MAGALI TERESOPOLIS REIS AMARAL

ABORDAGEM BAYESIANA PARA CURVA DE CRESCIMENTO COM RESTRIÇÕES NOS PARÂMETROS

RECIFE-PE - DEZ/2008



UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DE PERNAMBUCO PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM BIOMETRIA E ESTATÍSTICA APLICADA

ABORDAGEM BAYESIANA PARA CURVA DE CRESCIMENTO COM RESTRIÇÕES NOS PARÂMETROS

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Biometria e Estatística Aplicada como exigência parcial à obtenção do título de Mestre.

Área de Concentração: Inferência Estatística

Orientador: Prof. Dr Eufrázio de Souza Santos Coorientador: Prof. Dr Borko D. Stosic

RECIFE-PE - DEZ/2008.

FICHA CATALOGRÁFICA

A485a Amaral, Magali Teresopolis Reis Abordagem bayesiana para curva de crescimento com restrições nos parâmetros / Magali Teresopolis Reis Amaral. -- 2008. 109f. : il. Orientador : Eufrázio de Souza Santos Dissertação (Mestrado em Biometria e Estatística Apli – cada) -- Universidade Federal Rural de Pernambuco. Depar tamento de Estatística e Informática. Inclui apêndice e bibliografia.

CDD 519. 54

- 1. Curva de crescimento
- 2. Modelos não lineares
- 3. Análise bayesiana
- 4. Simulação MCMC
- 5. Método de Gauss Newton
- I. Santos, Eufrázio de Souza
- II. Título

UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DE PERNAMBUCO PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM BIOMETRIA E ESTATÍSTICA APLICADA

ABORDAGEM BAYESIANA PARA CURVA DE CRESCIMENTO COM RESTRIÇÕES NOS PARÂMETROS

Magali Teresopolis Reis Amaral

Dissertação julgada adequada para obtenção do título de mestre em Biometria e Estatística Aplicada, defendida e aprovada por unanimidade em 18/12/2008 pela Comissão Examinadora.

Orientador:

Prof. Dr. Eufrázio de Souza Santos Universidade Federal Rural de Pernambuco

Banca Examinadora:

- La De

Prof. Dr. Marinho Gomes de Andrade Filho Universidade de São Paulo

All D. Stric

Prof. Dr. Borko D. Stosic Universidade Federal Rural de Pernambuco

Rozemeire Crangeldo Fraccone

Profa. Dra. Rosemeire Leovigildo Fiaccone Universidade Federal da Bahia

À minha família, em especial a meus pais, dedico com muito amor e carinho

Agradecimentos

Agradeço primeiramente a DEUS, por ter me concedido a vida me dando força nos momentos mais difíceis, permitido a minha chegada até aqui.

Aos meus pais Antonio de Lisboa Amaral e Maria Helena Amaral pelo carinho, dedicação e esforço para me educar.

A David Duarte Pinto, pelo suporte, incentivo, amor, compreensão e pela suas incansáveis idas e vindas a Pernambuco, nunca me deixando só.

Ao professor Marinho Gomes de Andrade Filho pela amizade, confiança, incentivo e por me mostrar que as dificuldades da vida são importantes para o nosso próprio crescimento.

A Katiane Silva Conceição por estar sempre ao meu lado, dando-me apoio, incentivo e fazendo-me sorrir mesmo nos momentos mais difíceis. Obrigada amiga por ter sido a irmã que não tive.

Aos meus irmãos Marcos Teresopolis e Mateus Teresopolis pela alegria e confiança depositada em mim.

A meu sobrinho Rafael Teresopolis pelo sorriso sincero.

A professora Dra. Rosimeire Fiaccone pelo apoio, conselhos e experiências passadas nesse período.

Ao meu orientador Professor Dr. Eufrázio de Souza Santos, pela oportunidade concedida e ensinamentos ministrados

Ao professor Dr. Borko D. Stosic pelo profissionalismo, competência e incentivo.

Aos meus amigos Lenaldo Azevedo Santos e Eucymara França Nunes Santos pelos agradáveis momentos de convivência e descontração.

Aos professores e funcionários do Departamento de Estatística e Informática pela contribuição em minha formação profissional, convivência agradável durante esse período.

À minha amiga Aline Santos pelos momentos de lazer, amizade e apoio concedido.

À FAPESB pelo apoio financeiro.

A todos que de forma direta ou indireta, contribuíram para execução deste trabalho.

Resumo

O ajuste de curva de crescimento peso-idade para animais tem um papel importante no planejamento da produção animal. No entanto, as curvas de crescimento ajustadas devem ser coerentes com as interpretações biológicas do crescimento do animal, o que exige muitas vezes que sejam impostas restrições aos parâmetros desse modelo.

A inferência de parâmetros de modelos não lineares sujeito a restrições, utilizando técnicas clássicas apresenta diversas dificuldades. Para contornar estas dificuldades, foi proposta uma abordagem bayesiana para ajuste de curvas de crescimento. Neste sentido, a abordagem bayesiana proposta introduz as restrições nos parâmetros dos modelos através das densidades de probabilidade a priori adotadas. Devido à não linearidade, as densidades a posteriori destes parâmetros não têm um núcleo que possa ser identificado entre as distribuições tradicionalmente conhecidas e os seus momentos só podem ser obtidos numericamente. Neste trabalho, as técnicas de simulação de Monte Carlo Cadeia de Markov (MCMC) foram implementadas para obtenção de um sumário das densidades a posteriori. Além disso, foram utilizados critérios de seleção do melhor modelo para um determinado conjunto de dados baseados nas amostras geradas das densidades a posteriori.

