



NATIELE DE ALMEIDA GONZAGA

**ANÁLISE DA SECAGEM DE GRÃOS DE MILHO POR
MODELOS NÃO LINEARES: ABORDAGEM BAYESIANA E
ESTUDO DOS PONTOS INFLUENTES**

**LAVRAS - MG
2025**

NATIELE DE ALMEIDA GONZAGA

**ANÁLISE DA SECAGEM DE GRÃOS DE MILHO POR MODELOS NÃO
LINEARES: ABORDAGEM BAYESIANA E ESTUDO DOS PONTOS INFLUENTES**

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 obtenção do título de doutor.

Prof. Dr. Joel Augusto Muniz
Orientador

Prof. Dr. Edilson Marcelino Silva
Coorientador

**LAVRAS – MG
2025**

Ficha de identificação da obra elaborada pelo(a) autor(a) através do Sistema de Geração Automática de Ficha Catalográfica da Biblioteca Universitária da UFLA.

de Almeida Gonzaga, Natiele.

Análise da secagem de grãos de milho por modelos não lineares: abordagem bayesiana e estudo dos pontos influentes / Natiele de Almeida Gonzaga. 2025. 119 p. : il.

Orientador: Joel Augusto Muniz

Coorientador: Edilson Marcelino Silva

Tese (Doutorado) - Universidade Federal de Lavras, 2025.

Bibliografia.

1. Secagem de grãos. 2. Milho. 3. Modelos não lineares. 4. Inferência bayesiana. 5. Pontos influentes. I. Augusto Muniz, Joel. II. Marcelino Silva, Edilson. III. Universidade Federal de Lavras. IV. Título.

NATIELE DE ALMEIDA GONZAGA

**ANÁLISE DA SECAGEM DE GRÃOS DE MILHO POR MODELOS NÃO
LINEARES: ABORDAGEM BAYESIANA E ESTUDO DOS PONTOS INFLUENTES**

**ANALYSIS OF CORN GRAIN DRYING USING NONLINEAR MODELS: A
BAYESIAN APPROACH AND STUDY OF INFLUENTIAL POINTS**

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 obtenção do título de doutor.

APROVADA em 30 de abril de 2025.

| | |
|----------------------------------|-------|
| Dr. Joel Augusto Muniz | UFLA |
| Dra. Alessandra Querino da Silva | UFGD |
| Dr. Elias Silva de Medeiros | UFGD |
| Dr. Silvio de Castro Silveira | FEOL |
| Dr. Edilson Marcelino Silva | UFRRJ |

Prof. Dr. Joel Augusto Muniz
Orientador

Prof. Dr. Edilson Marcelino Silva
Coorientador

**LAVRAS – MG
2025**

*A Deus, acima de tudo,
à minha mãe, Sirlei; ao meu pai, Antonio (in memoriam),
aos meus irmãos, Suéli e Gabriel e
a todos os demais familiares e amigos.*

DEDICO

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus, não apenas pelo caminho percorrido, mas por ter sustentado os meus passos nos momentos em que me faltaram forças.

Aos meus familiares e amigos, com carinho. Em especial, à minha mãe, Sirlei, e ao meu pai, Antonio (in memoriam), pelo amor incondicional, apoio constante e por sempre acreditarem nas minhas escolhas.

Ao querido amigo Frei Rogério, pela presença orante em minha vida, pelas palavras de fé e encorajamento que me fortaleceram nos momentos mais desafiadores desta caminhada.

Ao meu orientador, professor Joel Augusto Muniz, pela orientação atenciosa, pela paciência, dedicação e pelas valiosas experiências e conselhos durante este período tão importante.

Ao meu coorientador, professor Edilson Marcelino Silva, pela disponibilidade, apoio, paciência e dedicação, fundamentais para a construção e desenvolvimento deste estudo.

À minha querida amiga Alessandra Querino da Silva, minha profunda gratidão pelo incentivo constante e pelo apoio generoso. Sua presença foi essencial nesta caminhada, sem sua ajuda, tudo teria sido muito mais difícil.

Aos meus amigos da UFLA, pelo companheirismo de cada dia, pelas conversas, pelos momentos de descontração e pelas memórias construídas juntos. Obrigada por transformarem minha estada em Lavras em uma experiência leve, feliz e cheia de significado.

Aos membros da banca examinadora, pela valiosa contribuição, pelas sugestões enriquecedoras e pela generosidade em dedicar tempo e conhecimento à avaliação deste trabalho.

À Universidade Federal de Lavras e ao Departamento de Estatística, em especial aos professores do Programa de Pós-Graduação em Estatística e Experimentação Agropecuária, pelo valioso conhecimento compartilhado e pela contribuição à minha formação acadêmica.

O presente trabalho foi realizado com apoio do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

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

Muito obrigada!

“A fé é crer naquilo que você não vê; a recompensa por essa fé é ver aquilo em que você crê.”

(Santo Agostinho)

"Entrega o teu caminho ao Senhor; confia nele, e Ele o fará."

(Salmos 37:5)

RESUMO

A análise da cinética de secagem de grãos é amplamente utilizada em estudos aplicados, por ser uma etapa essencial para garantir a qualidade dos grãos e reduzir perdas pós-colheita. Modelos estatísticos são empregados para descrever esse processo, representando a perda de umidade ao longo do tempo. Nesta tese, dois artigos foram desenvolvidos com o objetivo de analisar a secagem de grãos de milho, abordando a estimação dos parâmetros de modelos não lineares utilizando as inferências frequentista e bayesiana, bem como a identificação de pontos influentes nas curvas de decrescimento associadas à secagem. No primeiro artigo, destaca-se como contribuição original a aplicação da inferência bayesiana com distribuições *a priori* baseadas no princípio da máxima entropia, uma abordagem inovadora na secagem de alimentos voltada à estimação dos parâmetros de três modelos não lineares (Lewis, Henderson e Pabis e Overhults). Essa escolha permite incorporar de forma objetiva o conhecimento prévio disponível, maximizando a imparcialidade da informação prévia. As distribuições *a posteriori* foram obtidas por meio do método de Monte Carlo via Cadeias de Markov (MCMC), viabilizando a inferência mesmo em situações de alta complexidade computacional. Para selecionar o modelo que melhor representa os dados, foi utilizada a medida de Kullback-Leibler (KL). No segundo artigo, além da estimação frequentista dos parâmetros de cinco modelos não lineares (Lewis, Overhults, Page, Exponencial Simples com Três Parâmetros e Midilli), foi conduzida uma análise aprofundada para identificação e interpretação de pontos influentes nas curvas de decrescimento. Como principal contribuição desse estudo, propõe-se a definição de um novo ponto influente, denominado P_1 , com base em critérios técnicos relacionados à umidade final desejada. Além disso, pontos críticos como o ponto de inflexão, ponto de máxima aceleração e o ponto de desaceleração assintótica foram identificados por meio da análise das derivadas das funções ajustadas. A incerteza associada à localização desses pontos foi quantificada por meio de intervalos de confiança construídos via bootstrap. Nesse caso, para selecionar o melhor modelo foi utilizado coeficiente de determinação ajustado (R^2_{aj}) e o critério de informação de Akaike (AIC). Os resultados desta tese evidenciam que a aplicação de modelos não lineares, combinada a métodos estatísticos robustos e inovadores, como o uso de *prioris* de máxima entropia e a definição de novos pontos críticos, proporciona uma descrição mais precisa e informativa do processo de secagem. Tais avanços oferecem subsídios relevantes para a tomada de decisões no controle e na otimização desse processo em contextos aplicados.

Palavras-chave: secagem de grãos; modelos não lineares; inferência bayesiana; pontos influentes.

ABSTRACT

The analysis of grain drying kinetics is widely used in applied studies, as it is an essential step to ensure grain quality and reduce post-harvest losses. Statistical models are employed to describe this process, representing moisture loss over time. In this thesis, two articles were developed with the aim of analyzing the drying of corn grains, focusing on the estimation of parameters in nonlinear models using both frequentist and Bayesian inference approaches, as well as the identification of influential points on the decreasing curves associated with drying. In the first article, the main original contribution is the application of Bayesian inference with prior distributions based on the principle of maximum entropy, an innovative approach in food drying aimed at estimating the parameters of three nonlinear models (Lewis, Henderson and Pabis, and Overhults). This choice allows for the objective incorporation of available prior knowledge, maximizing the impartiality of prior information. The posterior distributions were obtained using the Markov Chain Monte Carlo (MCMC) method, enabling inference even in scenarios of high computational complexity. The Kullback-Leibler (KL) divergence was used to select the model that best represented the data. In the second article, in addition to the frequentist estimation of the parameters of five nonlinear models (Lewis, Overhults, Page, Simple Exponential with Three Parameters, and Midilli), an in-depth analysis was carried out to identify and interpret influential points on the decreasing curves. As the main contribution of this study, a new influential point, named P_1 , is proposed based on technical criteria related to the desired final moisture content. Moreover, critical points such as the inflection point, maximum acceleration point, and asymptotic deceleration point were identified through the analysis of derivatives of the fitted functions. The uncertainty associated with the location of these points was quantified using confidence intervals constructed via the bootstrap method. In this case, model selection was based on the adjusted coefficient of determination (R^2_{adj}) and the Akaike Information Criterion (AIC). The results of this thesis demonstrate that the application of nonlinear models, combined with robust and innovative statistical methods such as the use of maximum entropy priors and the definition of new critical points provides a more accurate and informative description of the drying process. These advances offer valuable support for decision-making in the control and optimization of this process in applied contexts.

Keywords: grain drying; nonlinear models; bayesian inference; influential points.

INDICADORES DE IMPACTO

O presente estudo contribui de forma significativa para o avanço do conhecimento na modelagem da secagem de grãos de milho, com impactos potenciais nas dimensões tecnológica, econômica e social. Os principais resultados envolvem o desenvolvimento e aplicação de métodos inovadores de inferência bayesiana com *prioris* de máxima entropia, além da identificação dos pontos influentes para as curvas de decrescimento e definição de um novo ponto influente (P_1) com base na umidade final segura para o armazenamento dos grãos. Essa inovação tecnológica permite otimizar o processo de secagem, reduzindo custos operacionais e perdas pós-colheita, e pode ser utilizada por indústrias de beneficiamento de grãos e cooperativas agrícolas. A caracterização de pontos críticos nas curvas de secagem contribui diretamente para a melhoria do controle do processo, promovendo maior eficiência energética e sustentabilidade no uso de recursos. Socialmente, beneficia produtores e técnicos ao promover a transferência de conhecimento sobre pontos críticos do processo, o que pode auxiliar na tomada de decisões mais assertivas no campo. Economicamente, os modelos propostos permitem otimizar o tempo e o consumo energético da secagem, reduzindo custos operacionais e aumentando a lucratividade de produtores e cooperativas agrícolas. Além disso, a melhoria na qualidade do produto final agrega valor comercial e fortalece a competitividade do milho brasileiro, tanto no mercado interno quanto no externo, promovendo inovação e sustentabilidade no setor agrícola.

IMPACT INDICATORS

The present study makes a significant contribution to advancing knowledge in the modeling of corn grain drying, with potential impacts in technological, economic, and social dimensions. The main results involve the development and application of innovative Bayesian inference methods with maximum entropy priors, as well as the identification of influential points on the decreasing curves and the definition of a new influential point (P_1) based on the safe final moisture content for grain storage. This technological innovation enables the optimization of the drying process, reducing operational costs and post-harvest losses, and can be applied by grain processing industries and agricultural cooperatives. The characterization of critical points on the drying curves directly contributes to improving process control, promoting greater energy efficiency and sustainability in resource use. Socially, it benefits producers and technicians by fostering the transfer of knowledge about critical points in the process, which can support more assertive decision-making in the field. Economically, the proposed models allow for the optimization of drying time and energy consumption, reducing operational costs and increasing profitability for producers and cooperatives. Furthermore, improvements in the final product quality add commercial value and strengthen the competitiveness of Brazilian corn in both domestic and international markets, fostering innovation and sustainability in the agricultural sector.

SUMÁRIO

| | | |
|----------------|--|-----------|
| | PRIMEIRA PARTE - UM PANORAMA GERAL..... | 12 |
| 1. | INTRODUÇÃO GERAL..... | 13 |
| 2. | REFERENCIAL TEÓRICO..... | 14 |
| 2.1 | A cultura do milho..... | 15 |
| 2.2 | Processo de secagem..... | 16 |
| 2.3 | Construção dos modelos de secagem..... | 19 |
| 2.4 | Pontos influentes em curvas de decrescimento..... | 21 |
| 2.5 | Modelos de Regressão..... | 22 |
| 2.6 | Inferência Frequentista..... | 23 |
| 2.6.1 | Métodos de Estimação de Parâmetros..... | 23 |
| 2.6.2 | Avaliadores de Qualidade de ajuste dos modelos | 24 |
| 2.6.2.1 | Coeficiente de Determinação Ajustado (R^2_{aj})..... | 25 |
| 2.6.2.2 | Crítério de Informação de Akaike (AIC)..... | 25 |
| 2.7 | Método <i>Bootstrap</i>..... | 26 |
| 2.8 | Inferência Bayesiana..... | 27 |
| 2.8.1 | Distribuição <i>a priori</i>..... | 28 |
| 2.8.1.1 | Distribuições <i>a priori</i> de máxima entropia..... | 29 |
| 2.8.2 | Distribuição <i>a posteriori</i>..... | 33 |
| 2.8.3 | Método de Monte Carlo via Cadeia de Markov (MCMC)..... | 33 |
| 2.8.3.1 | Amostrador de Gibbs..... | 34 |
| 2.8.3.2 | Algoritmo de Metropolis-Hastings..... | 35 |
| 2.8.4 | Diagnósticos de convergência..... | 35 |
| 2.8.5 | Medida de Kullback-Leibler..... | 37 |
| 2.8.6 | Intervalo de credibilidade- Highest Posterior Density (HPD)..... | 38 |
| | REFERÊNCIAS | 39 |
| | SEGUNDA PARTE - ARTIGOS | 44 |
| | ARTIGO 1 - A Bayesian Model to describe corn grain drying..... | 45 |

| | |
|---|------------|
| ARTIGO 2 - Analysis of Influential Points in Decreasing Curves Applied to Corn Grains Kernel Drying..... | 64 |
| TERCEIRA PARTE – CONSIDERAÇÕES FINAIS | 85 |
| CONSIDERAÇÕES FINAIS | 86 |
| APÊNDICE A - Anexo Artigo 1 e Material Suplementar Artigo 2..... | 87 |
| APÊNDICE B - Códigos R: Artigo 1 e Artigo 2..... | 113 |

PRIMEIRA PARTE - UM PANORAMA GERAL

1 INTRODUÇÃO GERAL

Sendo uma cultura originária da América Central, o milho (*Zea mays* L.) é atualmente cultivado em diversas regiões do mundo, destacando-se por sua ampla versatilidade de uso. Sua importância econômica torna-se evidente à medida que essa cultura atende desde demandas básicas, como a alimentação animal, até aplicações mais complexas, incluindo setores da indústria de alta tecnologia (Oliveira *et al.*, 2012).

Atualmente, os Estados Unidos, a China e o Brasil são, respectivamente, os maiores produtores de milho do mundo (USDA, 2024). Segundo dados da Companhia Nacional de Abastecimento (CONAB, 2024), a produção brasileira de milho na safra 2023/2024 foi de 115,8 milhões de toneladas.

A secagem é um dos processos mais utilizados para garantir a qualidade e a estabilidade de produtos agrícolas, uma vez que a redução do teor de água diminui significativamente a atividade biológica e as alterações químicas e físicas que ocorrem durante o armazenamento. Essa etapa é fundamental para preservar os grãos e evitar perdas pós-colheita, sendo um fator decisivo na cadeia produtiva agrícola (Gomes; Resende; Sousa, 2022).

No desenvolvimento de equipamentos de secagem, é importante compreender o comportamento dos grãos durante a remoção de umidade. Para isso, a utilização de modelos estatísticos tem auxiliado na simulação, avaliação e otimização dos processos e sistemas de secagem. Esses modelos são baseados, em grande parte, na dinâmica de secagem em camadas finas, exigindo representações matemáticas que descrevam com precisão a perda de água ao longo do tempo (Oliveira *et al.*, 2012).

Modelos de regressão não linear têm se mostrado eficazes na descrição do comportamento da secagem de grãos, pois conseguem representar adequadamente o decaimento da umidade ao longo do tempo (Gonzaga *et al.*, 2024). Além disso, métodos estatísticos como a inferência frequentista e bayesiana são importantes para a estimação de parâmetros essenciais como a taxa de secagem.

Do mesmo modo, uma análise detalhada dos modelos permite identificar pontos influentes, que representam momentos específicos de mudança no comportamento da curva de secagem, como o ponto de inflexão, o de máxima aceleração ou máxima desaceleração e desaceleração assintótica. A identificação desses pontos fornece informações adicionais relevantes para a compreensão da dinâmica do processo, o que contribui para o

aperfeiçoamento de estratégias de controle e otimização da secagem.

Esse estudo justifica-se pela necessidade de aprofundar a modelagem da secagem de milho, superando limitações ainda presentes na literatura atual. Muitos estudos concentram-se na estimação dos parâmetros dos modelos de secagem utilizando abordagens frequentistas, sem considerar adequadamente a incerteza associada às estimativas ou a incorporação de conhecimento prévio estruturado. Além disso, a inferência bayesiana, quando aplicada, frequentemente se baseia em escolhas arbitrárias de distribuições a priori, o que pode comprometer a robustez dos resultados.

Outro aspecto pouco explorado refere-se à análise de pontos críticos nas curvas de decaimento da umidade. Ainda, há uma lacuna quanto à definição de critérios objetivos para a identificação de pontos influentes relevantes do ponto de vista tecnológico, como o ponto P_1 , proposto nesta tese com base na umidade final recomendada para o armazenamento seguro dos grãos.

Assim, ao empregar a inferência bayesiana com *prioris* de máxima entropia e ao propor uma nova abordagem para a identificação e interpretação de pontos influentes nas curvas de secagem, esta pesquisa busca preencher essas lacunas, oferecendo contribuições metodológicas e práticas relevantes para a área.

A estrutura dessa tese é composta por duas partes. A primeira apresenta os tópicos que compõem a fundamentação teórica do trabalho, enquanto a segunda reúne dois artigos científicos: (i) “A Bayesian Model to Describe Corn Grain Drying”, já aceito para publicação na revista *Ciência Rural*, e (ii) “Analysis of Influential Points in Decreasing Curves Applied to Corn Grains Kernel Drying”, atualmente em processo de submissão à *European Journal of Agronomy*.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

Este capítulo apresenta conceitos e definições referentes a cultura do milho, processo de secagem, construção dos modelos de secagem, inferência frequentista e inferência bayesiana.

2.1 A cultura do Milho

Encontrando-se em climas tropicais, subtropicais e temperados, a planta de milho tem como finalidade de utilização a alimentação humana e animal, devido às suas elevadas qualidades nutricionais, contendo quase todos os aminoácidos conhecidos, além do alto valor energético. É também uma cultura associada a produção de silagem a qual é de excelente qualidade e a produção de grão, sendo uma cultura com enorme potencialidade produtiva da agricultura, a qual se torna importante para a economia nacional (Barros; Calado, 2014).

Além da importância econômica do milho, essa cultura também tem uma contribuição social significativa, especialmente em algumas regiões do Brasil. Além disso, a palha de milho é utilizada no artesanato local, na produção de peças como bonecas, flores e cestos. Culturalmente, o milho é destaque em festas e eventos, como as festas juninas, onde é ingrediente principal de pratos tradicionais (Môro; Fritsche-Neto, 2017). A Figura 1 apresenta imagens ilustrativas da espiga, da plantação e dos grãos de milho.

Figura 1- Espiga, plantação e grãos de milho.



Fonte: Rehagro e Revista Campo & Negócios (2020)

Há duas épocas de plantio do milho no Brasil: A safra de verão e a safrinha. Na safra de verão o milho é plantado entre outubro e dezembro, já o milho safrinha pode ser cultivado entre janeiro e abril. A segunda safra é chamada de safrinha pelo fato de não ser plantada em um período ideal para a cultura, podendo ocorrer deficiências hídricas, também pode ser prolongado por existir menor insolação em algumas regiões do país (Chinelato, 2019).

O Brasil, por dispor de condições climáticas e de solo extremamente favoráveis, destaca-se na produção agrícola, especialmente no cultivo de cereais. Esses fatores, aliados ao uso de tecnologias modernas no campo, resultam em alimentos de alta qualidade e em uma grande diversidade de culturas. Essa capacidade produtiva é fundamental para atender à demanda interna por produtos frescos. No entanto, o elevado volume de produção também pode gerar excedentes, o que, sem um planejamento adequado de armazenamento e escoamento, pode contribuir para o aumento do desperdício de alimentos (Alves; Nicoletti, 2016).

Apesar de toda a capacidade produtiva do Brasil, é extremamente necessário atender à exigência dos mercados nacional e internacional quanto à qualidade dos grãos, preocupação primordial, fazendo com que as práticas adotadas da colheita ao armazenamento, sejam as mais adequadas (Dias *et al.*, 2020).

Durante a colheita, é frequente que os grãos apresentem um teor de umidade acima do ideal para o armazenamento. Essa condição favorece o desenvolvimento de microrganismos, como bactérias e fungos, além de atrair insetos, o que compromete significativamente a qualidade e a segurança dos grãos armazenados. Outro fator relevante é a respiração dos próprios grãos, que continua ocorrendo após a colheita e pode acelerar processos de deterioração. Diante disso, torna-se essencial adotar medidas que possibilitem a redução desses riscos. Entre essas medidas, destaca-se o processo de secagem, que se mostra fundamental para diminuir a umidade dos grãos e, conseqüentemente, mitigar os efeitos adversos durante o armazenamento (Dias *et al.*, 2020; Silva; Mossini Junior; Dallacort, 2017).

2.2 Processo de Secagem

A secagem de alimentos é uma técnica em que ocorre a remoção de água presente no alimento por evaporação, transferindo calor e massa (Gomez *et al.*, 2020). É uma técnica muito importante para o alimento, pois prolonga sua vida útil, diminuindo assim o peso e volume, o que facilita no transporte e armazenamento, além de diversificar a oferta de produtos. Além disso, garante a qualidade e estabilidade de grãos e sementes durante o armazenamento. Devido ao volume produzido de milho no Brasil, há necessidade de armazenar, isso é impossível sem a secagem, visto que o Brasil é um dos maiores produtores de milho no mundo (Lima *et al.*, 2024).

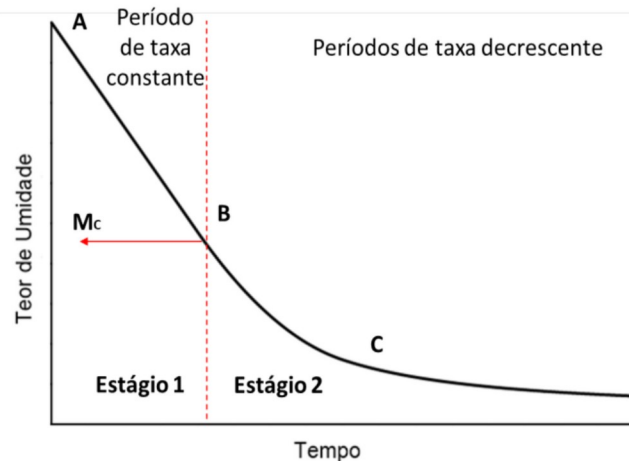
Existem diferentes sistemas de secagem de produtos alimentícios, a mais utilizada é a

secagem solar tradicional (ou secagem natural), principalmente quando se trata de grãos e sementes. A secagem natural é baseada nas ações do vento e do calor para que ocorra a remoção da água dos grãos ainda no campo, ou seja, é um processo dependente das condições climáticas locais. Mesmo sendo um método com baixo custo para o produtor rural, é uma prática mais lenta. No entanto, existem uma variedade de secadores além da energia solar, como a energia elétrica e a energia proveniente de combustão de lenha (Souza; Ruffato, 2021).

Já no processo de secagem por evaporação ocorrem dois processos simultâneos: há transferência de calor para a evaporação do líquido e transferência de massa de forma líquida ou vapor dentro do sólido para a superfície. Esses processos são responsáveis por determinar a velocidade de secagem (Gomez *et al.*, 2020).

Gomez *et al.* (2020) apresenta que no estudo de secagem de um material os resultados experimentais relacionam em geral o teor de umidade com o tempo. Na Figura 2, representa-se a curva típica de secagem que pode ser dividida em um estágio de taxa constante e um estágio de taxa decrescente.

Figura 2 - Curva típica de secagem.



Fonte: Gomez *et al.* (2020)

Sendo que :

AB – Representa à fase inicial de secagem, o período de taxa constante na secagem:

Nesse período a velocidade com que a umidade evapora é determinada principalmente pelas condições externas, como temperatura, umidade do ar e fluxo de ar, e não pelas propriedades específicas do material que está sendo secado. Nesse estágio, as características

do material não afetam diretamente a taxa de evaporação, pois ela é controlada pelos fatores do ambiente em que o processo ocorre (Ford, 2013; Gomez *et al.*, 2020).

Quando a secagem é excessivamente acelerada nesse primeiro estágio, ocorre uma redução acentuada e imediata na taxa de secagem. Isso acontece devido ao ressecamento da superfície, o que pode levar a deformações indesejadas, formação de rachaduras e outras falhas que comprometem significativamente a qualidade do material após a secagem (Gomez *et al.*, 2020).

BC – Corresponde ao primeiro período de taxa decrescente, sendo que a taxa de secagem é uma função linear do teor de umidade:

O teor de umidade no ponto B é denominado teor crítico de umidade (M_c). Esse ponto marca a transição entre o estágio de taxa constante e o estágio de taxa decrescente da secagem. Nesse período da secagem, a água líquida ainda se desloca do interior para a superfície do produto, permitindo que a evaporação continue ocorrendo diretamente a partir da superfície. Isso mantém o processo de remoção de umidade ativo, com a água migrando internamente para repor a umidade que se perde na superfície (Gomez *et al.*, 2020; Kowalski, 2012).

Após o teor crítico de umidade (M_c) ser ultrapassado, é comum elevar a temperatura e a velocidade do ar para acelerar o processo de secagem. Por isso, após o produto ultrapassar o ponto B, o processo de secagem pode prosseguir sem risco significativo de causar grandes deformações, rachaduras, empenamentos ou outros tipos de falhas que costumam ocorrer durante a secagem (Khalili *et al.*, 2014).

C – Representa o segundo período de velocidade decrescente: Nesta fase a água da superfície é totalmente removida o produto atinge o teor de umidade de equilíbrio (U_e), umidade que permanece no produto independente do tempo de secagem (Celestino, 2010).

De acordo com Gomez *et al.* (2020), no final do processo de secagem, o teor de umidade de equilíbrio, praticamente nunca é igual a zero. Esse teor é influenciado principalmente pela umidade relativa do ambiente e pela temperatura utilizada durante o processo, que determinam o ponto em que o material estabiliza sua umidade final.

