k_3)]} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-k_1 t_i)} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_2 e^{(-k_3 t_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i \right)$$

Partindo da *posteriori* conjunta, a condicional completa de φ_1 é proporcional à:

$$p(\varphi_1|\tau, k_1, k_0, k_2, k_3, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \omega, Y) \propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [y_i - k_0 e^{(-k_1 t_i)} - k_2 e^{(-k_3 t_i)} - \varphi_1 y_{i-1}]^2\right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\omega}[\varphi_1]^2\right\}}$$

Desenvolvendo o quadrado, e fazendo o rearranjo da equação, tem-se que, $p(\varphi_1|\tau, k_1, k_0, k_2, k_3, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \omega, Y)$ é proporcional:

\propto

$$e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [y_i^2 + k_0^2 e^{(-k_1 t_i)^2} + k_2^2 e^{(-k_3 t_i)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_i k_0 e^{(-k_1 t_i)} - 2y_i k_2 e^{(-k_3 t_i)} + 2k_0 k_2 e^{[-t_i(k_1+k_3)]} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-k_1 t_i)} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_2 e^{(-k_3 t_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i]\right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\omega}[\varphi_1]^2\right\}}$$

$$\propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [\varphi_1^2 y_{i-1}^2 + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-k_1 t_i)} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_2 e^{(-k_3 t_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i]\right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\omega}[\varphi_1]^2\right\}}$$

$$\propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n \left[\varphi_1^2 y_{i-1}^2 + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-k_1 t_i)} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_2 e^{(-k_3 t_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i \right] - \frac{\varphi_1^2}{2\omega} \right\}}$$

Colocando os termos φ_1^2 e φ_1 em evidência:

$$\propto e^{\left\{ \varphi_1^2 \left[-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n (y_{i-1}^2) - \frac{1}{2\omega} \right] - 2\varphi_1 \left[-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n \left[-y_{i-1} k_0 e^{(-k_1 t_i)} - y_{i-1} k_2 e^{(-k_3 t_i)} + y_{i-1} y_i \right] \right] \right\}}$$

$$\propto e^{\left\{ -\frac{1}{2} \left[\varphi_1^2 \left(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega} \right) - 2\varphi_1 \left(\tau \sum_{i=2}^n \left\{ -y_{i-1} k_0 e^{(-k_1 t_i)} - y_{i-1} k_2 e^{(-k_3 t_i)} + y_{i-1} y_i \right\} \right) \right] \right\}}$$

$$\propto e^{\left\{ -\frac{1}{2} \left(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} - \frac{1}{\omega} \right) \left[\varphi_1^2 - 2\varphi_1 \frac{\left(\tau \sum_{i=2}^n \left\{ -y_{i-1} k_0 e^{(-k_1 t_i)} - y_{i-1} k_2 e^{(-k_3 t_i)} + y_{i-1} y_i \right\} \right)}{\left(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega} \right)} \right] \right\}}$$

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

$$\mu = \frac{\left(\tau \sum_{i=2}^n \left\{ -y_{i-1} k_0 e^{(-k_1 t_i)} - y_{i-1} k_2 e^{(-k_3 t_i)} + y_{i-1} y_i \right\} \right)}{\left(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega} \right)}$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega}}$$

Partindo da *posteriori* conjunta, a condicional completa de k_0 é proporcional à:

$$p(k_0 | \varphi_1, \tau, k_1, k_2, k_3, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \omega, Y) \propto e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n \left[y_i - k_0 e^{(-k_1 t_i)} - k_2 e^{(-k_3 t_i)} - \varphi_1 y_{i-1} \right]^2 \right\}} e^{\left\{ -\frac{1}{2\sigma_0^2} [k_0 - \mu_0]^2 \right\}}$$

Desenvolvendo o quadrado, e fazendo o rearranjo da equação, tem-se que, $p(k_0 | \varphi_1, \tau, k_1, k_2, k_3, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \omega, Y)$ é proporcional:

\propto

$$e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n \left[y_i^2 + k_0^2 e^{(-k_1 t_i)^2} + k_2^2 e^{(-k_3 t_i)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_i k_0 e^{(-k_1 t_i)} - 2y_i k_2 e^{(-k_3 t_i)} + 2k_0 k_2 e^{[-t_i(k_1 + k_3)]} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-k_1 t_i)} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_2 e^{(-k_3 t_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i \right] \right\}} e^{\left\{ -\frac{1}{2\sigma_0^2} [k_0 - \mu_0]^2 \right\}}$$

$$\propto e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n \left[k_0^2 e^{(-k_1 t_i)^2} - 2y_i k_0 e^{(-k_1 t_i)} + 2k_0 k_2 e^{[-t_i(k_1 + k_3)]} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-k_1 t_i)} \right] \right\}} e^{\left\{ -\frac{1}{2\sigma_0^2} [k_0^2 - 2k_0 \mu_0 + \mu_0^2] \right\}}$$

$$\propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n \left[k_0^2 e^{(-k_1 t_i)^2} - 2y_i k_0 e^{(-k_1 t_i)} + 2k_0 k_2 e^{-t_i(k_1+k_3)} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-k_1 t_i)} \right] - \frac{[k_0^2 - 2k_0 \mu_0]}{2\sigma_0^2} \right\}}$$

Colocando os termos k_0^2 e k_0 em evidência:

$$\propto e^{\left\{ k_0^2 \left[-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n \left(e^{(-k_1 t_i)^2} \right) - \frac{1}{2\sigma_0^2} \right] - 2k_0 \left[-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n \left(y_{i-1} e^{(-k_1 t_i)} - k_2 e^{-t_i(k_1+k_3)} \right) - \varphi_1 y_{i-1} e^{(-k_1 t_i)} - \frac{\mu_0}{2\sigma_0^2} \right] \right\}}$$

$$\propto e^{\left\{ -\frac{1}{2} \left[k_0^2 \left(\tau \sum_{i=2}^n \left\{ e^{(-k_1 t_i)^2} \right\} + \frac{1}{\sigma_0^2} \right) - 2k_0 \left(\tau \sum_{i=2}^n \left\{ y_{i-1} e^{(-k_1 t_i)} - k_2 e^{-t_i(k_1+k_3)} \right\} - \varphi_1 y_{i-1} e^{(-k_1 t_i)} \right) + \frac{\mu_0}{\sigma_0^2} \right] \right\}}$$

$$\propto e^{\left\{ -\frac{1}{2} \left(\tau \sum_{i=2}^n \left\{ e^{(-k_1 t_i)^2} \right\} + \frac{1}{\sigma_0^2} \right) \left[k_0^2 - 2k_0 \frac{\left(\tau \sum_{i=2}^n \left\{ y_{i-1} e^{(-k_1 t_i)} - k_2 e^{-t_i(k_1+k_3)} \right\} - \varphi_1 y_{i-1} e^{(-k_1 t_i)} \right) + \frac{\mu_0}{\sigma_0^2}}{\left(\tau \sum_{i=2}^n \left\{ e^{(-k_1 t_i)^2} \right\} + \frac{1}{\sigma_0^2} \right)} \right] \right\}}$$

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

$$\mu = \frac{\left(\tau \sum_{i=2}^n \left\{ y_{i-1} e^{(-k_1 t_i)} - k_2 e^{-t_i(k_1+k_3)} \right\} - \varphi_1 y_{i-1} e^{(-k_1 t_i)} \right) + \frac{\mu_0}{\sigma_0^2}}{\left(\tau \sum_{i=2}^n \left\{ e^{(-k_1 t_i)^2} \right\} + \frac{1}{\sigma_0^2} \right)}$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{\tau \sum_{i=2}^n \left\{ e^{(-k_1 t_i)^2} \right\} + \frac{1}{\sigma_0^2}}$$

Partindo da *posteriori* conjunta, a condicional completa de k_2 é proporcional à:

$$p(k_2 | \varphi_1, \tau, k_1, k_0, k_3, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \omega, Y) \propto e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n \left[y_i - k_0 e^{(-k_1 t_i)} - k_2 e^{(-k_3 t_i)} - \varphi_1 y_{i-1} \right]^2 \right\}} e^{\left\{ -\frac{1}{2\sigma_2^2} [k_2 - \mu_2]^2 \right\}}$$

Desenvolvendo o quadrado, e fazendo o rearranjo da equação, tem-se que, $p(k_2 | \varphi_1, \tau, k_1, k_0, k_3, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \omega, Y)$ é proporcional:

\propto

$$e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n \left[y_i^2 + k_0^2 e^{(-k_1 t_i)^2} + k_2^2 e^{(-k_3 t_i)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_i k_0 e^{(-k_1 t_i)} - 2y_i k_2 e^{(-k_3 t_i)} + 2k_0 k_2 e^{-t_i(k_1+k_3)} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-k_1 t_i)} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_2 e^{(-k_3 t_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i \right] \right\}} e^{\left\{ -\frac{1}{2\sigma_2^2} [k_2 - \mu_2]^2 \right\}}$$

$$\propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n \left[k_2^2 e^{(-k_3 t_i)^2} - 2y_i k_2 e^{(-k_3 t_i)} + 2k_0 k_2 e^{-t_i(k_1+k_3)} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_2 e^{(-k_3 t_i)} \right] \right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\sigma_2^2} [k_2^2 - 2k_2 \mu_2 + \mu_2^2] \right\}}$$

$$\propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n \left[k_2^2 e^{(-k_3 t_i)^2} - 2y_i k_2 e^{(-k_3 t_i)} + 2k_0 k_2 e^{-t_i(k_1+k_3)} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_2 e^{(-k_3 t_i)} \right] - \frac{[k_2^2 - 2k_2 \mu_2]}{2\sigma_2^2} \right\}}$$

Colocando os termos k_2^2 e k_2 em evidência:

$$\propto e^{\left\{ k_2^2 \left[-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n \left(e^{(-k_3 t_i)^2} \right) - \frac{1}{2\sigma_2^2} \right] - 2k_2 \left[\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n \left(y_{i-1} e^{(-k_3 t_i)} - k_0 e^{-t_i(k_1+k_3)} - \varphi_1 y_{i-1} e^{(-k_3 t_i)} \right) - \frac{\mu_2}{2\sigma_2^2} \right] \right\}}$$

$$\propto e^{\left\{ -\frac{1}{2} \left[k_2^2 \left(\tau \sum_{i=2}^n \left\{ e^{(-k_3 t_i)^2} \right\} + \frac{1}{\sigma_2^2} \right) - 2k_2 \left(\tau \sum_{i=2}^n \left\{ y_{i-1} e^{(-k_3 t_i)} - k_0 e^{-t_i(k_1+k_3)} - \varphi_1 y_{i-1} e^{(-k_3 t_i)} \right\} + \frac{\mu_2}{\sigma_2^2} \right) \right] \right\}}$$

$$\propto e^{\left\{ -\frac{1}{2} \left(\tau \sum_{i=2}^n \left\{ e^{(-k_3 t_i)^2} \right\} + \frac{1}{\sigma_2^2} \right) \left[\frac{\left(\tau \sum_{i=2}^n \left\{ y_{i-1} e^{(-k_3 t_i)} - k_0 e^{-t_i(k_1+k_3)} - \varphi_1 y_{i-1} e^{(-k_3 t_i)} \right\} + \frac{\mu_2}{\sigma_2^2} \right)}{\left(\tau \sum_{i=2}^n \left\{ e^{(-k_3 t_i)^2} \right\} + \frac{1}{\sigma_2^2} \right)} \right] \right\}}$$

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

$$\mu = \frac{\left(\tau \sum_{i=2}^n \left\{ y_{i-1} e^{(-k_3 t_i)} - k_0 e^{-t_i(k_1+k_3)} - \varphi_1 y_{i-1} e^{(-k_3 t_i)} \right\} + \frac{\mu_2}{\sigma_2^2} \right)}{\left(\tau \sum_{i=2}^n \left\{ e^{(-k_3 t_i)^2} \right\} + \frac{1}{\sigma_2^2} \right)}$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{\tau \sum_{i=2}^n \left\{ e^{(-k_3 t_i)^2} \right\} + \frac{1}{\sigma_2^2}}$$

Partindo da distribuição *posteriori* conjunta, a condicional completa de k_3 é dada por:

$$p(k_3 | \varphi_1, \tau, k_0, k_2, k_1, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \omega, Y) \propto$$

$$e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n \left[y_i^2 + k_0^2 e^{(-k_1 t_i)^2} + k_2^2 e^{(-k_3 t_i)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_i k_0 e^{(-k_1 t_i)} - 2y_i k_2 e^{(-k_3 t_i)} + 2k_0 k_2 e^{-t_i(k_1+k_3)} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-k_1 t_i)} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_2 e^{(-k_3 t_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_{t_i} \right] \right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\sigma_k^2} [k_1 - \mu_k]^2 \right\}}$$

$$\propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n \left[k_2 e^{(-k_3 t_i)^2} - 2y_i k_2 e^{(-k_3 t_i)} + 2k_0 k_2 e^{-t_i(k_1+k_3)} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_2 e^{(-k_3 t_i)} \right] \right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\sigma_3^2} [k_3 - \mu_3]^2 \right\}}$$

Partindo da distribuição *posteriori* conjunta, a condicional completa de k_1 é dada por:

$$p(k_1 | \varphi_1, \tau, k_0, k_2, k_3, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \omega, Y) \propto$$

$$e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n \left[y_i^2 + k_0^2 e^{(-k_1 t_i)^2} + k_2^2 e^{(-k_3 t_i)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_i k_0 e^{(-k_1 t_i)} - 2y_i k_2 e^{(-k_3 t_i)} + 2k_0 k_2 e^{-t_i(k_1+k_3)} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-k_1 t_i)} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_2 e^{(-k_3 t_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i \right] \right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\sigma_k^2} [k_1 - \mu_k]^2 \right\}}$$

$$\propto e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n \left[k_0 e^{(-k_1 t_i)^2} - 2y_i k_0 e^{(-k_1 t_i)} + 2k_0 k_2 e^{-t_i(k_1+k_3)} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-k_1 t_i)} \right] \right\}} e^{\left\{-\frac{1}{2\sigma_k^2} [k_1 - \mu_k]^2 \right\}}$$

As distribuições condicionais completas de k_1 e k_3 não apresentaram forma conhecida, quando comparadas à distribuições padrão. Deste modo, é necessária a utilização do algoritmo de Metropolis-Hastings para gerar os resultados destes parâmetros.

Modelo Aproximação da Difusão

Para o modelo Aproximação da Difusão, ao considerar a dependência residual $y_i = k_0 e^{(-kt_i)} + (1 - k_0) e^{(-kbt_i)} + \varphi_1 y_{i-1} + \varepsilon_i$, tem-se, $\varepsilon_i = y_i - k_0 e^{(-kt_i)} - (1 - k_0) e^{(-kbt_i)} - \varphi_1 y_{i-1}$. Supondo que $\varepsilon_i \sim N(0; \sigma^2)$, são independentes e identicamente distribuídos (i.i.d.) e, que $(\sigma^2)^{-1} \propto \tau$, para a precisão τ assumiu-se, $\tau \sim \text{Gama}(\alpha; \beta)$, $\varphi_1 \sim N(0; \omega)$, $k \sim N(\mu_k; \sigma_k^2)$, $k_0 \sim N(\mu_0; \sigma_0^2)$, $b \sim U(g, h)$ com μ_k , σ_k^2 , μ_0 e σ_0^2 conhecidos.

A verossimilhança dos dados, é representada por:

$$L(Y | k, k_0, b, \tau, \alpha, \beta, \varphi_1) = \tau^{\frac{n-1}{2}} e^{\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n \left[y_i - k_0 e^{(-kt_i)} - e^{(-kbt_i)} + k_0 e^{(-kbt_i)} - \varphi_1 y_{i-1} - 0 \right]^2 \right\}}, \text{ em que } Y = (y_1, y_2, \dots, y_n), \text{ e o somatório inicia-se em}$$

2, pois foi feita uma aproximação devido à estrutura de erros.