O objetivo principal deste trabalho é mostrar a viabilidade da abordagem bayesiana e comparar a inferência bayesiana dos parâmetros estimados, considerando-se densidades a priori não informativas (de Jeffreys), com a inferência clássica das estimativas obtidas pelo método de Gauss-Newton. Assim, observou-se que o cálculo de intervalos de confiança, baseado na teoria assintótica, falha, levando a não significância de certos parâmetros de alguns modelos. Enquanto na abordagem bayesiana os intervalos de credibilidade não apresentam este problema. Os programas utilizados foram implementados no R e para ilustração da aplicabilidade do método proposto, foram realizadas análises de dados reais oriundos de um experimento de avaliação de sistema de cruzamento entre raças bovinas de corte, executado na Embrapa Pecuária Sudeste. Os dados correspondem a 12 mensurações de peso dos 8 aos 19 meses de idade do grupo genético das raças Nelore e Canchim, pertencente ao grupo de genotípico AALLAB, ver (Paz 2002). Os resultados revelaram excelente aplicabilidade do método bayesiano, destacando que o modelo de Richard apresentou dificuldades de convergência tanto na abordagem clássica como bayesiana (com priori não informativa). Por outro lado o modelo Logístico foi quem melhor se ajustou aos dados em ambas metodologias quando se optou por densidades a priori não informativa e informativa.

Palavras-chave: Curva de crescimento, modelos não lineares, análise bayesiana, simulação MCMC, método de Gauss-Newton.

Abstract

The adjustment of the weight-age growth curves for animals plays an important role in animal production planning. These adjusted growth curves must be coherent with the biological interpretation of animal growth, which often demands imposition of constraints on model parameters.

The inference of the parameters of nonlinear models with constraints, using classical techniques, presents various difficulties. In order to bypass those difficulties, a bayesian approach for adjustment of the growing curves is proposed. In this respect the bayesian proposed approach introduces restrictions on model parameters through choice of the prior density. Due to the nonlinearity, the posterior density of those parameters does not have a kernel that can be identified among the traditional distributions, and their moments can only be obtained using numerical techniques. In this work the MCMC simulation (Monte Carlo chain Markov) was implemented to obtain a summary of the posterior density. Besides, selection model criteria were used for the observed data, based on generated samples of the posterior density.

The main purpose of this work is to show that the bayesian approach can be of practical use, and to compare the bayesian inference of the estimated parameters considering non informative prior density (from Jeffreys), with the classical inference obtained by the Gauss-Newton method. Therefore it was possible to observe that the calculation of the confidence intervals based on the asymptotic theory fails, indicating non significance of certain parameters of some models, while in the bayesian approach the intervals of credibility do not present this problem. The programs in this work were implemented in R language, and to illustrate the utility of the proposed method, analysis of real data was performed, from an experiment of evaluation of system of crossing among cows from different herds, implemented by Embrapa Pecuária Sudeste. The data correspond to 12 measurements of weight of animals between 8 and 19 months old, from the genetic groups of the races Nelore and Canchim, belonging to the genotype AALLAB (Paz 2002). The results reveal excellent applicability of the bayesian method, where the model of Richard presented difficulties of convergence both in the classical and in the bayesian approach (with non informative prior). On the other hand the logistic model provided the best adjustment of the data for both methodologies when opting for non informative and informative prior density.

Key words: Growing Curves, nonlinear models, bayesian analysis, MCMC simulation, Gauss Newton method.

Sumário

Li	sta de	e Figuras	xi
Li	sta d	e Tabelas	xiii
1	Intro	odução e Revisão de Literatura	15
2	Abo	rdagem clássica para modelos de crescimento	19
	2.1	Os modelos para curvas de crescimento	19
	2.2	Procedimento de Gauss-Newton	21
		2.2.1 Uso de Incrementos Fracionários	23
	2.3	Aspectos práticos	24
	2.4	Critério de seleção dos modelos	25
3	Res	ultados da abordagem clássica	28
	3.1	Aplicação	28
	3.2	Seleção do modelo na abordagem clássica	36
4	Abo	rdagem bayesiana	39
	4.1	Introdução	39
	4.2	Protótipo bayesiano	40
	4.3	Distribuição a priori não informativa	42
		4.3.1 Método de Jeffreys	43
		4.3.2 Aspectos práticos usando o método de Jeffreys	44
	4.4	Densidade a posteriori	48

	4.5	Métod	o de Laplace	50
	4.6	impler	nentação do algoritimo da Metropolis-Hastings	51
	4.7	Cálcul	o da densidade preditiva dos pesos	52
	4.8	Critéri	o de seleção dos modelos	54
		4.8.1	Critério de Informação bayesiana (BIC)	54
		4.8.2	Critério Desvio-Informação (DIC)	54
		4.8.3	Critério da Densidade Preditiva Ordenada (CPO)	55
5	Res	ultados	s da abordagem bayesiana	56
	5.1	Aplica	ção	56
		5.1.1	Modelo de Brody	56
		5.1.2	Modelo de Chapman-Richards	60
		5.1.3	Modelo de Gompertz	63
		5.1.4	Modelo Logístico	66
		5.1.5	Modelo Von Bertalanffy	68
	5.2	Seleçá	ăo do modelo na abordagem bayesiana	72
6	Con	clusão		77
Re	eferêr	ncias B	ibliográficas	79
Ap	pêndi	ce A –	Demonstração de Fórmulas	82
A	pêndi	ce B –	Dados	84
Ap	pêndi	ce C –	Programas da abordagem clássica	85
	C.1	Model	o Brody	85
	C.2	Model	o Chapman-Richards	87
	C.3	Model	o Chapman-Richards m fixo igual a 10	89
	C.4	Model	o de Gompertz	91