O processo de secagem de produtos agrícolas, tem por finalidade determinar as taxas de secagem do produto utilizando-se o registro das perdas de massa ocorridas em uma amostra durante a remoção de água para a coleta de dados. Desse modo, as curvas de secagem, em fina camada, variam com a espécie, variedade, condições ambientais, métodos de preparo pós-colheita, entre outros fatores (Monte *et al.*, 2008; Resende *et al.*, 2009).

Nesse sentido, diversos modelos matemáticos têm sido utilizados para descrever o processo de secagem de produtos agrícolas. Esses modelos geralmente se baseiam em variáveis externas ao produto, como a temperatura e a umidade relativa do ar durante a secagem, assumindo que todo o processo ocorra apenas no período de taxa decrescente (Resende *et al.*, 2009).

Vários estudos foram desenvolvidos para avaliar a secagem de diversos tipos de grãos e sementes: Resende *et al.* (2009) estudaram a modelagem matemática para a secagem de clones de café (*Coffea canephora* Pierre) em terreiro de concreto; Costa *et al.* (2011) e Faria *et al.* (2012) analisaram a modelagem matemática da secagem de sementes de crambe (*Crambe abyssinica*); Sousa *et al.* (2011) pesquisaram a cinética de secagem de sementes de nabo forrageiro (*Raphanus sativus* L.); Oliveira *et al.* (2012) investigaram a cinética de secagem dos grãos de milho; Souza e Ruffato (2021) estudaram a cinética de secagem e qualidade de grãos de milho secados naturalmente, destacando a importância do estudo teórico do processo de secagem dos produtos agrícolas.

2.3 Construção dos modelos de secagem

Depois de estabelecer as condições de condução do experimento de secagem, como temperatura, umidade relativa do ar, entre outras, alguns cálculos são feitos para obter a Razão de Umidade (RU), e o teor de água, que é determinada durante os tempos de secagem, dada pela razão entre os teores de água no produto em um determinado instante e o teor inicial de água no produto, ambos são subtraídos pelo teor de umidade de equilíbrio (Resende *et al.*, 2010), representado pela equação:

$$RU = \frac{U - U_e}{U_i - U_e} \quad (2.1)$$

em que:

U_e : Teor de água de equilíbrio do produto (decimal b.s.);

U : Teor de água do produto (decimal b.s.);

U_i : Teor de água inicial do produto (decimal b.s.);

RU: razão de umidade do produto, adimensional.

Brooker *et al.* (1992), em um experimento com secagem de produtos porosos apontaram que no período de taxa decrescente a mudança da umidade é proporcional à

diferença instantânea entre o teor de água do material e o teor de água de equilíbrio do material, quando em condições de equilíbrio com o ar de secagem, dado da seguinte forma:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = -k(U - U_e) \quad (2.2)$$

onde, k é uma constante de secagem.

Para resolver essa equação diferencial, reorganizam-se os termos:

$$\frac{\partial U}{U - U_e} = -k \partial t \quad (2.3)$$

Agora, integrando ambos os lados da equação. No lado esquerdo, a integração é feita em relação a U , variando do teor de umidade inicial U_i até o período final U ; no lado direito, integra-se em relação ao tempo t , de 0 até t . Considerando k como uma constante diferente de zero, conforme apresentado por Afonso e Corrêa (1999), obtém-se:

$$\int_{U_i}^U \frac{1}{U - U_e} \partial U = -k \int_0^t \partial t \quad (2.4)$$

Assim:

$$\ln|U - U_e| \Big|_{U_i}^U = -kt \quad (2.5)$$

Substituindo os limites de integração:

$$\ln|U - U_e| - \ln|U_i - U_e| = -kt \quad (2.6)$$

$$\Rightarrow \ln\left(\frac{U - U_e}{U_i - U_e}\right) = -kt \quad (2.7)$$

Aplicando a função exponencial em ambos os lados:

$$\frac{U - U_e}{U_i - U_e} = \exp(-kt) \quad (2.8)$$

que corresponde a razão de umidade

$$RU = \exp(-kt) \quad (2.9)$$

denominado modelo exponencial decrescente. O numerador $[U - U_e]$ representa a quantidade de água que ainda poderá ser removida ou a quantidade de água livre em qualquer tempo t , já o denominador $[U_i - U_e]$ representa a quantidade total de água disponível para ser retirada pela secagem.

Este modelo obtido por Brooker *et al.* (1992) é chamado de modelo de Lewis. De modo geral, os modelos de secagem são obtidos por diferenciação e integração, considerando a estrutura dos materiais e as restrições adequadas às constantes de secagem. Além disso, os modelos para secagem de produtos biológicos são descritos por uma curva exponencial de decrescimento no teor de umidade do material, sendo característica de modelos de regressão não linear.

2.4 Pontos Influentes em Curvas de Decrescimento

Nos modelos de decrescimento, a identificação de pontos influentes possui grande importância na compreensão da dinâmica do fenômeno estudado. Esses pontos correspondem a instantes específicos em que ocorrem mudanças importantes na taxa de variação da curva, como máximos, mínimos ou pontos de inflexão (Apostol, 1967; Stewart, 2021). No contexto de processos como a secagem de alimentos, a análise desses pontos permite determinar fases distintas do comportamento da variável de interesse, facilitando a interpretação e otimização do processo.

A localização dos pontos influentes, como o Ponto de Inflexão (PI), o Ponto de Aceleração Máxima (PAM), o Ponto de Desaceleração Máxima (PDM) e o Ponto de Desaceleração Assintótica (PDA) é geralmente realizada por meio da análise das derivadas de primeira a quarta ordem da função ajustada aos dados experimentais. Por meio do cálculo das derivadas, é possível identificar com precisão os períodos em que há aceleração ou desaceleração na perda de umidade do produto durante o processo de secagem, bem como determinar o tempo exato em que essas mudanças ocorrem.

Já a taxa de secagem, estimada a partir do parâmetro k - conhecido como constante de secagem — nos modelos de regressão não linear com interpretação biológica, expressa a velocidade com que a umidade é removida do produto ao longo do tempo. Essa taxa pode ser interpretada como uma média representativa do comportamento do processo, sendo uma medida bastante útil para a compreensão do fenômeno, geralmente expressa em g de água por unidade de tempo de processamento.

Apesar de sua relevância para a análise do processo de secagem, os pontos influentes ainda são pouco explorados em estudos de secagem. Geralmente, esse tipo de abordagem é mais comum em pesquisas voltadas ao crescimento animal e vegetal (Mischan; Pinho; Carvalho, 2011; Teixeira *et al.*, 2021), onde o cálculo de tais pontos é um estudo consolidado.

Assim, sua aplicação no estudo da secagem representa uma oportunidade de enriquecer a análise do fenômeno e compreender melhor a dinâmica do processo.

2.5 Modelos de Regressão

A análise de regressão destaca-se como uma das técnicas estatísticas mais amplamente empregadas na atualidade, sendo fundamental para a investigação e modelagem da relação entre variáveis. Seu principal objetivo é representar essa relação por meio de funções matemáticas, possibilitando não apenas a descrição do comportamento observado, mas também a realização de inferências e previsões com base nos dados disponíveis (Hoffmann, 2015).

Os modelos de regressão descrevem a relação existente entre uma variável de interesse, denominada variável resposta (Y), e uma ou mais variáveis independentes, usualmente chamadas de variáveis explicativas, preditoras ou regressoras, representadas por X . De acordo com Seber e Wild (1989), matematicamente essa relação pode ser escrita como:

$$\mathbf{Y} = f(\mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}) + \boldsymbol{\varepsilon} \quad (2.10)$$

Em que \mathbf{Y} representa o vetor de valores observados ou variáveis dependentes, \mathbf{X} o vetor de variáveis independentes; $\boldsymbol{\theta}$ é o vetor de parâmetros do modelo; $f(\cdot)$ uma forma funcional e $\boldsymbol{\varepsilon} \sim N(0, \mathbf{I}\sigma^2)$ o vetor de erros aleatórios atribuídos ao modelo, sendo independentes e identicamente distribuídos com distribuição normal com média zero e variância constante, ou seja, $\boldsymbol{\varepsilon} \sim N(0, \mathbf{I}\sigma^2)$.

Draper e Smith (1998) apresentam que os modelos de regressão são classificados de três formas:

- a) modelos Lineares: são aqueles cuja relação com os parâmetros é linear, de modo que as derivadas parciais em relação a qualquer parâmetro não dependem de parâmetros do modelo;
- b) modelos não lineares: são aqueles cuja relação com os parâmetros é não linear, ou seja, pelo menos uma das derivadas parciais em relação a qualquer parâmetro depende de algum parâmetro do modelo, não existindo transformação que possa torná-los lineares;

- c) modelos linearizáveis: embora inicialmente não sejam lineares em seus parâmetros, podem ser transformados em modelos lineares por meio de uma reparametrização ou aplicação de funções adequadas.

Apesar de muitos processos experimentais serem satisfatoriamente descritos por modelos lineares, os fenômenos biológicos, por sua natureza complexa e frequentemente não proporcional, tendem a exigir abordagens mais flexíveis. Nesse contexto, os modelos não lineares se destacam por oferecerem ajustes mais precisos, pois são capazes de capturar com maior fidelidade as relações dinâmicas que caracterizam esse tipo de fenômeno.

A estimativa dos parâmetros em um modelo de regressão pode ser realizada por meio de diferentes métodos. Dentre eles, destaca-se a abordagem frequentista. Nessa perspectiva, assume-se que os parâmetros são fixos e correspondem a valores específicos, ainda que desconhecidos. Assim, todo o processo de inferência baseia-se unicamente nas informações fornecidas pelos dados amostrais disponíveis. Dentro desse contexto, quando se utiliza modelos lineares, os estimadores obtidos pelo método dos mínimos quadrados se destacam por apresentarem excelentes propriedades teóricas.

2.6 Inferência Frequentista

Nesta seção, serão apresentados os métodos utilizados para a estimação de parâmetros em modelos não lineares a partir da abordagem frequentista, bem como os procedimentos adotados para a construção de intervalos de confiança e os critérios empregados na seleção dos modelos que proporcionam os melhores ajustes aos dados.

2.6.1 Métodos de Estimação de Parâmetros

A estimação dos parâmetros em modelos não lineares pode ser realizada por diferentes métodos, entre os quais se destacam o Método dos Mínimos Quadrados (MMQ) e o Método da Verossimilhança. Dentre esses, o mais comumente utilizado é o MMQ, que consiste em ajustar o modelo aos dados observados minimizando a soma dos quadrados das diferenças entre os valores observados e os valores estimados pelo modelo, ou seja, minimizando a soma dos quadrados dos resíduos (Draper; Smith, 1998).

Gallant (1987) afirma que o método dos quadrados mínimos é utilizado na estimação dos parâmetros em modelos não lineares, da mesma forma que em modelos lineares. Do

ponto de vista da inferência frequentista, os estimadores obtidos pelo Método dos Mínimos Quadrados apresentam propriedades ótimas no contexto dos modelos lineares, tais como ausência de viés, distribuição aproximadamente normal e variância mínima em comparação com outros estimadores. No entanto, quando se trata de modelos não lineares, essas propriedades só são garantidas de forma assintótica, ou seja, tendem a se verificar apenas quando o tamanho amostral é suficientemente grande.

Em estudos de secagem de alimentos, é comum que os resíduos dos modelos apresentem correlação, uma vez que as observações ao longo do tempo são feitas no mesmo material, o que implica dependência entre as medições. Essa correlação residual, se não tratada, pode comprometer a validade das inferências estatísticas. Para lidar com esse problema, uma abordagem frequentemente adotada consiste na inclusão de termos autorregressivos nos modelos, os quais capturam a estrutura de dependência temporal dos resíduos. A estimação dos parâmetros, nesse contexto, é geralmente realizada por meio do método de mínimos quadrados generalizados, que permite obter estimativas mais eficientes ao considerar a correlação entre as observações.

No contexto de modelos não lineares, o processo de estimação dos parâmetros envolve a resolução de um sistema de equações normais que, diferentemente do caso linear, não possui uma solução analítica explícita. Diante disso, torna-se necessário recorrer a métodos numéricos iterativos para a obtenção dos estimadores (Draper; Smith, 1998).

Diversos métodos iterativos são descritos na literatura para a obtenção das estimativas de mínimos quadrados dos parâmetros em modelos de regressão não linear. Entre os mais destacados estão o método Steepest-Descent, também conhecido como método do gradiente, o método de Marquardt e o método de Gauss-Newton, também chamado de método da linearização. Este último, em particular, é amplamente utilizado em problemas de otimização não linear (Carneiro *et al.*, 2014; Fernandes *et al.*, 2015; Zeviani *et al.*, 2012).

O método de Gauss-Newton é amplamente utilizado na estimação de parâmetros em modelos não lineares, pois busca reduzir a soma dos quadrados dos erros. Esse método pode ser visto como uma extensão do algoritmo de mínimos quadrados e tem como principal objetivo encontrar os estimadores dos parâmetros de modo que a soma dos quadrados dos resíduos seja a menor possível (Seber; Wild, 2003).

2.6.2 Avaliadores de Qualidade de ajuste dos modelos

Em pesquisas, é comum ajustar diferentes modelos com o objetivo de descrever um determinado fenômeno. No entanto, após a obtenção das estimativas dos parâmetros, torna-se necessário adotar critérios que possibilitem ao pesquisador comparar os modelos e selecionar aquele que apresenta o melhor ajuste aos dados. A seguir, são apresentados alguns dos principais critérios utilizados para essa finalidade.

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

Para comparar modelos com diferentes números de parâmetros, geralmente é mais utilizado o coeficiente de determinação ajustado (R^2_{aj}), em vez de apenas o coeficiente de determinação (R^2), pois ele considera a quantidade de parâmetros do modelo. De acordo com Mischan e Pinho (2014), o coeficiente de determinação ajustado (R^2_{aj}) é dado por:

$$R^2_{aj} = 1 - \left[\frac{(n-i)(1-R^2)}{n-p} \right]; \quad (2.11)$$

em que:

n = número de observações,

p = número de parâmetros do modelo,

$i = 1$, se o modelo tiver intercepto, e 0 , se não tiver no modelo,

R^2 = coeficiente de determinação, estimado por:

$$R^2 = 1 - \frac{SQR}{SQTot}; \quad (2.12)$$

sendo que SQR refere-se à soma de quadrados dos resíduos, e $SQTot$, à soma de quadrados total. Na prática, quanto maior o valor de R^2_{aj} , melhor será o modelo.

2.6.2.2 Critério de Informação de Akaike (AIC)

O Critério de Informação de Akaike (AIC), foi proposto por Akaike em 1974, considera tanto a qualidade do ajuste aos dados quanto a complexidade do modelo, medida pelo número de parâmetros estimados, evitando modelos superparametrizados. Esse critério é definido por (Akaike, 1974):

$$AIC = n \ln \left(\frac{SQR}{n} \right) + 2p \quad (2.13)$$

em que: n representa o tamanho amostral, p corresponde ao número de parâmetros estimados pelo modelo de regressão, SQR refere-se à soma dos quadrados dos resíduos, e \ln denota o operador logaritmo natural.

Dentre os modelos avaliados, aquele que apresentar o menor valor do Critério de Informação de Akaike (AIC) é considerado o que proporciona o melhor ajuste aos dados.

2.7 Método *Bootstrap*

Um dos temas centrais quando se trata de métodos computacionalmente intensivos e, possivelmente, o principal responsável pela popularização desses métodos é a técnica conhecida como *bootstrap*. O método de *bootstrap* consiste na realização de reamostragens com reposição a partir da amostra original, permitindo simular diversas réplicas do processo de amostragem (Efron, 1987; Ferreira, 2013).

Inspirado na teoria da amostragem, o *bootstrap* é amplamente utilizado em diversas aplicações estatísticas, a principal vantagem associada ao uso de técnicas de reamostragem, como o *bootstrap*, está na sua flexibilidade diante de situações em que a distribuição de probabilidade da população é desconhecida ou quando o pressuposto de normalidade dos dados ou dos resíduos não é adequado (Ferreira, 2013).

O procedimento geral do método *bootstrap* para estimar um parâmetro desconhecido θ , cuja distribuição de probabilidade é f (referente à variável aleatória Y), parte do princípio de que o estimador $\hat{\theta}$ é uma função dos valores observados na amostra, ou seja, $\hat{\theta} = g(Y_1, Y_2, \dots, Y_n)$. O algoritmo segue os seguintes passos (Ferreira, 2013):

- a) inicialmente, atribui-se uma massa de probabilidade igual a $1/n$ para cada uma das observações da amostra original Y_j , com $j = 1, 2, \dots, n$, criando assim a distribuição de probabilidade empírica \hat{f} ;
- b) em seguida, são geradas amostras aleatórias com reposição a partir dessa distribuição empírica \hat{f} , denominada de amostra *bootstrap*, representada por $\hat{Y}_1, \hat{Y}_2, \dots, \hat{Y}_n$;
- c) para cada amostra *bootstrap*, calcula-se uma nova estimativa do parâmetro, denotada por $\tilde{\theta}$, aplicando a mesma função do estimador original: $\tilde{\theta} = g(\hat{Y}_1, \hat{Y}_2, \dots, \hat{Y}_n)$;
- d) por fim, os passos 2 e 3 são repetidos B vezes. Com base nessas reamostragens, é possível construir intervalos de confiança sem a necessidade de assumir uma distribuição paramétrica para os dados.

Existem diferentes tipos de intervalos de confiança obtidos por meio do método *bootstrap*, entre eles: o intervalo de confiança padrão do *bootstrap*, o intervalo baseado em percentis, o intervalo com correção de viés (BC) e o intervalo com correção de viés acelerado (BC_a).

O método BC_a é uma das abordagens mais refinadas para a construção de intervalos de confiança via *bootstrap*, apresentando vantagens em relação a outros tipos de intervalos. Segundo Efron e Tibshirani (1993), uma de suas principais qualidades é a capacidade de fornecer limites de confiança mais acurados, sendo, portanto, considerado o método ideal em muitas situações.

2.8 Inferência Bayesiana

Uma alternativa à abordagem frequentista na estimação de parâmetros é a abordagem bayesiana, na qual tanto as observações quanto os parâmetros do modelo são tratados como variáveis aleatórias. Nessa perspectiva, a inferência é realizada com base na distribuição *a posteriori* dos parâmetros, a qual resulta da combinação entre a distribuição *a priori* atribuída aos parâmetros e a distribuição conjunta dos dados observados (Paulino; Turkman; Murteira, 2003).

A teoria bayesiana, desenvolvida por Thomas Bayes no século XVIII, introduziu uma abordagem subjetiva para a probabilidade. Essa abordagem combina informações prévias com as incertezas presentes em um estudo, oferecendo uma forma mais abrangente de interpretar os dados (Silva, 2022).

A metodologia bayesiana é, atualmente, um dos principais assuntos da comunidade científica envolvida com o desenvolvimento e a aplicação de procedimentos estatísticos, sendo muito útil na modelagem estatística, principalmente devido ao avanço de recursos computacionais, que possibilita a aproximação na estimação de modelos complexos, além de vantagens inferenciais (Congdon, 2006; Heard, 2021).

Utilizando o método de Bayes obtém-se intervalos de credibilidade dos parâmetros que proporcionam uma precisa interpretação. Nesta metodologia são incorporadas no processo de estimação dos parâmetros informações já existentes sobre o fenômeno em estudo diminuindo o efeito de se ter poucos dados, considerando informações prévias de especialistas e estudos anteriores, com os dados experimentais, obtendo-se confiáveis estimativas (Congdon, 2006).

Na inferência bayesiana, o parâmetro θ (ou o vetor de parâmetros $\boldsymbol{\theta}$) é tratado como uma variável aleatória (ou um conjunto de variáveis aleatórias), à qual está associada uma distribuição de probabilidade a priori, enquanto que na inferência frequentista o parâmetro “ θ ” é uma quantidade fixa e desconhecida.

A informação prévia que o pesquisador possui sobre os parâmetros é denominada *priori*, ou distribuição *a priori*, representada por $p(\theta)$, sendo única, de natureza subjetiva e específica para cada problema (Berger *et al.*, 2006; Gillies, 2000; Paulino; Turkman; Murteira, 2003).

Considerando Y_1, \dots, Y_n a amostra de uma população indexada pelo parâmetro “ θ ” (ou um conjunto de parâmetros). A inferência bayesiana é fundamentada no teorema de Bayes, em que primeiramente é especificada a *priori* $p(\theta)$, além de uma distribuição conjunta atualizada com base nas informações presentes nos dados amostrais, que é chamada de função de verossimilhança $p(Y|\theta)$ ou $L(Y|\theta)$, que ao serem combinadas pelo teorema de Bayes formam a distribuição *a posteriori* de θ , $p(\theta|Y)$. Pelo teorema de Bayes, tem-se:

$$p(\theta|Y) = \frac{L(Y|\theta)p(\theta)}{\sum L(Y|\theta)p(\theta)} \quad (2.14)$$

onde, o denominador representa a verossimilhança marginal e, pode ser considerada como uma constante normalizadora, garantindo que $p(\theta|Y)$ seja uma densidade adequada. Desta maneira, a distribuição *a posteriori* pode ser representada por:

$$p(\theta|Y) \propto L(Y|\theta)p(\theta) \quad (2.15)$$

onde \propto indica proporcionalidade.

Os conceitos de *priori* e *posteriori* são relacionados a observação que está sendo considerada no momento. Assim $p(\theta|y)$ é a *posteriori* de θ em relação a y (que já foi observado) e $p(\theta)$ é a *priori* de θ em relação a Y que ainda não foi observado.

2.8.1 Distribuição *a priori*

A distribuição *a priori* é definida como qualquer informação que se tem sobre o “problema” antes de realizar o experimento e a coleta de dados. Segundo Congdon (2006) a distribuição *a priori* sob o parâmetro de interesse é uma etapa importante do processo de inferência, pois pode influenciar significativamente na obtenção da *posteriori* dependendo de

como for estabelecida, portanto ela deve traduzir adequadamente o conhecimento prévio sobre θ .

De acordo com Paulino, Turkman e Murteira (2003), Congdon (2006) e Silva (2022) a distribuição *a priori* pode ser classificada como informativa ou não informativa. Os conceitos lógicos e subjetivos de probabilidade representam graus de crença, condicionados às informações disponíveis seja num acontecimento, como um conjunto de afirmações sobre o problema em estudo e o pesquisador deve relacionar as informações de modo probabilístico sob o parâmetro de interesse.

Em algumas situações, não existem informações significativas da *priori*, assim a escolha de uma distribuição *a priori* fica difícil de ser realizada, nesse caso são usadas as *prioris* não informativas, assumindo-se características de uma distribuição uniforme ou uma constante (Paulino; Turkman; Murteira, 2003). Além disso, um outro tipo de *priori* que pode ser utilizada é a *priori* de máxima entropia, que será descrita a seguir.

2.8.1.1 Distribuições *a priori* de máxima entropia

Estabelecer distribuições de probabilidade que reflitam de forma adequada as informações prévias disponíveis a respeito dos parâmetros é um dos desafios fundamentais na aplicação de métodos Bayesianos para a análise de dados. Uma crítica significativa à diversidade de métodos para incluir informações *a priori* é que escolhas distintas podem resultar em diferenças consideráveis nos resultados, mesmo partindo da mesma verossimilhança. O método de máxima entropia (ME) é capaz de produzir estimativas menos tendenciosas possível sob a informação fornecida (Caticha; Preuss, 2004).

Ao modelar a incerteza sobre um parâmetro, deve-se considerar as informações disponíveis relacionadas a esse parâmetro, bem como as características da distribuição. Desta forma, os momentos da distribuição podem mostrar a forma e variabilidade da distribuição. A máxima entropia busca encontrar a distribuição de probabilidade que seja a mais uniforme possível, considerando as restrições impostas pelas informações conhecidas.

O princípio da máxima entropia é uma abordagem cujo objetivo é escolher a distribuição de probabilidade *a priori* que seja a menos informativa, ou seja, a que seja menos viesada possível, dadas as restrições ou informações disponíveis, sendo proposta por Shannon (1948) como uma medida quantitativa da incerteza de uma distribuição de probabilidade.

De acordo com o autor, toda informação associa-se à incerteza e a medida utilizada para quantificar essa incerteza corresponde a mesma expressão matemática da entropia da termodinâmica. Desse modo, o conceito de entropia, que antes era vinculado somente aos problemas da física, puderam ser aplicados a uma grande variedade de problemas, em diversas áreas do conhecimento. Nessa mesma linha de raciocínio, Jaynes (1978) concluiu que para fazer inferências baseando-se em informações parciais, precisa-se usar a distribuição de probabilidade que tenha a máxima entropia levando em consideração qualquer informação já conhecida (Antunes; Lyra, 2019).

Considere uma variável aleatória discreta X , modelada como:

$$X = \{x_k | k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm K\}$$

onde x_k é um número discreto e K o número total de níveis discretos.

Completando o modelo, considere agora que o evento $X = x_k$ ocorra com probabilidade

$$p_k = P(X = x_k)$$

Sendo:

$$0 \leq p_k \leq 1 \text{ e } \sum_{k=1}^K p_k = 1$$

Antes do evento $X = x_k$ ocorrer existe uma quantidade de incerteza, após sua ocorrência há um aumento na quantidade de informação. Além disso, é importante ressaltar que a quantidade de informação está associada ao inverso da probabilidade de ocorrência. Em outras palavras, quanto menos provável for um evento, maior será a quantidade de informação associada a ele (Haykin, 2007).

De acordo com o autor, a quantidade de informação obtida após observar o evento $X = x_k$, com probabilidade de p_k pode ser definida como a função logarítmica

$$I(x_k) = \log \left(\frac{1}{p_k} \right) = -\log p_k.$$

O valor médio de $I(x_k)$ é dado por:

$$H(X) = E[I(x_k)] = \sum_{k=1}^K p_k I(x_k) = -\sum_{k=1}^K p_k \log p_k.$$

A quantidade $H(X)$ da expressão anterior é chamada de *entropia* de uma variável aleatória X , podendo assumir um conjunto finito de valores discretos.

Pode-se então estender os conceitos teóricos de informação para variáveis aleatórias contínuas. Seja uma variável aleatória contínua X com função de densidade de probabilidade

$f_X(x)$. A definição de entropia diferencial para variável aleatória contínua, em analogia a entropia de variáveis discretas é dada por:

$$\begin{aligned} h(X) &= - \int_{-\infty}^{\infty} f_X(x) \log f_X(x) dx \\ &= - E[\log f_X(x)] \end{aligned}$$

Sendo que $h(X)$ é chamada de *entropia diferencial* de X .