Considerando o teorema de Bayes dado pela equação (16), a distribuição a *posteriori* conjunta é proporcional à:

$$p(k, k_0, b, \tau, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \varphi_1, \omega | Y) \propto$$

$$\tau^{\frac{n-1}{2}} e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [y_i - k_0 e^{(-kt_i)} - e^{(-kbt_i)} + k_0 e^{(-kbt_i)} - \varphi_1 y_{i-1}]^2 \right\}} \tau^{\alpha-1} e^{(-\beta\tau)} e^{\left\{ -\frac{1}{2\sigma_k^2} [k - \mu_k]^2 \right\}} e^{\left\{ -\frac{1}{2\sigma_0^2} [k_0 - \mu_0]^2 \right\}} e^{\left\{ -\frac{1}{2\omega} [\varphi_1 - 0]^2 \right\}}$$

Partindo a *posteriori* conjunta a condicional completa de τ é proporcional a seguinte expressão:

$$p(\tau | k, k_0, k_2, k_3, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \varphi_1, \omega, Y) \propto \tau^{\frac{n-1}{2}} e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [y_i - k_0 e^{(-kt_i)} - e^{(-kbt_i)} + k_0 e^{(-kbt_i)} - \varphi_1 y_{i-1}]^2 \right\}} \tau^{\alpha-1} e^{(-\beta\tau)}$$

Desenvolvendo o quadrado, e fazendo o rearranjo da equação, tem-se que, $p(\tau | k, k_0, b, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \varphi_1, \omega, Y)$ é:

$$\propto \tau^{\frac{n-1}{2}} e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n \left[y_i^2 + k_0^2 e^{(-kt_i)^2} + e^{(-kbt_i)^2} + k_0^2 e^{(-kbt_i)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_i k_0 e^{(-kt_i)} - 2y_i e^{(-kbt_i)} + 2y_i k_0 e^{[-t_i b k]} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i + 2k_0 e^{[-kt_i(1+b)]} - 2k_0^2 e^{[-kt_i(1+b)]} - 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} - 2k_0 e^{(-kt_i)^2} + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{(-kbt_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kbt_i)} \right] \right\}} \tau^{\alpha-1} e^{(-\beta\tau)}$$

$$\propto \tau^{\frac{n+2\alpha-1}{2}-1} e^{\left\{ -\tau \left[\frac{1}{2} \sum_{i=2}^n \left(y_i^2 + k_0^2 e^{(-kt_i)^2} + e^{(-kbt_i)^2} + k_0^2 e^{(-kbt_i)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_i k_0 e^{(-kt_i)} - 2y_i e^{(-kbt_i)} + 2y_i k_0 e^{[-t_i b k]} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i + 2k_0 e^{[-kt_i(1+b)]} - 2k_0^2 e^{[-kt_i(1+b)]} - 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} - 2k_0 e^{(-kt_i)^2} + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{(-kbt_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kbt_i)} \right) + \beta \right] \right\}}$$

Que representa o núcleo de uma distribuição gama de parâmetros:

$$\alpha^* = \frac{n+2\alpha-1}{2}$$

$$\beta^* = \beta + \frac{1}{2} \sum_{i=2}^n \left(y_i^2 + k_0^2 e^{(-kt_i)^2} + e^{(-kbt_i)^2} + k_0^2 e^{(-kbt_i)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_i k_0 e^{(-kt_i)} - 2y_i e^{(-kbt_i)} + 2y_i k_0 e^{[-t_i b k]} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i + 2k_0 e^{[-kt_i(1+b)]} - 2k_0^2 e^{[-kt_i(1+b)]} - 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} - 2k_0 e^{(-kt_i)^2} + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{(-kbt_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kbt_i)} \right)$$

Partindo da *posteriori* conjunta, a condicional completa de φ_1 é proporcional à:

$$p(\varphi_1 | \tau, k, k_0, b, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \omega, Y) \propto e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [y_i - k_0 e^{(-kkt_i)} - e^{(-kbt_i)} + k_0 e^{(-kbt_i)} - \varphi_1 y_{i-1}]^2 \right\}} e^{\left\{ -\frac{1}{2\omega} [\varphi_1]^2 \right\}}$$

Desenvolvendo o quadrado, e fazendo o rearranjo da equação, tem-se que, $p(\varphi_1 | \tau, k, k_0, b, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \omega, Y)$ é proporcional:

$$\propto e^{\left\{ \frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n \left[y_i^2 + k_0^2 e^{(-kt_i)^2} + e^{(-kbt_i)^2} + k_0^2 e^{(-bkt_i)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_i k_0 e^{(-kt_i)} - 2y_i e^{(-bkt_i)} + 2y_i k_0 e^{[-t_i b k]} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i + 2k_0 e^{[-kt_i(1+b)]} - 2k_0^2 e^{[-kt_i(1+b)]} - 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} - 2k_0 e^{(-kt_i)^2} + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{(-kbt_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kbt_i)} \right] \right\}} e^{\left\{ -\frac{1}{2\omega} [\varphi_1]^2 \right\}}$$

$$\propto e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n \left[\varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2\varphi_1 y_{i-1} y_{t_i} - 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{(-kbt_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kbt_i)} \right] \right\}} e^{\left\{ -\frac{1}{2\omega} [\varphi_1]^2 \right\}}$$

$$\propto e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n \left[\varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2\varphi_1 y_{i-1} y_{t_i} - 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{(-kbt_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kbt_i)} \right] - \frac{\varphi_1^2}{2\omega} \right\}}$$

Colocando os termos φ_1^2 e φ_1 em evidência:

$$\propto e^{\left\{ \varphi_1^2 \left[-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n (y_{i-1}^2) - \frac{1}{2\omega} \right] - 2\varphi_1 \left[-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n \left[y_{i-1} y_i + y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} - y_{i-1} e^{(-kbt_i)} + y_{i-1} k_0 e^{(-kbt_i)} \right] \right] \right\}}$$

$$\propto e^{\left\{ -\frac{1}{2} \left[\varphi_1^2 \left(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega} \right) - 2\varphi_1 \left(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1} y_i + y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} - y_{i-1} e^{(-kbt_i)} + y_{i-1} k_0 e^{(-kbt_i)} \} \right) \right] \right\}}$$

$$\propto e^{\left\{ -\frac{1}{2} \left(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega} \right) \left[\varphi_1^2 - 2\varphi_1 \frac{\left(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1} y_i + y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} - y_{i-1} e^{(-kbt_i)} + y_{i-1} k_0 e^{(-kbt_i)} \} \right)}{\left(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega} \right)} \right] \right\}}$$

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

$$\mu = \frac{\left(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1} y_i + y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} - y_{i-1} e^{(-kbt_i)} + y_{i-1} k_0 e^{(-kbt_i)} \} \right)}{\left(\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega} \right)}$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{\tau \sum_{i=2}^n \{y_{i-1}^2\} + \frac{1}{\omega}}$$

Partindo da *posteriori* conjunta, a condicional completa de k_0 é proporcional à:

$$p(k_0 | \varphi_1, \tau, k, b, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \omega, Y) \propto e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n \left[y_i - k_0 e^{(-kt_i)} - e^{(-kbt_i)} + k_0 e^{(-kbt_i)} - \varphi_1 y_{i-1} \right]^2 \right\}} e^{\left\{ -\frac{1}{2\sigma_0^2} [k_0 - \mu_0]^2 \right\}}$$

Desenvolvendo o quadrado, e fazendo o rearranjo da equação, tem-se que, $p(k_0 | \varphi_1, \tau, k, b, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \omega, Y)$ é proporcional:

$$\begin{aligned}
& \propto \\
& e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n \left[\begin{aligned} & y_i^2 + k_0^2 e^{(-kti)^2} + e^{(-kbt_i)^2} + k_0^2 e^{(-bkt_i)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_i k_0 e^{(-kti)} - 2y_i e^{(-kbt_i)} + 2y_i k_0 e^{[-t_i bk]} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i + 2k_0 e^{[-kti(1+b)]} - 2k_0^2 e^{[-kti(1+b)]} - \\ & 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kti)} - 2k_0 e^{(-kti)^2} + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{(-kbt_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kbt_i)} \end{aligned} \right] \right\}} e^{\left\{ -\frac{1}{2\sigma_0^2} [k_0 - \mu_0]^2 \right\}} \\
& \propto e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n \left[k_0^2 e^{(-kti)^2} + k_0^2 e^{(-bkt_i)^2} - 2y_i k_0 e^{(-kti)} + 2y_i k_0 e^{[-t_i bk]} + 2k_0 e^{[-kti(1+b)]} - 2k_0^2 e^{[-kti(1+b)]} - 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kti)} - 2k_0 e^{(-kti)^2} - 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kbt_i)} \right] \right\}} \\
& e^{\left\{ -\frac{1}{2\sigma_0^2} [k_0^2 - 2k_0 \mu_0 + \mu_0^2] \right\}} \\
& \propto \\
& e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n \left[k_0^2 e^{(-kti)^2} + k_0^2 e^{(-bkt_i)^2} - 2y_i k_0 e^{(-kti)} + 2y_i k_0 e^{[-t_i bk]} + 2k_0 e^{[-kti(1+b)]} - 2k_0^2 e^{[-kti(1+b)]} - 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kti)} - 2k_0 e^{(-kti)^2} - 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kbt_i)} \right] - \frac{[k_0^2 - 2k_0 \mu_0]}{2\sigma_0^2} \right\}}
\end{aligned}$$

Colocando os termos k_0^2 e k_0 em evidência:

$$\begin{aligned}
& \propto e^{\left\{ k_0^2 \left[-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n \left(e^{(-kti)^2} + e^{(-bkt_i)^2} - 2e^{[-kti(1+b)]} \right) - \frac{1}{2\sigma_0^2} \right] - 2k_0 \left[-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n \left(y_i e^{(-kti)} - y_i e^{[-t_i bk]} - e^{[-kti(1+b)]} \right) + \varphi_1 y_{i-1} e^{(-kti)} + e^{(-kti)^2} + \varphi_1 y_{i-1} e^{(-kbt_i)} \right] - \frac{\mu_0}{2\sigma_0^2} \right\}} \\
& \propto e^{\left\{ -\frac{1}{2} \left[k_0^2 \left(\tau \sum_{i=2}^n \left\{ e^{(-kti)^2} + e^{(-bkt_i)^2} - 2e^{[-kti(1+b)]} \right\} + \frac{1}{\sigma_0^2} \right) - 2k_0 \left(\tau \sum_{i=2}^n \left\{ y_i e^{(-kti)} - y_i e^{[-t_i bk]} - e^{[-kti(1+b)]} \right\} + \varphi_1 y_{i-1} e^{(-kti)} + e^{(-kti)^2} + \varphi_1 y_{i-1} e^{(-kbt_i)} \right) + \frac{\mu_0}{\sigma_0^2} \right] \right\}} \\
& \propto e^{\left\{ -\frac{1}{2} \left(\tau \sum_{i=2}^n \left\{ e^{(-kti)^2} + e^{(-bkt_i)^2} - 2e^{[-kti(1+b)]} \right\} + \frac{1}{\sigma_0^2} \right) \left[k_0^2 - 2k_0 \frac{\left(\tau \sum_{i=2}^n \left\{ y_i e^{(-kti)} - y_i e^{[-t_i bk]} - e^{[-kti(1+b)]} \right\} + \varphi_1 y_{i-1} e^{(-kti)} + e^{(-kti)^2} + \varphi_1 y_{i-1} e^{(-kbt_i)} \right) + \frac{\mu_0}{\sigma_0^2} \right]}{\left(\tau \sum_{i=2}^n \left\{ e^{(-kti)^2} + e^{(-bkt_i)^2} - 2e^{[-kti(1+b)]} \right\} + \frac{1}{\sigma_0^2} \right)} \right] \right\}}
\end{aligned}$$

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

$$\mu = \frac{\left(\tau \sum_{i=2}^n \left\{ y_i e^{(-kti)} - y_i e^{[-t_i bk]} - e^{[-kti(1+b)]} \right\} + \varphi_1 y_{i-1} e^{(-kti)} + e^{(-kti)^2} + \varphi_1 y_{i-1} e^{(-kbt_i)} \right) + \frac{\mu_0}{\sigma_0^2}}{\left(\tau \sum_{i=2}^n \left\{ e^{(-kti)^2} + e^{(-bkt_i)^2} - 2e^{[-kti(1+b)]} \right\} + \frac{1}{\sigma_0^2} \right)}$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{\tau \sum_{i=2}^n \left\{ e^{(-kti)^2} + e^{(-bkt_i)^2} - 2e^{[-kti(1+b)]} \right\} + \frac{1}{\sigma_0^2}}$$

Partindo da distribuição *posteriori* conjunta, a condicional completa de k é dada por:

$$p(k|\varphi_1, \tau, k_0, b, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \omega, Y) \propto$$

$$e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n \left[\begin{array}{l} y_i^2 + k_0^2 e^{(-kt_i)^2} + e^{(-kbt_i)^2} + k_0^2 e^{(-bkt_i)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_i k_0 e^{(-kt_i)} - 2y_i e^{(-bkt_i)} + 2y_i k_0 e^{[-t_i b k]} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i + 2k_0 e^{[-kt_i(1+b)]} - \\ 2k_0^2 e^{[-kt_i(1+b)]} - 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} - 2k_0 e^{(-kt_i)^2} + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{(-kbt_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} \end{array} \right] \right\}} e^{\left\{ -\frac{1}{2\sigma_k^2} [k - \mu_k]^2 \right\}}$$

\propto

$$e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n \left[\begin{array}{l} k_0^2 e^{(-kt_i)^2} + e^{(-kbt_i)^2} + k_0^2 e^{(-bkt_i)^2} - 2y_i k_0 e^{(-kt_i)} - 2y_i e^{(-bkt_i)} + 2y_i k_0 e^{[-t_i b k]} + 2k_0 e^{[-kt_i(1+b)]} - 2k_0^2 e^{[-kt_i(1+b)]} - 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} - \\ 2k_0 e^{(-kt_i)^2} + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{(-kbt_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kbt_i)} \end{array} \right] \right\}} e^{\left\{ -\frac{1}{2\sigma_k^2} [k - \mu_k]^2 \right\}}$$

Partindo da distribuição *posteriori* conjunta, a condicional completa de b é dada por:

$$p(b|\varphi_1, \tau, k_0, k, \alpha, \beta, \sigma_k, \mu_k, \sigma_0, \mu_0, \omega, Y) \propto$$

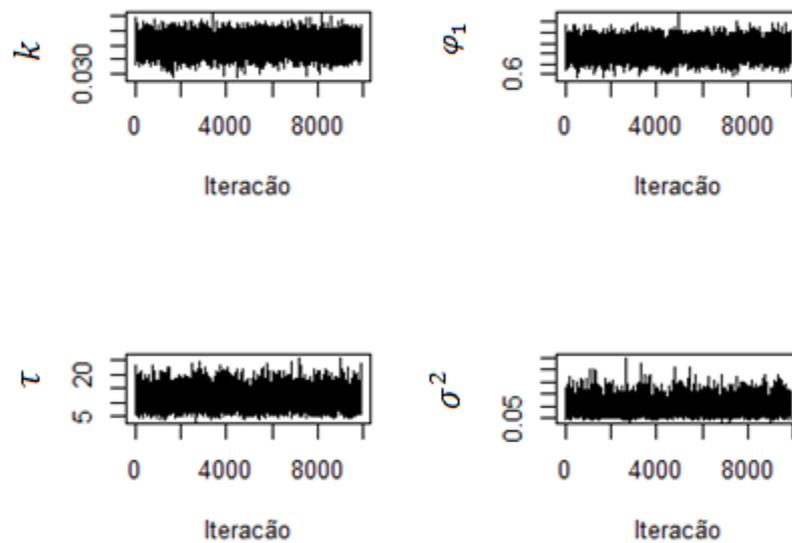
$$e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n \left[\begin{array}{l} y_i^2 + k_0^2 e^{(-kt_i)^2} + e^{(-kbt_i)^2} + k_0^2 e^{(-bkt_i)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_i k_0 e^{(-kt_i)} - 2y_i e^{(-bkt_i)} + 2y_i k_0 e^{[-t_i b k]} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i + 2k_0 e^{[-kt_i(1+b)]} - \\ 2k_0^2 e^{[-kt_i(1+b)]} - 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} - 2k_0 e^{(-kt_i)^2} + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{(-kbt_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kbt_i)} \end{array} \right] \right\}}$$

$$\propto e^{\left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n \left[\begin{array}{l} e^{(-kbt_i)^2} + k_0^2 e^{(-bkt_i)^2} - 2y_i e^{(-bkt_i)} + 2y_i k_0 e^{[-t_i b k]} + \\ 2k_0 e^{[-kt_i(1+b)]} - 2k_0^2 e^{[-kt_i(1+b)]} + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{(-kbt_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kbt_i)} \end{array} \right] \right\}}$$

As distribuições condicionais completas de k e b não apresentaram forma conhecida, quando comparadas à distribuições padrão. Deste modo, é necessária a utilização do algoritmo de Metropolis-Hastings para gerar os resultados destes parâmetros.