C.5	Modelo Logístico	93
C.6	Modelo Von Bertalanffy	95
C.7	Seleção do modelo	97
Apêndi	ce D – Programas da abordagem bayesiana	98
D.1	Modelo Brody	98
D.2	Modelo Chapman-Richards	100
D.3	Modelo de Gompertz	101
D.4	Modelo Logístico	103
D.5	Modelo Von Bertalanffy	104
D.6	Seleção do modelo	106

Lista de Figuras

3.1	Curva ajustada pelo modelo de Brody	29
3.2	Convergência dos parâmetros a, c e k para o modelo de Brody	29
3.3	Curva ajustada pelo modelo de Richards	30
3.4	Convergência dos parâmetros a, c , k e m para o modelo de Chapman- Richards	30
3.5	Curva ajustada pelo modelo de Richards (m=10)	31
3.6	Convergência dos parâmetros a, c e k para o modelo de Chapman-Richards (m=10).	31
3.7	Curva ajustada pelo modelo de Gompertz.	32
3.8	Convergência dos parâmetros a, c e k para o modelo de Gompertz	32
3.9	Curva ajustada pelo modelo de Logístico	33
3.10	Convergência dos parâmetros a, k e m para o modelo de Logístico	33
3.11	Curva ajustada pelo modelo de Von Bertalanffy	34
3.12	Convergência dos parâmetros a, c e k para o modelo de Von Bertalanffy	34
3.13	Pesos estimados para os diferentes modelos	36
3.14	Gráfico dos resíduos do modelo logístico.	38
3.15	Gráfico de normalidade dos modelo logístico.	38
5.1	Parâmetros ajustados pelo modelo de Brody.	58
5.2	Histograma do parâmetros para o modelo de Brody.	59
5.3	Parâmetros ajustados pelo modelo de Chapman-Richards.	61
5.4	Histograma do parâmetros para modelo de Chapman-Richards	62
5.5	Parâmetros ajustados pelo modelo de Gompertz	64

5.6	Histograma do parâmetros para o modelo de Gompertz	65
5.7	Parâmetros ajustados pelo modelo Logístico.	67
5.8	Histograma do parâmetros para o modelo Logístico.	68
5.9	Parâmetros ajustados pelo modelo de Von Bertalanffy	70
5.10	Histograma do parâmetros para o modelo de Von Bertalanffy	71
5.11	Densidade preditiva ordenada com priori não informativa.	73
5.12	Densidade preditiva ordenada com priori informativa	75
5.13	Percentis preditivo dos pesos do modelo logístico.	76

Lista de Tabelas

1.1	Modelos utilizados para expressar curvas de crescimento por peso	17
2.1	Forma geral dos modelos linearizados.	20
2.2	Derivadas dos modelos linearizados utilizadas no algoritmo de Gauss-Newton.	25
3.1	Estimativa e erro padrão dos parâmetros dos modelos de curvas de cresci- mento	35
3.2	Critério de seleção dos modelos de curvas de crescimento	37
5.1	Estimadores bayesianos pelo método de Laplace para o modelo de Brody.	56
5.2	Sumário das medidas descritivas das densidades a posteriori pelo método de Metropolis-Hastingns com 22% de aceitação para o modelo de Brody	57
5.3	Estimadores bayesianos pelo método de Laplace para o modelo de Chapman- Richards	60
5.4	Sumário das medidas descritivas das densidades a posteriori pelo método de Metropolis-Hastingns com 52% de aceitação para o modelo de Chapman- Richards	60
5.5	Estimadores bayesianos pelo método de Laplace para o modelo de Gompertz.	63
5.6	Sumário das medidas descritivas das densidades a posteriori pelo método de Metropolis-Hastingns com 25% de aceitação para o modelo de Gompertz.	63
5.7	Estimadores bayesianos pelo método de Laplace para o modelo Logístico	66
5.8	Sumário das medidas descritivas das densidades a posteriori pelo método de Metropolis-Hastingns com 27% de aceitação para o modelo Logístico	66
5.9	Estimadores bayesianos pelo método de Laplace para o modelo de Von Bertalanffy	68
5.10	Sumário das medidas descritivas das densidades a posteriori pelo método	

de Metropolis-Hastingns com 24% aceitação para o modelo de Von Bertalanffy. 69

5.11	Critério de seleção dos modelos de curvas de crescimento na abordagem	
	bayesiana com priori não informativa.	72
5.12	Critério de seleção dos modelos de curvas de crescimento na abordagem	
	bayesiana com priori informativa	74
5.13	Percentis preditivo dos pesos do modelo logístico.	75
B.1	Mensurações de idade e peso do grupo genético das raças Nelore e Can-	
	chim do grupo de genotípico AALLAB	84

1 Introdução e Revisão de Literatura

A representação paramétrica das curvas de crescimento peso-idade de animais é feita por modelos matemáticos não lineares (função de crescimento) (Ratkoswky 1983). O ajuste de funções de crescimento peso-idade é uma ferramenta fundamental no planejamento da produção animal, pois permite obter informações precisas da presente curva de crescimento dos animais estudados, além de informações de prognósticos futuros para animais do mesmo grupo racial sob a mesma situação ambiental. Neste contexto, a seleção da função de crescimento que melhor descrevesse o crescimento de um animal é utilizada tanto para fins de exigência nutricional, como para seleção genética, uma vez que essas funções sintetizam um grande número de medidas em apenas alguns parâmetros com significado biológico, facilitando dessa forma, a interpretação e o entendimento do fenômeno. Vale ressaltar que, nessa nova dimensão de análise, é possível destacar outras vantagens, como por exemplo, a possibilidade de se fazer previsões sobre o comportamento médio da resposta para ocasiões de avaliação diferente daquela para as quais o estudo foi planejado e a aquisição de um maior conhecimento sobre o processo de variação da resposta ao longo das condições de avaliação.