Como visto anteriormente, a entropia é um tipo de medida sobre o espaço de distribuições de probabilidades, no qual as distribuições que possuem alta entropia são favorecidas em relação a outras. Diante disso, tem-se que o problema de máxima entropia é um problema de otimização restrita. Para resolver tal problema considere a maximização da entropia diferencial (Haykin, 2007):

$$h(X) = - \int_{-\infty}^{\infty} f_X(x) \log f_X(x) dx$$

sobre todas as funções de densidade de probabilidade de uma variável aleatória X , sujeita às seguintes restrições:

- a) $f_X(x) \geq 0$, com a igualdade fora do suporte de x ;
- b) $\int_{-\infty}^{\infty} f_X(x) dx = 1$;
- c) $\int_{-\infty}^{\infty} f_X(x) g_i(x) dx = \alpha_i$ para $i = 1, 2, \dots, m$.

em que $g_i(x)$ é uma função de x . As restrições 1 e 2 descrevem duas propriedades básicas de função densidade de probabilidade. A restrição 3 define os momentos de X , resumindo o conhecimento prévio disponível sobre a variável aleatória X . Segundo Templeman e Xingsi (1989) e Haykin (2007). Para resolver este problema de otimização restrito, utiliza-se o método dos multiplicadores de Lagrange, formulando inicialmente a função objetivo:

$$J(f) = \int_{-\infty}^{\infty} \left[-f_X(x) \log [f_X(x)] + \lambda_0 f_X(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(x) f_X(x) \right] dx$$

onde $\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_m$ são os *multiplicadores de Lagrange*. Derivando-o e integrando em relação a $f_X(x)$ e igualando a zero, obtemos:

$$\left[-\log [f_X(x)] - \frac{f_X(x)}{f_X(x)} + \lambda_0 + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(x) \right] = 0$$

$$\log[f_X(x)] = -1 + \lambda_0 + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(x)$$

Logo,

$$f_X(x) = \exp\left[-1 + \lambda_0 + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(x)\right]$$

Os multiplicadores de Lagrange na equação anterior são selecionados de acordo com as restrições 2 e 3. Assim, a equação acima define a distribuição de máxima entropia para o problema.

Singh *et al.* (1986) apresentam as distribuições de máxima entropia com suas respectivas restrições, algumas podem ser observadas na Tabela 1.

Tabela 1- Algumas distribuições de probabilidade e restrições necessárias para sua derivação.

| Distribuição | Função densidade de probabilidade | Restrições necessárias |
|--------------|--|---|
| Uniforme | $f(x) = \frac{1}{b-a}$ | $\int_a^b f(x) dx = 1$ |
| Exponencial | $f(x) = \delta \exp(-\delta x)$ | $\int_0^{\infty} f(x) dx = 1$ $\int_0^{\infty} x f(x) dx = E[x] = \mu$ |
| Normal | $f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu)^2\right\}$ | $\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = 1$ $\int_{-\infty}^{\infty} x f(x) dx = E[x] = \mu$ $\int_{-\infty}^{\infty} x^2 f(x) dx = \sigma^2 + \mu^2$ |
| Gama | $f(x) = \frac{1}{a\Gamma(b)} \left(\frac{x}{a}\right)^{b-1} \exp\left(-\frac{x}{a}\right)$ | $\int_0^{\infty} f(x) dx = 1$ $\int_0^{\infty} x f(x) dx = E[x] = \mu$ $\int_0^{\infty} \ln(x) f(x) dx = E[\ln(x)]$ |

2.8.2 Distribuição *a posteriori*

Toda a inferência é feita utilizando a distribuição “*a posteriori*” $p(\theta|Y)$ e as informações de interesse sobre os parâmetros podem ser obtidos pela média, moda ou mediana desta distribuição (Bernardo; Smith, 1994; Paulino; Turkman; Murteira, 2003; Young; Smith, 2005). Para obter-se informações sobre cada parâmetro em particular, calcula-se a integral da distribuição *a posteriori* conjunta em relação aos demais parâmetros obtendo, a distribuição “*marginal a posteriori*” do parâmetro de interesse.

A distribuição *a posteriori* 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, como mencionado anteriormente. Já a estimação intervalar é dada a partir de um intervalo de credibilidade definido numericamente, englobando os valores aceitáveis do parâmetro θ , com menor amplitude. O uso da informação *a priori* informativa gera intervalos de credibilidade mais estreitos comparados com a utilização de *prioris* não informativas (Box; Tiao, 1973; Paulino; Turkman; Murteira, 2003, Tang, 2020).

De maneira geral, a inferência sobre os parâmetros tende obter a *a posteriori* conjunta do modelo, com interesse na distribuição marginal do parâmetro, por meio da integral da *a posteriori* conjunta em relação a todos os outros parâmetros. No entanto, em muitos casos não é fácil realizar a inferência sobre *a posteriori*, pois a função densidade de probabilidade pode ser muito complexa, devido ao fato das integrais serem de difícil resolução, ou não possuir uma forma conhecida. Uma alternativa é utilizar os métodos numéricos, dos quais vários são apresentados na literatura, como o Método de Monte Carlo via Cadeias de Markov (MCMC), a reamostragem por importância e o método hamiltoniano. Dentre esses, o MCMC é o mais amplamente utilizado para obter as distribuições marginais *a posteriori* dos parâmetros. (Heard, 2021; Paulino; Turkman; Murteira, 2003; Silva, 2022; Tang, 2020; Young; Smith, 2005).

2.8.3 Método de Monte Carlo via Cadeia de Markov (MCMC)

O Método de Monte Carlo via cadeias de Markov (MCMC) é uma técnica de simulação estatística poderosa usada para estimar integrais e resolver problemas complexos computacionalmente que podem ser difíceis ou impossíveis de resolver manualmente ou através de métodos analíticos tradicionais (Brito *et al.*, 2023; Press, 2003; Tang, 2020; Young;

Smith, 2005). A ideia é obter uma amostra da distribuição *a posteriori* e calcular estimativas amostrais de características desta distribuição, usando técnicas de simulação iterativa, baseadas em cadeias de Markov, e assim os valores gerados não são mais independentes (Gregory, 2005; Koch, 2007; Robert; Casella, 2004).

Serão apresentados dois métodos mais utilizados de Monte Carlo via Cadeias de Markov: o amostrador de Gibbs e o algoritmo de Metropolis-Hasting. O amostrador de Gibbs é utilizado no caso em que a distribuição condicional *a posteriori* tem forma conhecida. Caso a distribuição condicional a posteriori não tenha forma conhecida utiliza-se o algoritmo Metropolis-Hastings. A ideia básica consiste em simular um passeio aleatório no espaço de θ de modo que convirja para uma distribuição estacionária, que é a distribuição de interesse no problema, a distribuição marginal *a posteriori* $p(\theta|Y)$.

2.8.3.1 Amostrador de Gibbs

O amostrador de Gibbs é uma técnica que gera amostras aleatórias de uma distribuição condicional (marginal) sem que se conheça sua densidade. O algoritmo é um processo markoviano dinâmico que requer a amostragem dessas distribuições condicionais (Gamerman; Lopes, 2006; Gelman et al., 2003; Heard, 2021; Sorensen; Gianola, 2002). Ele também é muito útil para se amostrar a função de verossimilhança nos métodos frequentistas.

O amostrador de Gibbs, analisando as distribuições condicionais completas através de algoritmo iterativo, foi introduzido por Geman e Geman (1984), no campo de reconstrução de imagens, e posteriormente utilizado por Gelfand e Smith (1990) para simular distribuições *a posteriori*.

Suponhamos então que o vetor de parâmetros θ seja dividido em n subvetores $(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_t)'$ e que as distribuições condicionais de cada parâmetro θ_i dado todos os outros sejam conhecidas. Estas distribuições são chamadas distribuições condicionais completas e denotadas por $p(\theta_i | \theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{t-1}, y)$.

O amostrador de Gibbs é definido pelo seguinte esquema (Gamerman; Lopes, 2006):

Seja $\theta^{(0)} = (\theta_1^{(0)}, \dots, \theta_t^{(0)})$, um valor inicial para θ .

Procede-se iterativamente da seguinte forma:

$$\theta_1^{(1)} \sim p(\theta_1 | \theta_2^{(0)}, \theta_3^{(0)}, \dots, \theta_t^{(0)}, y)$$

$$\theta_2^{(1)} \sim p(\theta_2 | \theta_1^{(1)}, \theta_3^{(0)}, \dots, \theta_t^{(0)}, y)$$

$$\theta_t^{(1)} \sim p(\theta_t | \theta_1^{(1)}, \theta_2^{(1)}, \dots, \theta_{t-1}^{(1)}, y)$$

Completa-se assim uma iteração do esquema do algoritmo. O esquema anterior é repetido M vezes produzindo $\theta^{(1)}, \theta^{(2)}, \dots, \theta^{(M)}$, sendo uma realização da cadeia de Markov. Resultados teóricos provam que quando $M \rightarrow \infty$, $\theta_1^{(M)}, \dots, \theta_t^{(M)}$, tende em distribuição para um vetor aleatório cuja função densidade de probabilidade conjunta é $p(\theta|Y)$.

2.8.3.2 Algoritmo de Metropolis-Hastings

Quando as distribuições condicionais completas $P(\theta_i | \theta_n, y)$, com $i \neq n$ não são identificáveis ou se a geração não iterativa é muito complicada computacionalmente, utiliza-se o Algoritmo de Metropolis-Hastings (MH). Os algoritmos de Metropolis-Hastings baseiam-se a mesma ideia dos métodos de rejeição, isto é, um valor é gerado de uma distribuição auxiliar e aceito com uma dada probabilidade. Neste mecanismo de correção, garante-se que ocorra a convergência para a distribuição de interesse *a posteriori* (Albert, 2007).

Suponha que a cadeia esteja no estado θ e um valor θ' é gerado de uma distribuição proposta $q(.|\theta)$. O novo valor θ' é aceito com probabilidade:

$$\alpha(\theta, \theta') = \min\left(1, \frac{\pi(\theta')q(\theta/\theta')}{\pi(\theta)q(\theta'/\theta)}\right), \quad (2.16)$$

onde π é a distribuição de interesse.

O algoritmo de Metropolis-Hastings pode ser especificado pelos seguintes passos:

- a) inicialize o contador de iterações $t = 0$ e especifique um valor inicial $\theta^{(0)}$;
- b) gere um novo valor θ' de $q(.|\theta)$;
- c) calcule a probabilidade de aceitação $\alpha(\theta, \theta')$ e gere $u \sim U(0, 1)$;
- d) se $u \leq \alpha(\theta, \theta')$ então aceite o novo valor e faça $\theta^{(t+1)} = \theta'$, caso contrário rejeite e faça $\theta^{(t+1)} = \theta$;
- e) incremente o contador de t para $t+1$ e volte ao passo 2.

2.8.4 Diagnósticos de convergência

O método de Monte Carlo via Cadeia de Markov é usado para o cálculo de integrais, sendo de grande interesse, por apresentar maior confiabilidade às respostas obtidas. Quanto mais pontos forem gerados, maior é a confiabilidade. Faz-se então necessário avaliar a convergência do método. Essa verificação é capaz de indicar valores para descarte e saltos nas cadeias, a fim de garantir a independência entre os valores gerados na amostra.

Descartar as iterações iniciais, referidas como “amostra de aquecimento” ou “*burn-in*” é uma prática comum no uso de métodos MCMC, pois conforme o número de iterações aumenta, a cadeia gradualmente esquece os valores iniciais, e converge para uma distribuição de equilíbrio. Para avaliar a estacionariedade de uma cadeia são utilizados alguns métodos apresentados na literatura, assim como a análise gráfica. Dentre os critérios de convergência, destacam-se: Raftery & Lewis (1992) e Geweke (1992).

O critério de Raftery & Lewis (1992) é um método que estima quantas iterações são necessárias para o Amostrador de Gibbs e algoritmo de Metropolis-Hastings apresentar convergência à distribuição estacionária, mostrando quantidades necessárias com um N mínimo, sendo o número mínimo de iterações requeridas para se obter a precisão necessária de estimação. O método fornece as estimativas do *burn-in*, que é o número de iterações que devem ser descartadas, o número total de iterações que devem ser computadas e o *thin*, que é a distância mínima de uma iteração à outra para se obter a subamostra aproximadamente independente. A regra de decisão desse critério é baseada no fator de dependência, se o mesmo for maior que 5, conclui-se que a cadeia não atingiu convergência (Nogueira; Safadi; Ferreira, 2004).

Conforme Geweke (1992), as amostras geradas com o algoritmo de Gibbs e outros métodos, geralmente não são independentes e identicamente distribuídas, dificultando a análise da convergência das cadeias, uma vez que gera aproximações numéricas de baixa precisão para o valor esperado das distribuições *a posteriori*. O método de Geweke (1992) baseia-se na aplicação de técnicas usuais em séries temporais, para verificar a convergência da cadeia. Desta forma, ele compara as estimativas de duas partes diferentes da cadeia, uma no início da simulação, contendo 10% das primeiras sequências iniciais e outra no final, composta por 50% das sequências finais das amostras.

Calcula-se então a média \bar{g}_a , das n primeiras iterações, e a média \bar{g}_b , das n últimas iterações, bem como as variâncias assintóticas s_a^2 e s_b^2 , respectivamente. Assumido-se que as razões $\frac{n_a}{N}$ e $\frac{n_b}{N}$ são fixas e $N \rightarrow \infty$, tem-se:

$$\frac{\bar{g}_a - \bar{g}_b}{\sqrt{\frac{s_a^2}{n_a} + \frac{s_b^2}{n_b}}} \sim N(0,1), \quad (2.17)$$

Se a diferença entre as médias for muito grande, há ausência de convergência da cadeia. A regra de decisão do critério de Geweke é baseada na estimativa de um valor p . Caso esse valor seja menor que um nível de significância estabelecido pelo pesquisador, conclui-se que a cadeia não atingiu convergência.

Existem também outros métodos gráficos de convergência, que são considerados informais, sendo capazes de fornecer uma ideia geral da convergência das cadeias e podendo corroborar os testes apresentados acima. Entre estes gráficos estão o traço da cadeia, histogramas e densidades para as distribuições condicionais completas *a posteriori*.

2.8.5 Medida de Kullback-Leibler

A verificação do modelo é muito importante para a análise estatística, pois as inferências Bayesianas da *priori* e *posteriori* assumem toda a estrutura de um modelo de probabilidade e correm o risco de produzir inferências imprecisas quando o modelo não é adequado. Logo, é necessário definir algum critério para comparar o modelo que melhor descreve o fenômeno em estudo. Nesse contexto, a escolha do melhor modelo pode ser realizada com base na medida de Kullback-Leibler, uma métrica que avalia a discrepância entre distribuições de probabilidade, permitindo identificar o modelo que melhor representa os dados observados (Nava, 2023).

A medida de Kullback-Leibler pode ser usada para comparar a distribuição *a posteriori* de um modelo com a distribuição *a priori*, avaliando quanta informação é obtida, ou seja, quanto a *posteriori* difere da *priori*. Sendo $P(\theta)$ e $P(\theta|y)$ as densidades *a priori* e *a posteriori*, respectivamente, a medida de Kullback-Leibler é dada por (Abufoudeh; Awwad; Bdair, 2019; Sorensen e Gianola, 2002):

$$KL(P(\theta), P(\theta|y)) = \int \dots \int \left(\log \frac{P(\theta|y)}{P(\theta)} \right) P(\theta|y) d(\theta) \quad (2.18)$$

$$KL(P(\theta), P(\theta|y)) = E \left(\log \frac{P(\theta|y)}{P(\theta)} \right) \quad (2.19)$$

$$KL(P(\theta), P(\theta|y)) = - E \left(\log \frac{P(\theta)}{P(\theta|y)} \right) \quad (2.20)$$

sendo a esperança assumida sobre a distribuição *a posteriori*.

Essa medida é sempre maior ou igual a zero, sendo igual a zero apenas quando os dados não fornecem nenhuma informação adicional sobre o parâmetro, ou seja, quando a distribuição *a priori* $P(\theta)$ é igual à distribuição *a posteriori* $P(\theta|y)$. Quanto maior o valor da medida, maior é o ganho de informação obtido (Sorensen; Gianola, 2002).

2.8.6 Intervalo de credibilidade- Highest Posterior Density (HPD)

Após se obter a informação *a posteriori* sob o parâmetro θ , na inferência bayesiana obtém-se o intervalo de credibilidade, sendo intervalo de estimativas prováveis com certo grau de confiabilidade. Por definição, uma região de credibilidade R com grau de credibilidade $\gamma = 100(1 - \alpha)\%$ é tal que $P(\theta \in R) \geq 1 - \alpha$ (Box; Tiao, 1973). Depois de ter obtido este intervalo de credibilidade, é interessante selecionar aquele com o menor comprimento possível, contendo todos os valores de θ mais plausíveis. Os valores da 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 (Silva, 2022).

REFERÊNCIAS

- ABUFOUDEH, G.K.; AWWAD, R.R. Abu; BDAIR, O.M. Bayesian estimation under Kullback-Leibler divergence measure based on exponential data. **Investigacion Operacional**, v. 40, n. 1, 2019.
- AFONSO, P. C. J; CORRÊA, P. C. Comparação de modelos matemáticos para a descrição da cinética de secagem em camada fina de sementes de feijão. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, Campina Grande, v.3, n.3, p 349-353, 1999.
- ALBERT, J. **Philosophical theories of probability**. New York: Springer Science & Business Media, 2007. 273 p.
- ALVES, T. P; NICOLETI, J. F. Influência das variáveis de processo sobre a secagem osmoconvectiva de pimentão verde. **Revista Brasileira de Tecnologia Agroindustrial**, v. 10, n. 1, 2016.
- APOSTOL, T. M. **Calculus: Volume 1 & 2**. 2^a ed. New York: John Wiley & Sons, 1967.
- ANTUNES, M.M; LYRA, Al. O Princípio da Máxima Entropia e o Problema da Razão Insuficiente. **Interdisciplinaridade em Revista**, v. 1, n. 3, p. 9-9, 2019.
- AKAIKE, H. A new look at the statistical model identification. **IEEE Transactions on Automatic Control**, Boston, v. 19, n. 6, p. 716-723, 1974.
- BARROS, J. F.C.; CALADO, J. G. **A cultura do milho**. 2014.
- BERGER, J. et al. The case for objective bayesian analysis. **Bayesian analysis**, International Society for Bayesian Analysis, v. 1, n. 3, p. 385-402, 2006.
- BERNARDO, J. M.; SMITH, A. F. **Bayesian theory**. New York: J. Wiley, 1994. v. 405. 597 p.
- BOX, G. E.; TIAO, G. C. **Bayesian inference in statistical analysis**. New York: A. Wesley, 1973. 588 p.
- BRITO, E. S. et al. Inference methods for the Very Flexible Weibull distribution based on progressive type-II censoring. **Communications in Statistics-Simulation and Computation**, p. 1-25, 2023.
- BROOKER, D.B. et al. **Drying and storage of grains and oilseeds**. New York: van Nostrand Reinhold, 1992. 450p.
- CARNEIRO, A. P. S. et al. Identidade de modelos não lineares para comparar curvas de crescimento de bovinos Tabapuã. **Pesquisa Agropecuária Brasileira, Brasília, DF**, v. 49, n. 1, p. 57-62, jan. 2014.
- CATICHA, A; PREUSS, R. Maximum entropy and Bayesian data analysis: Entropic prior distributions. **Physical Review E**, v. 70, n. 4, p. 046127, 2004.
- CELESTINO, S. M. C. Princípios de Secagem de Alimentos – Planaltina, DF: **Embrapa Cerrados**, 51 p. 2010. ISSN 1517-5111, ISSN online 2176-5081; 276.

- COSTA, L. M. et al. Coeficiente de difusão efetivo e modelagem matemática da secagem de sementes de crambe. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, Campina Grande, v. 15, n. 10, p. 1089-1096, 2011.
- CONGDON, P. **Bayesian Statistical Modelling**. 2 ed. John Wiley & Sons, Ltd, 2006.
- CONAB – COMPANHIA NACIONAL DE ABASTECIMENTO. Acompanhamento da Safra Brasileira de Grãos, Brasília, DF, v.10, safra 2022/2023, n.10. Disponível em: <<https://www.conab.gov.br/info-agro/safra/gaos/boletim-da-safra-de-graos>>. Acesso em : 08 ago. 2023.
- CHINELATO, G. Plantação de milho: 5 passos para maior produção e lucro. Blog da Aegro, 2019. Disponível em: <https://blog.aegro.com.br/plantacao-de-milho/> Acesso em 06 nov 2024.
- DIAS, J. P. et al. Análise das condições climáticas dos municípios de Marechal Cândido Rondon e Toledo para a secagem de grãos de soja e milho com ar ambiente. **Brazilian Journal of Development**, v. 6, n. 7, p. 50492-50501, 2020.
- DRAPER, N. R.; SMITH, H. **Applied regression analysis**. 3rd ed. New York:J. Wiley, 1998. 706p.
- EFRON, B. **Better bootstrap confidence intervals**. J. Am. Stat. Assoc., v.82, n.397, p.171-200, 1987.
- EFRON, B., TIBSHIRANI, R. **An introduction to the bootstrap**. New York: Chapman & Hall, 1993. 436p.
- FARIA, R. Q. et al. Cinética de secagem de sementes de crambe. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, Campina Grande, v. 16, n. 5, p. 573-583, 2012.
- FERNANDES, T. J. et al. Parameterization effects in nonlinear models to describe growth curves. **Acta Scientiarum Technology**, Editora da Universidade Estadual de Maringá-EDUEM, v. 37, n. 4, p. 397–402, 2015.
- FORD, R. W. *Ceramics drying*. Oxford, England: Elsevier, 2013.
- FERREIRA, D. F. **Estatística computacional em Java**. 1. ed. Lavras: Ed. UFLA, 2013. 695 p. ISBN 978-85-8127-013-5.
- GAMERMAN, D.; LOPES, H. F. **Markov Chain Monte Carlo: Stochastic Simulation for Bayesian Inference**. 2. ed. New York: Chapman & Hall, 2006. v. 68. 344 p.
- GALLANT, A. R. **Nonlinear statistical models**. New York: J. Wiley, 1987. 610 p.
- GELMAN, A. et al. **Bayesian Data Analysis**. 2 ed. Boca Raton: Chapman and Hall/CRC, 2003.
- GELFAND, A. E.; SMITH, A. F. Sampling-based approaches to calculating marginal densities. **Journal of the American Statistical Association**, Alexandria, v. 85, n. 410, p. 398-409, 1990.
- GEMAN, S.; GEMAN, D. Stochastic relaxation, Gibbs distributions, and the Bayesian

restoration of images. **IEEE Transactions on pattern analysis and machine intelligence**, v. 6, n. 6, p. 721-741, 1984.

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

GILLIES, D. **Philosophical theories of probability**. New York: Psychology Press, 2000. 238 p.

GOMES, F.P.; RESENDE, O.; SOUSA, E. P. Food drying: a review on applications/Secagem de alimentos: uma revisão sobre aplicações. **Brazilian Journal of Development**, v. 8, n. 2, p. 12759-12777, 2022.

GOMEZ, R. S. et al. Processo de secagem de materiais cerâmicos argilosos: uma revisão. **Research, Society and Development**, v. 9, n. 11, p. e78591110300-e78591110300, 2020.

GONZAGA, NA et al. Descrição da cinética de secagem de grãos de milho-pipoca por modelos de regressão não linear. **Revista Foco**, 17(1), e4176, 2024.

GREGORY, P. **Bayesian logical data analysis for the physical sciences: A comparative approach with mathematica support**. New York: Cambridge University Press, 2005. 488 p.

HAYKIN, S. **Redes neurais: princípios e prática**. trad. Paulo Martins Engel. 2^ª. Porto Alegre: Bookman, 2007. 900p.

HEARD, N. **An introduction to Bayesian inference, methods and computation**. Cham: Springer, 2021.

HOFFMANN, R. **Análise de regressão: uma introdução à econometria [recurso eletrônico]**. Piracicaba: ESALQ/USP, 2015.

JAYNES, E. T. "Where do we stand on maximum Entropy", The Maximum Entropy Formalism, A Conference Held at the Massachusetts Institute of Technology on May 24, 1978.

KHALILI, K. Numerical simulation of drying ceramic using finite element and machine vision. **Procedia Technology**, 12, 388–393, 2014.

KOWALSKI, S. J. **Thermomechanics of drying processes (Vol. 8)**, 2012.

KOCH, K. R. **Introduction to Bayesian statistics**. 2. ed. Berlin: Springer Science & Business Media, 2007. 257 p.

LIMA, W. F. et al. Técnicas de armazenamento e conservação de grãos de trigo. **Revista Científica Eletrônica de Ciências Aplicadas da Fait**, v.9, n 2, 2024.

MISCHAN, M. M.; PINHO, S. Z. de. **Modelos não lineares [recurso eletrônico]: funções assintóticas de crescimento**. São Paulo: Cultura Acadêmica, 184 p, 2014.

MONTE, J. E. C. et al. Sistema automático para secagem de produtos agrícolas em camada fina. **Acta Scientiarum**. Agronomy, v. 30, n. 3, p. 307-312, 2008.

MÔRO, G.V; FRITSCHÉ-NETO, R. Importância e usos do milho no Brasil. **Milho: do plantio à colheita**, 376 p, 2017.

NAVA, F. A. Significance estimation for the Kullback-Leibler divergence: the Poissonian case in seismological studies. **Geofísica internacional**, v. 62, n. 3, p. 519-523, 2023.

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.

OLIVEIRA, D. E. C. et al. Cinética de secagem dos grãos de milho. **Revista Brasileira de Milho e Sorgo**, v. 11, n. 2, p. 190-201, 2012.

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

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.

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. et al. Modelagem matemática para a secagem de clones de café (*Coffea canephora* Pierre) em terreiro de concreto. **Acta Scientiarum**. Agronomy, v. 31, p. 189-196, 2009.

RESENDE, O. et al. 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 171 ISSN 1517-8595.

ROBERT, C.; CASELLA, G. **Monte Carlo statistical methods**. 2. ed. New York: Springer Science & Business Media, 2004. 683 p.

SHANNON, C. E. A mathematical theory of communication. **The Bell System Technical Journal**, v. 27, n. 3, p. 379-423, jul. 1948.

SEBER, G. A. F.; WILD, C. J. **Nonlinear regression**. New Jersey: John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, 2003.

SILVA, S.V. C. **Precipitação Máxima Anual em Petrópolis: Análise Bayesiana-GEV**. Editora Dialética, 2022.

SILVA, F. S.; MOSSINI JUNIOR, D.; DALLACORT, R. Análise das condições climáticas dos municípios do estado de Mato Grosso para secagem de grãos com ar ambiente. **Global Science Technology**, Rio Verde, v.10, n.02, p.67-83, maio/ago. 2017.

SINGH, V. P. et al. Derivation of some frequency distributions using the principle of maximum entropy (POME). **Advances in Water Resources**, v. 9, p. 91-106, jun. 1986.

SORENSEN, D.; GIANOLA, D. **Likelihood, bayesian and MCMC methods in**

quantitative genetics. New York: Springer, 2002. 740p.

SOUSA, K. A. et al. Cinética de secagem do nabo forrageiro (*Raphanus sativus* L.). **Revista Ciência Agronômica**, Fortaleza, v. 42, n. 4, p. 883-892, 2011.