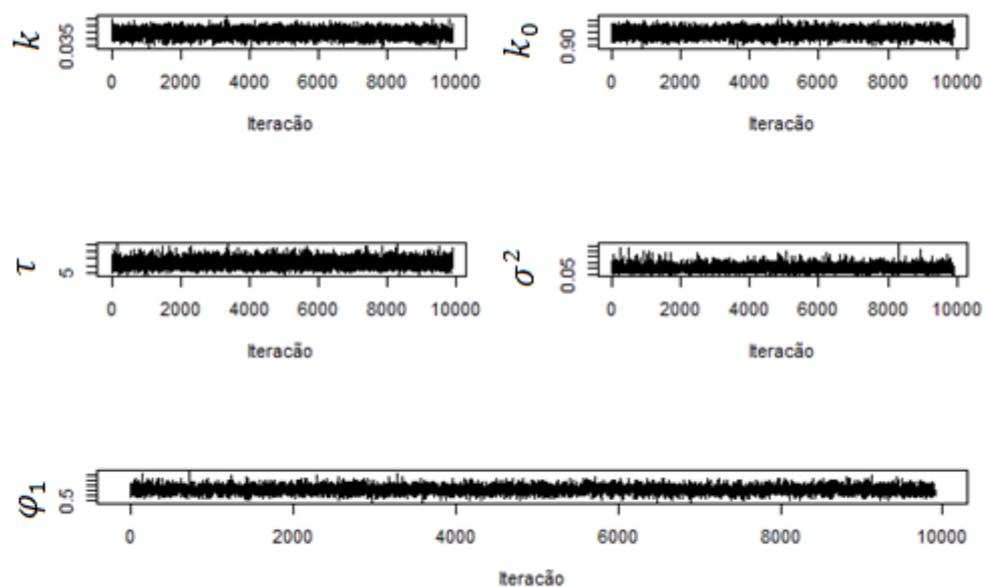
ANEXO 2
GRÁFICOS DE CONVERGÊNCIA E DENSIDADES

Figura 7. Traço das cadeias MCMC geradas para modelo de Lewis, considerando a estrutura de erros autoregressivos de ordem 1, em relação ao algoritmo de análise de dados de cinética de polpa de Jabuticaba na temperatura de 50°C.



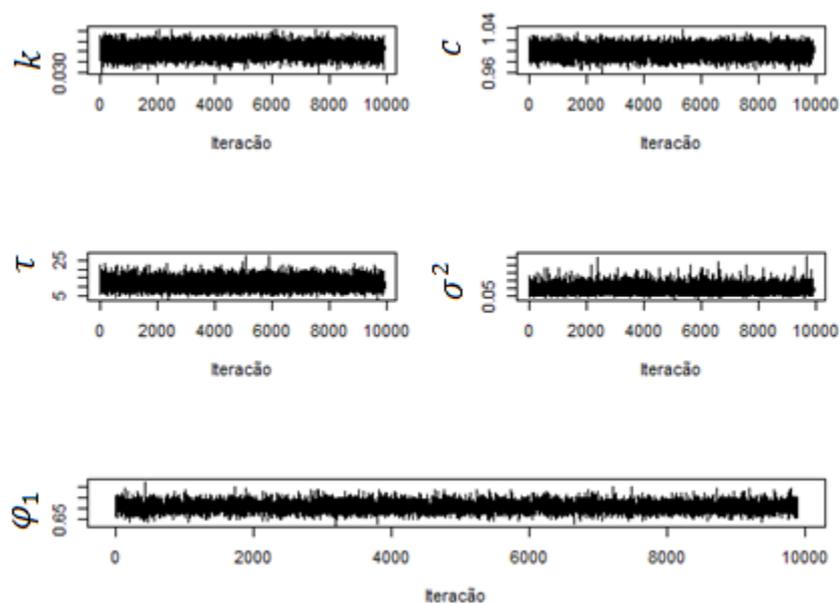
Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Figura 8. Traço das cadeias MCMC geradas para modelo de Henderson e Pabis, considerando a estrutura de erros autoregressivos de ordem 1, em relação ao algoritmo de análise de dados de cinética de polpa de Jabuticaba na temperatura de 50°C.



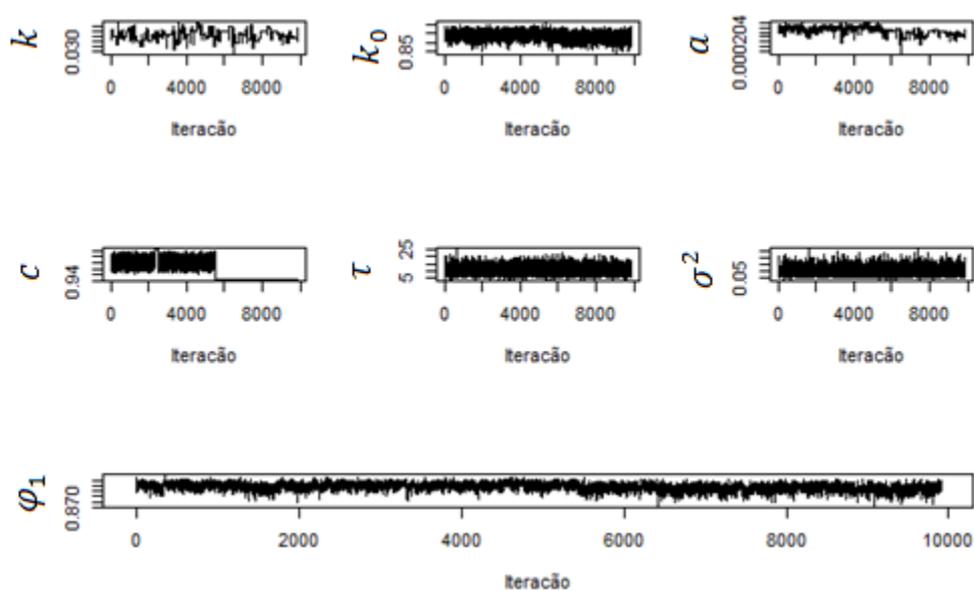
Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Figura 9. Traço das cadeias MCMC geradas para modelo de Page, considerando a estrutura de erros autoregressivos de ordem 1, em relação ao algoritmo de análise de dados de cinética de polpa de Jabuticaba na temperatura de 50°C



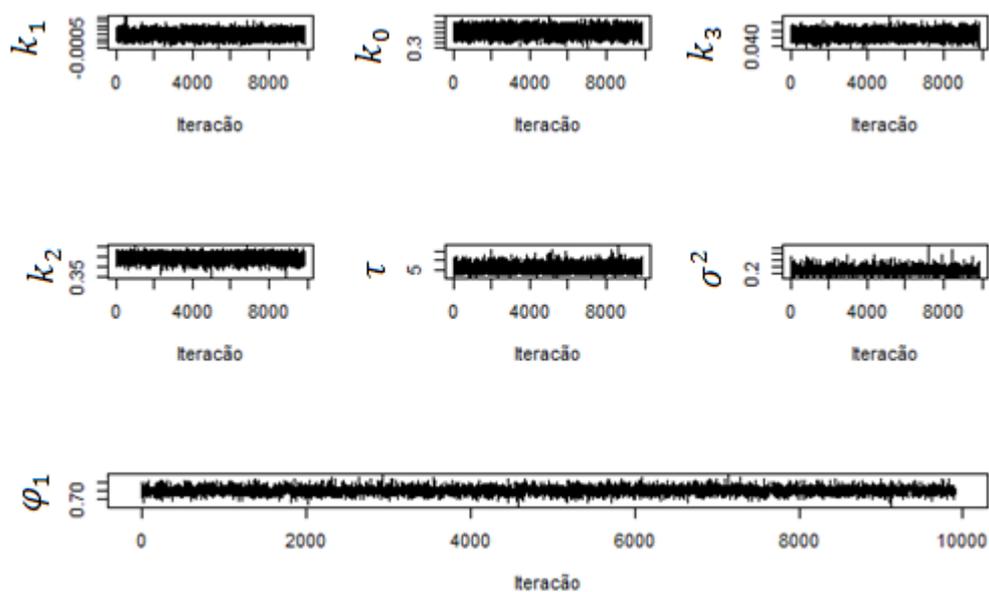
Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Figura 10. Traço das cadeias MCMC geradas para modelo de Midilli, considerando a estrutura de erros autoregressivos de ordem 1, em relação ao algoritmo de análise de dados de cinética de polpa de Jabuticaba na temperatura de 50°C.



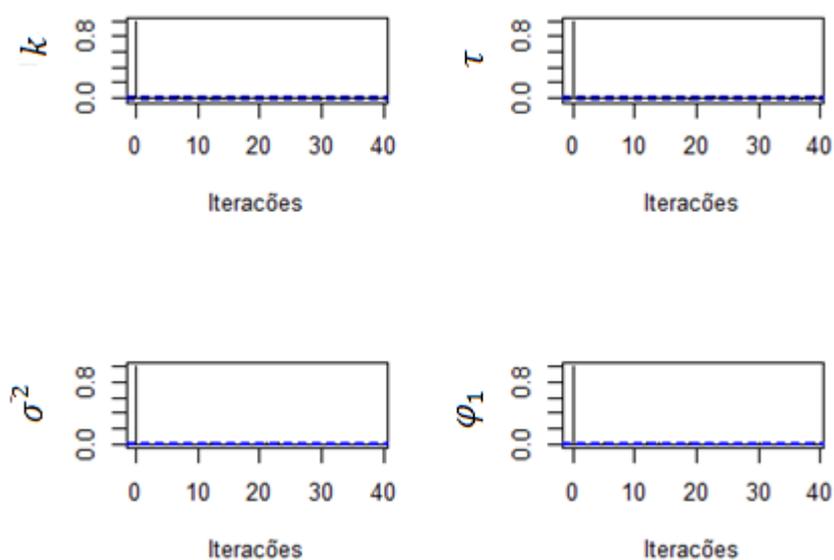
Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Figura 11. Traço das cadeias MCMC geradas para modelo de Dois Termos, considerando a estrutura de erros autoregressivos de ordem 1, em relação ao algoritmo de análise de dados de cinética de polpa de Jabuticaba na temperatura de 50°C.



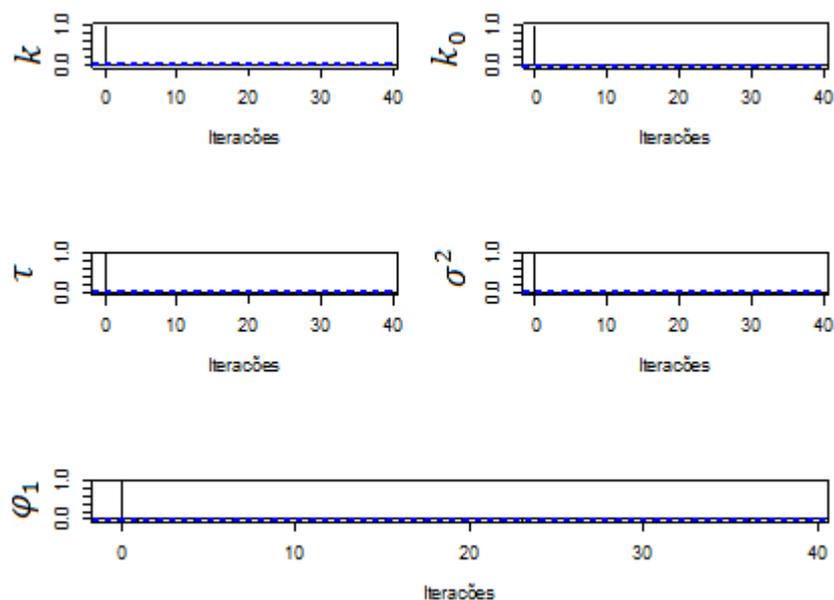
Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Figura 12. Gráfico da função de autocorrelação, gerado para o modelo de Lewis, considerando a estrutura de erros autoregressivos de ordem 1, em relação ao algoritmo de análise de dados de cinética de polpa de Jabuticaba na temperatura de 50°C.



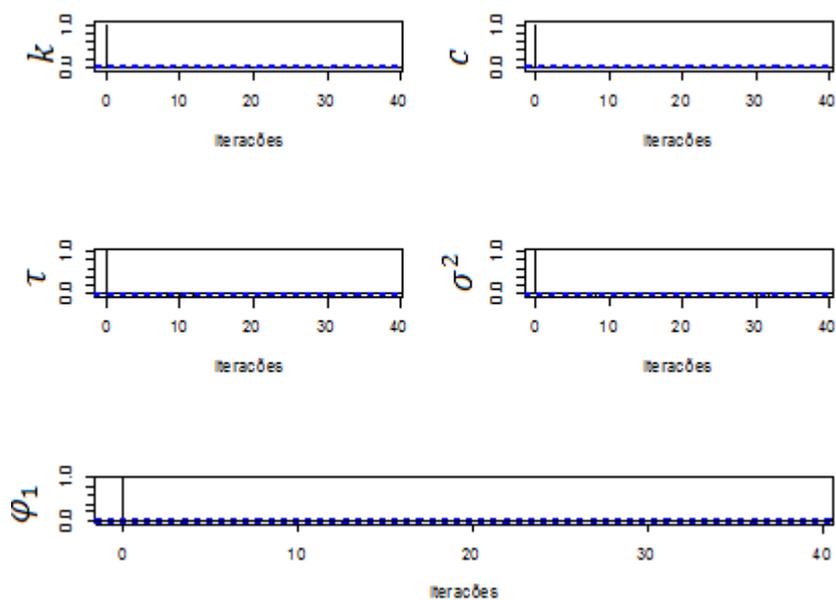
Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Figura 13. Gráfico da função de autocorrelação, gerado para o modelo de Henderson e Pabis, considerando a estrutura de erros autoregressivos de ordem 1, em relação ao algoritmo de análise de dados de cinética de polpa de Jabuticaba na temperatura de 50°C.