A diversidade genética, variabilidade ambiental e nutricional, pode levar a diferentes curvas de crescimento para uma mesma espécie de animal. Assim, serão abordados diversos modelos de crescimento, visando proporcionar ao pesquisador uma metodologia estatística que possa selecionar de forma sistemática o modelo que melhor se ajusta aos dados analisados.

Neste sentido, diversas funções vêm sido empregadas nos estudos de crescimento (Tabela 1.1), entre eles destacam-se as funções de Brody, Gompertz, Logística, Richards e von Bertalanffy. Essas funções têm sido utilizadas por diversos autores em diferentes áreas, para descrever o crescimento de bois, ovinos, rã-touro, tilápia, cordeiro, vacas entre outros, ver por ex. (Tedeschi et al 2000), (Sousa 2006), (Santos et al 2007) e (Guedes et al 2005).

Para descrever a curva de crescimento de bovinos, alguns autores como, (Tedeschi et al 2000), utilizou diferentes funções não lineares na forma genuína e modificada, (Mazzini et al 2003) comparou as funções ajustadas de forma não-ponderada e ponderada pelo inverso da variância dos pesos em cada pesagem, (Machado et al 2003) ajustou a curva de crescimento de bovinos por meio da equação de Michaelis-Menten, mostrando que o ajuste com essa técnica é condizente com a realidade. Tanto (Tedeschi et al 2000) como (Silva et al 2003) usaram os valores da soma dos quadrados do resíduo (SQr), coeficiente de determinação (R^2) e desvio de regressão na seleção das funções de crescimento, o método utilizado para estimar os parâmetros, em quase todos os estudos, foi o método de Gauss-Newton.

(Sousa 2006) e (Afonso 2007) aplicaram esses modelos a dados de ovinos. Segundo esses autores os pesos ajustados pela função de Gompertz se mostraram mais próximos aos pesos observados, sendo esta, a função escolhida para melhor representar o crescimento desses animais.

De acordo com (Santos et al 2007) a aplicação de modelos não lineares para o ajuste de curvas de crescimento de tilápia do Nilo foi satisfatória em todos os modelos, contudo os modelos de Gompertz e von Bertalanffy são mais indicados, tanto para a linhagem Chitralada quanto para a Supreme, considerando que foram pequenas as diferenças existentes entre as duas linhagens. Já (Rodrigues et al 2007) ajustou essa funções matemáticas para curva de crescimento em peso de rã-touro e deduziu que o formato sigmoidal da curva dos modelos de Gompertz e Logístico, associado ao parâmetro que representou o peso final, fez com que estes modelos fossem os eleitos para estimar o crescimento da rã-touro em recria para as condições observadas no experimento.

(Guedes et al 2005), estudaram a curva de crescimento de cordeiros da raça Santa Inês através da análise bayesiana, e concluíram que as estimativas para os parâmetros são mais precisa, comparados às obtidas por estudos anteriores nos quais foi utilizado o mesmo conjunto de dados para ajustar modelos não lineares.

Neste estudo as funções não lineares usadas no ajuste da curva de crescimento são listadas na Tabela 1.1:

Autor	Peso $P(t)$
Brody	$a(1-ce^{-kt})$
Chapman-Richards	$a(1-ce^{-kt})^m$
Gompertz	$ae^{ce^{(-kt)}}$
Logístico	$a(1+e^{-kt})^{-m}$
Von Bertalanffy	$a(1-ce^{-kt})^3$

Tabela 1.1: Modelos utilizados para expressar curvas de crescimento por peso.

Na Tabela 1.1, P(t) é a média dos pesos dos animais, t é a idade em meses, a é o parâmetro que representa o peso assintótico ou peso adulto, o valor assintótico da curva, isto é, o peso médio do animal livre das variações sazonais, c é uma constante que está relacionada aos pesos iniciais do animal, indicando a proporção do crescimento assintótico a ser ganho depois do nascimento, k é a taxa de crescimento da variável de interesse e corresponde ao índice de maturidade, determina a eficiência do crescimento do animal, isto é indica a velocidade com que o animal se aproxima da idade adulta, m representa o parâmetro que define a forma da curva nos modelos e conseqüentemente determina o ponto em que o animal passa de uma fase de crescimento inibitório, indicando o ponto que ele passa a crescer com menor eficiência.