SOUZA, Í. P ; RUFFATO, S. Cinética de secagem e qualidade de grãos de milho secados naturalmente. **Research, Society and Development**, v. 10, n. 8, p. e44010817334-e44010817334, 2021.

STEWART, J. **Cálculo**. 9ª ed. São Paulo: Cengage Learning, 2021.

TANG, N. **Bayesian inference on complicated data**. BoD–Books on Demand, 2020.

TEIXEIRA, G.L. et al. Growth curves of campolina horses using nonlinear models. **Livestock Science**, v. 251, p. 104631, 2021.

TEMPLEMAN, A.; XINGSI, L. Maximum entropy and constrained optimization. In: **Maximum Entropy and Bayesian Methods**. [S.l.]: Springer, 1989. p. 447-454.

YOUNG, G. A.; SMITH, R. **Essentials of statistical inference**. New York: Cambridge University Press, 2005. v. 16. 238 p.

ZEVIANI, W. M. et al. Modelos não lineares para a liberação de potássio de esterco animal em latossolos. **Ciência Rural**, Santa Maria, v. 42, n. 10, p. 1789-1796, 2012.

SEGUNDA PARTE - ARTIGOS

ARTIGO 1 - A Bayesian Model to describe corn grain drying

Redigido conforme as normas da revista Ciência Rural (versão em processo de editoração).

A Bayesian Model to describe corn grain drying

Natiele de Almeida Gonzaga^{1*} Joel Augusto Muniz² Edilson Marcelino Silva³

ABSTRACT

Drying is a critical process for the preservation of corn (*Zea mays*), as it ensures grain quality and minimizes postharvest losses. In Brazil, where corn is the second largest agricultural crop, drying is essential for safe storage, the preservation of nutritional properties, and the enhancement of the final product's value. This study employed Bayesian inference, a methodology recognized for its efficiency in statistical analysis. Within this framework, objective priors can be determined using maximum entropy prior distributions. The study aimed to describe the drying of corn grains using maximum entropy priors for the parameters of the nonlinear models Lewis, Henderson and Pabis, and Overhults, to assess the necessity of employing autoregressive errors of order 1 (AR(1)), and to develop complete conditional distributions for the parameters of the models analyzed. Samples of marginal posterior distributions were generated using the Gibbs sampler and the Metropolis-Hastings algorithm, implemented in R software (version 4.4.1), to obtain convergence diagnostics, point estimates of mean, mode, and intervals (HPD), and the Kullback-Leibler measure for model selection. The Kullback-Leibler measure was utilized to identify the most appropriate model to describe the drying of corn grains at 40 and 60°C. The analysis revealed that the Henderson and Pabis model was the most suitable for describing the drying of corn grains at 40 °C, while the Overhults model was better suited for drying at 60 °C.

Keywords: cereal, reduction of water content, nonlinear models, maximum entropy prior, Bayesian inference.

INTRODUCTION

Corn (*Zea mays* L.) cultivation in Brazil began long before the arrival of Europeans. History shows that before the colonization of Brazil, the indigenous population had already cultivated corn as the main ingredient in their diet. Soon, with the arrival of the Portuguese, the consumption of this grain increased, and new corn-based products were integrated into the eating habits of Brazilians (VON PINHO et al., 2017; SOUSA, 2020).

Currently, the largest producers of corn in the world are the United States, China, and Brazil, respectively (USDA, 2024). According to data from the National Supply Company (CONAB, 2024), corn production in Brazil in 2023/2024 was 115.8 million tons.

Grain quality is influenced by several factors throughout the production chain from cultivation to storage. These factors include the characteristics of the species and variety, environmental conditions during development, harvesting time and procedure, drying method, and storage practices (BROOKER et al., 1992 & ALVES et al., 2001).

According to DIAS et al. (2020), temperature and relative humidity are critical agricultural variables. For grain and seed drying and storage systems, knowledge of these variables is essential because grains have the property of hygroscopicity, which allows the product to gain or lose moisture to the surrounding environment, establishing a state of equilibrium. Such a balance between the grain and environment requires precise regulation of the water content in the grain to preserve and maintain quality and germination potential.

At harvest, the grain often has a higher water content than that recommended for storage. During storage, the aim is to minimize potential deterioration by bacteria, fungi, and insects, in addition to reducing grain respiration. These reductions can be achieved through the drying process, which reduces grain respiration, decreases the water content, and regulates temperature, thereby impeding the proliferation of biological agents and prolonging the shelf life of the product (SILVA et al., 2017; DIAS et al., 2020).

Drying is defined as the rate at which the water content of a product decreases over time. This phenomenon of water loss can be represented by a decreasing sigmoidal curve, which is a characteristic of nonlinear regression models. Nonlinear regression models are important for understanding the development of biological phenomena over time (FERNANDES et al., 2017; SILVA & SAVIAN, 2019; FURTADO et al., 2019a; PEREIRA et al., 2022).

Higher temperatures during corn drying reduce the time required for drying but can concomitantly compromise the final quality of the grains. Rapid cooling can lead to hardening and cracking, whereas excessive heat can degrade proteins and vitamins and alter color and flavor due to chemical reactions. Therefore, it is essential to regulate the temperature and drying time to minimize losses and preserve the product quality (TIMM et al., 2023).

According to GUIMARÃES FILHO et al. (2020), the use of mathematical models to simulate the drying process has emerged as a pivotal tool, as it facilitates the reduction of time and costs associated with the development of the drying process while concurrently enabling the prediction of drying times and the development of equipment suitable for the phenomenon.

Several mathematical models have been used to describe grain drying. Among them, the most prominent are the Lewis model (LEWIS, 1921), Page model (PAGE, 1949), Overhults model (SOUZA et al., 2015), Henderson and Pabis model (HENDERSON & PABIS, 1961), Midilli model (MIDILLI et al., 2002), Verma model (VERMA et al., 1985), and Thompson model (THOMPSON, 1967). Each of these models has advantages and limitations, and is chosen according to the material under study and experimental conditions.

Although drying modeling has been widely studied, the application of Bayesian inference in this area remains poorly explored. In the present study, this approach is employed as an alternative to estimate the model parameters, allowing for a more flexible analysis and integration of prior information. The advent of advanced computational resources has led to the prominence of Bayesian inference in statistical modeling, facilitating the estimation of complex models with greater precision and offering inferential advantages (CONGDON, 2006 & HEARD, 2021).

The foundation of Bayesian inference rests on Bayes' Theorem, which integrates prior knowledge of the model parameters, as represented by the prior distribution $p(\theta)$, with data-derived information, symbolized by the likelihood function $p(Y/\theta)$. This integration process yields the posterior distribution, which represents the updated knowledge about the parameters based on the observed data (PAULINO et al., 2003).

The prior distribution can be defined through the principle of maximum entropy, which ensures that individuals with the same information assign the same distribution to the parameter. The principle of maximum entropy is employed to ascertain the most balanced and least biased probability distribution, taking into account the restrictions imposed by known information (ANTUNES & LYRA, 2019).

In this context, the objective was to describe the drying process of corn grains at temperatures of 40 °C and 60 °C. To this end, maximum entropy priors were employed for the parameters of the nonlinear models Lewis, Henderson and Pabis, and Overhults via Bayesian inference. This approach was then used to determine the most appropriate model.

MATERIAL AND METHODS

The database used to adjust the models was extracted from COSTA et al. (2022) and corresponds to the drying of flint corn in a thin layer, with 16 observations being made. To conduct the experiments, a drying system was developed that includes a fixed bed dryer and a

thin-layer drying chamber, obtaining equipment that allowed efficient control of the temperature and regulation of the air speed at the inlet.

According to the authors, grains of the corn cultivar BG7640VYH were used in the experiments, a hybrid supplied by Embrapa, widely adapted to tropical regions and with no restrictions on the growing season. The grains were harvested and mechanically threshed in a grain harvester, with the plant in an adequate state of conservation.

Initially, measurements were taken of the grain bed temperature, as well as the temperature and relative humidity of the drying air. The initial grain moisture content was 18% on a wet basis and increased to approximately 12% to 14%. The tests were carried out following a factorial experimental design. Measurements of the temperature and relative humidity of the drying air, as well as the temperature and mass of the grain bed, were recorded every 10 minutes over 150 minutes at drying temperatures of 40 °C and 60 °C. At the end of the experiment, the experimental data were analyzed.

The nonlinear regression models fitted to the experimental data of corn grain drying are:

i) Lewis model (LEWIS, 1921):

$$RU_i = e^{-kt_i} + u_i \quad (2.1)$$

ii) Henderson and Pabis model (HENDERSON & PABIS, 1961):

$$RU_i = k_0 e^{-kt_i} + u_i \quad (2.2)$$

iii) Overhults model (SOUZA et al., 2015):

$$RU_i = e^{(-kt_i)^c} + u_i \quad (2.3)$$

where:

$i = 1, 2, \dots, n$; $u_i = \varphi_1 u_{i-1} + \dots + \varphi_p u_{i-p} + \varepsilon_i$, where u_i is the residual of the fit at the i -th time; φ_1 is the autoregressive parameter of order 1; u_{i-1} is the residual of the fit at the time immediately prior to the i -th measurement; φ_p is the autoregressive parameter of order p ; u_{i-p} is the residual of the fit at p times prior to the i -th measurement; ε_i is white noise, with normal distribution $N(0, \sigma^2)$. When the residuals are independent, the parameters φ_i will be zero, and consequently $u_i = \varepsilon_i$ (MORETTIN & TOLOI, 2006).

RU_i describes the average value of the moisture ratio (dimensionless) of corn grains at time i in minutes; k_0 corresponds to the initial condition of the grain, being close to 1 because it represents 100% of the initial water content of the grain; k refers to the drying rate or variation in water content loss over time, with values between 0 and 1; c is a dimensionless parameter associated with relative air humidity; e is the base of the Neperian logarithm, and t_i is the time (minutes) of analysis of the dependent variable for measuring moisture in the grain.

For this work, information from previous studies on the drying of agricultural products was used. The prior distributions were selected based on knowledge of the drying process, considering estimated values of the parameters and physical aspects of the models, according to FURTADO et al. (2019a), FURTADO et al. (2019b), COSTA et al. (2022), GONZAGA et al. (2024a) & GONZAGA et al. (2024b), being defined for each parameter or proposed according to their characteristics.

Priors were initially established for the parameters of the Lewis, Overhults and Henderson, and Pabis models. Since the parameters k , k_0 , and c assume only positive values, a mean value and the interval of the parameters around this value were considered to have finite variance, and the following prior distributions of maximum entropy were obtained:

For parameters k and k_0 , the truncated normal distribution:

$$p(k|\mu_k, \sigma_k) \propto \exp\left\{\frac{-1}{2\sigma_k^2}[k - \mu_k]^2\right\}, \quad 0 < k < \infty \quad (2.4)$$

$$p(k_0|\mu_0, \sigma_0) \propto \exp\left\{\frac{-1}{2\sigma_0^2}[k_0 - \mu_0]^2\right\}, \quad 0 < k_0 < \infty \quad (2.5)$$

For parameter c , the uniform distribution, due to the absence of specific prior information, guarantees a non-informative approach that assigns equal probability to all possible values within the interval, being:

$$p(c) \propto \frac{1}{b-a}, I_{[0,2]} \quad (2.6)$$

Since σ^2 can only assume positive values and the exponential distribution is defined in the interval $[0, \infty)$, for the precision $\tau = \frac{1}{\sigma^2}$, the distribution of maximum entropy was the exponential one with hyperparameter δ , that is,

$$p(\tau|\delta) = \exp(-\delta\tau) \quad (2.7)$$

Generally, in studies related to food drying, the residuals of the models are correlated, as in the study by FURTADO et al. (2019a), FURTADO et al. (2019b), GONZAGA et al. (2024a) & GONZAGA et al. (2024b), since the measurements taken in time are performed on the same material. Due to this, an error structure was considered, adding the autoregressive parameter ϕ_1 (AR(1)) in all models.

Since the Normal distribution is defined for positive and negative values, for ϕ_1 , the prior distribution of maximum entropy used was the normal one, with mean 0 and variance v , for all $0.5 < v < 1$ and $-1 < \phi_1 < 1$ (CONGDON, 2006).

$$p(\phi_1|0, v) \propto \exp\left\{\frac{-1}{2v}[\phi_1 - 0]^2\right\} \quad (2.8)$$

At a temperature of 40 °C, $\mu_k = 0.15$ and $\sigma_k = 0.1$, $\mu_0 = 0.99$ and $\sigma_0 = 0.02$ were considered, and for the parameter c , the prior defined was the uniform distribution (0.2). Since σ^2 can only assume positive values, the distribution of maximum entropy for the precision $\tau = 1/\sigma^2$ is exponential with hyperparameter $\delta = 1/0.05^2$, all these values were assigned considering food drying studies carried out by FURTADO et al. (2019a), FURTADO et al. (2019b), COSTA et al. (2022), GONZAGA et al. (2024a), and GONZAGA et al. (2024b). For the temperature of 60 °C, $\mu_k = 0.18$ and $\sigma_k = 0.3$ were considered, $\mu_0 = 0.99$, and $\sigma_0 = 0.3$ based on food drying studies performed by FURTADO et al. (2019a) & COSTA et al. (2022).

Assuming that $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$, for the Lewis model, considering the independent error structure $y_i = e^{(-kt_i)} + \varepsilon_i$, when considering the dependence of residuals $y_i = e^{(-kt_i)} + \phi_1 y_{i-1} + \varepsilon_i$ (to facilitate notation, $y_i = RU_i$), therefore, we have $\varepsilon_i = y_i - e^{(-kt_i)} - \phi_1 y_{i-1}$.

The likelihood for the Lewis model with error structure is given by:

$$L(Y|k, \tau, \phi_1) \propto \tau^{\frac{n-1}{2}} \exp\left\{-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [y_i - e^{(-kt_i)} - \phi_1 y_{i-1}]^2\right\} \quad (2.9)$$

where $Y = (y_1, y_2, \dots, y_n)$.

Assuming that $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$, for the Henderson and Pabis model, considering dependence of residuals $y_i = k_0 e^{(-kt_i)} + \phi_1 y_{i-1} + \varepsilon_i$, therefore, we have $\varepsilon_i = y_i - k_0 e^{(-kt_i)} - \phi_1 y_{i-1}$.

The likelihood for the Henderson and Pabis model with error structure is given by:

$$L\langle Y|k, k_0, \tau, \varphi_1 \rangle \propto \tau^{\frac{n-1}{2}} \exp\left\{-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [y_i - k_0 e^{(-kt_i)} - \varphi_1 y_{i-1}]^2\right\} \quad (2.10)$$

And assuming that $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$, for the Overhults model, considering the dependence of residuals $y_i = e^{(-kt_i)^c} + \varphi_1 y_{i-1} + \varepsilon_i$ therefore, we have $\varepsilon_i = y_i - e^{(-kt_i)^c} - \varphi_1 y_{i-1}$.

The likelihood for the Overhults model with error structure is given by:

$$L\langle Y|k, c, \tau, \varphi_1 \rangle \propto \tau^{\frac{n-1}{2}} \exp\left\{-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [y_i - e^{(-kt_i)^c} - \varphi_1 y_{i-1}]^2\right\} \quad (2.11)$$

Using Bayes' theorem (performing the product between the likelihood and the prior), the joint posterior distributions of the model parameters were obtained. From the joint posterior distributions of the parameters, the complete conditionals were obtained. When these conditionals have known forms, the Gibbs sampler can be applied, otherwise, the Metropolis-Hastings algorithm is necessary (PEREIRA et al., 2009; SILVA et al., 2020; HEARD, 2021; SILVA et al., 2022).

The Kullback-Leibler measure was employed to determine the model that provided the most substantial information gain, with the model with the highest value being the most appropriate (SORENSEN & GIANOLA, 2002). The entire computational part was developed using the open-access R statistical software (R DEVELOPMENT CORE TEAM, version 4.4.1, 2024). To implement the Gibbs sampler and Metropolis-Hastings algorithms, 100,000 values were generated from each chain, with the initial 500 iterations discarded (burn-in), and 10 values skipped (thin). After the burn-in phase, the initial 500 iterations were discarded, and the thin phase was executed, selecting one value every 10 iterations. The final sample size was reduced to 9,951 iterations. The convergence of the chains was verified using the Geweke and Raftery & Lewis criteria, available in the BOA (Bayesian Output Analysis) package.

RESULTS AND DISCUSSION

Complete conditional distributions were obtained for the parameters of each model from the joint posterior distributions. The corresponding algorithms were then generated, and the convergence of the samples obtained for each fitted model was analyzed based on the results of the Raftery and Lewis (1992) and Geweke (1992) tests. After these steps, posterior estimates of the mean and mode for each parameter are presented.

The complete conditional distributions of the parameters for the Lewis model are:

$$p(\tau|k, \varphi_1, Y) \sim \text{Gama} \left(\frac{n+1}{2}, \frac{\sum_{i=2}^n (y_i^2 + e^{(-kt_i)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_i e^{(-kt_i)} + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{(-kt_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i) + 2\delta}{2} \right)$$

$$p(\varphi_1|k, \tau, Y) \sim \text{Normal} \left(\frac{\tau \sum_{i=2}^n (-y_{i-1} e^{(-kt_i)} + y_{i-1} y_i)}{\tau \sum_{i=2}^n (y_{i-1})^2 + \frac{1}{v}}, \frac{1}{\left(\tau \sum_{i=2}^n (y_{i-1})^2 + \frac{1}{v} \right)} \right)$$

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

Because the complete conditional distributions for parameters τ and φ_l have a known form, the Gibbs Sampler is used to sample from the parameter marginals. For the parameter k , the conditional posterior distribution does not have a known shape, and therefore, it was necessary to use the Metropolis-Hastings algorithm to sample from this distribution (MARTINS FILHO et al., 2008 & SILVA et al., 2023).

The complete conditional distributions of the parameters for the Henderson and Pabis model are as follows:

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

$$p(\varphi_1|k, k_0, \tau, Y) \sim \text{Normal} \left(\frac{\tau \sum_{i=2}^n (-y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} + y_{i-1} y_i)}{\tau \sum_{i=2}^n (y_{i-1})^2 + \frac{1}{v}}, \frac{1}{\left(\tau \sum_{i=2}^n (y_{i-1})^2 + \frac{1}{v} \right)} \right)$$

$$p(k_0|k, \varphi_1, \tau, Y) \sim \text{Normal} \left(\frac{\tau \sum_{i=2}^n (y_i e^{(-kt_i)} - \varphi_1 y_{i-1} e^{(-kt_i)}) + \frac{\mu_0}{\sigma_0^2}}{\tau \sum_{i=2}^n (e^{(-kt_i)^2}) + \frac{1}{\sigma_0^2}}, \frac{1}{\left(\tau \sum_{i=2}^n (e^{(-kt_i)^2}) + \frac{1}{\sigma_0^2} \right)} \right)$$

$$\exp\langle k|\tau, k_0, \varphi_1, Y \rangle \propto \exp\left\{-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [y_i - k_0 e^{-kt_i} - \varphi_1 y_{i-1}]^2\right\} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma_k^2} [k - \mu_k]^2\right\}$$

The complete conditional distributions of parameters τ , φ_1 , and k_0 have known shapes, allowing sampling using the Gibbs Sampler. However, the conditional posterior distribution of parameter k does not have a known shape, requiring the use of the Metropolis-Hastings algorithm to sample this distribution (FERNANDES et al., 2022).

The complete conditional distributions of the parameters for the Overhults model are:

$$p\langle \tau | k, c, \varphi_1, Y \rangle \sim \text{Gama}\left(\frac{n+1}{2}, \frac{\sum_{i=2}^n (y_i^2 + e^{(-kt_i)^c} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_i e^{(-kt_i)^c} + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{(-kt_i)^c} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i) + 2\delta}{2}\right)$$

$$p\langle \varphi_1 | k, c, \tau, Y \rangle \sim \text{Normal}\left(\frac{\tau \sum_{i=2}^n (-y_{i-1} e^{(-kt_i)^c} + y_{i-1} y_i)}{\tau \sum_{i=2}^n (y_{i-1})^2 + \frac{1}{v}}, \frac{1}{\tau \sum_{i=2}^n (y_{i-1})^2 + \frac{1}{v}}\right)$$

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

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

Therefore, for the parameters τ and φ_1 , the complete conditional distributions presented a known form. Conversely, for parameters k and c , the conditional posterior distribution does not have a known form; therefore, it was necessary to use the Metropolis-Hastings algorithm to generate the results (GONZAGA et al., 2024c).

Table 1 lists the results for the Lewis, Henderson and Pabis, and Overhults models in relation to the RAFTERY & LEWIS (1992) & GEWEKE (1992) tests for all the models analyzed.

Table 1 – Dependence Factor (DF) values from the Raftery and Lewis diagnostic and p-values from the Geweke diagnostic, regarding the convergence of the models for the drying data of corn grains at temperatures of 40 °C and 60 °C.

| Model | Parameter | 40 °C | | 60 °C | |
|---------------------|-----------|------------------------|--------|------------------------|--------|
| | | Raftery and Lewis (DF) | Geweke | Raftery and Lewis (DF) | Geweke |
| Lewis | k | 0.9914 | 0.6493 | 0.9914 | 0.2038 |
| | τ | 0.9591 | 0.1722 | 0.9831 | 0.7439 |
| | ϕ_1 | 0.9914 | 0.6428 | 1.0245 | 0.0810 |
| Henderson and Pabis | k | 0.9915 | 0.3875 | 0.9915 | 0.9009 |
| | k_0 | 0.9991 | 0.9318 | 1.0501 | 0.6069 |
| | τ | 1.0208 | 0.5275 | 0.9671 | 0.5000 |
| | ϕ_1 | 0.9831 | 0.6029 | 0.9831 | 0.2247 |
| Overhults | k | 1.0162 | 0.6425 | 0.9831 | 0.3158 |
| | c | 0.9991 | 0.9735 | 1.0162 | 0.6009 |
| | τ | 1.0245 | 0.5505 | 1.0077 | 0.4556 |
| | ϕ_1 | 1.0246 | 0.4767 | 0.9914 | 0.2284 |

The Raftery and Lewis criterion indicated convergence in all cases, as evidenced by the Dependence Factor (DF) being less than five. According to Raftery and Lewis (1992), DF values below 5 are indicative of chain convergence. The Geweke test also indicates the stationarity of the chains, since the p-values were non-significant, being greater than 0.05, for all parameters and in all models.

Using the Geweke and Raftery and Lewis criteria, SILVA et al. (2020), SILVA et al. (2022), and GONZAGA et al. (2024c) found non-significant p-values when assessing the convergence of MCMC chains in the study of the zinc extraction curve in soil with sewage sludge, in the description of CO₂ evolved from soil treated with swine waste by linear regression models, and in the drying of rice grains, respectively.

Table 2 presents the Kullback-Leibler measure for the Lewis, Henderson and Pabis, and Overhults models. The Henderson and Pabis nonlinear model yielded a greater information gain than the others at a temperature of 40 °C, and the Overhults nonlinear model provided a greater information gain at a temperature of 60 °C.

Table 2 – Kullback-Leibler (KL) measure of the models at temperatures of 40 °C and 60 °C.

| | 40 °C | 60 °C |
|---------------------|------------|------------|
| Model | KL measure | KL measure |
| Lewis | 10.2698 | 11.2211 |
| Henderson and Pabis | 14.3175 | 12.8457 |
| Overhults | 12.2428 | 14.1038 |

Table 3 presents the posterior means and modes, and the credible interval (HPD) for each parameter of the models for the analysis of corn grain data at temperatures of 40 °C and 60 °C.

Table 3 – Estimates of the mode and mean of the parameters and their respective HPD intervals (Lower Limit (LL) and Upper Limit (UL)) for the Henderson and Pabis and Overhults models, related to the drying data of corn grains at temperatures of 40 °C and 60 °C, respectively, considering first-order autoregressive errors.

| 40 °C | | | | | |
|---------------------|-------------|--------|--------|----------|----------|
| Model | Parameter | Mode | Mean | HPD (LL) | HPD (UL) |
| Henderson and Pabis | k | 0.1218 | 0.1228 | 0.1148 | 0.1304 |
| | k_0 | 0.9201 | 0.9885 | 0.3906 | 1.0676 |
| | τ | 0.0006 | 0.0007 | 0.0002 | 0.0012 |
| | φ_1 | 0.7951 | 0.8002 | 0.7418 | 0.8593 |
| 60 °C | | | | | |
| Model | Parameter | Mode | Mean | HPD (LL) | HPD (UL) |
| Overhults | k | 0.3782 | 0.3780 | 0.3760 | 0.3799 |
| | c | 0.4086 | 0.5723 | 0.0957 | 1.4950 |
| | τ | 0.0006 | 0.0007 | 0.0002 | 0.0012 |
| | φ_1 | 0.6449 | 0.7012 | 0.2235 | 0.9578 |

The estimates of the k parameter indicate that the mean and mode values were between 0 and 1, as expected, given their relationship with the corn drying rate (FURTADO et al., 2019b; GONZAGA et al., 2024a; GONZAGA et al., 2024c). Since the posterior mean and

mode of k were close for both models, according to SAVIAN et al. (2009) & MENDES et al. (2021), this indicates symmetry in the distributions. The values obtained for the drying rate parameter k in the Overhults model were higher than those of the Henderson and Pabis model for the posterior mean and mode. This is also common, since the higher the temperature, the higher the drying rate (GOMEZ et al., 2020).

According to the estimates of the k_0 parameter, the mean and mode values were close to 1, which was expected, since they refer to 100% of the initial water content of the corn grains. GONZAGA et al. (2024a) and GONZAGA et al. (2024c) also report values close to 1 when fitting the Henderson and Pabis model in the drying kinetics of popcorn grains using a frequentist approach and in the drying kinetics of rice grains using a Bayesian approach, respectively. The posterior mean and mode estimates were similar for k_0 , as well as for τ .

The c parameter of the Overhults model yielded distinct estimates for the posterior mean and mode. For MENDES et al. (2021), when the posterior mean and mode estimates differ, it is preferable to employ the posterior mode estimate. Consequently, the point estimate is considered the most representative of the posterior mode.

The first-order autoregressive component (φ_1), which is employed to represent the residual autocorrelation identified in the data, exhibited positive values in the three models analyzed. This finding indicates a positive first-order correlation between the residuals. The estimates of the posterior mean and mode of φ_1 were close in both models. PEREIRA et al. (2022) incorporated the dependence of residuals in their study on the Bayesian modeling of the coffee tree growth curve and obtained positive values of the first-order autoregressive component (φ_1).

All model parameters were significant, as evidenced by the 95% probability credible intervals that did not contain zero. Consequently, the nonlinear models fitted using the Bayesian methodology with maximum entropy priors were demonstrated to adequately describe the drying kinetics of corn grains.