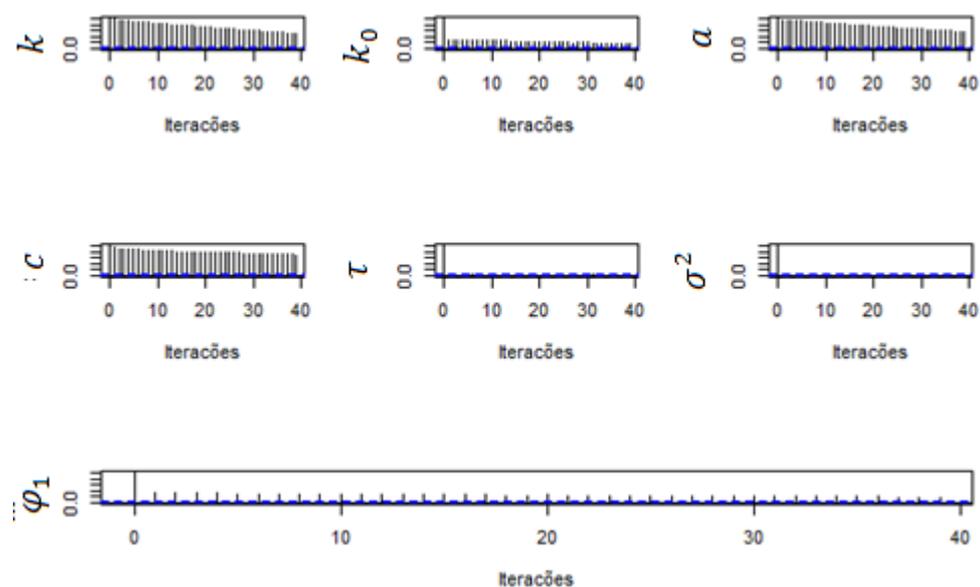
Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Figura 14. Gráfico da função de autocorrelação, gerado para o modelo de Page, considerando a estrutura de erros autoregressivos de ordem 1, em relação ao algoritmo de análise de dados de cinética de polpa de Jabuticaba na temperatura de 50°C.



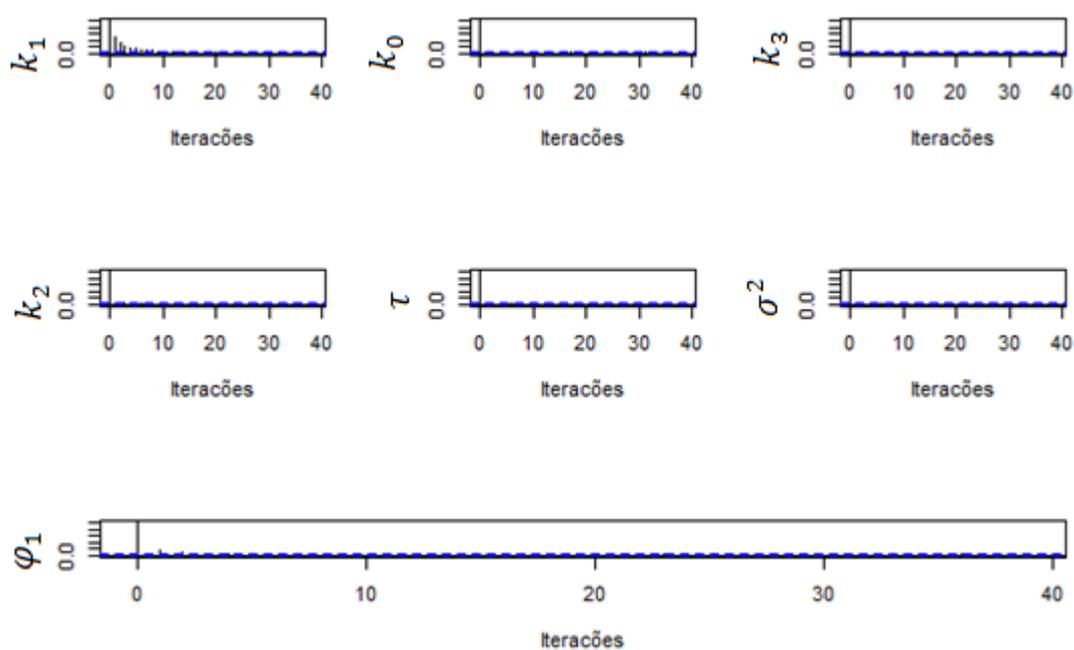
Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Figura 15. Gráfico da função de autocorrelação, gerado para o modelo de Midilli, considerando a estrutura de erros autoregressivos de ordem 1, em relação ao algoritmo de análise de dados de cinética de polpa de Jabuticaba na temperatura de 50°C.



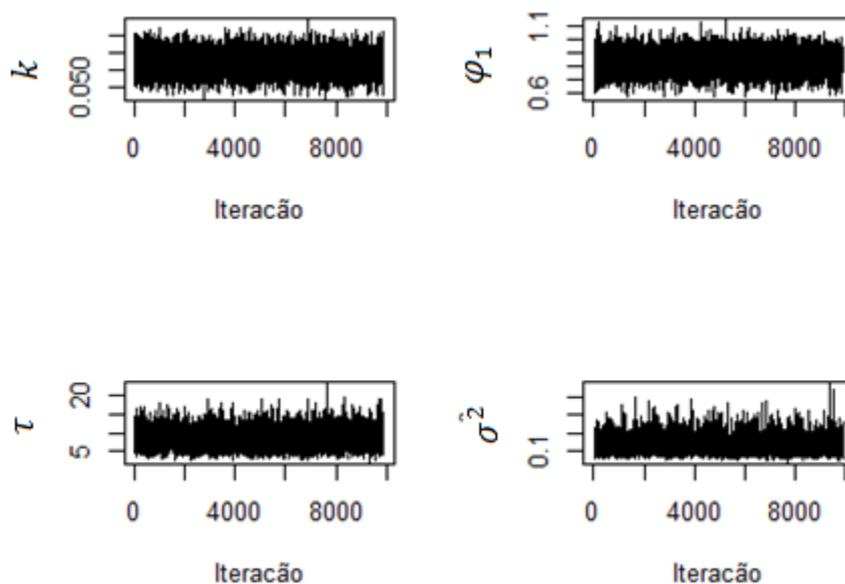
Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Figura 16. Gráfico da função de autocorrelação, gerado para o modelo de Dois Termos, considerando a estrutura de erros autoregressivos de ordem 1, em relação ao algoritmo de análise de dados de cinética de polpa de Jabuticaba na temperatura de 50°C.



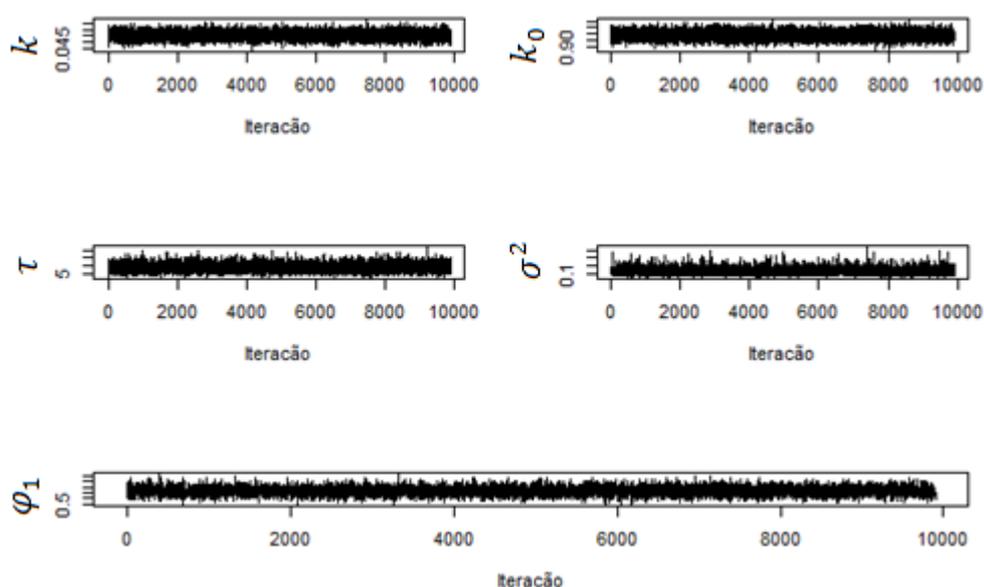
Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Figura 17. Traço das cadeias MCMC geradas para o modelo de Lewis, considerando a estrutura de erros autoregressivos de ordem 1, em relação ao algoritmo de análise de dados de cinética de polpa de Jabuticaba na temperatura de 60°C.



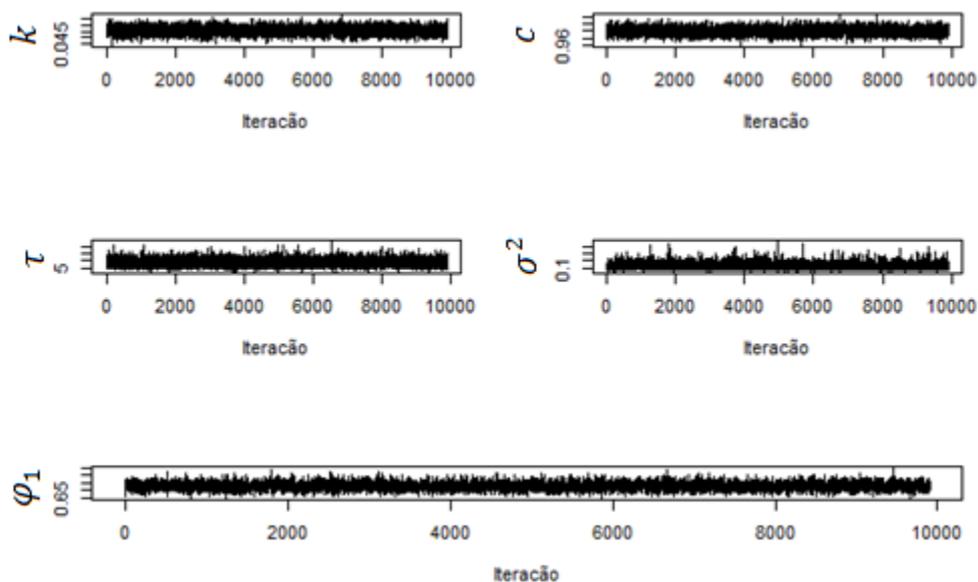
Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Figura 18. Traço das cadeias MCMC geradas para o modelo de Henderson e Pabis, considerando a estrutura de erros autoregressivos de ordem 1, em relação ao algoritmo de análise de dados de cinética de polpa de Jabuticaba na temperatura de 60°C.



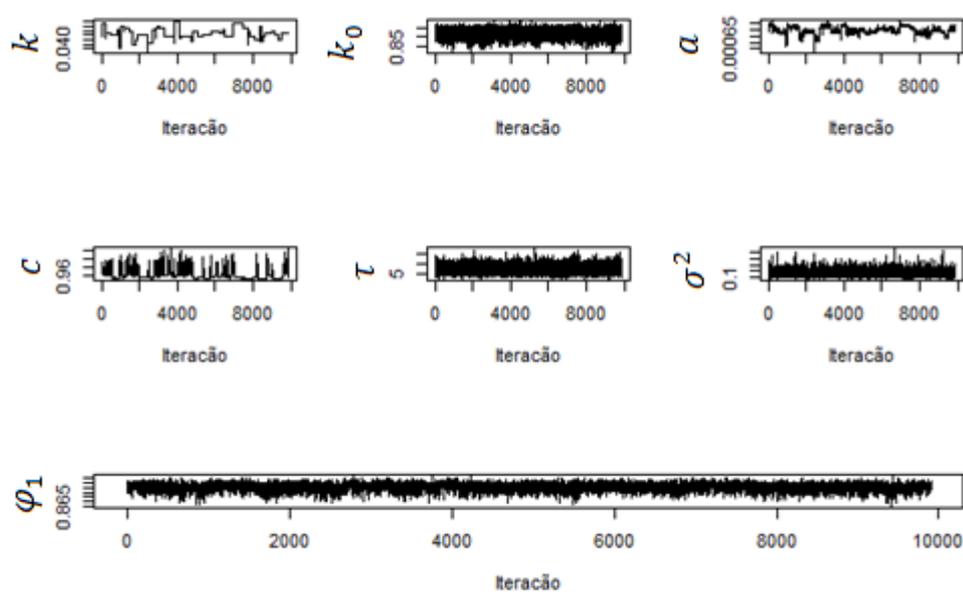
Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Figura 19. Traço das cadeias MCMC geradas para o modelo de Page, considerando a estrutura de erros autoregressivos de ordem 1, em relação ao algoritmo de análise de dados de cinética de polpa de Jabuticaba na temperatura de 60°C



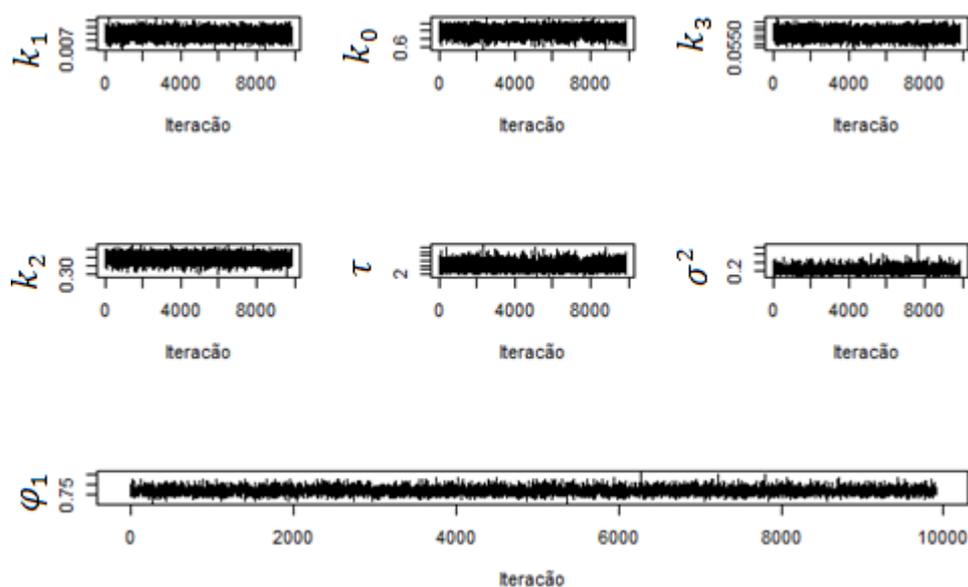
Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Figura 20. Traço das cadeias MCMC geradas para o modelo de Midilli, considerando a estrutura de erros autoregressivos de ordem 1, em relação ao algoritmo de análise de dados de cinética de polpa de Jabuticaba na temperatura de 60°C.



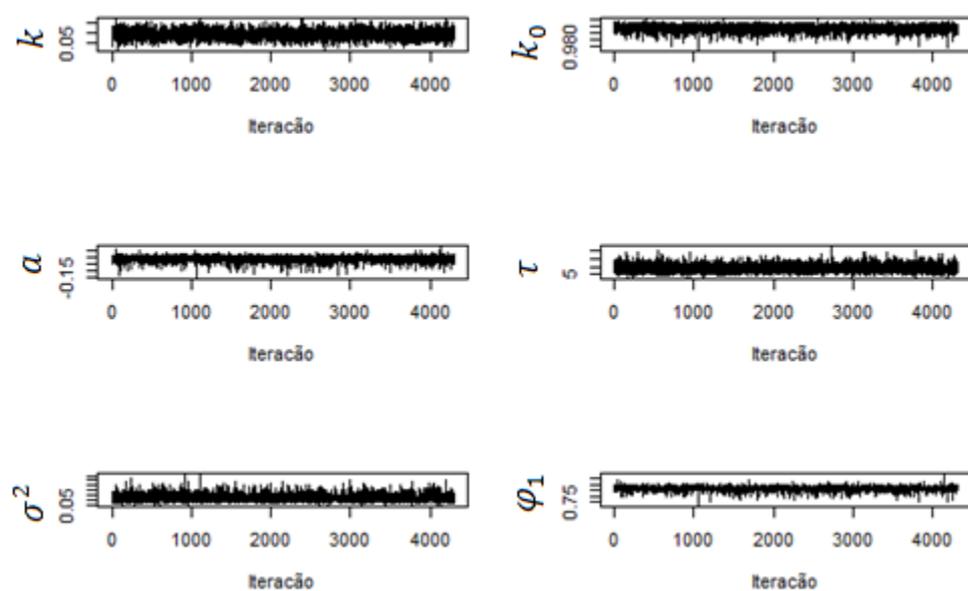
Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Figura 21. Traço das cadeias MCMC geradas para o modelo de Dois Termos, considerando a estrutura de erros autoregressivos de ordem 1, em relação ao algoritmo de análise de dados de cinética de polpa de Jaboticaba na temperatura de 60°C.