Quando 0 < m < 1, tem-se um modelo intermediário entre o de Brody e o de Gompertz; quando 1 < m < 2, o formato se situa entre o modelo de Gompertz e o modelo logístico; quando m > 2, o resultado é um modelo similar ao logístico, porém, assimétrico, em que o ponto de inflexão pode ser alterado para um valor maior do que P = a/2, ver (Freitas 2007). Contudo, vale salientar que no modelo logístico, o parâmetro c é fixo e igual a 1, uma parametrização realizada por (Brown et al 1976) que inclui o parâmetro m, tornou o ponto de inflexão variável, acarretando dessa forma na limitação do ponto de inflexão a entre 0,41 e 0,44. Para esta função, o ponto de inflexão é determinado por:

$$I = a(\frac{m-1}{m})^m.$$

Note que o modelo de Von Bertalanffy e Brody são casos especiais do modelo de Richards para o ponto de inflexão *m* igual a três e um respectivamente. A equação abaixo

determina o ponto de inflexão para essa função

$$I = a(\frac{m}{m+1})^m.$$

Cada curva é desenvolvida a partir dos dados obtidos e os modelos matemáticos utilizados para representá-la, podem ser classificados como modelos lineares ou passíveis de linearização, que podem ser ajustados pelos métodos de regressão linear simples ou múltipla ou modelos não lineares ajustados por método de regressão não linear. No entanto, diversos autores relataram dificuldades de ajuste para a função de Richards, (Ratkoswky 1983) e (Brown et al 1976). (Sarmento et al 2006) relatou que na aplicação desse modelo a convergência no processo iterativo não foi atingida em aproximadamente 50% dos animais. Conseqüentemente, essa dificuldade foi atribuída à necessidade desse modelo em estimar um parâmetro a mais e principalmente pela correlação negativa entre c e m.

Neste trabalho foi utilizado o método de Gauss-Newton para ajustar os modelos no contexto clássico e teste de hipótese são utilizados no sentido de auxiliar na escolha do melhor modelo. O principal objetivo deste estudo é propor uma abordagem bayesiana para ajustar estes modelos. Considerando restrições nos parâmetros, foram utilizados também critérios de seleção dos modelos no contexto bayesiano, para selecionar o modelo que melhor se ajusta a um conjunto de dados.

Esta dissertação é estruturada da seguinte forma: No Capitulo 2, é apresentada a abordagem clássica de ajuste dos modelos de crescimento. No Capitulo 3, resultados e discussão, da abordagem clássica. No Capitulo 4, apresenta-se a abordagem bayesiana para ajuste e seleção destes modelos. No Capitulo 5, resultados e discussão, da abordagem bayesiana. No capitulo 6, apresenta-se a conclusão do trabalho.

2 Abordagem clássica para modelos de crescimento

2.1 Os modelos para curvas de crescimento

A análise de curvas de crescimento consiste na análise de dados longitudinais por meio de ajustamento de um modelo matemático que descreve todo o período de vida do animal relacionando o peso P(t) e a idade t do animal. O ajuste destas curvas tem sido abordado em inúmeros estudos e em diversas áreas de pesquisa, (ver citações em (Paz 2002)). Neste contexto, pode-se definir os modelos de crescimento como funções não lineares que relacionam os pesos de um animal, medido em diferentes idades. Denotando por P(t)o peso do animal na idade t e as diferentes funções dadas na Tabela 1.1.

Vale ressaltar que uma grande vantagem desses modelos é a simplicidade e facilidade na interpretação dos parâmetros, pois em muitas situações, são requeridos menos parâmetros nos modelos não lineares do que nos lineares. Além disso, nos modelos não lineares, os parâmetros fornecem um maior conhecimento sobre o fenômeno em estudo, o que gera um bom ajuste, com menos parâmetros.

Em muitas aplicações práticas, adota-se o procedimento de linearização, isso pode ser feito aplicando-se a transformação logarítmica nos modelos, dessa forma o modelo geral pode ser escrito como:

$$\ln P(t_i) = h(t_i;\beta) + e_{t_i}, \qquad (2.1)$$

em que β pode ser definido como um vetor de parâmetros, $\beta = (a, c, k, m)$ e e_t é um erro aleatório independente de t e com distribuição normal $N(0, \tau^{-1})$, em que $\tau = 1/\sigma^2$ e $\sigma^2 > 0$ é a variância dos erros e_t .

Entretanto a transformação de um modelo não linear em um modelo linear nos parâ-

metros, se por um lado facilita o processo de ajuste, implica em fazer suposições não realistas sobre o termo dos erros (distribuição normal com variância constante). Outro fato importante, é que existem modelos que são inerentemente não lineares, isto é, não podem ser linearizados por transformação.

Pelo modelo geral descrito em (2.1), obtêm-se os modelos logaritmizados conforme a Tabela 2.1.

Autor	$h(x; \beta)$		
Brody	$\ln(a) + \ln(1 - ce^{-kt})$		
Chapman-Richards	$\ln(a) + m\ln(1 - ce^{-kt})$		
Gompertz	$\ln(a) + ce^{-kt}$		
Logístico	$\ln(a) - m\ln(1 + e^{-kt})$		
Von Bertalanffy	$\ln(a) + 3\ln(1 - ce^{-kt})$		

Tabela 2.1: Forma geral dos modelos linearizados.

O uso de transformações para linearização de modelos não lineares torna-se mais crítico quando as estimativas obtidas, utilizando-se os modelos linearizados, são feitas para os parâmetros transformados e não para os parâmetros originais do modelo. Nestes casos, perde-se a informação sobre os erros padrões dos parâmetros originais e isso resulta em grandes dificuldades na inferência dos parâmetros originais e, em geral, impossibilita cálculos de intervalos de confiança e testes de hipóteses sobre os parâmetros originais do modelo (uma abordagem mais ampla deste problema é dada em (Myers 1990)).