According to the Henderson and Pabis model, the drying rate was determined to be 0.1228 g of water/min on average for a temperature of 40 °C. This rate exhibited a range within the Highest Posterior Density (HPD) interval of 0.1148 to 0.1304 g of water/min. For a temperature of 60 °C, the Overhults model indicates an average drying rate of 0.3780 g of water/min, with a range of 0.3760 to 0.3799 g of water/min according to the HPD. In a separate study, GONZAGA et al. (2024b) examined the drying kinetics of bean seeds and identified similar values for the k parameter in the Overhults model.

CONCLUSION

All nonlinear models fitted using Bayesian methodology with maximum entropy priors were found to be suitable for describing corn grain drying. The maximum entropy method was found to be particularly useful for determining the objective priors of the model parameters.

The Henderson and Pabis nonlinear model yielded a greater information gain than the other models at a temperature of 40 °C, and the Overhults model provided a greater information gain at a temperature of 60 °C, as determined by the Kullback-Leibler measure.

Although the fitted models demonstrated efficiency in describing the drying process, their application could be expanded to different types of grains, environmental conditions, and drying methods. Furthermore, while the maximum entropy criterion was employed to define the prior distributions, other prior approaches could be investigated to evaluate their impact on parameter estimates. In addition to the models examined, other drying models can be used, thereby expanding the analysis and facilitating the comparison of different modeling strategies to more accurately represent the process.

ACKNOWLEDGMENTS

The authors thank the National Council for Scientific and Technological Development (CNPq) for financial support.

DECLARATION OF CONFLICT OF INTEREST

We have no conflict of interest to declare.

AUTHORS' CONTRIBUTIONS

All authors contributed equally to the conception and writing of the manuscript. All authors critically reviewed the manuscript and approved the final version.

REFERENCES

ALVES, WM et al. Qualidade dos grãos de milho em função da umidade de colheita e da temperatura de secagem. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, v. 5, p. 469-474, 2001. Available from:
<<https://www.scielo.br/j/rbeaa/a/tcp8xd3jVyhXDKRYwn7mngG/?lang=pt>>. Accessed: Jan. 03, 2025. doi: <https://doi.org/10.1590/S1415-43662001000300017> .

ANTUNES, MM; LYRA, AI. O Princípio da Máxima Entropia e o Problema da Razão Insuficiente. **Interdisciplinaridade em Revista**, v. 1, n. 3, p. 9-9, 2019. Available from: <<https://revistas.hcte.ufrj.br/index.php/interdisciplinaridadeemrevista/article/view/11>>. Accessed: Jan. 04, 2025.

BROOKER, DB et al. **Drying and storage of grains and oilseeds**. New York: van Nostrand Reinhold, 1992. 450p.

CONAB – COMPANHIA NACIONAL DE ABASTECIMENTO. Acompanhamento da Safra Brasileira de Grãos, Brasília, DF. Disponível em: <<https://www.conab.gov.br>>. Accessed: Oct. 10, 2024.

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

COSTA, LA et al. Mathematical modeling for drying flint corn in a thin layer. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, v. 57, 2022. Available from: <<https://www.scielo.br/j/pab/a/4yQfkb9bgLRBqMzTrFgrDLz/>>. Accessed: Jun. 30, 2024. doi: <https://doi.org/10.1590/S1678-3921.pab2022.v57.02845>.

DIAS, JP et al. Análise das condições climáticas dos municípios de Marechal Cândido Rondon e Toledo para a secagem de grãos de soja e milho com ar ambiente. **Brazilian Journal of Development**, v. 6, n. 7, p. 50492-50501, 2020. Available from: <<https://ojs.brazilianjournals.com.br/ojs/index.php/BRJD/article/view/13798>>. Accessed: Nov. 28, 2024. doi: <https://doi.org/10.34117/bjdv6n7-630>.

FERNANDES, TJ et al. Modelos duplo sigmoidais na descrição do crescimento de frutos do cafeeiro. **Ciência Rural**, v. 47, p. e20160646, 2017. Available from: <<https://www.scielo.br/j/cr/a/WwBhx78XKb7N7WxNtzhtKzK/?lang=en>>. Accessed: Nov. 28, 2024. doi: <https://doi.org/10.1590/0103-8478cr20160646>.

FERNANDES, TJ et al. Bayesian estimation of nonlinear models parameters in the description of growth coffee fruits. **Brazilian Journal of Biometrics**, v. 40, n. 4, p. 393–406-393–406, 2022. Available from: <<https://biometria.ufla.br/index.php/BBJ/article/view/623>>. Accessed: Nov. 29, 2024. doi: <https://doi.org/10.28951/bjb.v40i4.623>.

FURTADO, TDR et al. Cinética de secagem em convecção natural de bananas Prata e D'água (*Musa ssp*) por modelos de regressão não linear. **Revista Brasileira de Fruticultura**, v. 41, p. e-426, 2019a. Available from: <<https://www.scielo.br/j/rbf/a/yjrXWT8J4ggxpXGL6S6L5Mk/?lang=en>>. Accessed: Jul. 25,

2024. doi: <https://doi.org/10.1590/0100-29452019426> .

FURTADO, TDR et al. Drying kinetics of Jaboticaba pulp by regression models. **Revista Brasileira de Fruticultura**, Jaboticabal , v.41,n. 1, e-097, 2019b. Available from: <<https://www.scielo.br/j/rbf/a/Nq38PgFMbTyvLnfyMqMCH5q/?lang=en&format=pdf>>. Accessed: Jul. 25, 2024. doi: <http://dx.doi.org/10.1590/0100-29452019097> .

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. Available from: <<https://researchdatabase.minneapolisfed.org/concern/publications/qz20ss555>>. Accessed: Jul. 25, 2024. doi: <https://doi.org/10.21034/sr.148> .

GONZAGA, NA et al. Descrição da cinética de secagem de grãos de milho-pipoca por modelos de regressão não linear. **Revista Foco**, 17(1), e4176, 2024a. Available from: <<https://ojs.focopublicacoes.com.br/foco/article/view/4176>>. Accessed: Jul. 26, 2024. doi: <https://doi.org/10.54751/revistafoco.v17n1-094>.

GONZAGA, NA et al. Non-Linear Models With Autoregressive Error Structure for Studying Bean Seed Drying Kinetics. **Revista de Gestão Social e Ambiental**, v. 18, n. 3, p. e07886-e07886, 2024b. Available from: <<https://rgsa.openaccesspublications.org/rgsa/article/view/7886>>. Accessed: Sep. 20, 2024. doi: <https://doi.org/10.54751/revistafoco.v17n1-094>.

GONZAGA, NA et al. Bayesian modeling used to describe the drying kinetics of rice grains. **Sigmae**, 13(4), 1–12, 2024c. Available from: <<https://publicacoes.unifal-mg.edu.br/revistas/index.php/sigmae/article/view/2471/1968>>. Accessed: Dec. 02, 2024. ISSN: 2317-0840.

GOMEZ, RS et al. Processo de secagem de materiais cerâmicos argilosos: uma revisão. **Research, Society and Development**, v. 9, n. 11, p. e78591110300-e78591110300, 2020. Available from: <<https://colab.ws/articles/10.33448%2Frdsd-v9i11.10300>>. Accessed: Oct. 20, 2024. doi: [10.33448/rdsd-v9i11.10300](https://doi.org/10.33448/rdsd-v9i11.10300).

GUIMARÃES FILHO, EÉX et al. Isotermas de sorção e propriedades termodinamicas do abiu (*Pouteria caimito*). In: NARDELI, J. V. (Ed.). **Avanços das pesquisas e inovações na engenharia química 1**. Ponta Grossa, PR: Atena Editora, 2020. v. 1, cap. 13, p. 131-142. Available from: <<https://atenaeditora.com.br/catalogo/post/isotermas-de-sorcao-e>>

propriedades-termodinamicas-do-abiu-pouteria-caimito>. Accessed: Oct. 12, 2024. doi: 10.22533/at.ed.53920200313.

HEARD, N. **An introduction to Bayesian inference, methods and computation**. Cham: Springer, 2021.

HENDERSON, SM; 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.

LEWIS, KW. The rate of drying of solid materials. **Industrial & Engineering Chemistry**, Washington, v.13, n. 1, p. 427, 1921. Available from: <<https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ie50137a021>>. Accessed: Oct. 01, 2024. doi: <https://doi.org/10.1021/ie50137a021>.

MARTINS FILHO, S. et al. Abordagem Bayesiana das curvas de crescimento de duas cultivares de feijoeiro. **Ciência Rural**, v. 38, p. 1516-1521, 2008. Available from: <<https://www.scielo.br/j/cr/a/8fMQyt9RWqJRrkGRNyBWTSP/>>. Accessed: Oct. 03, 2024. doi: <https://doi.org/10.1590/S0103-84782008000600004>.

MENDES, P.N. et al. Modelo Logístico Bayesiano no estudo do crescimento de tomates. **Research, Society and Development**, v. 10, n. 3, 2021. Available from: <<https://repositorio.usp.br/item/003074043>>. Accessed: Sep. 05, 2024. doi: 10.33448/rsd-v10i3.13198.

MIDILLI, A et al. A new model for single-layer drying. *Drying Technology*, **20**(7), 1503–1513, 2002. Available from: <<https://www.tandfonline.com/doi/full/10.1081/DRT-120005864>>. Accessed: Mar. 20, 2025. doi: <https://doi.org/10.1081/DRT-120005864>.

MORETTIN, PA & TOLOI, CMC. **Análise de séries temporais**. 2. ed. São Paulo: Blucher, 2006. 538 p.

PAULINO, CD et al. **Estatística Bayesiana**. Fundação Calouste Gulbenkian. Lisboa. 2003.
PAGE, GE. **Factors influencing the maximum rates of air drying shelled corn in thin layers**. Unpublished M.S. thesis, Purdue University, West Lafayette, 1949.

PEREIRA, JM et al. Comparação entre modelos para predição do nitrogênio mineralizado: uma abordagem bayesiana. **Ciência e Agrotecnologia**, v. 33, p. 1792-1797, 2009. Available

from: <<https://www.scielo.br/j/cagro/a/GgfVPzsj8K4xTjCSFt6zV3d/>>. Accessed: Dec. 08, 2024. doi: <https://doi.org/10.1590/S1413-70542009000700016>.

PEREIRA, AA et al. Bayesian modeling of the coffee tree growth curve. **Ciência Rural**, v. 52, n. 9, p. e20210275, 2022. Available from:

<<https://www.scielo.br/j/cr/a/f3xKFqHSpXLC9X8zjxsZK4r/>>. Accessed: Dec. 09, 2024. doi: <https://doi.org/10.1590/0103-8478cr20210275>.

RAFTERY, AE; 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.

R DEVELOPMENT CORE TEAM. **R: A language and environment for statistical computing**. Version 4.4.1, 2024. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. Disponível em: < <https://www.R-project.org/>>

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

<<https://www.scielo.br/j/cr/a/ZcpdR6wbmWrTzfR6y3m5KVt/abstract/?lang=pt>>. Accessed: Jan. 09, 2025. doi: <https://doi.org/10.1590/S0103-84782009000700033>.

SILVA, PV & SAVIAN, TV. Chanter model: nonlinear modeling of the fruit growth of cocoa. **Ciência Rural**, Santa Maria, v.49, n.11, p.1-7, 2019. Available from:

<<https://www.scielo.br/j/cr/a/BCMVGQR4hG4M3bjnBTTb6vM/?lang=en>>. Accessed: Jan. 07, 2025. doi: <https://doi.org/10.1590/0103-8478cr20190409>.

SILVA, FS et al. Análise das condições climáticas dos municípios do estado de Mato Grosso para secagem de grãos com ar ambiente. **Global Science Technology**, Rio Verde, v.10, n.02, p.67-83, maio/ago. 2017. Available from:

<<https://ojs.brazilianjournals.com.br/ojs/index.php/BRJD/article/view/13798/11543>>. Accessed: Jan. 09, 2025. doi: 10.34117/bjdv6n7-630.

SILVA, EM et al. Bayesian approach to the zinc extraction curve of soil with sewage sludge. **Acta Scientiarum. Technology**, v. 42, 2020. Available from:

<<https://periodicos.uem.br/ojs/index.php/ActaSciTechnol/article/view/46893/751375149043>>. Accessed: Dec. 22, 2024. doi: 10.4025/actascitechnol.v42i1.46893.

SILVA, EM et al. Stanford & Smith nonlinear model in the description of CO₂ evolved from

soil treated with swine manure: maximum entropy prior. **Acta Scientiarum**. Technology, v. 45, 2022. Available from:

<<https://periodicos.uem.br/ojs/index.php/ActaSciTechnol/article/view/56360>>. Accessed: Dec. 29, 2024. doi: <https://doi.org/10.4025/actascitechnol.v45i1.56360>.

SILVA, SVC et al. Modelagem bayesiana da precipitação máxima de Petrópolis (RJ) e Poços de Caldas (MG). **Engenharia Sanitária e Ambiental**, v. 28, p. e20210342, 2023. Available from: <<https://www.scielo.br/j/esa/a/GqkKqqNWcfnyBWkdWHcXWg/>>. Accessed: Jan. 04, 2025. doi: <https://doi.org/10.1590/S1413-415220210342> .

SOUSA, VF et al. **Cultivo do milho-verde irrigado na Baixada Maranhense**. 2020, 141p.

SOUZA, GFMV et al. Simultaneous heat and mass transfer in a fixed bed dryer. **Applied Thermal Engineering**, v.90, p.38-44, 2015. Available from:

<<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S1359431115006481?via%3Dihub>>. Accessed: Dec. 27, 2024. doi: <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2015.06.088>.

SORENSEN, D.; GIANOLA, D. **Likelihood, bayesian and MCMC methods in quantitative genetics**. New York: Springer, 2002. 740p.

TIMM, NS et al. Effects of drying temperature of corn from the center and extremities of the corncob on drying parameters, protein and starch properties, and carotenoid profile. **Food Research International**, v. 163, p. 112267, 2023. Available from:

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0963996922013254?casa_token=UTw-Ki7l8tgAAAAA:hbwqi0ZldOOcgblhTD47j4vmphNhBt1QjDqRCWB3sZ14P-Vsr03zWRsXwn9I9VP8mwBVwkRyblj7>. Accessed: Mar. 31, 2025. doi: <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2022.112267>.

THOMPSON, TL. Predicting the final moisture content of grain from its drying history. *Transactions of the ASAE*, 10(5), 0548-0551, 1967.

UNITED STATE DEPARTAMENT OF AGRICULTURE - USDA (2024).Disponível em: <<https://fas.usda.gov/data/production/commodity/0440000>>. Acesso em: 10 out 2024.

VERMA, LR et al. Effects of drying air parameters on rice drying models. *Transactions of the ASAE*, 28(1), 296-301, 1985.

VON PINHO, RG et al. BOTÂNICA. In: BORÉM, J. C.C.G; PIMENTEL, M.A. (Ed.). **MILHO do Plantio à Colheita**. Viçosa, PR: Editora UFV, 2017. cap. 2, p. 25-48.

**ARTIGO 2 - Analysis of Influential Points in Decreasing Curves Applied to
Corn Grains Kernel Drying**

Redigido conforme as normas do European Journal of Agronomy (versão em processo de
submissão).

Analysis of Influential Points in Decreasing Curves Applied to Corn Grains Kernel Drying

Natiele de Almeida Gonzaga^{1*}, Rafael Genaro², Joel Augusto Muniz³, Edilson Marcelino Silva⁴, Daniel Furtado Ferreira⁵

Abstract

The analysis of influential points in grain drying curves is essential for a better understanding of the critical phases of the process, optimizing operation time, and ensuring the quality of the final product. These points represent specific milestones in the drying dynamics, such as the moment of maximum moisture loss or the transition to a stabilization phase, and provide practical support for technical decisions, such as determining the optimal point to stop the process. In this study, the inflection point (IP), maximum acceleration point (MAP), maximum deceleration point (MDP), and asymptotic deceleration point (ADP) were analyzed in decreasing curves applied to the drying of corn grains using five nonlinear models: Lewis, Overhults, Page, Simple Exponential with Three Parameters, and Midilli. In addition, a new influential point, called P_1 , is proposed with strong practical motivation: it represents the time at which the moisture content reaches 13%, a value considered safe for storage according to technical recommendations. Unlike the other points, P_1 has a direct operational interpretation, being close to the hygroscopic equilibrium and easily identified from the inverse of the fitted model. The models were compared based on the adjusted coefficient of determination (R^2_{adj}) and the Akaike Information Criterion (AIC), with the Page model selected for its ability to identify all influential points and provide a reliable fit. Confidence intervals for the estimated times at each point were obtained using the BCa bootstrap method, reinforcing the robustness of the estimates. The results contribute to the improvement of drying modeling and to decision-making in the agro-industrial context.

Keywords: Grain drying, Nonlinear models, Influential points, Page.

1. INTRODUCTION

After harvesting, corn kernels (*Zea mays* L.) undergo different agroindustrial stages, including cleaning, drying, storage, and processing. First, the kernels are classified to identify the characteristics of the mass that will be subjected to the following stages. This

categorization enhances both the efficiency and quality of the overall processing (Senar, 2018).

The primary goal of drying grains is to lower their moisture content. This reduction plays a critical role in preventing spoilage from fungi and bacteria during storage (Anukiruthik and Anandharamakrishnan, 2021). A notable advantage of reducing moisture is the extended storage life of grains, as it inhibits the growth of fungi and pests, thereby ensuring the product's quality and safety (Mantovani and Pimentel, 2017; Khan et al., 2021).

Several specific technical parameters must be monitored and controlled during drying, especially the temperature of the air used in the process (Nguyen et al., 2020; Sinha and Bhargav, 2022). Once the grains are properly cleaned and desiccated, they are stored until processing (Pravallika et al., 2023). At this stage, it is necessary to carefully monitor factors such as temperature and grain moisture content to safeguard their quality and preservation (Malumba et al., 2014; Timm et al., 2020a; Timm et al., 2020b).

In the field of food drying research, nonlinear models have proven to be efficient tools. They provide good fits to the data and parameter estimates that have clear biological meaning (Furtado et al., 2019; Costa et al., 2022; Gonzaga et al., 2024a; Gonzaga et al., 2024b).

Identifying influential points such as the Inflection Point (IP), the Maximum Acceleration Point (MAP), the Maximum Deceleration Point (MDP), and the Asymptotic Deceleration Point (ADP) can be very useful to professionals involved in agricultural activities. These influential points describe essential aspects of the curve dynamics and can be accurately determined using derivatives. However, they are not extensively studied in the context of decreasing curves as they are commonly estimated in studies focused on the growth of fruits, vegetables, and animals (Carini et al., 2020; Diel et al., 2020; Sari et al., 2018; Teixeira et al., 2021).

In growth modeling, influential points (IP, MAP, MDP, and ADP) indicate points of acceleration and deceleration in the increase of the study variable. However, when transposing this approach to decreasing curves, the patterns shift: maximums become minimums and vice versa. This inversion mirrors the dynamics of processes involving the reduction in a given magnitude over time, such as organic matter breakdown, depletion of natural resources, and population decline.

In drying kinetics, the drying rate typically decreases gradually until a point is reached where the reduction in moisture content levels off and approaches the lower horizontal

asymptote. This behavior is analogous to the growth process, where acceleration tends asymptotically to zero. Thus, it becomes essential to establish a criterion to determine the point at which observations can be discontinued.

In the context of growth curves, Mischan, Pinho, and Carvalho (2011) argued that the critical points of these curves can be determined mathematically based on the function fitted to observational data. In biological studies, the inflection point is often used as a reference. Based on this information, these authors proposed to define an asymptotic deceleration point (ADP). Similarly, in the context of deceleration curves, these points can be identified using the roots of the fourth derivative of the model.

The bootstrap method can be used to construct confidence intervals by resampling the data multiple times and fitting the model at each resampling. This nonparametric approach allows for more robust estimates of uncertainty. In this study, bootstrapping was specifically used to compute confidence intervals for influential points to better characterize the variability associated with these points in the model.

The present study aimed to apply the Lewis, Overhults, Page, Midilli, and Three-Parameter Simple Exponential models to the drying kinetics of corn kernels, using methods to identify the influential points of the decreasing curves that characterize these models. In addition, 95% confidence intervals were constructed by bootstrapping for these points in all models analyzed.

2. MATERIAL AND METHODS

2.1. Drying process and database

The data used in this study were sourced from the research conducted by Timm et al. (2023) (available in the Supplementary Material). The yellow flint corn, specifically the Pioneer P3016 VYHR variety, was harvested in the municipality of Canguçu, state of Rio Grande do Sul, Brazil, during the 2019/2020 growing season. Following the harvest, the kernels were promptly packed in plastic bags and transported to the Post-Harvest Laboratory of the Federal University of Santa Maria, Cachoeira do Sul campus, where the drying experiments took place.

The kernels, with an initial moisture content of $31.90 \pm 0.20\%$, were dried using an experimental fixed-bed dryer at 80°C at a constant airflow rate of 0.5 m/s . The drying process continued until the kernels achieved a final moisture content of $13.00 \pm 0.20\%$.

2.2. Nonlinear models studied

The equations of the five nonlinear models used to describe the drying of corn kernels were: Lewis (Lewis, 1921) (1), Overhults (Souza et al., 2015) (2), Page (Page, 1949) (3), Three-Parameter Simple Exponential (Ertekin and Yaldiz, 2004) (4), and Midilli (Midilli, Kucuk and Yapar, 2002) (5).

$$RU_i = \exp(-kt_i) + \varepsilon_i \quad (1)$$

$$RU_i = \exp(-(kt_i)^c) + \varepsilon_i \quad (2)$$

$$RU_i = \exp(-kt_i^c) + \varepsilon_i \quad (3)$$

$$RU_i = k_0 \exp(-kt_i) + a + \varepsilon_i \quad (4)$$

$$RU_i = k_0 \exp(-kt_i^c) + at_i + \varepsilon_i \quad (5)$$

Where: RU_i is the moisture ratio (dimensionless) of the corn kernels at a given time i in minutes; $i = 1, \dots, n$; t_i = time of analysis of the dependent variable for measuring kernel moisture; k_0 is the initial condition, close to 1 because it represents 100% of the initial moisture of the kernel; k is the drying rate or change in moisture loss over time, with values ranging from 0 to 1; c = relative humidity of the air; a is a constant of the model, has no direct interpretation; e = base of the Napierian logarithm; ε_i = residuals with zero mean and variance σ^2 .

2.3. Influential Points in Decreasing Models

2.3.1. Inflection Point (IP)

The point of inflection in increasing curves represents the moment when the growth rate reaches its peak before starting to slow down. This point is essential for understanding the phase of most accelerated development of a system, as it indicates the onset of a decrease in growth rate (Mischan, Pinho and Carvalho, 2011; Mischan and Pinho, 2014; Teixeira et al., 2021).

Conversely, for decreasing curves, the point of inflection acquires a different interpretation. It marks the lowest rate of change, signaling the shift from a more accelerated decline to a progressive stabilization. In other words, while the IP for increasing curves signifies the maximum rate of increase, for decreasing curves, it indicates the maximum rate of loss. Therefore, this point is critical to understanding the phase of greatest intensity in the reduction phenomenon.

2.3.2. Maximum Deceleration Point (MDP)

The MDP is the minimum point of the model's acceleration, indicating that the acceleration begins to increase from this point. This means that the rate at which the variable is increasing or decreasing begins to change at a slower pace.

For increasing curves, MDP marks the onset of a decrease in the deceleration rate, which can suggest that the curve is approaching a plateau. For decreasing functions, it indicates the point at which the rate of deceleration starts to decrease, i.e., stabilization of the variable occurs later.

In decreasing curves, the MDP occurs before the PI, reflecting the shift in the behavior of the variable before reaching stabilization. This comprehensive interpretation shows that in both cases, the MDP plays a key role in the dynamics of the process.

2.3.3. Maximum Acceleration Point (MAP)

The MAP is the point of maximum acceleration in the model and represents the moment when acceleration is at its peak, after which it begins to decline. This means that the rate of change—whether increasing or decreasing—reaches its greatest variation before beginning a process of decreasing intensity.

In increasing curves, the MAP marks the point of greatest positive acceleration, signaling the point of the most intense increase before the onset of deceleration. In decreasing curves, it corresponds to the peak of the loss rate, i.e., when the reduction is fastest before decelerating. This unified interpretation allows the identification of the critical phase of the process and is particularly valuable for forecasting periods of collapse, depletion, or rapid change in dynamic systems.

2.3.4. Asymptotic Deceleration Point (ADP)

The ADP is one of the most important points on the increasing curve because it is close to the asymptote and indicates the stabilization of the process. It corresponds to the last root of the fourth derivative of the growth model, marking the last change in the concavity of acceleration. At this stage, acceleration is already low and approaches zero, characterizing a state of equilibrium in the increase (Mischan, Pinho and Carvalho, 2011; Mischan and Pinho, 2014).

In the context of increasing curves, the ADP represents the last point of inflection for acceleration, marking the onset of the phase where acceleration tends to zero. This point marks a transition to a state of lower variability in the rate of decrease, indicating the approach to a lower asymptote in many processes. However, in the decreasing models that follow a negative exponential pattern, the ADP does not necessarily occur near the asymptote, as the rate of change remains significant even at reduced values of the variable.

The identification of the ADP provides valuable insights into the dynamics of the processes under study. This understanding helps to predict trends and formulate mitigation strategies for systems in decline, such as cycles of environmental degradation or depletion of biological stocks.

In sigmoidal curves, the tendency is for the PI to be located between the Maximum Deceleration Point (MDP) and the Maximum Acceleration Point (MAP). The sequence of these points is thus: MDP, IP, and, then, MAP. This pattern contrasts with that of the increasing curves, where the order is reversed: MAP, IP, and then MDP (Mischan and Pinho, 2014).

In the decreasing curves that exhibit negative exponential behavior, such as $y=A \exp(-Bt)$, the point of inflection usually appears before the MAP and tends to occur early in the curve. This is because the rate of change is more intense at the beginning and quickly stabilizes over time. In these negative exponential curves, the MDP is often absent, as the decline is continuous and without clear transitions between different phases of the process.

2.3.5. 13% Quantile as an Influential Point in Decreasing (P_1)

In drying processes, especially in corn, it is crucial to identify a specific moment when the drying model approaches zero. This moment indicates the optimal time to stop drying. Research conducted by Mantovani and Pimentel (2017), Embrapa (2015), and Timm et al.

(2023) suggests that 13% moisture content is widely accepted as a reference for completing the drying process, as it ensures safe storage and preserves grain quality.

Since the ADP is not necessarily close to the asymptote of the drying curve, it is proposed to define a new influential point, referred to as P_1 . This point corresponds to the 13% quantile of the decreasing model. Mathematically, P_1 is defined as the time t such that $f(P_1) = 0.13$. Identifying this point provides a practical and operationally relevant approximation of the stage at which the acceleration of moisture loss tends to zero.

The interpretation of P_1 as a critical indicator is based on the need to establish a drying interruption criterion compatible with ideal storage conditions. Unlike the ADP, which reflects a change in the concavity of the acceleration, P_1 has a direct practical meaning as it signals the point at which the process reaches the desired technical limit. Recognizing this point helps to accurately model moisture reduction and optimize industrial drying processes.