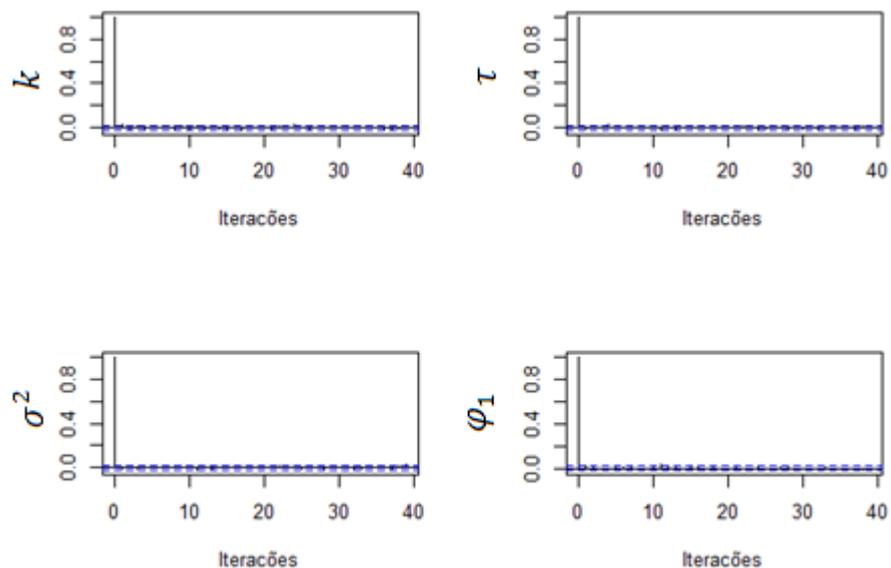
Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Figura 22. Traço das cadeias MCMC geradas para o modelo de ESTP, considerando a estrutura de erros autoregressivos de ordem 1, em relação ao algoritmo de análise de dados de cinética de polpa de Jaboticaba na temperatura de 60°C.



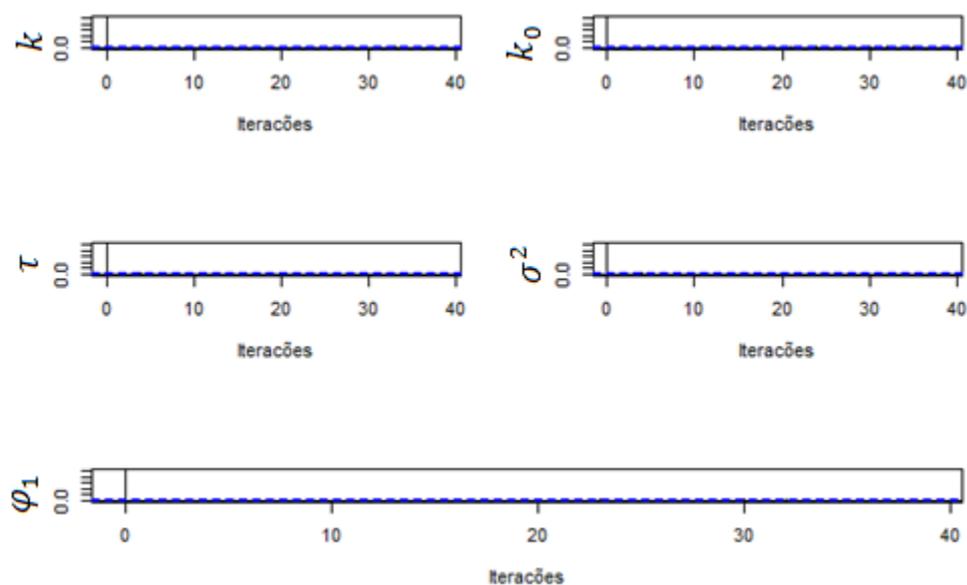
Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Figura 23. Gráfico da função de autocorrelação, gerado para o modelo de Lewis, considerando a estrutura de erros autoregressivos de ordem 1, em relação ao algoritmo de análise de dados de cinética de polpa de Jabuticaba na temperatura de 60°C.



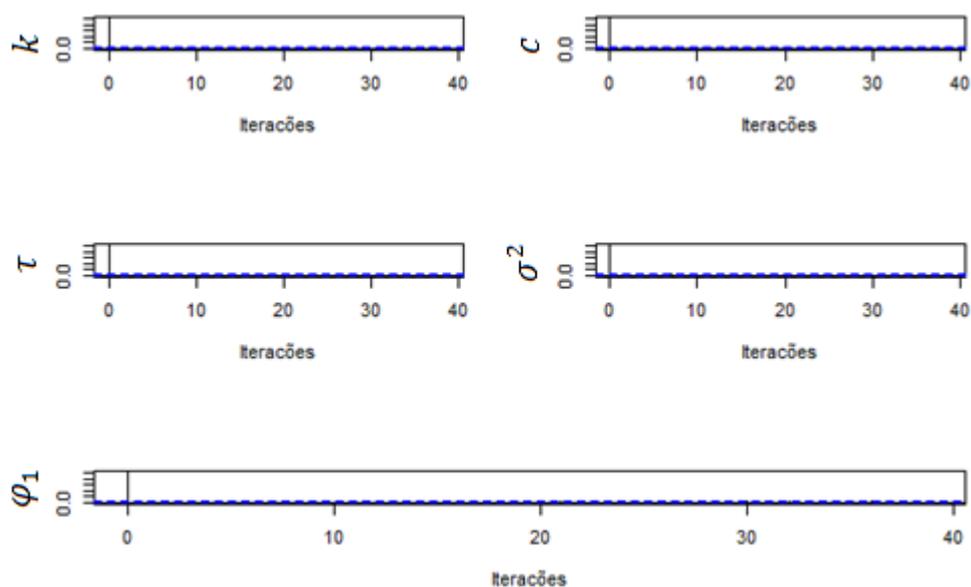
Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Figura 24. Gráfico da função de autocorrelação, gerado para o modelo de Henderson e Pabis, considerando a estrutura de erros autoregressivos de ordem 1, em relação ao algoritmo de análise de dados de cinética de polpa de Jabuticaba na temperatura de 60°C.



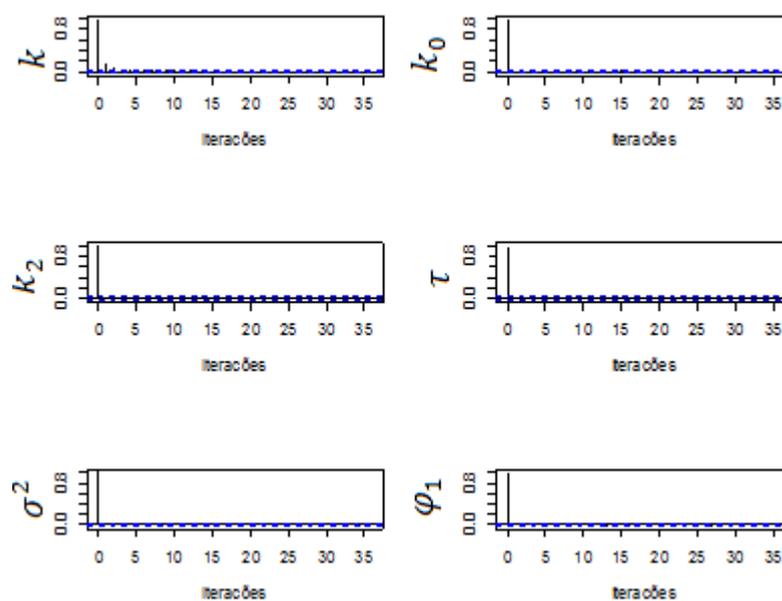
Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Figura 25. Gráfico da função de autocorrelação, gerado para o modelo de Page, considerando a estrutura de erros autoregressivos de ordem 1, em relação ao algoritmo de análise de dados de cinética de polpa de Jabuticaba na temperatura de 60°C.



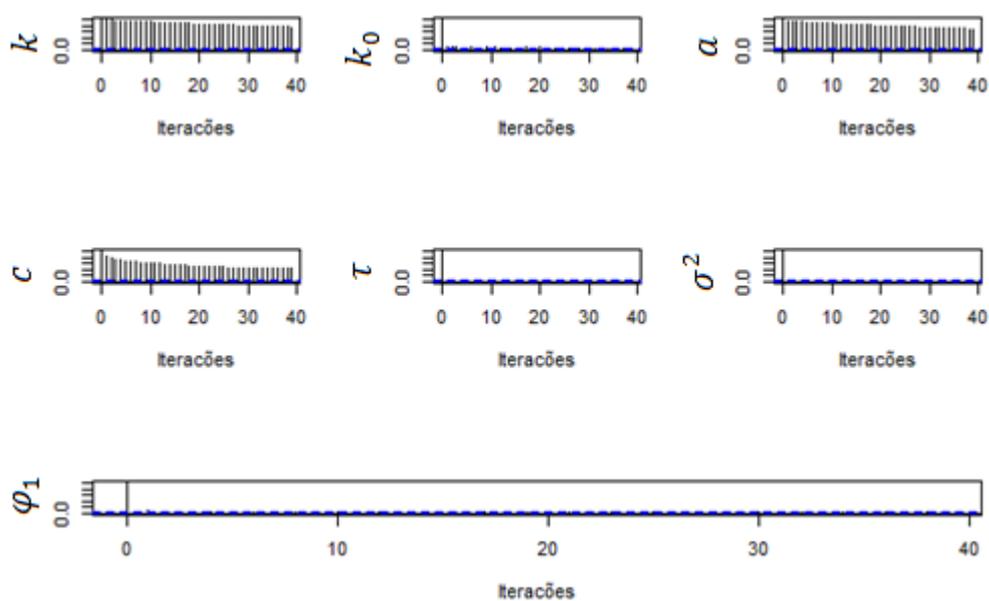
Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Figura 26. Gráfico da função de autocorrelação, gerado para o modelo de ESTP, considerando a estrutura de erros autoregressivos de ordem 1, em relação ao algoritmo de análise de dados de cinética de polpa de Jabuticaba na temperatura de 60°C.



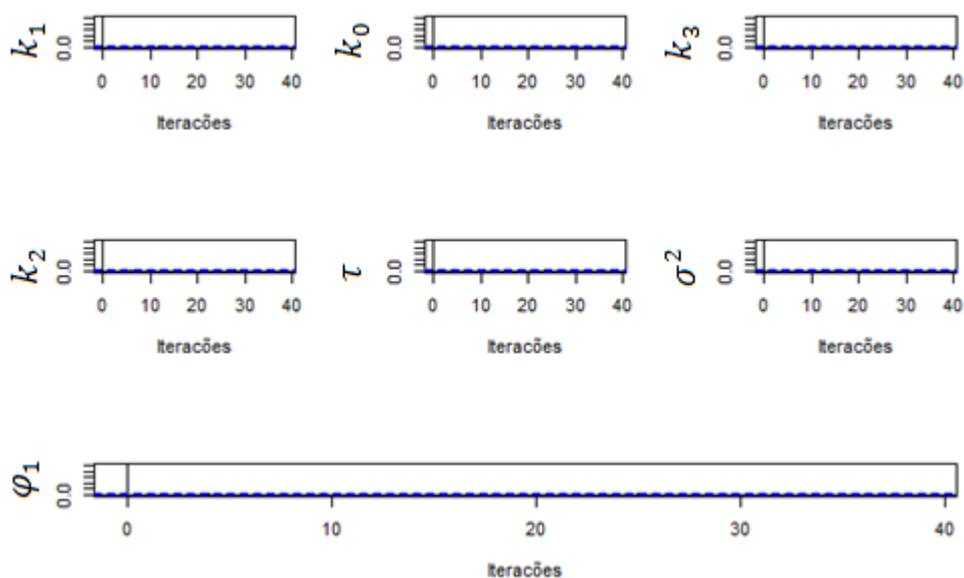
Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Figura 27. Gráfico da função de autocorrelação, gerado para o modelo de Midilli, considerando a estrutura de erros autoregressivos de ordem 1, em relação ao algoritmo de análise de dados de cinética de polpa de Jabuticaba na temperatura de 60°C.



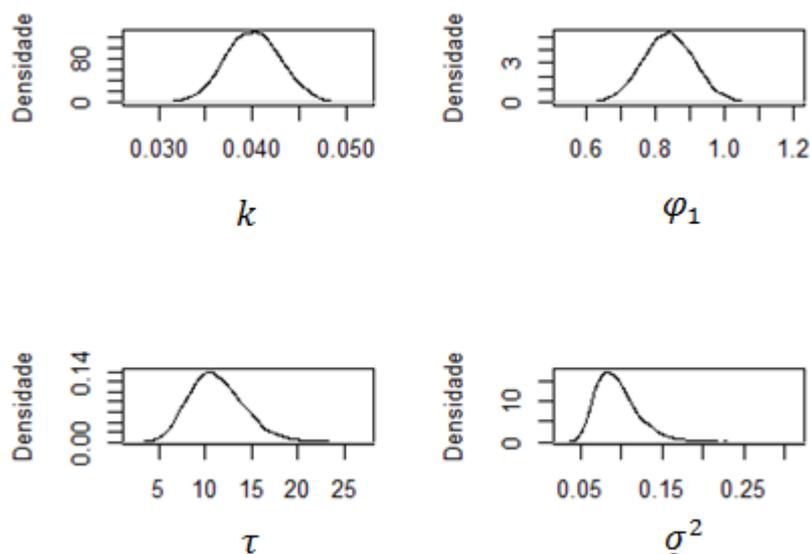
Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Figura 28. Gráfico da função de autocorrelação, gerado para o modelo de Dois Termos, considerando a estrutura de erros autoregressivos de ordem 1, em relação ao algoritmo de análise de dados de cinética de polpa de Jabuticaba na temperatura de 60°C.



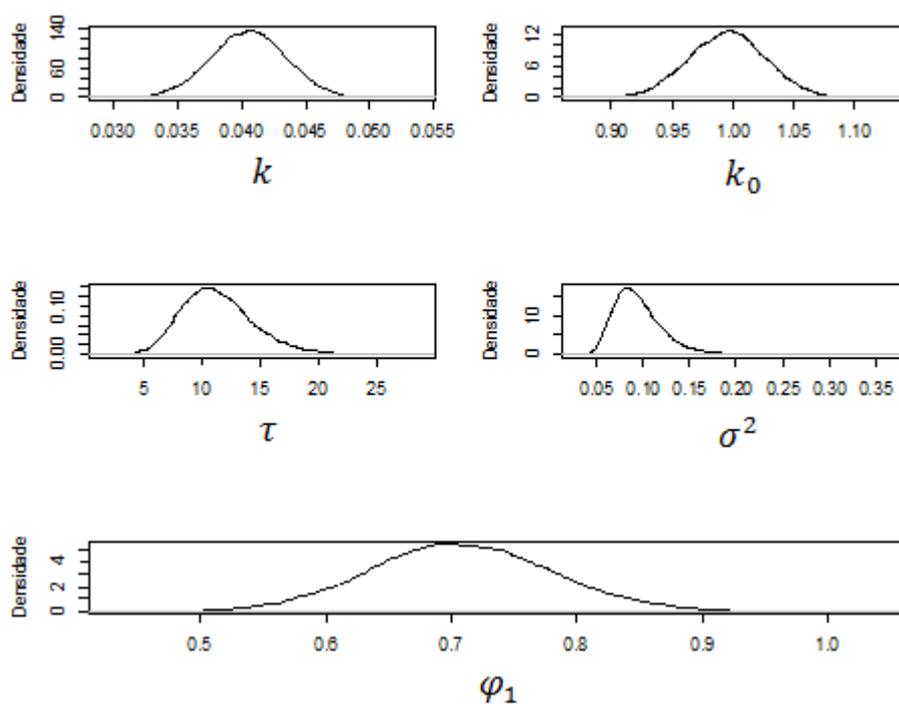
Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Figura 29. Gráfico das densidades *a posteriori*, gerado para os parâmetros do modelo de Lewis, considerando a estrutura de erros autoregressivos de ordem 1, em relação ao ajuste aos dados de cinética de polpa de Jabuticaba na temperatura de 50°C.