Vale salientar que mesmo utilizando variáveis contínuas como variáveis independentes, não há razão para que as variáveis independentes, nos modelos não lineares, sejam contínuas. Ao contrário, pode-se fazer uso de variáveis dummy para indicar a presença ou ausência de um grupo, ou codificar diferenças entre indivíduos (dados de medidas repetidas).

2.2 Procedimento de Gauss-Newton

No ajuste de funções, a forma mais utilizada para estimar os parâmetros de uma função é o método dos mínimos quadrados ponderados. Este método consiste em encontrar um vetor de parâmetros β de estimativas que minimiza a soma de quadrados dos desvios dos valores observados em relação aos ajustados, por meio de processos iterativos, nos quais são requeridos valores iniciais próximos ao verdadeiro valor dos parâmetros.

Entretanto, como trata-se de funções não lineares, não é possível obter explicitamente o vetor de estimativas através do método dos mínimos quadrados. Neste caso, o método de Gauss-Newton é indicado.

O método de Gauss-Newton é um caso particular do método dos mínimos quadrados ponderados, também conhecido como método da linearização. Este método utiliza uma expansão em série de Taylor para aproximar o modelo de regressão não linear com termos lineares e, então, aplica-se mínimos quadrados ordinário para estimar os parâmetros. Iterações desses passos geralmente conduzem a uma solução para o problema de regressão não linear.

O método de Gauss-Newton inicia dando-se valores iniciais aos parâmetros $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p$, denotados por:

$$\beta_0^0, \beta_1^0, ..., \beta_p^0$$

Esses valores iniciais podem ser obtidos por meio de estudos anteriores conhecidos na literatura.

Com os valores iniciais dos parâmetros, aproxima-se a função esperada $h(x,\beta)$ até a potência desejada por termos lineares da expansão em série de Taylor de primeira ordem, em torno dos valores iniciais β^0 . Assim, a solução geral para o i-ésimo caso é dada por:

$$h(x;\beta) \cong h(x;\beta^0) + \sum_{j=1}^p \frac{\partial h(x;\beta^0)}{\partial \beta_j} (\beta_j - \beta_j^0)$$
(2.2)

Aqui β^0 é o vetor dos valores iniciais dos parâmetros. Observe que as derivadas, assim como a $f(x,\beta)$, são avaliadas em $\beta_i = \beta_i^0$, isto representa a diferença entre os verdadeiros parâmetros da regressão e as estimativas iniciais dos mesmos. Assim, os coeficientes de regressão representam uma correção que deve ser feita nos coeficientes de regressão iniciais. Em linguagem matricial tem se que $h(x;\beta^0) = \{h(x_i;\beta^0), i = 1,...,n\}$ é um vetor de ordem $(n \times 1), \gamma = \{(\beta_j - \beta_j^0), j = 1,...,p\}$ tem dimensão $(p \times 1)$ e as derivadas parciais $\frac{\partial h(x_i;\beta^0)}{\partial \beta_j}$, com i = 1,...,n e j = 1,...,p formam uma matriz W de ordem $(n \times p)$ cujos elementos são definidos por:

$$w_{i,j} = \frac{\partial h(x_i; \boldsymbol{\beta}^0)}{\partial \boldsymbol{\beta}_j^0} \quad \text{para } i = 1, \dots, n, \quad j = 1, \dots, p \tag{2.3}$$

Passando $h(x; \beta^0)$ para o lado esquerdo denotando por $\gamma_j = \beta_j - \beta_j^0$, tem-se a equação (2.2) reescrita como:

$$\mathbf{y} - \mathbf{h}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\beta}^0) = \boldsymbol{\gamma} \mathbf{W},\tag{2.4}$$

Pode-se portanto, estimar os parâmetros β^0 pelo método de mínimos quadrados ordinários, considerando as primeiras estimativas de $\gamma = (\gamma_1, \dots, \gamma_p)^T$ obtidas da equação (2.4),

$$\widehat{\gamma}_0 = (\mathbf{W}^T \mathbf{W})^{-1} \mathbf{W}^T (\mathbf{y} - \mathbf{h}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\beta}_0)).$$

Então temos uma primeira estimativa para os parâmetros $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_p)^T$, dada por:

$$\widehat{oldsymbol{eta}}_j^1 = \widehat{oldsymbol{eta}}_j^0 + \widehat{oldsymbol{\gamma}}_j^0, ext{ para } j=1,\ldots,p$$

Em que β_j^1 representa a estimativa corrigida de β_j no fim da primeira iteração.

Formalmente podemos afirmar que a o vetor das estimativas da *s*-ésima iteração, definindo por $\beta_s = (\beta_1^s, \dots, \beta_p^s)^T$ é dado por $\hat{\beta}_s = \hat{\beta}_{s-1} + \hat{\gamma}_{s-1}$, ou seja:

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{s} = \widehat{\boldsymbol{\beta}}_{s-1} + (\mathbf{W}_{s-1}^{T}\mathbf{W}_{s-1})^{-1}\mathbf{W}_{s-1}^{T}(\mathbf{y} - \mathbf{h}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\beta}_{s-1})).$$
(2.5)