2.4. Obtaining influential points

According to Mischan, Pinho and Carvalho (2011) and Teixeira et al. (2021), the Inflection Point (IP) is defined as the moment when the second derivative of the increasing model equals zero. The estimates of the maximum acceleration point (MAP) and the maximum deceleration point (MDP) can be obtained by calculating the third derivative of the model and identifying its two roots, and the asymptotic deceleration point (ADP) can be obtained by calculating the fourth derivative and setting it to zero.

The detailed calculation of the first- to fourth-order derivatives for the Lewis, Overhults, Page, Three-Parameter Simple Exponential, and Midilli models is presented in the Supplementary Material. The results of the calculations for each model are presented below:

I) Lewis

The Lewis model is presented in Eq. (1), and analytically, the Inflection Point (IP) is determined by (6):

$$\frac{d^2 f(t)}{dt^2} = k^2 \exp[-kt] \quad (6)$$

Since $k \neq 0$ and $\exp[-kt] \neq 0$, there is no IP.

The Maximum Acceleration Point (MAP) and Maximum Deceleration Point (MDP) is given by equation (7):

$$\frac{d^3 f(t)}{dt^3} = -k^3 \exp[-kt] \quad (7)$$

Since $k \neq 0$ and $\exp[-kt] \neq 0$, there is no MAP and MDP.

Asymptotic Deceleration Point (ADP) described in equation (8):

$$\frac{d^4 f(t)}{dt^4} = k^4 \exp[-kt] \quad (8)$$

Since $k \neq 0$ and $\exp[-kt] \neq 0$, there is no ADP either.

II) Overhults

The Overhults model is described in Eq. (2), and by solving it analytically, the Inflection Point (IP) is given in Eq. (9):

$$\frac{d^2 f(t)}{dt^2} = 0 \Rightarrow t = \left(\frac{c-1}{ck^c} \right)^{\frac{1}{c}} \quad (9)$$

The Maximum Acceleration Point (MAP) and the Point of Maximum Deceleration (MDP) are determined by the critical point equation given in Eq. (10):

$$\frac{d^3 f(t)}{dt^3} = 0 \Rightarrow t = \frac{1}{k} \left(\frac{c(kt)^c}{c} \right)^{\frac{1}{c}} \quad (10)$$

However, Eq. (10) only provides the formula for identifying critical points. To distinguish between MAP and MDP, the second derivative test must be applied. Since the test yields a value less than zero, corresponds to the MAP of the Overhults model.

Finally, the Asymptotic Deceleration Point (ADP) is determined by Eq. (11):

$$\frac{d^4 f(t)}{dt^4} = 0 \Rightarrow t = \left(\frac{c(kt)^c}{k^c} \right)^{\frac{1}{c}} \quad (11)$$

III) Page

The Page's model is given by Eq. (3), and by solving it analytically, the Inflection Point (IP) is obtained in Eq. (12):

$$\frac{d^2 f(t)}{dt^2} = 0 \Rightarrow t = \left(\frac{c-1}{kc} \right)^{\frac{1}{c}} \quad (12)$$

The Maximum Acceleration Point (MAP) and the Point of Maximum Deceleration (MDP) are obtained from the critical point equation presented in Eq. (13):

$$\frac{d^3 f(t)}{dt^3} = 0 \Rightarrow t = \left(\frac{kct^c}{kc} \right)^{\frac{1}{c}} \quad (13)$$

Eq. (13) only provides the formula for identifying critical points. To differentiate between MAP and MDP, the second derivative test must be applied. As the test results in a value less than zero, corresponds to the MAP of the Page model.

The Asymptotic Deceleration Point (ADP) is given in Eq. (14):

$$\frac{d^4 f(t)}{dt^4} = 0 \Rightarrow t = \left(\frac{kct^c}{kc} \right)^{\frac{1}{c}} \quad (14)$$

IV) Three-Parameter Simple Exponential

For the Three-Parameter Simple Exponential model, given in Eq. (4), the Inflection Point (IP) is analytically determined in Eq. (15).

$$\frac{d^2 f(t)}{dt^2} = k_0 k^2 \exp[-kt] \quad (15)$$

Since $k_0 \neq 0, k \neq 0$, and $\exp[-kt] \neq 0$, there is no PI.

The critical point equation presented in Eq. (16) is used to determine the Maximum Acceleration Point (MAP) and the Point of Maximum Deceleration (MDP).

$$\frac{d^3 f(t)}{dt^3} = -k_0 k^3 \exp[-kt] \quad (16)$$

Since $k_0 \neq 0, k \neq 0$, and $\exp[-kt] \neq 0$ therefore, there is no MAP and MDP.

Mathematically, the Asymptotic Deceleration Point (ADP) is described by Eq. (17):

$$\frac{d^4 f(t)}{dt^4} = k_0 k^4 \exp[-kt] \quad (17)$$

Since all terms remain nonzero, the ADP does not exist in this model.

V) Midilli

For the model presented in Eq. (5), the Inflection Point (IP) is found in Eq. (18).

$$\frac{d^2 f(t)}{dt^2} = 0 \Rightarrow t = \left(\frac{c-1}{kc} \right)^{\frac{1}{c}} \quad (18)$$

The Maximum Acceleration Point (MAP) and Maximum Deceleration Point (MDP) are given for Eq. (19):

$$\frac{d^3 f(t)}{dt^3} = 0 \Rightarrow t = (t^c)^{\frac{1}{c}} \quad (19)$$

The Asymptotic Deceleration Point (ADP) is described in Eq. (20):

$$\frac{d^4 f(t)}{dt^4} = 0 \Rightarrow t = (v)^{\frac{1}{c}} \quad (20)$$

In addition to the points determined by analytical calculations, the Newton-Raphson numerical method (Nocedal and Wright, 2006) was applied to all models to check the accuracy of the analytically obtained results.

2.4.1. P_1

Given a model $f(t)$, we then find an expression for t such that, given y , we have $t = f^{-1}(y)$. According to Mantovani and Pimentel (2017) and Timm et al. (2023), $y = 0.13$ is the ideal value for P_1 for drying. Therefore, we used $t = f^{-1}(y)$ to obtain P_1 for each model (detailed calculations are provided in the supplementary material). In Eqs. (21–24), P_1 is presented for the Lewis, Overhults, Page and Three-Parameter Simple Exponential models, respectively.

$$t = \frac{-\log(0.13)}{k} \quad (21)$$

$$t = \frac{(-\log(0.13))^{\frac{1}{c}}}{k} \quad (22)$$

$$t = \left(\frac{-\log(0.13)}{k} \right)^{\frac{1}{c}} \quad (23)$$

$$t = \frac{-1}{k} \log \left(\frac{0.13 - a}{k_0} \right) \quad (24)$$

For the Midilli model, the equation has no analytical solution, making it impossible to explicitly isolate t . Therefore, P_1 was determined using the Bisection method (Burden and Faires, 1985).

Bootstrapping was used to estimate the confidence intervals of the influential points using the bias-corrected and accelerated bootstrap (BC_a) method. The bootstrap is a statistical resampling method used to obtain the distribution of a statistic of interest from an observed sample by generating new samples through resampling with replacement. Confidence intervals can be constructed from these resamples without relying on parametric distributions. Among the bootstrap confidence interval methods, the percentile bootstrap is the most straightforward, which uses the quantiles of the bootstrap distribution to define the interval limits. Another method, known as the bias-corrected (BC) interval, addresses any bias in the estimated statistic by adjusting the confidence interval limits. The bias-corrected and accelerated bootstrap (BC_a) improves on this technique by including an acceleration factor that accounts for the curvature of the statistic, improving precision when the distribution of the statistic of interest is asymmetric. These refinements make BC_a one of the most robust methods for bootstrap-based statistical inference (Efron and Tibshirani, 1983; Diccio and Efron, 1996; Ferreira, 2013).

2.5. Adjusting Models

The model parameters were estimated using the least squares method, specifically through the Gauss-Newton numerical algorithm (Seber and Wild, 2003). To evaluate and compare the models to select the most suitable one, we used the Akaike Information Criterion (AIC) (Akaike, 1974) and the adjusted coefficient of determination (R^2_{adj}) (Mischan and

Pinho, 2014). The model deemed most appropriate was the one with the lowest AIC value and the highest R^2_{adj} value.

Once selected the best model to describe the corn kernel drying curve, the drying curve and the derivatives of this model were plotted. All parameter estimates, graphical adjustments, and computational analyses necessary for this study were performed using the statistical software R (R Development Core Team, 2024).

3. RESULTS AND DISCUSSION

Table 1 lists the 95% confidence intervals for the estimated parameters of the models fitted to the corn kernel drying kinetics data. The models examined were Lewis, Overhults, Page, Three-Parameter Simple Exponential (TPSE), and Midilli, which allows a thorough comparative analysis of the interval estimates for each model.

| Model | Parameter | Estimate | LL | UL |
|-----------|-----------|----------|---------|---------|
| Lewis | k | 0.0302 | 0.0295 | 0.0309 |
| Overhults | k | 0.0299 | 0.0293 | 0.0304 |
| | c | 1.0634 | 1.0318 | 1.0958 |
| Page | k | 0.0239 | 0.0212 | 0.0269 |
| | c | 1.0634 | 1.0318 | 1.0958 |
| TPSE | k | 0.0266 | 0.0259 | 0.0274 |
| | k_0 | 1.0489 | 1.0392 | 1.0587 |
| | a | -0.0541 | -0.0648 | -0.0438 |
| Midilli | k | 0.0300 | 0.0270 | 0.0333 |
| | k_0 | 1.0000 | 0.9910 | 1.0109 |
| | c | 0.0979 | 0.9499 | 1.0103 |
| | a | -0.0005 | -0.0006 | -0.0003 |

Table 1 – Estimates and 95% confidence intervals for the parameters of the fitted models.

Source: Authors (2025)

According to Table 1, parameter k, which represents the drying rate as the relationship between moisture variation and drying time, showed values around 0.03 across all models. In

contrast, previous studies such as Oliveira et al. (2012) and Gonzaga et al. (2024a) reported higher values for this parameter in the drying kinetics of corn kernels. This discrepancy may be related to the experimental conditions, including temperature, initial grain moisture, and airspeed used during the drying process.

In general, the confidence intervals for all parameters of the fitted models did not include the value zero. However, the parameters k_0 and c in the Midilli model were not significant, as the value 1 falls within their confidence intervals. Therefore, this model can be simplified to a more parsimonious one. Besides that, the narrow range of these intervals underscores the precision of the estimates, thus reinforcing the reliability of our results.

Table 2 shows the 95% BC_a confidence intervals for the times (minutes) corresponding to the influential points in the drying curves of the fitted models.

| Model | PI | PAM | PDA | P ₁ |
|-----------|--------------|---------------|----------------|----------------|
| Lewis | - | - | - | (66.07, 68.56) |
| Overhults | (2.29, 6.76) | (3.55, 13.29) | (34.78, 45.26) | (63.37, 67.00) |
| Page | (0.06, 2.74) | (1.31, 11.41) | (49.27, 63.16) | (58.93, 70.70) |
| TPSE | - | - | - | (63.72, 66.01) |
| Midilli | (0.13, 2.70) | (1.17, 12.18) | (6.95, 26.31) | (64.60, 70.00) |

Table 2 – *Bootstrap* confidence intervals for the times at the influential points (IP, MAP, ADP, and P₁) of the fitted models.

Source: Authors (2025)

The analysis of the results in Table 2 revealed that, in the Overhults, Page, and Midilli models, the inflection point (IP) occurs at the very beginning of the drying curve. This point represents the first critical moment in the process, suggesting a potential shift in the moisture removal rate. Following this, the maximum acceleration point (MAP) was identified, which marks the phase in which the change in the drying rate intensifies. This point occurs within a time interval of 1 to 13 minutes.

In the Page model, the asymptotic deceleration point (ADP) was reached later, indicating that the significant reduction in the drying rate occurs more gradually than in the other models. According to Khalili et al. (2014) and Gomez et al. (2020), this point is characterized by a significant reduction in the shrinkage of the product during drying. Hence, once this stage is reached, the process can proceed with a lower risk of causing major

deformations, cracks, or other structural issues in the material, ensuring a safer and more efficient drying.

The P_1 intervals present relatively close values across all models, varying between approximately 63 and 70 minutes. This finding indicates that, regardless of the model used, drying stabilization occurs within this period. This means that, at this time, the net transfer of moisture from the product to the drying medium is low, indicating that hygroscopic equilibrium has been achieved (Gomez et al., 2020).

However, the Lewis and ESTP models did not provide confidence intervals for IP, MAP and ADP, as shown analytically, so it was not possible to identify these influential points in their drying curves. However, both provided an interval for P_1 , indicating they are more suited for describing the latter part of the drying curve.

Table 3 presents the goodness-of-fit scores for the models fitted to the drying data: the adjusted coefficient of determination (R^2_{adj}) and the Akaike Information Criterion (AIC).

| Model | R^2_{adj} | AIC |
|-----------|-------------|-----------|
| Lewis | 0.9966 | -134.4544 |
| Overhults | 0.9982 | -146.7625 |
| Page | 0.9982 | -146.7625 |
| TPSE | 0.9996 | -183.1653 |
| Midilli | 0.9996 | -185.8832 |

Table 3 – Evaluators of the goodness-of-fit of the fitted models.

Source: Authors (2025)

The analysis of Table 3 shows that all models achieved high R^2_{adj} values, exceeding 0.996, indicating a good fit to the data. However, although the Midilli and Three-Parameter Simple Exponential (TPSE) models had the lowest Akaike (AIC) scores, we opted to work with the Page model. The Midilli model poses a challenge in calculating influential points for the data since negative values appear under the root, resulting in complex numbers. To overcome this limitation, it would be necessary to apply an additional transformation, which could affect the direct interpretation of the results.

As mentioned above, the TPSE model does not identify influential points in the analyzed data. Since the identification of these points is essential for the objectives of this

study, this characteristic renders the model unsuitable for our approach. On the other hand, while the Page model has a higher AIC value than the Midilli and TPSE models, it effectively identifies all influential points. This allows the calculation of confidence intervals in a direct and reliable way, which fully meets our objectives. Thus, we chose the Page model due to its methodological compatibility and robustness in data analysis. Previous studies confirm its effectiveness, such as the work by Alves and Nicoletti (2016), which deemed it the best fit for drying green bell peppers, Carvalho et al. (2021), which highlighted its advantages in modeling the drying of macaúba kernels, and Costa et al. (2022), which demonstrated its efficiency in drying corn.

Figure 1 graphically illustrates the 1st to 4th order derivatives of the Page model, as well as the influential points for time (in minutes) found in this study. The graph shows that the drying is most intense at the beginning and gradually slows down with time.

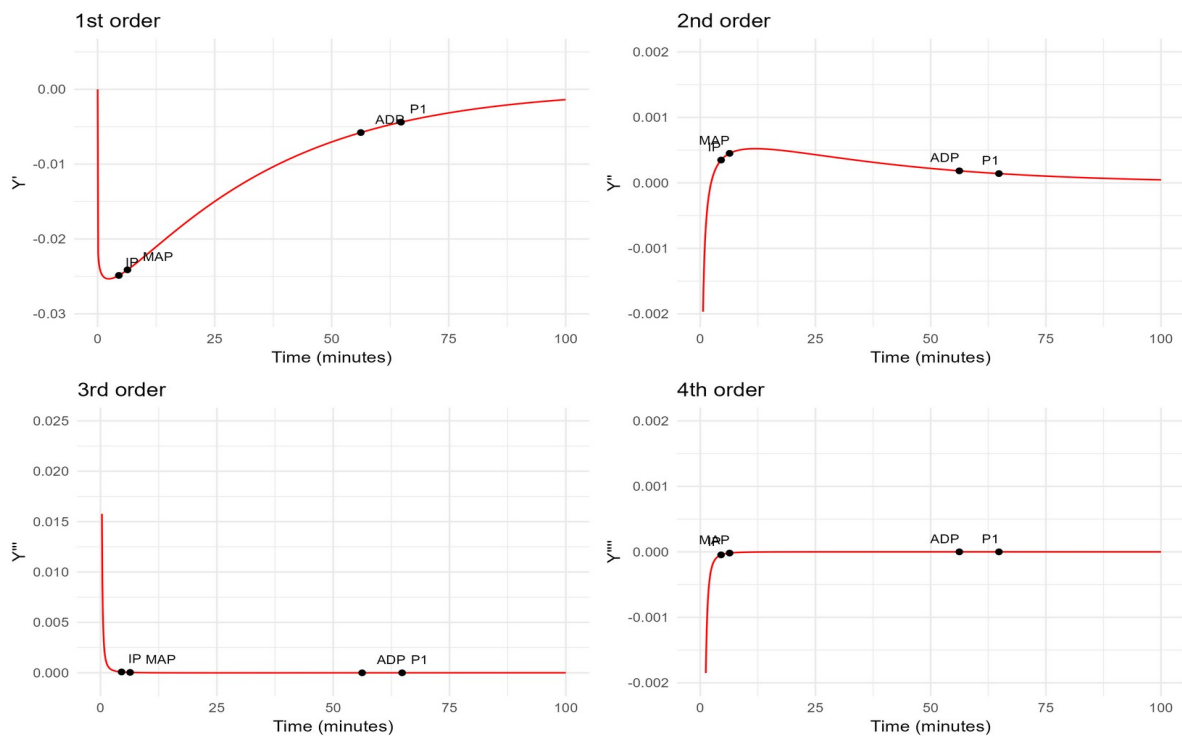


Figure 1 - 1st, 2nd, 3rd, and 4th order derivatives of the Page drying model to describe the drying process of corn kernels.

Source: Authors (2025)

Figure 2 illustrates the drying curve of the Page model and the influential points estimated by this model.

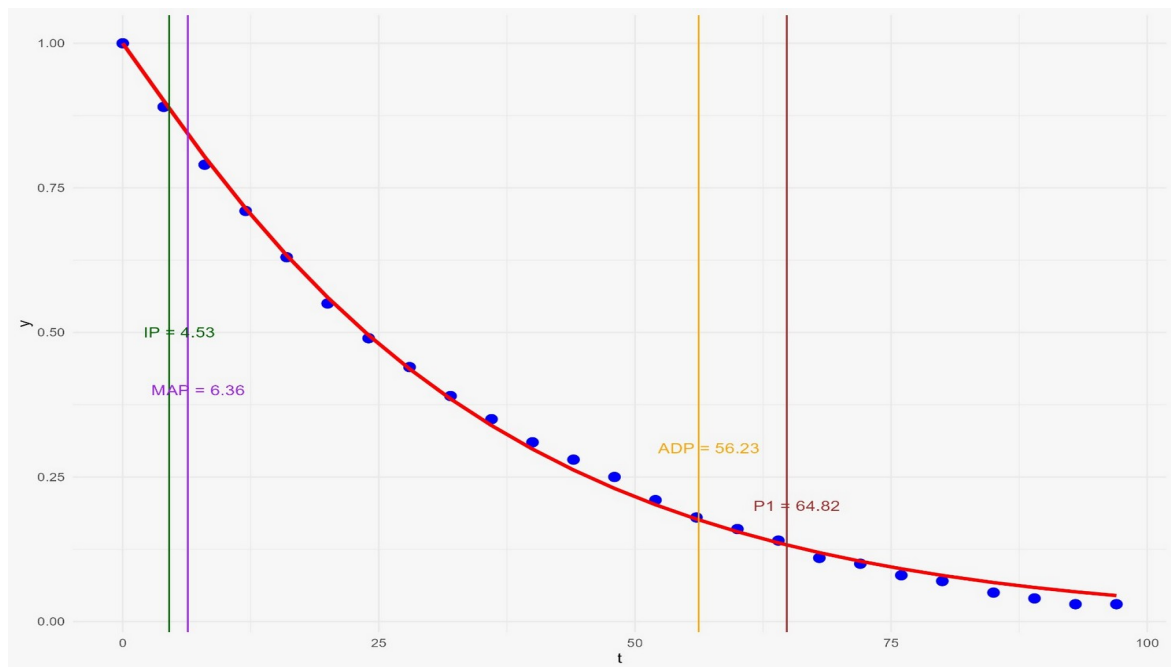


Figure 2 – Drying curve of the Page model fitted to corn kernel drying data.

Source: Authors (2025)

The graph shows that the decreasing process is more dynamic at the beginning and stabilizes over time. This pattern aligns with the principles of various drying processes in physics. Initially, more water is available in the outer layers of the grains, making it easier to remove. As drying progresses, the remaining moisture must migrate to the surface, slowing down the process. P_1 varies between 58.93 and 70.70 minutes. This marks a stage close to the equilibrium, where the rate of water diffusion from the interior to the exterior is minimal. Extending the drying time beyond this point may be not only inefficient but also economically impractical (Gomez et al., 2020).

4. CONCLUSIONS

Accurate identification of the influential points in corn drying is essential to optimize the process and ensure grain quality. Nonlinear models, particularly the Page model, have proven effective in describing the kinetics of drying and accurately estimating these critical points. In contrast, the Lewis and TPSE models have shown certain limitations in this context. The introduction of a new influential point, P_1 , based on 13% moisture content, has emerged as a promising strategy for determining the optimal duration of the drying process. These insights contribute to enhancing the efficiency of corn drying and storage.

5. ACKNOWLEDGMENTS

The authors thank the National Council for Scientific and Technological Development (CNPq) for financial support.

6. REFERENCES

- Akaike, H., 1974. A new look at the statistical model identification. *IEEE Transactions on Automatic Control*, **19**(6), 716–723. <https://doi.org/10.1109/TAC.1974.1100705>.
- Alves, T.P., Nicoleti, J.F., 2016. Influência das variáveis de processo sobre a secagem osmoconvectiva de pimentão verde. *Revista Brasileira de Tecnologia Agroindustrial*, **10**(1). <https://doi.org/10.3895/rbta.v10n1.2014>.
- Anukiruthik, T.J.A., Anandharamakrishnan, M.C., 2021. Electrohydrodynamic drying of foods: Principle, applications, and prospects. *Journal of Food Engineering*, **295**. <https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2021.110891>.
- Burden, R.L., Faires, J.D., 1985. *Numerical Analysis*, 3rd ed. PWS Publishers, Boston. ISBN 0-87150-857-5.
- Carvalho, M.S., Costa, L.A., Diel, M.I., et al., 2021. Kinetics and mathematical modeling of the drying process of macaúba almonds. *Revista Caatinga*, **35**(1), 199–205. <https://doi.org/10.1590/1983-21252022v35n120rc>
- Carini, F., et al., 2020. Nonlinear models for describing lettuce growth in autumn-winter. *Ciência Rural*, **50**(1). <https://doi.org/10.1590/0103-8478cr20190534>.
- Costa, L.A., Carvalho, M.S., Diel, M.I., et al., 2022. Mathematical modeling for drying flint corn in a thin layer. *Pesquisa Agropecuária Brasileira*, **57**. <https://doi.org/10.1590/S1678-3921.pab2022.v57.02845>.
- Diel, M.I., Costa, L.A., Carvalho, M.S., et al., 2020. Production of biquinho pepper in different growing seasons characterized by the logistic model and its critical points. *Ciência Rural*, **50**(1). <https://doi.org/10.1590/S1678-3921.pab2022.v57.02845>.
- Diciccio, T.J., Efron, B., 1996. Bootstrap confidence intervals. *Statistical Science*, **11**(3), 189–228. <http://dx.doi.org/10.1214/ss/1032280214>.
- Embrapa Milho e Sorgo, 2015. *Milho: colheita e pós-colheita*. Brasília, DF: EMBRAPA. Available at: <https://www.infoteca.cnptia.embrapa.br/infoteca/bitstream/doc/748767/1/Milho-Colheita-e-pos-colheita.pdf> (accessed 30 January 2025).

- Efron, B., Tibshirani, R., 1983. *An Introduction to the Bootstrap*. Chapman and Hall, New York. <https://doi.org/10.1201/9780429246593>.
- Ertekin, C., Yaldiz, O., 2004. Drying of eggplant and selection of a suitable thin-layer drying model. *Journal of Food Engineering*, **63**(1), 349–359. <https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2003.08.007>.
- Ferreira, D.F., 2013. *Estatística Computacional em Java*. 1st ed. Ed. UFPA, Lavras, 695 p. ISBN 978-85-8127-013-5.
- Furtado, T.D.R., et al., 2019. Drying kinetics of Jaboticaba pulp by regression models. *Revista Brasileira de Fruticultura*, **41**(1), e-097. <https://doi.org/10.1590/0100-29452019097>.
- Gomez, R.S., et al., 2020. Processo de secagem de materiais cerâmicos argilosos: uma revisão. *Research, Society and Development*, **9**(11), e78591110300. <https://doi.org/10.33448/rsd-v9i11.10300>
- Gonzaga, N.A., et al., 2024a. Descrição da cinética de secagem de grãos de milho-pipoca por modelos de regressão não linear. *Revista Foco*, **17**(1), e4176. <https://doi.org/10.54751/revistafoco.v17n1-094>.
- Gonzaga, N.A., et al., 2024b. Nonlinear Models With Autoregressive Error Structure for Studying Bean Seed Drying Kinetics. *Revista de Gestão Social e Ambiental*, **18**(3), e07886. <https://doi.org/10.24857/rgsa.v18n3-179>.
- Serviço Nacional de Aprendizagem Rural (SENAR), 2018. *Grãos: armazenamento de milho, soja, feijão e café*. Brasília: SENAR. ISBN 978-85-7664-201-5.
- Khalili, K., 2014. Numerical simulation of drying ceramic using finite element and machine vision. *Procedia Technology*, **12**, 388–393. <https://doi.org/10.1016/j.protcy.2013.12.504> .
- Khan, M.I., et al., 2021. Characterisation of mechanical properties of food materials during drying using nanoindentation. *Journal of Food Engineering*, **291**. <https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2020.110306> .
- Lewis, K.W., 1921. The rate of drying of solid materials. *Industrial & Engineering Chemistry*, **13**(1), 427. <https://doi.org/10.1021/ie50137a021>.