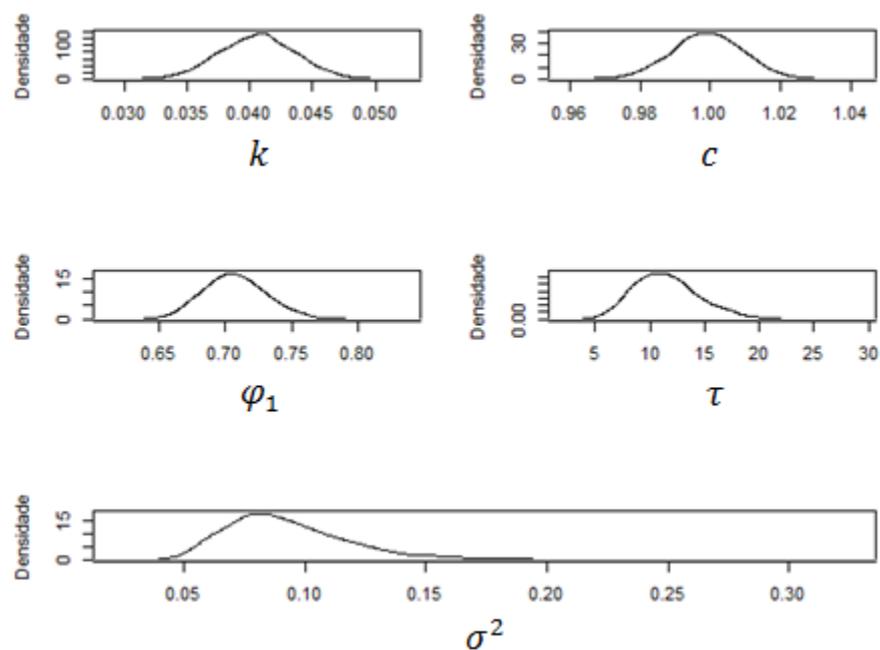
Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Figura 30. Gráfico das densidades *a posteriori*, gerado para os parâmetros do modelo de Henderson e Pabis, considerando a estrutura de erros autoregressivos de ordem 1, em relação ao ajuste aos dados de cinética de polpa de Jabuticaba na temperatura de 50°C.



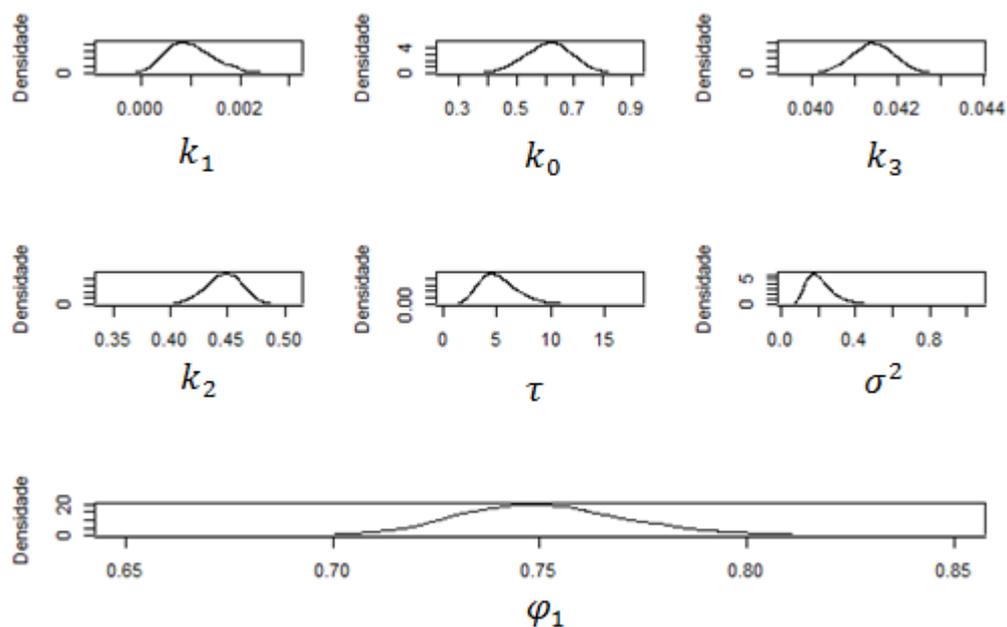
Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Figura 31. Gráfico das densidades *a posteriori*, gerado para os parâmetros do modelo de Page, considerando a estrutura de erros autoregressivos de ordem 1, em relação ao ajuste aos dados de cinética de polpa de Jabuticaba na temperatura de 50°C.



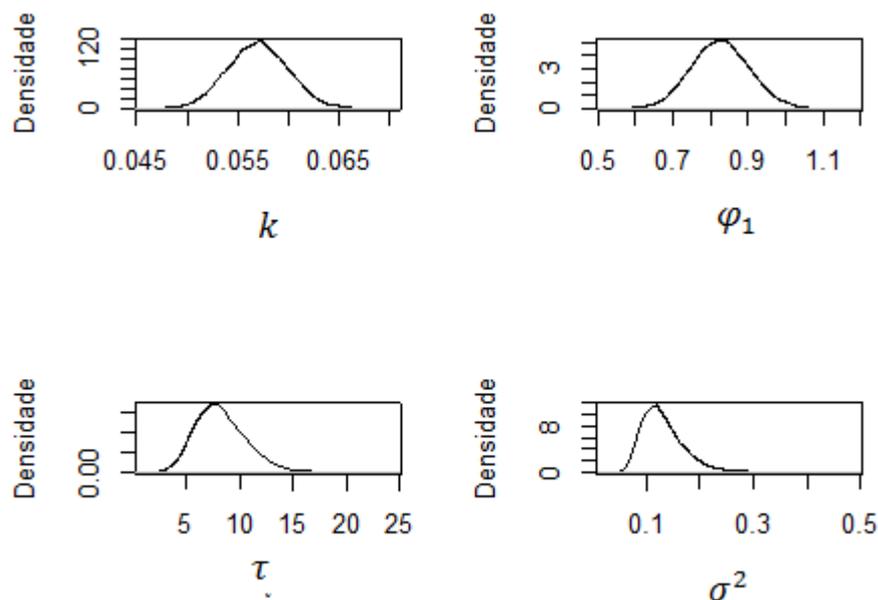
Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Figura 32. Gráfico das densidades *a posteriori*, gerado para os parâmetros do modelo de Dois Termos, considerando a estrutura de erros autoregressivos de ordem 1, em relação ao ajuste aos dados de cinética de polpa de Jabuticaba na temperatura de 50°C.



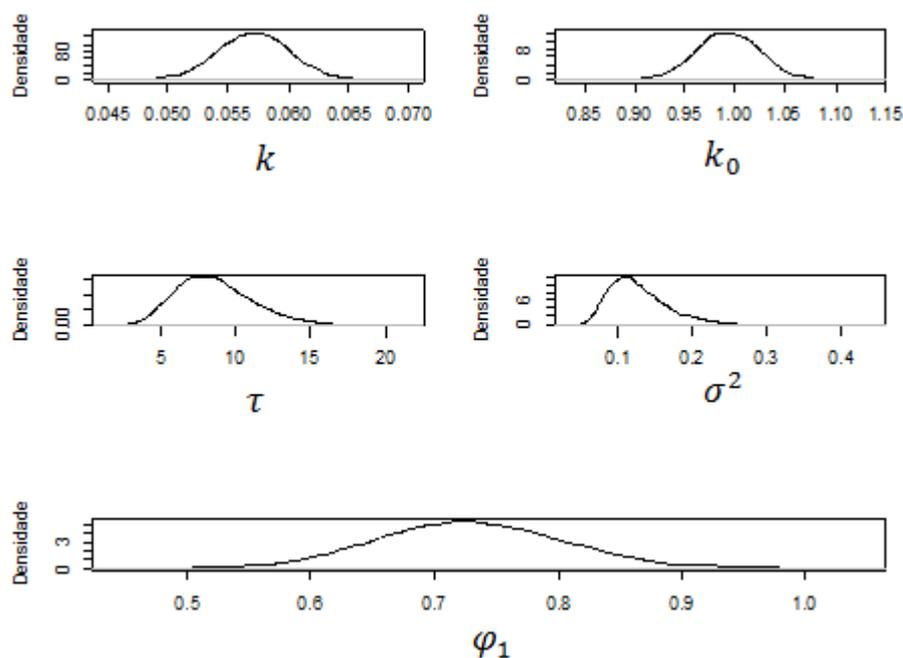
Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Figura 33. Gráfico das densidades *a posteriori*, gerado para os parâmetros do modelo de Lewis, considerando a estrutura de erros autoregressivos de ordem 1, em relação ao ajuste aos dados de cinética de polpa de Jabuticaba na temperatura de 60°C.



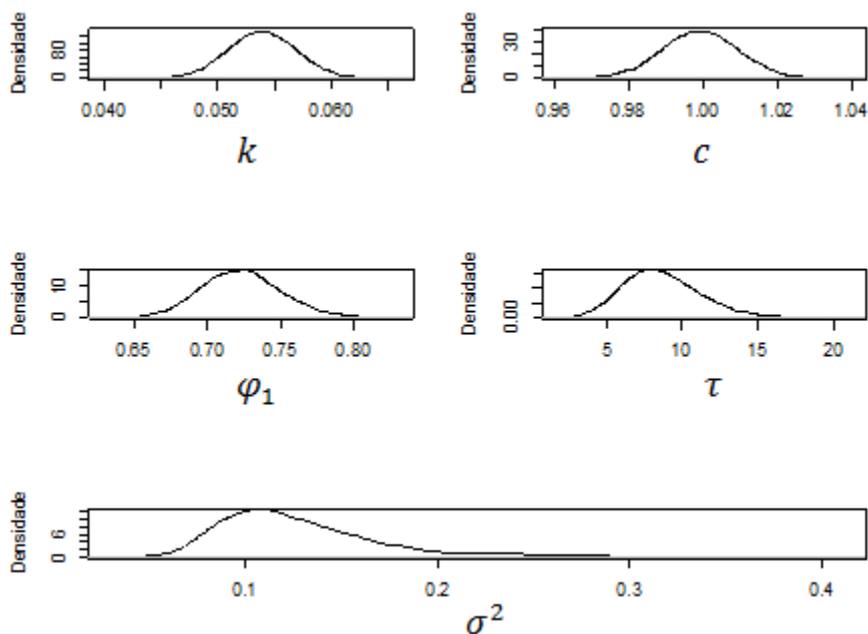
Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Figura 34. Gráfico das densidades *a posteriori*, gerado para os parâmetros do modelo de Henderson e Pabis, considerando a estrutura de erros autoregressivos de ordem 1, em relação ao ajuste aos dados de cinética de polpa de Jabuticaba na temperatura de 60°C.



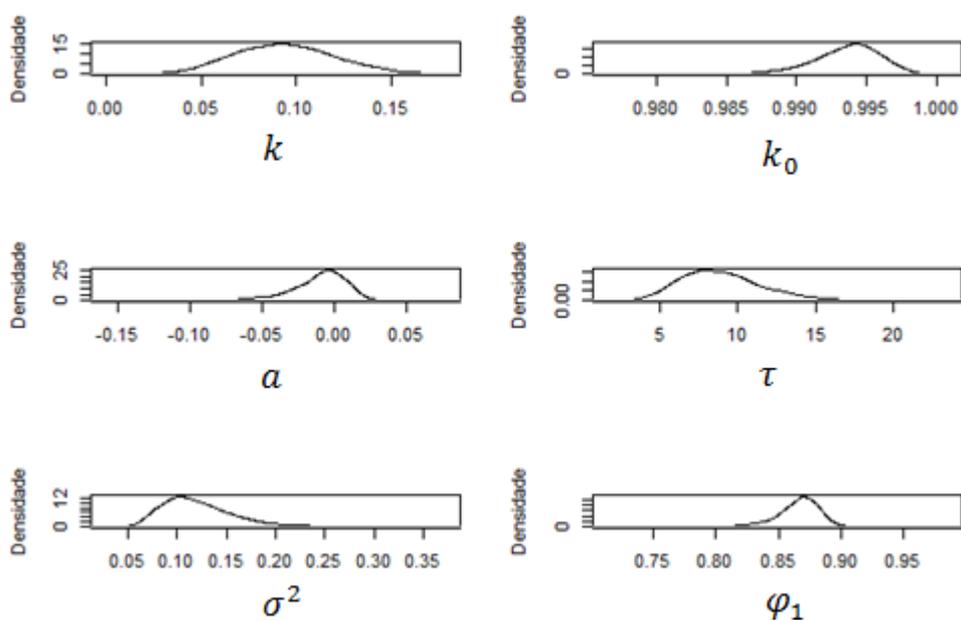
Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Figura 35. Gráfico das densidades *a posteriori*, gerado para os parâmetros do modelo de Page, considerando a estrutura de erros autoregressivos de ordem 1, em relação ao ajuste aos dados de cinética de polpa de Jabuticaba na temperatura de 60°C.



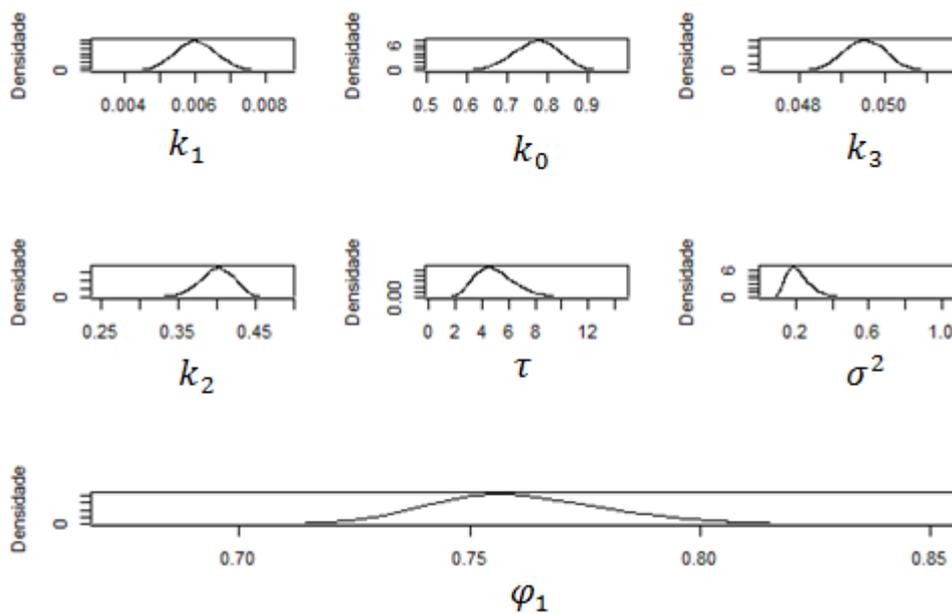
Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Figura 36. Gráfico das densidades *a posteriori*, gerado para os parâmetros do modelo Exponencial Simples com Três Parâmetros, considerando a estrutura de erros autoregressivos de ordem 1, em relação ao ajuste aos dados de cinética de polpa de Jabuticaba na temperatura de 60°C.



Fonte: Elaborado pela autora (2019).

Figura 37. Gráfico das densidades *a posteriori*, gerado para os parâmetros do modelo de Dois Termos, considerando a estrutura de erros autoregressivos de ordem 1, em relação ao ajuste aos dados de cinética de polpa de Jaboticaba na temperatura de 60°C.