Neste ponto, verifica-se que os coeficientes de regressão corrigidos representam uma melhoria na direção apropriada. Qualquer inferência sobre as estimativas dos parâmetros proveniente do algoritmo de Gauss-Newton é baseada na matriz de covariância assintótica da regressão, dada por $\sigma^2 (\mathbf{W}^T \mathbf{W})^{-1}$ assim tem-se que:

$$Var(\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{s}) = diag\{\widehat{\boldsymbol{\sigma}}^{2}(\mathbf{W}_{s}^{T}\mathbf{W}_{s})^{-1}\}$$
(2.6)

em que $\widehat{\sigma}^2$ é o resíduo médio quadrático dado por

$$\widehat{\sigma}^{2} = \frac{1}{n-p} \sum_{i=1}^{n} (h_{i} - h(x_{i};\widehat{\beta}))^{2}.$$
(2.7)

Denotaremos por $SS_{R,s}$ a soma dos quadrados dos resíduos na iteração *s*. Assim calcula-se os coeficientes de regressão iniciais $SS_{R,1}$ como segue

$$SS_{R,1} = \sum_{i=1}^{n} (y_i - h(x_i; \widehat{\beta}_1))^2.$$

Os coeficientes de regressão corrigidos são $\hat{\beta}_2$, no final da primeira iteração. Assim, calcula-se $SS_{R,2}$, como segue

$$SS_{R,2} = \sum_{i=1}^{n} (y_i - h(x_i; \hat{\beta}_2))^2.$$

Se o algoritmo de Gauss-Newton estiver na direção correta, $SS_{R,2}$ deverá ser menor do que $SS_{R,1}$. Neste caso, o processo repetirá, isto é, procede-se a nova iteração até que se verifique a convergência desejada. Vale ressaltar que a escolha das estimativas iniciais no método de Gauss-Newton é muito importante, pois uma má escolha pode resultar num número muito grande de iterações chegando muitas vezes a não convergir.

O método descrito é a base de muitos outros métodos. Alguns desses métodos introduzem modificações para obter uma convergência mais rápida; outros usam o desenvolvimento de Taylor de segunda ordem (método de Newton-Raphson), procurando assim uma melhor aproximação. Estes métodos necessitam que se calculem derivadas das funções. Alguns programas de computador requerem a introdução das expressões matemáticas das derivadas, outros utilizam sub-rotinas com aproximações numéricas das derivadas. É importante lembrar que no método iterativo, o valor inicial usado no processo deve ser selecionado o mais próximo possível do verdadeiro valor. Deste modo, não só a convergência é mais rápida como também é mais seguro que terminará no limite desejado.

2.2.1 Uso de Incrementos Fracionários

Um ponto fraco do procedimento de Gauss-Newton é o fato de que em alguns problemas práticos o incremento nos γ pode ser muito pequeno, o que provoca uma convergência muito lenta em alguns casos, já em outras situações mais graves, o algoritmo pode caminhar na direção errada podendo muitas vezes não convergir. Para contornar estas dificuldades, uma estratégia de incremento apresentada em (Myers 1990), é dada por:

Algoritmo Gauss-Newton com Incrementos Fracionários

1. Use $(\mathbf{W}_{s-1}^T \mathbf{W}_{s-1})^{-1} \mathbf{W}_{s-1}^T (\mathbf{y} - \mathbf{h}(\mathbf{x}; \hat{\beta}_{s-1})) = \hat{\gamma}_{s-1}$ para calcular o incremento padrão de Gauss-Newton para as iterações s = 1, 2, ...

- 2. Calcule $\widehat{\beta}_s = \widehat{\beta}_{s-1} + \widehat{\gamma}_{s-1}$, como o procedimento padrão sugere.
- 3. Se $SS_{R,s} < SS_{R,s-1}$ continue na próxima iteração usando $\hat{\beta}_s$.

4. Se $SS_{R,s} > SS_{R,s-1}$ vá para o passo 2; use $\alpha \hat{\gamma}_{s-1}$ para $0 < \alpha \le 1$ como vetor de incremento.

5. Faça $s \leftarrow s+1$ e repetir os passos (2)-(4).

2.3 Aspectos práticos

Considere os modelos com erro aditivo apresentados na tabela (2.1) com vetor de parâmetros $\beta = (a, c, k, m)^T$ e o conjunto de medidas de pesos e idades, $D = \{(p_1, t_1), \dots, (p_n, t_n)\}$. Seja $\mathbf{x} = (t_1, \dots, t_n)$ e $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)^T$ em que, $y_t = \log(p_t)$. Considerando os seguintes valores iniciais para a estimativa do vetor de parâmetros $\beta^0 = (a_0, c_0, k_0, m_0)^T$, aproximamos a função $h(x; \beta)$ para os quatro parâmetros por termos lineares da expansão em série de Taylor de primeira ordem, em torno dos valores iniciais β^0 . Logo expandindo as funções $h(t; \beta)$ da tabela (2.1) em série de Taylor, temos:

$$h(x;\beta) = h(x;\beta^{0}) + \frac{\partial h(x;\beta^{0})}{\partial a}(a-a_{0}) + \frac{\partial h(x;\beta^{0})}{\partial c}(c-c_{0})$$

$$+ \frac{\partial h(x;\beta^{0})}{\partial k}(k-k0) + \frac{\partial h(x;\beta^{0})}{\partial m}(m-m_{0}).$$
(2.8)

Aqui observa-se que as derivadas, assim como a função $h(x;\beta)$, são avaliadas no vetor dos valores iniciais dos parâmetros β^0 .

Para implementação do algoritmo de Gauss-Newton, vamos considerar os modelo dado na tabela (2.1), calculando os elementos $w_{i,j}$ da matriz W. A tabela (2.2) apresenta os elementos $w_{i,j}$ da matriz W de cada modelo dado em (2.8).