- Malumba, P., et al., 2014. Physicochemical Characterization and in Vitro Assessment of the Nutritive Value of Starch Yield from Corn Dried at Different Temperatures. *Starch*, **66**, 738–748. <https://doi.org/10.1002/star.201400012>.
- Mantovani, E.C., Pimentel, M.A.G., 2017. Colheita e armazenamento. In: Borém, J.C.C.G., Pimentel, M.A. (Eds.), *Milho do Plantio à Colheita*. Editora UFV, Viçosa, PR, pp. 328–356.
- Midilli, A., Kucuk, H., Yapar, Z., 2002. A new model for single-layer drying. *Drying Technology*, **20**(7), 1503–1513. <https://doi.org/10.1081/DRT-120005864>.
- Mischan, M.M., Pinho, S.Z., Carvalho, L.R., 2011. Determination of a point sufficiently close to the asymptote in nonlinear growth functions. *Scientia Agricola*, **68**(2), 109–114. <https://doi.org/10.1590/S0103-90162011000100016>.
- Mischan, M.M., Pinho, S.Z., 2014. *Modelos não lineares: funções assintóticas de crescimento*. Cultura Acadêmica, São Paulo, 184 p. <https://doi.org/10.1590/s0102-0536-20210302>.
- Nocedal, J., Wright, S.J., 2006. *Numerical Optimization.*, 2nd ed. Springer, New York.
- Nguyen, T.K., et al., 2020. Moisture profile analysis of food models undergoing glass transition during air-drying. *Journal of Food Engineering*, **281**. <https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2020.109995>.
- Oliveira, D.E.C., et al., 2012. Cinética de secagem dos grãos de milho. *Revista Brasileira de Milho e Sorgo*, **11**(2), 190–201. <https://doi.org/10.18512/1980-6477/rbms.v11n2p190-201>.
- Page, G.E., 1949. Factors influencing the maximum rates of air drying shelled corn in thin layers. Unpublished M.S. thesis, Purdue University, West Lafayette.
- Pravallika, K., et al., 2023. Supercritical drying of food products: An insightful review. *Journal of Food Engineering*, **343**. <https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2022.111375>.
- R Core Team, 2024. *R: A language and environment for statistical computing*. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. Available at: <https://www.R-project.org/>.
- Sari, B.G., et al., 2018. Nonlinear modeling for analyzing data from multiple harvest crops. *Agronomy Journal*, **110**(5), 2331–2342. <https://doi.org/10.2134/agronj2018.05.0307>.
- Serviço Nacional de Aprendizagem Rural (Senar). Grãos: armazenamento de milho, soja, feijão e café. 100p, Brasília, 2018.

Seber, G.A.F., Wild, C.J., 2003. *Nonlinear Regression*. John Wiley & Sons, Hoboken, New Jersey.

Souza, G.F.M.V., et al., 2015. Simultaneous heat and mass transfer in a fixed-bed dryer. *Applied Thermal Engineering*, **90**, 38–44.

<https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2015.06.088>

Sinha, A., Bhargava, A., 2022. A simplified modelling approach for predicting shrinkage and sensitive material properties during low temperature air drying of porous food materials. *Journal of Food Engineering*, **317**. <https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2021.110732>.

Teixeira, G.L., et al., 2021. Growth curves of campolina horses using nonlinear models. *Livestock Science*, **251**, 104631. <https://doi.org/10.1016/j.livsci.2021.104631>.

Timm, N.S., et al., 2020a. Effects of drying methods and temperatures on protein, pasting, and thermal properties of white flourey corn. *Journal of Food Processing and Preservation*. <https://doi.org/10.1111/jfpp.14767> .

Timm, N.S., et al., 2020b. Effects of drying temperature and genotype on morphology and technological, thermal, and pasting properties of corn starch. *International Journal of Biological Macromolecules*. <https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2020.09.197>.

Timm, N.S., et al., 2023. Effects of drying temperature of corn from the center and extremities of the corncob on drying parameters, protein and starch properties, and carotenoid profile. *Food Research International*, **163**. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2022.112267> .

TERCEIRA PARTE – CONSIDERAÇÕES FINAIS

CONSIDERAÇÕES FINAIS

A análise da secagem do milho por meio de modelos de regressão não linear exige um entendimento tanto do processo físico quanto das ferramentas estatísticas aplicáveis. Foi possível contextualizar a importância da cultura do milho e a relevância da secagem como prática pós-colheita indispensável à manutenção da qualidade dos grãos.

Ao combinar a inferência bayesiana com *prioris* de máxima entropia e a análise de pontos críticos em curvas de decrescimento, o trabalho propôs abordagens inovadoras que ampliam as possibilidades de interpretação e controle do processo de secagem. A utilização de modelos não lineares demonstrou ser eficaz na descrição da perda de umidade ao longo do tempo, enquanto a estimação bayesiana se mostrou vantajosa especialmente em situações com alta complexidade computacional ou disponibilidade de conhecimento prévio.

A definição do novo ponto influente P_1 , associada a critérios técnicos relacionados à umidade final recomendada, representa um avanço conceitual que pode orientar decisões mais assertivas no manejo pós-colheita. Além disso, a identificação de pontos como o de inflexão, máxima aceleração e desaceleração assintótica, com incertezas quantificadas via *bootstrap*, contribui para uma compreensão mais refinada da dinâmica do processo.

Os resultados obtidos demonstram que a articulação entre métodos estatísticos robustos e o conhecimento técnico da área agrícola pode gerar ferramentas mais eficazes para o monitoramento e a otimização de processos produtivos. Assim, espera-se que as metodologias propostas nesta tese sejam incorporadas em estudos futuros e possam ser adaptadas para outras culturas, promovendo avanços no uso de tecnologias estatísticas aplicadas à agroindústria.

APÊNDICE A - Anexo Artigo 1 e Material Suplementar Artigo 2

ANEXO - ARTIGO 1

1) Distribuições condicionais

1.1) Posterioris condicionais completas para o modelo de Lewis

A princípio foi obtida a condicional completa $P(\tau | k, \varphi_i, Y)$ do parâmetro τ :

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

Desenvolvendo o quadrado e fazendo o rearranjo da equação, obtém-se:

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

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

que representa o núcleo de uma distribuição gama de parâmetros:

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

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

Os cálculos algébricos para obter a condicional completa *a posteriori* do parâmetro φ_1 é apresentado a seguir:

$$p(\varphi_1 | k, \tau, Y) \propto \exp\left\{-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [y_i - e^{(-kt_i)} - \varphi_1 y_{t_{i-1}}]^2\right\} \exp\left\{-\frac{1}{2v} [\varphi_1 - 0]^2\right\} \\ \propto \exp\left\{-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [y_i^2 + e^{(-kt_i)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_i e^{(-kt_i)} + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{(-kt_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i]\right\} \exp\left\{-\frac{1}{2v} [\varphi_1]^2\right\}$$

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

Colocando-se φ_1^2 e φ_1 em evidência:

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

somando-se e subtraindo-se $\left(\frac{\tau \sum_{i=2}^n (-y_{i-1} e^{-kt_i} + y_{i-1} y_i)}{\tau \sum_{i=2}^n (y_{i-1})^2 + \frac{1}{\nu}} \right)^2$, tem-se:

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

$$x \left\{ \left[\varphi_1 - \frac{\tau \sum_{i=2}^n (-y_{i-1} e^{-kt_i} + y_{i-1} y_i)}{\tau \sum_{i=2}^n (y_{i-1})^2 + \frac{1}{v}} \right]^2 - \underbrace{\left(\frac{\tau \sum_{i=2}^n (-y_{i-1} e^{-kt_i} + y_{i-1} y_i)}{\tau \sum_{i=2}^n (y_{i-1})^2 + \frac{1}{v}} \right)^2}_{\text{n\~{a}o depende de } \varphi_1} \right\}.$$

Logo,

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

e portanto, a posteriori de φ_1 é uma distribuição normal com média e variância, respectivamente, dadas por:

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

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

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

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

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

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

Como as distribuições condicionais completas para os parâmetros τ e φ_l apresentam forma conhecida, utiliza-se o algoritmo de Amostrador de Gibbs para amostrar das marginais. Para o parâmetro k , a distribuição *a posteriori* condicional não possui forma conhecida, e portanto será necessário utilizar o algoritmo Metropolis-Hastings para se amostrar desta distribuição.

1.2) Posterioris condicionais completas para o modelo de Henderson e Pabis

Obtendo-se a condicional completa $P(\tau | k, \varphi_l, Y)$ do parâmetro τ , tem-se:

$$p(\tau | k, k_0, \varphi_1 Y) \propto \tau^{\frac{n-1}{2}} \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [y_i - k_0 e^{(-kt_i)} - \varphi_1 y_{i-1}]^2 \right\} \exp(-\delta\tau).$$

Desenvolvendo-se o quadrado e reorganizando a equação, obtém-se:

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

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

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

que representa o núcleo de uma distribuição gama de parâmetros:

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

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

A condicional completa *a posteriori* do parâmetro φ_1 é apresentada a seguir:

$$\begin{aligned}
p(\varphi_1|k, k_0, \tau, Y) &\propto \exp\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [y_i - k_0 e^{-kt_i} - \varphi_1 y_{i-1}]^2\right\} \exp\left\{-\frac{1}{2\nu}[\varphi_1 - 0]^2\right\} \\
&\propto \exp\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [y_i^2 + k_0^2 e^{-2kt_i} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_i k_0 e^{-kt_i} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{-kt_i} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i]\right\} \exp\left\{-\frac{1}{2\nu}[\varphi_1]^2\right\} \\
&\propto \exp\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [\varphi_1^2 y_{i-1}^2 + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{-kt_i} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i] - \frac{\varphi_1^2}{2\nu}\right\}.
\end{aligned}$$

Colocando-se φ_1^2 e φ_1 em evidência:

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

somando-se e subtraindo-se $\left(\frac{\tau \sum_{i=2}^n (-y_{i-1} k_0 e^{-kt_i} + y_{i-1} y_i)}{\tau \sum_{i=2}^n (y_{i-1})^2 + \frac{1}{\nu}}\right)^2$, tem-se:

$$\propto \exp\left\{-\frac{1}{2}\left(\tau \sum_{i=2}^n (y_{i-1})^2 + \frac{1}{\nu}\right)\right\} \quad \times$$

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

$$\begin{aligned}
& \left[- \left(\frac{\tau \sum_{i=2}^n (-y_{i-1} k_0 e^{-kt_i} + y_{i-1} y_i)}{\tau \sum_{i=2}^n (y_{i-1})^2 + \frac{1}{v}} \right)^2 \right] \\
& \propto \exp \left\{ - \frac{1}{2} \left(\tau \sum_{i=2}^n (y_{i-1})^2 + \frac{1}{v} \right) \right\} \quad \times \\
& \left(\left[\varphi_1 - \left(\frac{\tau \sum_{i=2}^n (-y_{i-1} k_0 e^{-kt_i} + y_{i-1} y_i)}{\tau \sum_{i=2}^n (y_{i-1})^2 + \frac{1}{v}} \right) \right]^2 - \underbrace{\left(\frac{\tau \sum_{i=2}^n (-y_{i-1} k_0 e^{-kt_i} + y_{i-1} y_i)}{\tau \sum_{i=2}^n (y_{i-1})^2 + \frac{1}{v}} \right)^2}_{\text{n\~{a}o depende de } \varphi_1} \right)
\end{aligned}$$

Logo, o resultado obtido indica que:

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

representando o n\u00facleo de uma distribui\u00e7\u00e3o normal com m\u00e9dia e vari\u00e2ncia, respectivamente, dadas por:

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

Partindo da *posteriori* conjunta, a condicional completa de k_0 \u00e9 igual a:

$$\begin{aligned}
p(k_0|k, \varphi_1, \tau, Y) &\propto \exp\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [y_i - k_0 e^{(-kt_i)} - \varphi_1 y_{i-1}]^2\right\} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma_0^2}[k_0 - \mu_0]^2\right\} \\
&\propto \exp\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [y_i^2 + k_0^2 e^{(-kt_i)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_i k_0 e^{(-kt_i)} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i]\right\} \\
&\quad \times \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma_0^2}[k_0 - \mu_0]^2\right\} \\
&\propto \exp\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=2}^n [k_0^2 e^{(-kt_i)^2} - 2y_i k_0 e^{(-kt_i)} + 2\varphi_1 y_{i-1} k_0 e^{(-kt_i)}] - \frac{[k_0^2 - 2k_0\mu_0 + \mu_0^2]}{2\sigma_0^2}\right\}.
\end{aligned}$$

Colocando-se k_0^2 e k_0 em evidência:

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

somando-se e subtraindo-se $\left(\frac{\tau \sum_{i=2}^n (y_i e^{(-kt_i)} - \varphi_1 y_{i-1} e^{(-kt_i)}) + \frac{\mu_0}{\sigma_0^2}}{\tau \sum_{i=2}^n (e^{(-kt_i)^2}) + \frac{1}{\sigma_0^2}}\right)^2$, obtém-se:

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

$$\begin{aligned}
& \left[\left[k_0^2 - 2k_0 \left(\frac{\tau \sum_{i=2}^n (y_i e^{-kt_i} - \varphi_1 y_{i-1} e^{-kt_i}) + \frac{\mu_0}{\sigma_0^2}}{\tau \sum_{i=2}^n (e^{-kt_i})^2 + \frac{1}{\sigma_0^2}} \right) + \left(\frac{\tau \sum_{i=2}^n (y_i e^{-kt_i} - \varphi_1 y_{i-1} e^{-kt_i}) + \frac{\mu_0}{\sigma_0^2}}{\tau \sum_{i=2}^n (e^{-kt_i})^2 + \frac{1}{\sigma_0^2}} \right)^2 \right] \right] \\
& \left[- \left(\frac{\tau \sum_{i=2}^n (y_i e^{-kt_i} - \varphi_1 y_{i-1} e^{-kt_i}) + \frac{\mu_0}{\sigma_0^2}}{\tau \sum_{i=2}^n (e^{-kt_i})^2 + \frac{1}{\sigma_0^2}} \right)^2 \right] \\
& \propto \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left(\tau \sum_{i=2}^n (e^{-kt_i})^2 + \frac{1}{\sigma_0^2} \right) \right\} \quad \times \\
& \times \left[\left[k_0 - \left(\frac{\tau \sum_{i=2}^n (y_i e^{-kt_i} - \varphi_1 y_{i-1} e^{-kt_i}) + \frac{\mu_0}{\sigma_0^2}}{\tau \sum_{i=2}^n (e^{-kt_i})^2 + \frac{1}{\sigma_0^2}} \right) \right]^2 - \underbrace{\left(\frac{\tau \sum_{i=2}^n (y_i e^{-kt_i} - \varphi_1 y_{i-1} e^{-kt_i}) + \frac{\mu_0}{\sigma_0^2}}{\tau \sum_{i=2}^n (e^{-kt_i})^2 + \frac{1}{\sigma_0^2}} \right)^2}_{\text{não depende de } k_0} \right]
\end{aligned}$$

Logo, o resultado obtido indica que a expressão:

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

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

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

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

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

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

$$\times \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_k^2} [k - \mu_k]^2 \right\}$$

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

$$\times \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_k^2} [k - \mu_k]^2 \right\}$$

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

Como as distribuições condicionais completas para os parâmetros τ , φ_1 e k_0 apresentam forma conhecida, logo utiliza-se o algoritmo de Amostrador de Gibbs para amostrar das marginais. Para o parâmetro k , a distribuição *a posteriori* condicional não possui forma conhecida, e portanto utiliza-se o algoritmo Metropolis-Hastings para se amostrar desta distribuição.

1.3) Posterioris condicionais completas para o modelo de Overhults

A posteriori conjunta para o modelo de Page é dada por (3.16):

$$p(k, \tau, c, \varphi_1 | Y) \propto \tau^{\frac{n-1}{2}} \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n [y_i - e^{(-kt_i)^c} - \varphi_1 y_{i-1}]^2 \right\} \exp(-\delta\tau) \frac{1}{b-a} \quad \times$$

$$x \quad \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma_k^2}[k-\mu_k]^2\right\} \exp\left\{-\frac{1}{2v}[\varphi_1-0]^2\right\}$$

Desta forma, para o parâmetro τ a condicional completa será:

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

Desenvolvendo o quadrado e fazendo o rearranjo da equação, temos:

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

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

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

Que representa o núcleo de uma distribuição gama de parâmetros:

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

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

A condicional completa *a posteriori* do parâmetro φ_1 é dada por:

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

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

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

Colocando φ_1^2 e φ_1 em evidência:

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

Somando-se e subtraindo-se $\left(\frac{\tau \sum_{i=2}^n (-y_{i-1} e^{(-kt_i)^c} + y_{i-1} y_i)}{\tau \sum_{i=2}^n (y_{i-1})^2 + \frac{1}{\nu}} \right)^2$:

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

$$X \left(\left[\varphi_1 - \frac{\tau \sum_{i=2}^n (-y_{i-1} e^{(-kt_i)^c} + y_{i-1} y_i)}{\tau \sum_{i=2}^n (y_{i-1})^2 + \frac{1}{v}} \right]^2 - \underbrace{\left[\frac{\tau \sum_{i=2}^n (-y_{i-1} e^{(-kt_i)^c} + y_{i-1} y_i)}{\tau \sum_{i=2}^n (y_{i-1})^2 + \frac{1}{v}} \right]^2}_{\text{n\~{a}o depende de } \varphi_1} \right)$$

Logo,

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

Que representa o n\u00facleo da distribui\u00e7\u00e3o normal com m\u00e9dia e vari\u00e2ncia, dadas por:

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

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

Para o par\u00e2metro c , a condicional completa ser\u00e1:

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

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

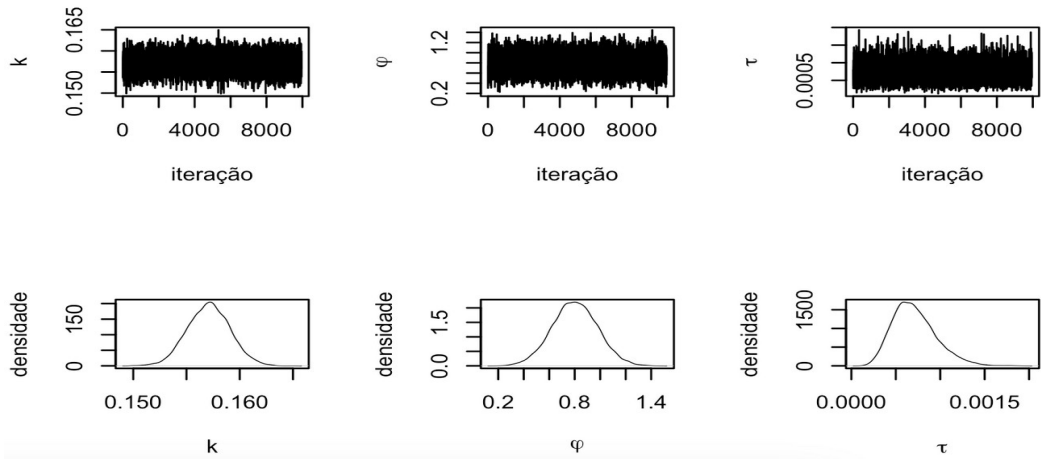
E a condicional completa do par\u00e2metro k \u00e9 dada por:

$$\begin{aligned}
p(k|\tau, c, \varphi_1 Y) &\propto \exp\left\{-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n \left[y_i - e^{(-kt_i)^c} - \varphi_1 y_{i-1}\right]^2\right\} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma_k^2} [k - \mu_k]^2\right\} \\
&\propto \exp\left\{-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n \left[y_i^2 + e^{((-kt_i)^c)^2} + \varphi_1^2 y_{i-1}^2 - 2y_i e^{(-kt_i)^c} + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{(-kt_i)^c} - 2\varphi_1 y_{i-1} y_i\right]\right\} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma_k^2} [k - \mu_k]^2\right\} \\
&\propto \exp\left\{-\frac{\tau}{2} \sum_{i=2}^n \left[e^{((-kt_i)^c)^2} - 2y_i e^{(-kt_i)^c} + 2\varphi_1 y_{i-1} e^{(-kt_i)^c}\right]\right\} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma_k^2} [k - \mu_k]^2\right\}.
\end{aligned}$$

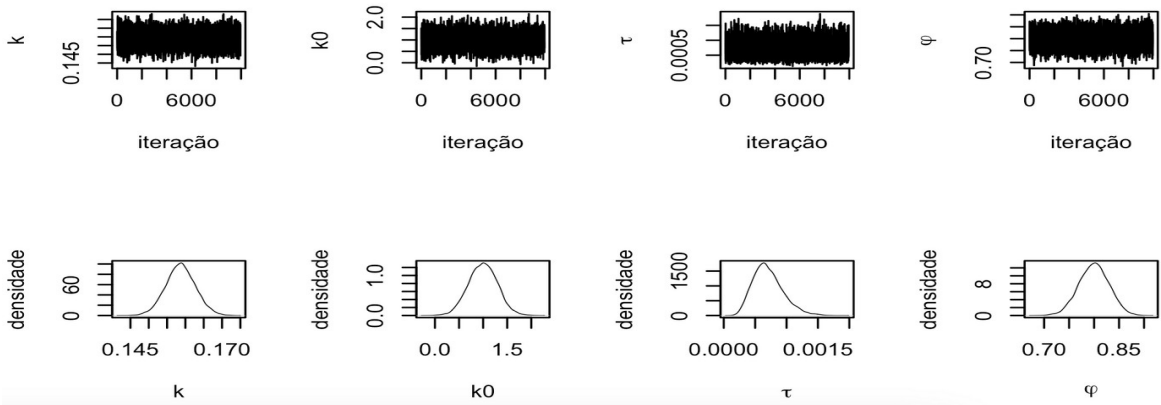
Logo, tem-se que para os parâmetros τ e φ_1 as distribuições condicionais completas apresentaram forma conhecida. Já para os parâmetros k e c , a distribuição *a posteriori* condicional não possui forma conhecida, e portanto será necessário utilizar o algoritmo Metropolis-Hastings para gerar os resultados.

Figura 1- Traço das cadeias MCMC e gráfico das densidades *a posteriori* geradas para modelo de Lewis, Henderson e Pabis e Overhults considerando a estrutura de erro autoregressivo de ordem 1, em relação ao algoritmo de análise de dados de cinética de grãos de milho na temperatura de 40°C.

Modelo de Lewis



Modelo de Henderson e Pabis



Modelo de Overhults

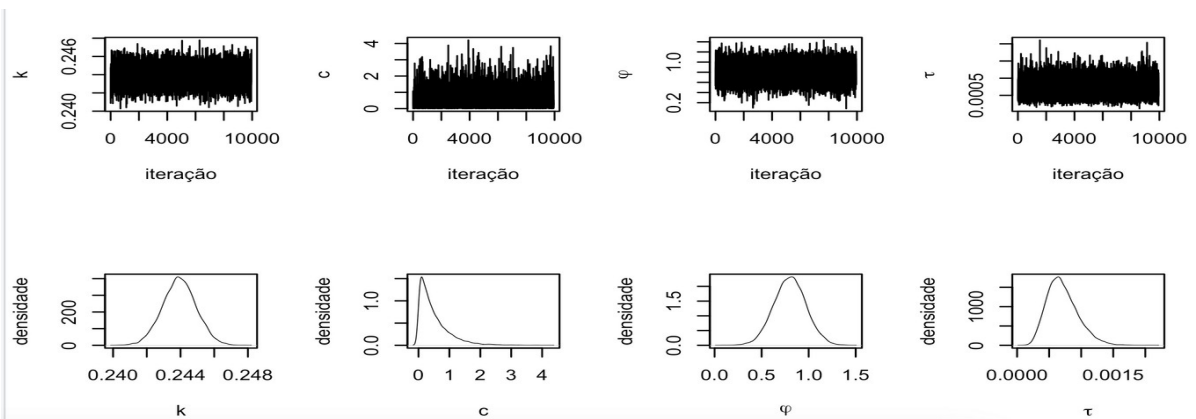
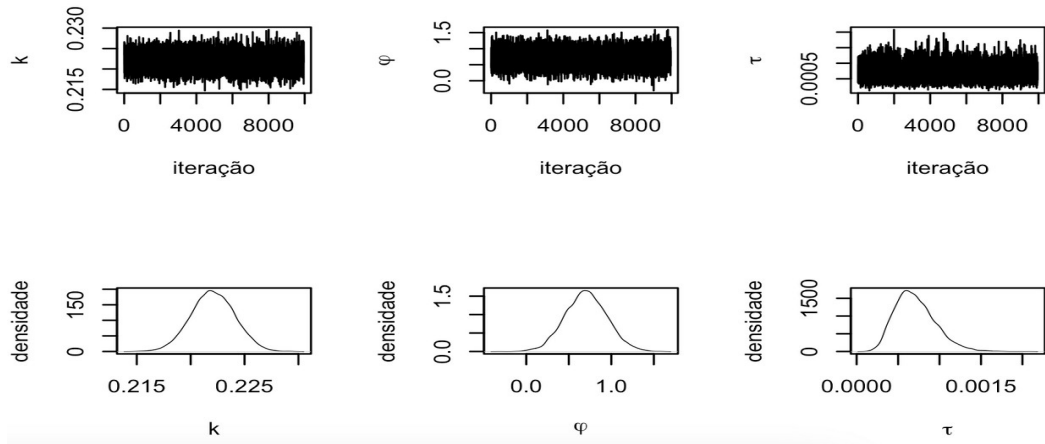
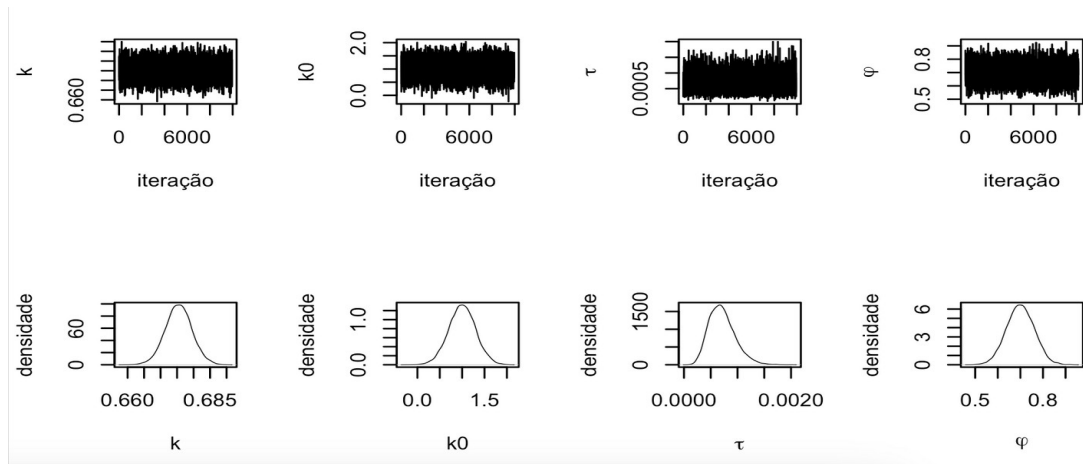


Figura 2- Traço das cadeias MCMC e gráfico das densidades *a posteriori* geradas para modelo de Lewis, Henderson e Pabis e Overhults considerando a estrutura de erro autoregressivo de ordem 1, em relação ao algoritmo de análise de dados de cinética de grãos de milho na temperatura de 60°C.