Fonte: Elaborado pela autora (2019).

ANEXO 3

**A – ROTINA DE ANÁLISE DE DADOS NO SOFTWARE R, PARA O MODELO DE LEWIS
SEM CONSIDERAR ESTRUTURA DE ERROS**

```

rm(list=ls())
dad60<-read.table("c:\\...\\sec60.txt",h=t)
dad60

y1<- dad60$sec ; y1
x <- dad60$t ; x

plot(x,y1)
y<- y1
n<-length(y); n
t<- x; t
length(t)

#hiperparâmetros para k dist normal
muk<-0.0055
s2k<-0.0006
k.priori = rnorm(1,muk,s2k)

#hiperparâmetros para tau dist gama
alpha<-1.5
beta<-1
tau.priori <- rgamma(1,alpha,beta)

m<-100000 #número de iterações

#valores a serem gerados
k.post <-matrix(na,nrow=m)
tau.post<-matrix(na,nrow=m)
s2.post <- 1/tau.post

#valores iniciais
k.post[1]<-k.priori
tau.post[1]<- tau.priori
s2.post[1] <- 1/tau.priori

aceitacao<-0

#amostrador de gibbs e metropolis-hasting
for (i in 2:m){

  # amostrador de gibbs
  #condicional de tau
  a <- (n+2*alpha)/2
  b <- (beta+sum((1/2)*(y-(exp(-k.post[i-1]*t)))^2))

  tau.post[i] <- rgamma(1,a,b)

  # Metropolis-Hastings

  #candidado - densidade auxiliar - proposta
  semelhante à condicional
  candidato <- rnorm(1,mean(k.priori),0.003)
  u <-runif(1,0,1)

  ##### condicional de k
  pa<-exp((-1/(2*s2k))*((k.post[i-1]-
muk)^2))*exp(sum((-tau.post[i-1]/2)*(y-exp(-
k.post[i-1]*t))^2))
  qa<-dnorm(k.post[i-1],0.0049,sqrt(0.0036))

  ##### condicional de k considerando a distribuição
  auxiliar
  pn <-exp((-1/(2*s2k))*((candidato-
muk)^2))*exp(sum((-tau.post[i-1]/2)*(y-exp(-
candidato*t))^2))
  qn<-dnorm(candidato,0.0049,sqrt(0.0036))

  raz<-min(1,(pn*qa)/(pa*qn))
  if(u<=raz){
    k.post[i] <- candidato
    aceitacao <- aceitacao+1
  } else k.post[i] <- k.post[i-1]
  }
  aceitacao/m
  s2.post <- 1/tau.post

  library(boa)
  #burn-in e thin
  t1 <-seq(1000,m,by=10)
  length(t1)
  k <- k.post[t1]
  tau <- tau.post[t1]
  s2 <- s2.post[t1]

  dados <- cbind(k,tau)
  boa.menu()

  ### resíduos
  e <- dnorm(t,0,s2.post[i])

  require(car)
  library(qpcr)
  library(lmtest)

  modelo = exp(-mean(k)*t)
  e = y-modelo
  erro<-as.vector(e)

  #teste de durbin watson

```

```
dw<-
durbinwatsonest(e,alternative=c("two.sided")); dw
# teste de shapiro wilk
```

```
shapiro.test(erro)
# teste de breush-pagan
bptest(y~modelo)
```

B – ROTINA DE ANÁLISE DE DADOS NO SOFTWARE R, PARA O MODELO DE DOIS TERMOS SEM CONSIDERAR ESTRUTURA DE ERROS

```
rm(list=ls())
dad50<-read.table("c:\\...\\sec50.txt",h=t)
dad50
```

```
y0 <- dad50$sec ; y0
x <- dad50$t ; x
```

```
y<- y0
n<-length(y); n
t<- x; t
length(t)
```

```
#hiperparâmetros para k1
muk<-0.004
s2k<-0.0005
k.priori <- rnorm(1,muk,s2k)
```

```
#hiperparâmetros para k0 dist normal
muz<-1
s2z<-0.01
k0.priori <- rnorm(1,muz,s2z)
```

```
#hiperparâmetros para k3
mukk<-0.004
s2kk<-0.0005
kk.priori <- rnorm(1,mukk,s2kk)
```

```
#hiperparâmetros para k2
muz0<-0.5
s2z0<-0.01
k00.priori <- rnorm(1,muz0,s2z0)
```

```
#hiperparâmetros para tau
alpha<-1.5
beta<-1
tau.priori <- rgamma(1,alpha,beta)
```

```
m<-100000 #número de iterações
```

```
#valores a serem gerados
k.post <-matrix(na,nrow=m)
k0.post <- matrix(na,nrow=m)
tau.post <-matrix(na,nrow=m)
kk.post <-matrix(na,nrow=m)
k00.post <- matrix(na,nrow=m)
```

```
#valores iniciais
k.post[1]<-k.priori
k0.post[1]<-k0.priori
tau.post[1]<- tau.priori
```

```
kk.post[1]<-kk.priori
k00.post[1]<-k00.priori
```

```
aceutacao<-0
aceutacaokk<-0
```

```
#amostrador de gibbs e metropolis-hasting
```

```
for (i in 2:m){
```

```
  #condicional de tau
  a <- (n+2*alpha)/2
  b <- (beta+sum(0.5*(y-k0.post[i-1]*exp(-k.post[i-1]*t)-k00.post[i-1]*exp(-kk.post[i-1]*t))^2))
  tau.post[i] <- rgamma(1,a,b)
```

```
  # condicional de k0
  mkz <- (tau.post[i-1]*sum(y*exp(-k.post[i-1]*t)-k00.post[i-1]*exp(-t*(kk.post[i-1]+k.post[i-1]))) + muz/s2z)/(tau.post[i]*sum(exp(-k.post[i-1]*t)^2) + 1/s2z)
  sikz <- 1/(tau.post[i-1]*sum(exp(-k.post[i-1]*t)^2) + (1/s2z))
  k0.post[i] <- rnorm(1, mkz, sikz)
```

```
  # condicional de k00
  mkz0 <- ((tau.post[i-1]*sum(y*exp(-kk.post[i-1]*t)-k0.post[i]*exp(-t*(kk.post[i-1]+k.post[i-1]))) + muz0/s2z0)/(tau.post[i]*sum(exp(-kk.post[i-1]*t)^2) + 1/s2z0)
  sikz0 <- 1/(tau.post[i-1]*sum(exp(-kk.post[i-1]*t)^2) + (1/s2z0))
  k00.post[i] <- rnorm(1, mkz0, sikz0)
```

```
  #metropolis h
  candidato <- rnorm(1,k.priori,0.0006) #teta proposto
  u <-runif(1,0,1)
```

```
  ##### condicional de k
  pa<-exp((-1/(2*s2k))*((k.post[i-1]-muk)^2))*exp(-0.5*tau.post[i]*sum((y-k0.post[i]*exp(-k.post[i-1]*t)-k00.post[i]*exp(-kk.post[i-1]*t))^2))
  qa<-dnorm(k.post[i-1],0.005,0.0036)
```

```
  ##### condicional de k1
  pn <-exp((-1/(2*s2k))*((candidato-muk)^2))*exp(sum(-0.5*tau.post[i-1]*(y-k0.post[i-1]*exp(-candidato*t)-
```

```

      k00.post[i-1]*exp(-kk.post[i-1]*t)^2))
qn<-dnorm(candidato,0.005,sqrt(0.0036))
raz<-min(1,(pn*qa)/(pa*qn))

if(u<=raz){
  k.post[i] <- candidato
  aceitacao <- aceitacao+1
} else k.post[i] <- k.post[i-1]
candidatok <- rnorm(1,kk.priori,0.0005) #teta
proposto
uk <-runif(1,0,1)

#### condicional de k3
pak<-exp((-1/(2*s2kk))*((kk.post[i-1]-mukk)^2))*
exp(sum(-0.5*tau.post[i]*
(y-k0.post[i]*
exp(-k.post[i-1]*t)-k00.post[i-1]*
exp(-kk.post[i-1]*t))^2))
qak<-dnorm(kk.post[i-1],0,1)
#### condicional de k3 considerando a
distribuição auxiliar
pnk <-exp((-1/(2*s2kk))*((candidatok-mukk)^2))*
exp(sum(-0.5*tau.post[i]*
(y-k0.post[i]*exp(-k.post[i-1]*t)-
k00.post[i]*exp(-candidatok*t))^2))
qnk <- dnorm(candidatok,0,1)

razk<-min(1,(pnk*qak)/(pak*qnk))

if(uk<=razk){
  kk.post[i] <- candidatok
  aceitacaokk <- aceitacaokk+1
} else kk.post[i] <- kk.post[i-1]
}
aceitacao/m
aceitacaokk/m

#pacote para análise da convergência
library(boa)
s2.post <- 1/tau.post

#burn-in e thin
t1<-seq(1000,m,by=10)
length(t1)
k <- k.post[t1]
tau <- tau.post[t1]
s2 <- s2.post[t1]
k0 <- k0.post[t1]
kk <- kk.post[t1]
k00 <- k00.post[t1]
dados <- cbind(k,tau,k0,kk,k00)
boa.menu()

### resíduos
e <- dnorm(t,0,s2.post[i])
modelo =mean(k0)*exp(-
mean(k)*t)+mean(k00)*exp(-mean(kk)*t)
e = y-modelo

plot(t,modelo)
par(new=t)
plot(t,y)

require(car)
library(qpcr)
library(lmtest)
erro<-as.vector(e)
dw<-
durbinwatsontest(erro,alternative=c("two.sided"));
dw
shapiro.test(erro)
bptest(y~modelo)

```

C – ROTINA DE ANÁLISE DE DADOS NO SOFTWARE R, PARA O MODELO DE LEWIS COM CONSIDERAR ESTRUTURA DE ERROS

```

rm(list=ls())
dad50<-read.table("c:\\...\\sec50.txt",h=t)
dad50

y0 <- dad50$sec ; y0
x <- dad50$t ; x
n <- length(y0)
y<- y0[2:n]
ytmenos1<- y[1:(n-1)]
length(ytmenos1)
n<-length(y); n
t<- x[2:n]; t
length(t)

#hiperparâmetros para k
muk<-0.004
s2k<-0.0005
k.priori = rnorm(1,muk,s2k)
#hiperparâmetros para tau
alpha<-6
beta<-1
tau.priori <- rgamma(1,alpha,beta)
#hiperparâmetros para theta dist normal
muth<-0.9
s2th<-0.001
theta.priori <- rnorm(1,muth,s2th)
m<-100000 #número de iterações
#valores a serem gerados

```

```

k.post <- matrix(na,nrow=m)
tau.post<-matrix(na,nrow=m)
theta.post <- matrix(na,nrow=m)
#valores iniciais
k.post[1]<-k.priori
tau.post[1]<- tau.priori
theta.post[1]<-theta.priori
aceitacao<-0 #numero de valores aceito
#amostrador de gibbs e metropolis-hasting
for (i in 2:m){
  #gerando iterativamente (a. gibbs)
  #condicional de tau
  a <- (n+2*alpha-1)/2
  b <- (beta+sum((1/2)*(y-(exp(-k.post[i-1]*t)
    -(theta.post[i-1]*ytmenos1))^2))
    tau.post[i] <- rgamma(1,a,b)

  # condicional de theta
  m<- (
    tau.post[i-1]*(sum(y*ytmenos1-
ytmenos1*exp(-k.post[i-1]*t)))+
    (muth/s2th))/(tau.post[i-
1]*sum(ytmenos1^2)+(1/s2th))
  si <- 1/
    (tau.post[i-1]*(sum(ytmenos1^2))+(1/s2th))
  theta.post[i] <- rnorm(1,m,sqrt(si))

  #gerando iterativamente (metropolis k)
  candidato <- rnorm(1,mean(k.priori),0.003)
#teta proposto
  # uniforme para critério de aceitação
  u <-runif(1,0,1)
  ##### condicional de k
  pa<-exp((-1/(2*s2k))*((k.post[i-1]-muk)^2))*
  exp(sum((-tau.post[i-1]/2)*(y-exp(-k.post[i-
1]*t)-theta.post[i-1]*ytmenos1)^2))
  qa<-dnorm(k.post[i-1],0.0049,sqrt(0.0036))
  ##### condicional de k considerando a
distribuição auxiliar
  pn <-exp((-1/(2*s2k))*((candidato-
muk)^2))*exp(sum((-tau.post[i-1]/2)*(y-exp(-
candidato*t)-theta.post[i-1]*ytmenos1)^2))
  qn<-dnorm(candidato,0.0049,sqrt(0.0036))
  raz<-min(1,(pn*qa)/(pa*qn))

  if(u<=raz){
    k.post[i] <- candidato
    aceitacao <- aceitacao+1
  } else k.post[i] <- k.post[i-1]
}
aceitacao/m

library(boa)
library(teachingdemos)

s2.post <- 1/tau.post

#burn-in e thin
t1<-seq(1000,m,by=10)
length(t1)
k <- k.post[t1]
tau <- tau.post[t1]
s2 <- s2.post[t1]
phi <-theta.post[t1]
dados <- cbind(k,tau,phi)
boa.menu()

### resíduos
modelo = exp(-mean(k)*t) +
mean(phi)*ytmenos1
e= y - modelo
plot(t,e)
require(car)
library(qpcr)
library(lmtest)
erro<-as.vector(e)
dw1<- durbinwatson(erro,
  alternative=c("two.sided"));dw1
shapiro.test(erro)
bptest(y~modelo)

layout(matrix(c(1,2,3,4), 2, 2, byrow = true))
##### cadeias #####
plot(k, type = "l", ylab = expression(k),
  xlab = "iteração")
plot(phi, type = "l", ylab = expression(phi1),
  xlab = "iteração")
plot(tau, type = "l", ylab = expression(tau),
  xlab = "iteração")
plot(s2, type = "l", ylab = expression(sigma^2),
  xlab = "iteração")

##### densidade #####
plot(density(k), cex = 0.7, lwd = 0.5, main =
"",xlab = expression(k), ylab = "densidade")
plot(density(phi), cex = 0.7, lwd = 0.5, main =
"",xlab = expression(phi1), ylab = "densidade")
plot(density(tau), cex = 0.7, lwd = 0.5, main =
"",xlab = expression(tau), ylab = "densidade")
plot(density(s2), cex = 0.7, lwd = 0.5, main =
"",xlab = expression(sigma^2), ylab =
"densidade")

# obtendo as estimativas da média, moda e hpd
a posteriori
#install.packages("stringr")
library(stringr)
ks <- str_sub(k, end = 6)
kss <- as.numeric(ks)
k0s <- str_sub(k0, end = 6)

```

```

k0ss <- as.numeric(k0s)
phis <- str_sub(phi, end = 6)
phiss <- as.numeric(phis)
taus <- str_sub(tau, end = 7)
tauss <- as.numeric(taus)
s2s <- str_sub(s2, end = 6)
s2ss <- as.numeric(s2s)
#### estimativas
mean(kss)
median(kss)
moda <- function(v) {
  z <- table(as.vector(v))
  names(z)[z == max(z)]}
mo<- kss
mk<-moda(mo);mk
emp.hpd(kss,conf=0.95)

mean(k0ss)
median(k0ss)
moda <- function(v) {
  z <- table(as.vector(v))
  names(z)[z == max(z)]}
mo<- k0ss
mk0 <- moda(mo); mk0
emp.hpd(k0ss,conf=0.95)

mean(tauss)
median(tauss)
moda <- function(v) {
  z <- table(as.vector(v))
  names(z)[z == max(z)]}
mo<- tauss
mtau <- moda(mo); mtau
emp.hpd(tauss,conf=0.95)

mean(s2ss)
median(s2ss)
moda <- function(v) {
  z <- table(as.vector(v))
  names(z)[z == max(z)]}
mo<- s2ss
ms2<-moda(mo); ms2
emp.hpd(s2ss,conf=0.95)

mean(phiss)
median(phiss)
moda <- function(v) {
  z <- table(as.vector(v))
  names(z)[z == max(z)]}
mo<- phiss
mphi <-moda(mo);mphi
emp.hpd(phiss,conf=0.95)

mk
emp.hpd(kss,conf=0.95)

#### correlation function estimation ####
acf(k, main = "", xlab = "iterações", ylab =
expression(k))
acf(tau, main = "", xlab = "iterações",ylab =
expression(tau))
acf(s2, main = "", xlab = "iterações",ylab =
expression(sigma^2))
acf(phi, main = "", xlab = "iterações",ylab =
expression(phi1))

##### avaliadores
veross <- (((tau.post[i]/(2*pi))^(n-
1)/2))*(exp(sum((-tau.post[i]/2)*(y-exp(-
k.post[i]*t)-ytmenos1*theta.post[i]^2))))

#### dic ####
htheta <- -2*log(veross)
taum <- mean(tau); taum
km <- mean(k) ; km
thetam <- mean(phi) ; thetam
theta_barra <- cbind(taum,km,thetam)
veross_thetabarra= (((taum/(2*pi))^(n-
1)/2))*(exp(sum((-taum/2)*(y-exp(-km*t)-
ytmenos1*thetam)^2))))
htheta_barra <- -2*log(veross_thetabarra)
dbarra <- mean(htheta)
dchapeu <- htheta_barra
pd = dbarra - dchapeu

dic = dbarra + pd ; dic
dev=htheta ; dev
# p n. de parâmetros(tau, k, alfa, beta, s2k,
muk)
p=

aic = -2*log(veross) + 2*p ; aic
bic = -2*log(veross) + p*log(n) ; bic
dic = dbarra + pd ; dic
dev =htheta ; dev

#figura
par(mfrow=c(1,2))
modelo = exp(-mean(k)*t) +
mean(phi)*ytmenos1
plot(t,y,pch=16, xlab="tempo (min)",
ylab="ru", ylim=c(0,1),las=1)
lines(t,modelo, col=c("red"))
legend(200,1, c("lewis - 50°C"),
lty=c(3,1),pch=c("",""), col=c("red"),
cex=.70)

```

D – ROTINA DE ANÁLISE DE DADOS NO SOFTWARE R, PARA O MODELO DE DOIS TERMOS COM CONSIDERAR ESTRUTURA DE ERROS

```

rm(list=ls())
dad60<-read.table("c:\\...\\sec60.txt",h=t)
dad60
y1<- dad60$sec ; y1
x <- dad60$t ; x
n <- length(y1)
y<- y1[2:n]
ytmenos1<- y[1:(n-1)]
length(ytmenos1)
n<-length(y); n
t<- x[2:n]; t
length(t)
#hiperparâmetros para k1
muk<-0.005
s2k<-0.0006
k.priori <- rnorm(1,muk,s2k)

#hiperparâmetros para k0
muz<-1
s2z<-0.001
k0.priori <- rnorm(1,muz,s2z)
#hiperparâmetros para k3
mukk<-0.0055
s2kk<-0.0006
kk.priori <- rnorm(1,mukk,s2kk)
#hiperparâmetros para k2
muz0<-0.5
s2z0<-0.01
k00.priori <- rnorm(1,muz0,s2z0)
#hiperparâmetros para tau
alpha<-1.5
beta<-1
tau.priori <- rgamma(1,alpha,beta)
# hiperparâmetros phi
muth <- 0
s2th <- 1
phi.priori <- rnorm(1, muth, s2th)
m<- 100000 #número de iterações
#valores a serem gerados
k.post <-matrix(na,nrow=m)
k0.post <- matrix(na,nrow=m)
tau.post <-matrix(na,nrow=m)
kk.post <-matrix(na,nrow=m)
k00.post <- matrix(na,nrow=m)
phi.post <- matrix(na,nrow=m)
#valores iniciais
k.post[1] <-k.priori
k0.post[1] <-k0.priori
tau.post[1] <- tau.priori
kk.post[1] <-kk.priori
k00.post[1] <-k00.priori
phi.post[1] <- phi.priori
aceitacao<-0 #numero de valores aceito
aceitacaokk<-0 #numero de valores aceito
#amostrador de gibbs e metropolis-hasting
for (i in 2:m){
#condicional de tau
a <- (n+2*alpha+1)/2
b <- (beta+sum(0.5*
(y-k0.post[i-1]*exp(-k.post[i-1]*t)-
k00.post[i-1]*exp(-kk.post[i-1]*t)-
phi.post[i-1]*ytmenos1)^2))
tau.post[i] <- rgamma(1,a,b)

# condicional de k0
mkz <- (tau.post[i-1]*
sum(y*exp(-k.post[i-1]*t)-
k00.post[i-1]*exp(-t*(kk.post[i-
1]+k.post[i-1]))-
phi.post[i-1]*ytmenos1*exp(-k.post[i-
1]*t))+
muz/s2z)/(tau.post[i]*sum(exp(-k.post[i-
1]*t)^2)+ 1/s2z)
sikz <- 1/(tau.post[i-1]*sum(exp(-k.post[i-1]*t)^2)
+ (1/s2z))
k0.post[i] <- rnorm(1, mkz, sikz)

# condicional de k00
mkz0 <- (tau.post[i-1]*sum(
y*exp(-kk.post[i-1]*t)-
k0.post[i]*exp(-t*(kk.post[i-1]+k.post[i-1]))-
phi.post[i-1]*ytmenos1*exp(-kk.post[i-1]*t))+
muz0/s2z0)/
(tau.post[i]*sum(exp(-kk.post[i-1]*t)^2)+ 1/s2z0)
sikz0 <- 1/(tau.post[i-1]*sum(exp(-kk.post[i-
1]*t)^2) + (1/s2z0))
k00.post[i] <- rnorm(1, mkz0, sikz0)

# condicional de phi
mth <- (tau.post[i-1]*sum(y*ytmenos1 -
k0.post[i-1]*ytmenos1*exp(-
k.post[i-1]*t)-
-k00.post[i-1]*ytmenos1*exp(-
kk.post[i-1]*t))+ (muth/s2th))/
(tau.post[i-1]*sum(ytmenos1^2)+(1/s2th))
sith <- 1/(tau.post[i-
1]*sum(ytmenos1^2)+(1/s2th))

phi.post[i] <-rnorm(1, mth,sith)

#gerando iterativamente (metropolis k1)
candidato <- rnorm(1,k.priori,0.0006) #teta
proposto
# uniforme para critério de aceitação
u <-runif(1,0,1)
#### condicional de k1
pa<-exp((-1/(2*s2k))*((k.post[i-1]-muk)^2))*
exp(-0.5*tau.post[i]*sum(
(y-k0.post[i]*exp(-k.post[i-1]*t)-
k00.post[i]*exp(-kk.post[i-1]*t)-
phi.post[i]*ytmenos1)^2))

```

```

qa<-dnorm(k.post[i-1],0.005,0.0036)
#### condicional de k1 considerando a
distribuição auxiliar
pn <-exp((-1/(2*s2kk))*((candidato-muk)^2))*
exp(sum(-0.5*tau.post[i-1]*
(y-k0.post[i-1]*exp(-candidato*t)-
k00.post[i-1]*exp(-kk.post[i-1]*t)-
phi.post[i]*ytmenos1)^2))
qn<-dnorm(candidato,0.005,sqrt(0.0036))
raz<-min(1,(pn*qa)/(pa*qn))
if(u<=raz){
k.post[i] <- candidato
aceitacao <- aceitacao+1
} else k.post[i] <- k.post[i-1]
candidatok <- rnorm(1,kk.priori,0.0005)
uk <-runif(1,0,1)

#### condicional de k3
pak<-exp((-1/(2*s2kk))*((kk.post[i-1]-mukk)^2))*
exp(sum(-0.5*tau.post[i]*(y-k0.post[i]*exp(-
k.post[i-1]*t)-k00.post[i-1]*
exp(-kk.post[i-1]*t)-
phi.post[i]*ytmenos1)^2))
qak<-dnorm(kk.post[i-1],0,1)

#### condicional de k3 considerando a
distribuição auxiliar
pnk <-exp((-1/(2*s2kk))*((candidatok-mukk)^2))*
exp(sum(-0.5*tau.post[i]*
(y-k0.post[i]*exp(-k.post[i-1]*t)-
k00.post[i]*exp(-candidatok*t)-
phi.post[i]*ytmenos1)^2))
qnk <- dnorm(candidatok,0,1)
razk<-min(1,(pnk*qak)/(pak*qnk))

if(uk<=razk){
kk.post[i] <- candidatok
aceitacaokk <- aceitacaokk+1
#numero de vezes que a cadeia recebeu novo
valor
} else kk.post[i] <- kk.post[i-1]
}
aceitacao/m
aceitacaokk/m
library(boa)
library(teachingdemos)
s2.post <- 1/tau.post
#burn-in e thin
t1<-seq(1000,m,by=10)
length(t1)
k <- k.post[t1]
tau <- tau.post[t1]
s2 <- s2.post[t1]
phi <-phi.post[t1]
k0 <- k0.post[t1]
kk <- kk.post[t1]
k00 <- k00.post[t1]
dados <- cbind(k,k0,kk,k00,tau,phi)
boa.menu()

### resíduos
modelo =mean(k0)*exp(-
mean(k)*t)+mean(k00)*exp(-mean(kk)*t)+
mean(phi)*ytmenos1
e = y-modelo
require(car)
library(qpcr)
library(lmtest)
erro<-as.vector(e)
dw1<-durbinwatsontest(erro,
alternative=c("two.sided"));dw1
shapiro.test(erro)
bptest(y~modelo)
##### cadeias #####
layout(matrix(c(1,2,3,4,5,6,7,7), 3, 3, byrow =
true))
plot(k, type = "l", ylab = expression(k),
xlab = "iteração")
plot(k0, type = "l", ylab = expression(k0),
xlab = "iteração")
plot(kk, type = "l", ylab = expression(kk),
xlab = "iteração")
plot(k00, type = "l", ylab = expression(k00),
xlab = "iteração")
plot(tau, type = "l", ylab = expression(tau), xlab =
"iteração")
plot(s2, type = "l", ylab = expression(sigma^2),
xlab = "iteração")
plot(phi, type = "l", ylab = expression(phi1),
xlab = "iteração")
##### densidade #####
plot(density(k), cex = 0.7, lwd = 0.5, main = "",xlab
= expression(k), ylab = "densidade")
plot(density(k0), cex = 0.7, lwd = 0.5, main =
"",xlab = expression(k0), ylab = "densidade")
plot(density(kk), cex = 0.7, lwd = 0.5, main =
"",xlab = expression(kk), ylab = "densidade")
plot(density(k00), cex = 0.7, lwd = 0.5, main =
"",xlab = expression(k00), ylab = "densidade")
plot(density(tau), cex = 0.7, lwd = 0.5, main =
"",xlab = expression(tau), ylab = "densidade")
plot(density(s2), cex = 0.7, lwd = 0.5, main =
"",xlab = expression(sigma^2), ylab = "densidade")
plot(density(phi), cex = 0.7, lwd = 0.5, main =
"",xlab = expression(phi1), ylab = "densidade")
#### correlation function estimation ####
acf(k, main = "", xlab = "iterações", ylab =
expression(k))
acf(k0, main = "", xlab = "iterações",ylab =
expression(k0.post))
acf(kk, main = "", xlab = "iterações",
ylab = expression(kk))
acf(k00, main = "", xlab = "iterações",
ylab = expression(k00))
acf(tau, main = "", xlab = "iterações",ylab =
expression(tau))
acf(s2, main = "", xlab = "iterações",ylab =
expression(sigma^2))
acf(phi, main = "", xlab = "iterações",ylab =
expression(phi1))

```

```

# média, moda e hpd
library(stringr)
ks <- str_sub(k, end = 6)
kss <- as.numeric(ks)
k0s <- str_sub(k0, end = 6)
k0ss <- as.numeric(k0s)
kks <- str_sub(kk, end = 6)
kkss <- as.numeric(kks)
k00s <- str_sub(k00, end = 6)
k00ss <- as.numeric(k00s)
phis <- str_sub(phi, end = 6)
phiss <- as.numeric(phis)
taus <- str_sub(tau, end = 7)
tauss <- as.numeric(taus)
s2s <- str_sub(s2, end = 6)
s2ss <- as.numeric(s2s)

#estimativas
mean(kss)
mean(k)
median(kss)
moda <- function(v) {
  z <- table(as.vector(v))
  names(z)[z == max(z)]}
mo<- kss
mk<-moda(mo);mk
emp.hpd(kss,conf=0.95)

mean(kkss)
mean(k)
median(kkss)
moda <- function(v) {
  z <- table(as.vector(v))
  names(z)[z == max(z)]}
mo<- kkss
mk<-moda(mo);mk
emp.hpd(kkss,conf=0.95)
mean(k0ss)
median(k0ss)
moda <- function(v) {
  z <- table(as.vector(v))
  names(z)[z == max(z)]}
mo<- k0ss
mk0 <- moda(mo); mk0
emp.hpd(k0ss,conf=0.95)

mean(k00ss)
median(k00ss)
moda <- function(v) {
  z <- table(as.vector(v))
  names(z)[z == max(z)]}
mo<- k00ss
mk0 <- moda(mo); mk0
emp.hpd(k00ss,conf=0.95)

mean(tauss)
median(tauss)
moda <- function(v) {
  z <- table(as.vector(v))
  names(z)[z == max(z)]}
mo<- tauss
mtau <- moda(mo); mtau
emp.hpd(tauss,conf=0.95)

mean(s2ss)
median(s2ss)
moda <- function(v) {
  z <- table(as.vector(v))
  names(z)[z == max(z)]}
mo<- s2ss
ms2<-moda(mo); ms2
emp.hpd(s2ss,conf=0.95)

mean(phiss)
median(phiss)
moda <- function(v) {
  z <- table(as.vector(v))
  names(z)[z == max(z)]}
mo<- phiss
mphi <-moda(mo);mphi
emp.hpd(phiss,conf=0.95)
##### avaliadores
veross <- ((tau.post[i]/(2*pi))^(n-1/2))*
  sum(exp(-0.5*tau.post[i]*
    (y-k0.post[i]*exp(-k.post[i]*t)-
    k00.post[i]*exp(-kk.post[i]*t)-
    phi.post[i]*ytmenos1)^2))
#### dic ####
hphi <- -2*log(veross)
taum <- mean(tau.post); taum
km <- mean(k.post) ; km
k0m <- mean(k0.post);k0m
kkm<- mean(kk.post) ; kkm
k00m <- mean(k00.post);k00m
phim <- mean(phi.post) ; phim
phi_barra <- cbind(taum,km,k0m,kkm,k00m,phim)
veross_phibarra= ((taum/(2*pi))^(n-1/2))*
  sum(exp(-0.5*taum*
    (y-k0m*exp(-km*t)-
    k00m*exp(-kkm*t)-
    phim*ytmenos1)^2))
hphi_barra <- -2*log(veross_phibarra)
dbarra <- mean(hphi)
dchapeu <- hphi_barra
pd = dbarra - dchapeu
dic = dbarra - pd ; dic
dev=hphi ; dev

# p n. de parâmetros(tau, k, alfa, beta, s2k, muk)
p=

aic = -2*log(veross) + 2*p ; aic
bic = -2*log(veross) + p*log(n) ; bic
dic = dbarra + pd ; dic

#Figura dados
par(mfrow=c(1,1))
modelo =k0m*exp(-km*t)+k00m*exp(-kkm*t)+
  phim*ytmenos1

```

```
plot(t,y,pch=16, xlab="tempo (min)",  
      ylab="ru", ylim=c(0,1),las=1)  
lines(t,modelo)
```

```
legend(200,1, c("dois termos - 60°C "),  
       lty=c(3,1),pch=c("", ""), col=c("red", "yellow"),  
       cex=.70)
```