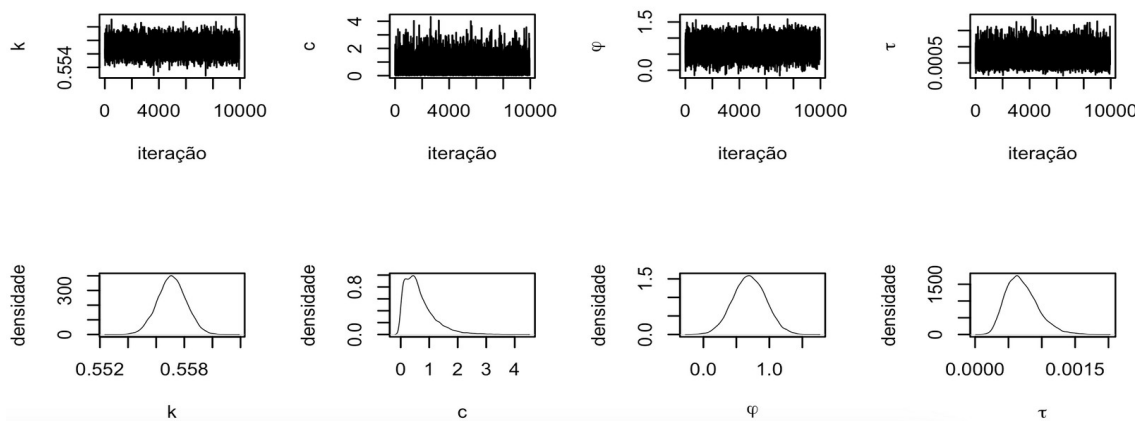
Modelo de Lewis



Modelo de Henderson e Pabis



Modelo de Overhults



MATERIAL SUPPLEMENTAR- ARTIGO 2

2. Obtaining the Influential Points of Decreasing Models

Below is the calculation of the derivatives from 1 to 4 order of the nonlinear models studied in this article: Lewis, Overhults, Page, Simple Exponential with three parameters, and Midilli.

2.1 Lewis Model

$$f(t) = \exp[-kt]$$

where $0 < k < 1$

We know that the Inflection Point (IP) is calculated at t_0 , where

$$\frac{d^2 f(t)}{dt^2} = 0$$

However,

$$\frac{df(t)}{dt} = -k \exp[-kt]$$

$$\frac{d^2 f(t)}{dt^2} = k^2 \exp[-kt]$$

Therefore,

$$\frac{d^2 f(t)}{dt^2} > 0 \quad \forall t \in \mathbb{R}^+$$

Therefore, IP does not exist.

We know that the Maximum Acceleration Point (MAP) and the Maximum Deceleration Point (MDP) will be calculated at t_0 and t_1 , where

$$\frac{d^3 f(t_0)}{dt^3} = \frac{d^3 f(t_1)}{dt^3} = 0$$

However,

$$\frac{d^3 f(t)}{dt^3} = -k^3 \exp[-kt]$$

Therefore,

$$\frac{d^3 f(t)}{dt^3} < 0 \quad \forall t \in \mathbb{R}^+$$

Therefore, there is no MAP and MDP.

We also know that the Asymptotic Deceleration Point (ADP) will be calculated at t_0 , where

$$\frac{d^4 f(t)}{dt^4} = 0$$

However,

$$\frac{d^4 f(t)}{dt^4} = k^4 \exp[-kt]$$

Therefore,

$$\frac{d^4 f(t)}{dt^4} > 0 \quad \forall t \in \mathbb{R}^+$$

Therefore, there is also no ADP.

2.2 Overhults model

$$f(t) = \exp [(-kt)^c]$$

where $0 < k < 1$; $c > 0$

We know that the Inflection Point (IP) is calculated at t_0 , where

$$\frac{d^2 f(t_0)}{dt^2} = 0$$

Thus,

$$\frac{d^2 f(t)}{dt^2} = \exp[-(kt)^c] c (kt)^{c-2} k^2 (c(kt)^c - (c-1))$$

$$\Rightarrow c(kt)^c - (c-1) = 0$$

$$c k^c t^c = c - 1 \rightarrow t^c = \frac{c-1}{ck^c} \rightarrow t = \left(\frac{c-1}{ck^c} \right)^{\frac{1}{c}}$$

We know that MAP and MDP occur at t_0 and t_1 , such that

$$\frac{d^3 f(t_0)}{dt^3} = \frac{d^3 f(t_1)}{dt^3} = 0$$

Thus,

$$\frac{d^3 f(t)}{dt^3} = -\exp[-(kt)^c] c (kt)^{c-3} k^3 \left((c(kt)^c)^2 - 3c(kt)^c(c-1) + (c-1)(c-2) \right)$$

For

$$\left((c(kt)^c)^2 - 3c(kt)^c(c-1) + (c-1)(c-2) \right) = 0$$

Take the change of variable $v = c(kt)^c$ (I)

We will have

$$v^2 - 3(c-1)v + (c-1)(c-2) = 0$$

By Bhaskara:

$$v = \frac{3(c-1) \pm \sqrt{(-3(c-1))^2 - 4(c-1)(c-2)}}{2}$$

Returning in (I)

$$v = c(kt)^c$$

$$(kt)^c = \frac{v}{c} \Rightarrow kt = \left(\frac{v}{c} \right)^{\frac{1}{c}} \Rightarrow t = \frac{1}{k} \left(\frac{v}{c} \right)^{\frac{1}{c}}$$

We know that the ADP occurs at t_0 , where

$$\frac{d^4 f(t)}{dt^4} = 0$$

So,

$$\frac{d^4 f(t)}{dt^4} = \exp[-(kt)^c] c(kt)^{c-4} k^4 \left((c(kt)^c)^3 - 6(c(kt)^c)^2(c-1) + 7c(kt)^c(c-1)(c-2) - (c-1)(c-2) \right) \times (c-3)$$

Solving the equation

$$\left(c(kt)^c \right)^3 - 6 \left(c(kt)^c \right)^2 (c-1) + 7c(kt)^c (c-1)(c-2) - (c-1)(c-2)(c-3) = 0$$

Take the change of variable $x = c(kt)^c$, só

$$x^3 - 6x^2 \frac{(c-1)}{c} + 7x \frac{(c-1)(c-2)}{c} - \frac{(c-1)(c-2)(c-3)}{c^3} = 0$$

The cubic equation is represented as

$$x^3 - px^2 + qx + r = 0$$

where

$$p = \frac{-6(c-1)}{c}$$

$$q = \frac{7(c-1)(c-2)}{c^2}$$

$$r = \frac{-(c-1)(c-2)(c-3)}{c^3}$$

According to Cardano's formulas, the roots will be:

$$x_1 = y_1 - \frac{p}{c}$$

$$x_2 = y_1 \exp[2\pi/3] - \frac{p}{c}$$

$$x_3 = y_1 \exp[4\pi/3] - \frac{p}{c}$$

where

$$y_1 = \sqrt[3]{\frac{-B}{2} + \sqrt{\left(\frac{-B}{2}\right)^2 + \left(\frac{A}{3}\right)^3}} + \sqrt[3]{\frac{-B}{2} - \sqrt{\left(\frac{-B}{2}\right)^2 + \left(\frac{A}{3}\right)^3}}$$

$$A = q - \frac{p^2}{3}$$

$$B = r - \frac{pq}{3} + \frac{2p^3}{27}$$

Since x_2 and x_3 are complex numbers, only x_1 is the one we calculated

$$t_0 = \left(\frac{x}{k^c}\right)^{\frac{1}{c}}$$

2.3 Page model

$$f(t) = \exp[-kt^c]$$

where $0 < k < 1$; $c > 0$

The IP occurs at t_0 , such that

$$\frac{d^2 f(t_0)}{dt^2} = 0$$

Assim,

$$\frac{df(t)}{dt} = -ckt^{c-1} \exp[-kt^c]$$

$$\frac{d^2 f(t)}{dt^2} = \exp[-kt^c] ckt^{c-2} (ckt^c - (c-1))$$

Thus, solving the equation

$$\Rightarrow ckt^c - (c-1) = 0$$

$$ckt^c = c-1 \rightarrow t^c = \frac{c-1}{ck} \rightarrow t = \left(\frac{c-1}{ck} \right)^{\frac{1}{c}}$$

The MAP and MDP It occurs at t_0 and t_1 , such that

$$\frac{d^3 f(t_0)}{dt^3} = \frac{d^3 f(t_1)}{dt^3} = 0$$

Thus,

$$\frac{d^3 f(t)}{dt^3} = -\exp[-kt^c] ckt^{c-3} \left((ckt^c)^2 - 3ckt^c(c-1) + (c-1)(c-2) \right)$$

Solving the equation

$$(ckt^c)^2 - 3ckt^c(c-1) + (c-1)(c-2) = 0$$

Consider $v = ckt^c$:

We will have

$$v^2 - 3(c-1)v + (c-1)(c-2) = 0$$

$$v = \frac{3(c-1) \pm \sqrt{(-3(c-1))^2 - 4(c-1)(c-2)}}{2}$$

In this way,

$$v = ckt^c \Rightarrow t = \left(\frac{v}{kc} \right)^{\frac{1}{c}}$$

The ADP occurs at t_0 , such that

$$\frac{d^4 f(t)}{dt^4} = 0$$

So,

$$\frac{d^4 f(t)}{dt^4} = \exp[-kt^c] kct^{c-4} \left((ckt^c)^3 - 6(ckt^c)^2(c-1) + 7ckt^c(c-1)(c-2) - (c-1)(c-2)(c-3) \right)$$

Solving the equation using Cardano's formula, we will have:

$$(kct^c)^3 - 6(kct^c)^2(c-1) + 7kct^c(c-1)(c-2) - (c-1)(c-2)(c-3) = 0$$

Take $x = kct^c$, so

$$x^3 - 6x^2(c-1) + 7x(c-1)(c-2) - (c-1)(c-2)(c-3) = 0$$

given

$$p = -6(c-1)$$

$$q = 7(c-1)(c-2)$$

$$r = -(c-1)(c-2)(c-3)$$

We have

$$x = y - \frac{p}{3}$$

where

$$y_1 = \sqrt[3]{\frac{-B}{2} + \sqrt{\left(\frac{B}{2}\right)^2 + \left(\frac{A}{3}\right)^3}} + \sqrt[3]{\frac{-B}{2} - \sqrt{\left(\frac{B}{2}\right)^2 + \left(\frac{A}{3}\right)^3}}$$

And finally,

$$t = \left(\frac{x}{kc}\right)^{\frac{1}{c}}$$

2.4 Simple Exponential Model with 3 Parameters

$$f(t) = k_0 \exp[-kt] + a$$

where $0 < k_0 < 1$; $0 < k < 1$; $a \in \mathbb{R}$

The Inflection Point (IP) is calculated at t_0 , where

$$\frac{d^2 f(t)}{dt^2} = 0$$

However,

$$\frac{df(t)}{dt} = -k_0 k \exp[-kt]$$

$$\frac{d^2 f(t)}{dt^2} = k_0 k^2 \exp[-kt]$$

How $k_0 \neq 0$, $k \neq 0$ e $\exp[-kt] \neq 0$, We have that there is no IP.

The MAP and MDP will be calculated in t_0 and t_1 , such that

$$\frac{d^3 f(t_0)}{dt^3} = \frac{d^3 f(t_1)}{dt^3} = 0$$

However,

$$\frac{d^3 f(t)}{dt^3} = -k_0 k^3 \exp[-kt]$$

How $k_0 \neq 0, k \neq 0 e \exp[-kt] \neq 0$, we have to say that there is no MAP and MDP.

We also know that the ADP will be calculated in t_0 , where

$$\frac{d^4 f(t)}{dt^4} = 0$$

However,

$$\frac{d^4 f(t)}{dt^4} = k_0 k^4 \exp[-kt]$$

How $k_0 \neq 0, k \neq 0 e \exp[-kt] \neq 0$, we have to say that there is no ADP.

2.5 Midilli model

We have to

$$f(t) = k_0 \exp[-kt^c] + at$$

where $0 < k_0 < 1$; $0 < k < 1$; $c > 0$, $a \in \mathbb{R}$

We know that the IP occurs at the time when

$$\frac{d^2 f(t_0)}{dt^2} = 0$$

Thus,

$$\frac{df(t)}{dt} = -k_0 k c t^{c-1} \exp[-kt^c] + a$$

$$\frac{d^2 f(t)}{dt^2} = \exp[-kt^c] t^{c-2} k_0 k c [c k t^c - (c-1)]$$

Thus, solving the equation

$$\Rightarrow c k t^c - (c-1) = 0$$

$$k c t^c = c-1 \rightarrow t^c = \frac{c-1}{k c} \rightarrow t = \left(\frac{c-1}{k c} \right)^{\frac{1}{c}}$$

The MAP and MDP It occurs at t_0 and t_1 , such that

$$\frac{d^3 f(t_0)}{dt^3} = \frac{d^3 f(t_1)}{dt^3} = 0$$

So,

$$\frac{d^3 f(t)}{dt^3} = -\exp[-kt^c] t^{c-3} k_0 kc [-(c-1)(c-2) + kc(2c-2)t^c - k^2 c^2 t^{2c}]$$

Solving the equation

$$-(c-1)(c-2) + kc(2c-2)t^c - k^2 c^2 t^{2c} = 0$$

Take $v = t^c$, we will have:

$$k^2 c^2 v^2 - kc(2c-2)v + (c-1)(c-2) = 0$$

By Bhaskara,

$$v = \frac{kc(2c-2) \pm \sqrt{(-kc(2c-2))^2 - 4k^2 c^2 (c-1)(c-2)}}{2k^2 c^2}$$

So,

$$t = v^{\frac{1}{c}}$$

The ADP occurs in t_0 , such that

$$\frac{d^4 f(t)}{dt^4} = 0$$

Thus,

$$\frac{d^4 f(t)}{dt^4} = \exp[-kt^c] k_0 kct^{c-4} [-(c-1)(c-2)(c-3) + kc(2c-2)(2c-3)t^c - k^2 c^2 (3c-3)]$$

$$\times [(3c-4)t^{2c} + k^3 c^3 t^{3c}]$$

Solving the equation, we will have:

$$k^3 c^3 t^{3c} - k^2 c^2 (3c-3)(3c-4)t^{2c} + kc(2c-2)(2c-3)t^c - (c-1)(c-2)(c-3) = 0$$

Take $v = t^c$, so

$$k^3 c^3 v^3 - k^2 c^2 (3c-3)(3c-4)v^2 + kc(2c-2)(2c-3)v - (c-1)(c-2)(c-3) = 0$$

By Cardano's formula

$$v = u + \frac{(3c-3)(3c-4)}{3kc}$$

where

$$u = \sqrt[3]{\frac{-q}{2} + \sqrt{\left(\frac{q}{2}\right)^2 + \left(\frac{p}{3}\right)^3}} + \sqrt[3]{\frac{-q}{2} - \sqrt{\left(\frac{q}{2}\right)^2 + \left(\frac{p}{3}\right)^3}}$$

Such that

$$p = \frac{1}{k^2 c^2} \left[(2c-2)(2c-3) - \frac{(3c-3)^2(3c-4)^2}{9} \right]$$

$$q = \frac{1}{k^3 c^3} \left[(c-1)(c-2)(c-3) - \frac{(3c-3)(3c-4)(2c-2)(2c-3)}{3k} \right]$$

So,

$$t = v^{\frac{1}{c}}$$

It is worth noting that the roots such that

$$u_1 = wc_1 + w^2 c_2$$

$$u_2 = w^2 c_1 + wc_2$$

where

$$c_1 = \sqrt[3]{\frac{-q}{2} + \sqrt{\left(\frac{q}{2}\right)^2 + \left(\frac{p}{3}\right)^3}}$$

$$c_2 = \sqrt[3]{\frac{-q}{2} - \sqrt{\left(\frac{q}{2}\right)^2 + \left(\frac{p}{3}\right)^3}}$$

$$w = \exp[2\pi/3]$$

They will be complex numbers.

3. 13th Percentile as an Influential Point in the Decline (P₁)

Given a model f(t), we will find an expression for t such that, given y, we will have:

$$t = f^{-1}(y)$$

According to the literature, y = 0.13 is the ideal value for P₁ for drying.

3.1 Lewis model

We know that f(t) = exp [-kt]

Thus,

$$y = \exp [-kt]$$

$$\log (y) = -kt$$

Therefore,

$$t = \frac{-\log (y)}{k}$$

Thus, P_1 occurs in

$$t = \frac{-\log (0.13)}{k}.$$

3.2 Overhults model

We know that $f(t) = \exp [(-kt)^c]$

Thus, P_1 occurs in

$$t = \frac{(-\log (0.13))^{\frac{1}{c}}}{k}.$$

3.3 Page model

We know that $f(t) = \exp [-kt^c]$

Thus,

$$y = \exp [-kt^c]$$

$$\log (y) = -kt^c$$

Thus,

$$t = \left(\frac{-\log (y)}{k} \right)^{\frac{1}{c}}$$

Thus, P_1 occurs in

$$t = \left(\frac{-\log (0.13)}{k} \right)^{\frac{1}{c}}.$$

3.4 Simple Exponential Model with 3 Parameters

We know that

$$f(t) = k_0 \exp [-kt] + a$$

Thus

$$y = k_0 \exp [-kt] + a$$

$$\log\left(\frac{y-a}{k}\right) = -kt$$

So,

$$t = -\frac{1}{k} \log\left(\frac{y-a}{k_0}\right)$$

Thus, P_1 occurs in

$$t = -\frac{1}{k} \log\left(\frac{0.13-a}{k_0}\right)$$

3.5 Midilli model

We know that

$$f(t) = k_0 \exp [-kt^c] + at$$

Thus,

$$y = k_0 \exp [-kt^c] + at$$

The equation will be transcendental, which implies the impossibility of isolating t .

APÊNDICE B – Códigos R: Artigo 1 e Artigo 2

CÓDIGOS ARTIGO 1

```
# SCRIPT MODELO LEWIS COM ESTRUTURA DE ERROS AR(1)
```

```
# carregando os dados
dados<-read.table("dados.txt", head=T)
tempo<- dados$tempo
ru<- dados$ru
yz <- ru ; yz
x <- tempo ; x
n <- length(yz)
y<- yz[2:n]
ytmenos1<- y[1:(n-1)]
length(ytmemos1)
n1<-length(y); n1
t<- x[2:n]; t
length(t)
```

```
#Hiperparâmetros para k (dist normal)
```

```
mu_k <-0.15
s2_k <-0.1
k_piori = rnorm(1,mu_k, s2_k)
```

```
#Hiperparâmetros para tau (dist exponencial)
```

```
delta<-1/(0.05^2)
```

```
#hiperparâmetros para theta (dist normal)
```

```
mu<-0.8
s2<-0.03
theta_piori <- rnorm(1,mu,s2)
```

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

```
#valores a serem gerados
```

```
kpost <-numeric(M)
taupost<-numeric(M)
thetapost <- numeric(M)
```

```
#valores iniciais
```

```
kpost[1]<-k_piori
taupost[1]<- delta
thetapost[1]<-theta_piori
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-1)/2)+1)
  b <- (sum((1/2)*(y-(exp(-kpost[i-1]*t))
            -(thetapost[i-1]*yt-1))^2 +2*taupost[1]))
```

```

taupost[i] <- rgamma(1,a,b)
# Condicional de Theta
m<- (taupost[i-1]*(sum(y*ytmenos1-ytmenos1*exp(-kpost[i-1]*t)))+
(mu/s2))/(taupost[i-1]*sum(ytmenos1^2)+(1/s2))
s <- 1/(taupost[i-1]*(sum(ytmenos1^2)+(1/s2))
thetapost[i] <- rnorm(1,m,sqrt(s))

#gerando iterativamente (Metropolis k)
candidato <- rnorm(1,mean(k_priori),0.002)
u <-runif(1,0,1)

##### Condicional de k
p1<-exp((-1/(2*s2_k))*((kpost[i-1]-mu_k)^2))*
exp(sum((-taupost[i-1]/2)*(y-exp(-kpost[i-1]*t)-thetapost[i-1]*ytmenos1)^2))
q1<-dnorm(kpost[i-1], 0.15, sqrt(0.004))

##### Condicional de k considerando a distribuição auxiliar
p2 <-exp((-1/(2*s2_k))*((candidato-mu_k)^2))*exp(sum((-taupost[i-1]/2)*(y-exp(-candidato*t)-
thetapost[i-1]*ytmenos1)^2))
q2<-dnorm(candidato,0.15,sqrt(0.004))
razao<-min(1,(p2*q1)/(p1*q2))

if(u<=razao){
kpost[i] <- candidato
aceitacao <- aceitacao+1
} else kpost[i] <- kpost[i-1]
}
aceitacao/M

#burn-in e thin
t1<-seq(500,M,by=10)
length(t1)
k <- kpost[t1]
tau <- taupost[t1]
phi <-thetapost[t1]
dados <- cbind(k,phi,tau)
library(boa)
boa.menu()

##### Cadeias #####
par(mfrow=c(2,3))
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")

```

```
##### Avaliadores #####
## Medida de Kullback-Leibler
k. <- rnorm(10000, mean = 0.15, sd = sqrt(0.1))
phi. <- rnorm(10000, mean = 0.8, sd = sqrt(0.03))
tau. <- rexp(10000,1/(0.05^2))
priori <- cbind(k.,phi.,tau.)
```

```
library(FNN)
KL.divergence(priori,dados, k=1)
```

CÓDIGOS ARTIGO 2

```
#-----
# Pontos Influentes do Modelo de Page
#-----
# carregando os dados
dados<-read.table("dados.txt", head=T)
tempo<- dados$tempo
ru<- dados$ru
t <- tempo
y <- ru
sample.data <- data.frame(t, y)

# Ajustando ao modelo de Page
model <- nls(y ~ exp(-k * (t^c)), start = c(k = 0.05, c = 1.00))
summary(model)

# Extraindo os parâmetros
coef <- coef(model)
k <- coef["k"]
c <- coef["c"]

# Ponto de IP
T <- ((c-1)/(k*c))^(1/c)

# Usando Newton-Rapshon IP
NR <- function(t){
  parada <- Inf
  while(parada>0.00001){
    t0 <- t
    f <- D2_Page(t,k,c)
    fl <- D3_Page(t,k,c)
    # Verificar se valores são válidos
    if (is.na(f) || is.na(fl) || is.nan(f) || is.nan(fl)) {
      warning("Valores inválidos encontrados. Iteração interrompida.")
      break
    }
    if (abs(fl) < 1e-10) { # Evita problemas de divisão por valores muito pequenos
      warning("Derivada de ordem 3 muito próxima de zero. Iteração interrompida.")
    }
  }
}
```

```

    break
  }
  t <- t - f/fl
  parada <- abs(t-t0)
}
return(list(IP = t, ValorIP =Page(t,k,c), TesteSD = D3_Page(t,k,c), TestePD = D2_Page(t,k,c)))
}
A <- c();B <- c();C <- c();D <- c();F <- c()
for(i in 1:3000){
  M <- NR(i)
  A[i] <- M$IP
  B[i] <- M$ValorIP
  C[i] <- M$TesteSD
  D[i] <- M$TestePD
  F[i] <- i
}
View(data.frame(Tempo = A, Valor = B, TesteSD = C, TestePD = D, Iteração = F))

#-----
# Fazendo Gráfico das derivadas
#-----
# Modelo Page
page <- function(t) {exp(-k * (t^c))}
# Primeira derivada
d1_Page <- function(t) {
  -k * c * t^(c - 1) * exp(-k * t^c)
}

# Segunda derivada
d2_Page <- function(t) {
  exp(-k * t^c) * k * c * t^(c - 2) * (k * c * t^c - (c - 1))
}

# Terceira derivada
d3_Page <- function(t) {
  -exp(-k * t^c) * k * c * t^(c - 3) * ((k * c * t^c)^2 -
    3 * k * c * (c - 1) * t^c +
    (c - 1) * (c - 2))
}

# Quarta derivada
d4_Page <- function(t) {
  exp(-k * t^c) * k * c * t^(c - 4) * ((k * c * t^c)^3 -
    6 * (k * c * t^c)^2 * (c - 1) +
    7 * k * c * t^c * (c - 1) * (c - 2) -
    (c - 1) * (c - 2) * (c - 3))
}

# Valores de x (dias)
x <- seq(0, 100, length.out = 1000)

# Cálculo dos valores das funções
y <- page(x)

```

```

d1 <- d1_Page(x)
d2 <- d2_Page(x)
d3 <- d3_Page(x)
d4 <- d4_Page(x)

# Pontos influentes

points_influent <- data.frame(
  x = c(T, T1, T3, T4),
  label = c("IP", "MAP", "ADP", "P_1")
)

# Plotagem
library(ggplot2)

# Primeiro gráfico (1ª derivada)
p1 <- ggplot(data.frame(x, y = d1), aes(x, y)) +
  geom_line(color = "red") +
  geom_point(data = points_influent, aes(x = x, y = d1_Page(x)), color = "black") +
  geom_text(data = points_influent, aes(x = x, y = d1_Page(x), label = label),
    vjust = -1, hjust = -0.5, size = 3) +
  labs(title = "1st order", x = "Age (days)", y = "Y") +
  ylim(-0.03, 0.005) + # Ajuste os limites para que o rótulo fique visível
  theme_minimal()
(Fazer para todos os pontos)
# Exibição
library(gridExtra)
grid.arrange(p1, p2, p3, p4, nrow = 2)

#-----
# Bootstrap do Modelo de Page
#-----
B <- 2000
# Extrair os parâmetros
k <- coef(model)["k"]
c <- coef(model)["c"]

# Função de ajuste do Page
page_model <- function(t, k) { exp(-k * (t^c)) }
# Previsões do modelo ajustado
x$y_pred <- page_model(x$t, k)
library(boot)

# IP
IPboot <- function(data) {
  perturbed_data <- data
  perturbed_data$y <- perturbed_data$y + rnorm(nrow(perturbed_data), mean = 0, sd = 0.05)
  model <- nls(y ~ exp(-k * (t^c)), data = perturbed_data, start = list(k = k * runif(1, 0.9, 1.1), c = c *
runif(1, 0.9, 1.1)))
  coef <- coef(model)
  k <- coef["k"]
  c <- coef["c"]
  T <- ((c-1)/(k*c))^(1/c)
  return(T)
}

```

```

}
ipboot <- function(x, d) {
  resample <- x[d, ] # Reamostragem dos dados
  return(IPboot(resample))
}
ICboot <- boot(x, ipboot, R = 1999) # A amostra original, sempre incorpora, daí fica 2000
boot.ci(ICboot, conf=0.95, type=c("norm", "basic", "perc", "bca")) # IC do IP
ICboot
print(sd(ICboot$t[,1]))

#-----
# Gráfico do modelo de Page com IC BCa para IP, MAP, ADP e P_1
#-----
# Calcular intervalos de confiança para IP, MAP, ADP e P_1
ci_ip <- boot.ci(boot(x, ipboot, R = 1999), conf = 0.95, type = "bca") # Para IP
ci_map <- boot.ci(boot(x, mapboot, R = 1999), conf = 0.95, type = "bca") # Para MAP
ci_adp <- boot.ci(boot(x, adpboot, R = 1999), conf = 0.95, type = "bca") # Para ADP
ci_p_1 <- boot.ci(boot(x, p_1, R = 1999), conf = 0.95, type = "bca") # Para P_1

# Criar o data frame com os pontos influentes
points_influential <- data.frame(
  x = c(T, T1, T3, T4),
  label = c("IP", "MAP", "ADP", "P_1")
)
# Plotar o gráfico
library(ggplot2)

```