Autor	$\frac{\partial h(x;\boldsymbol{\beta})}{\partial a}$	$\frac{\partial h(x;\beta)}{\partial c}$	$\frac{\partial h(x;\boldsymbol{\beta})}{\partial k}$	$\frac{\partial h(x;\boldsymbol{\beta})}{\partial m}$
Brody	$\frac{1}{a}$	$-\frac{e^{-kt}}{1-ce^{-kt}}$	$\frac{cte^{-kt}}{1-ce^{-kt}}$	-
Chapman-Richards	$\frac{1}{a}$	$-\frac{me^{-kt}}{1-ce^{-kt}}$	$\frac{mcte^{-kt}}{1-ce^{-kt}}$	$\ln(1-ce^{-kt})$
Gompertz	$\frac{1}{a}$	e^{-kt}	$-cte^{-kt}$	-
Logístico	$\frac{1}{a}$	-	$\frac{mte^{-kt}}{1+e^{-kt}}$	$-\ln(1+e^{-kt})$
Von Bertalanffy	$\frac{1}{a}$	$-\frac{3e^{-kt}}{1-ce^{-kt}}$	$\frac{3cte^{-kt}}{1-ce^{-kt}}$	-

Tabela 2.2: Derivadas dos modelos linearizados utilizadas no algoritmo de Gauss-Newton.

A maior dificuldade de se empregar a abordagem utilizando estimadores de mínimos quadrados é considerar restrições nos parâmetros. Todos os modelos apresentados na Tabela 1.1 apresentam algum tipo de restrição nos parâmetros para que a relação pesoidade seja biologicamente coerente. Nestes casos, todos os parâmetros devem obrigatoriamente ser não negativos.

A solução numérica deste problema pode ser encontrada, mas exige condições iniciais adequadas, caso contrário implica em muitas dificuldades de convergência. Para contornar essa dificuldade, propomos uma abordagem bayesiana para o cálculo dessas estimativas.

Na abordagem bayesiana as informações a priori sobre os parâmetros podem compensar parcialmente a pouca informação extraída somente dos dados quando estes constituem uma pequena amostra. Para incorporar as restrições nos parâmetros dos modelos, vamos utilizar uma abordagem bayesiana onde as restrições serão impostas nas densidades a priori escolhidas para cada parâmetro.

2.4 Critério de seleção dos modelos

Os critérios para selecionar a melhor função de crescimento têm sido relatados em diversos trabalhos, (Santos et al 2007), (Guedes et al 2005), (Freitas 2007), (Sarmento et al 2006) e são dados pelo quadrado médio dos resíduos (QMR), que é calculado através da divisão da Soma de Quadrados do Resíduo (SQR), pelo número de observações. Quando os dados são transformados, como no caso de linearização por logaritmos, altera-se a estrutura do modelo matemático que expressa a média das observações, ou seja, para

comparação de modelos matemáticos, é necessário que as variáveis dependentes sejam de mesma dimensão, com idêntica estrutura de médias. Portanto, o QMR das equações logarítmicas deve ser calculado partindo da extração do antilogaritmo da variável dependente estimada e da observada, da seguinte forma (Sit 1994).

$$QMR = \sum_{t=1}^{n} \frac{(P(t) - \hat{P})^2}{(n-p)},$$

em que \hat{P} são os pesos estimados. Assim o erro padrão dos resíduos pode ser denotado por:

$$S_{P(t)} = \sqrt{QMR},\tag{2.9}$$

O erro padrão de estimativa $S_{P(t)}$, pode ser expresso em percentagem em relação à média das observações $\overline{P}(t)$ da variável dependente P(t), esta relação é chamada de coeficiente de variação do modelo (*CV*) e é dada por

$$CV = \frac{100S_{P(t)}}{\overline{P}(t)}.$$
(2.10)

O coeficiente de determinação (R^2) é calculado como o quadrado da correlação entre os pesos observados e estimados, que é equivalente a equação:

$$R^2 = 1 - \frac{SQR}{SQTc},\tag{2.11}$$

em que SQR é a soma de quadrados dos resíduos definida pelo $\sum_{t=1}^{n} (P(t) - \hat{P})^2$ e SQTc a Soma de Quadrados Total corrigida pela média dada por $\sum_{t=1}^{n} (P(t) - \overline{P}(t))^2$.

Para avaliar a qualidade do ajuste, utiliza-se o desvio médio absoluto percentual dos resíduos (DMAP), definido por

$$DMAP = \frac{100}{n} \sum_{t=1}^{n} \frac{(|P(t) - \hat{P}|)}{P(t)}.$$
(2.12)

Os critérios Akaike, AIC (Akaike 1974) e de Schwarz, SBC (ou BIC) (Schwarz 1978) são calculados pelas seguintes equações

$$AIC = -2\ln L + 2(p+1). \tag{2.13}$$

$$SBC = -2\ln L + (p+1)\ln(n).$$
 (2.14)

em que L é a função de verossimilhança das curvas de crescimento apresentadas, n o tamanho da amostra e p é o número de parâmetros livres;

Sob a hipótese de normalidade e independência dos resíduos, temos que os critérios de AIC e de SBC são definidos por

$$AIC = n[\ln(2\pi SS_{R,s}) + 1] + 2(p+1).$$
(2.15)

$$SBC = n \ln(\frac{SS_{R,s}}{n}) + \ln(n)(p+1).$$
 (2.16)

Assim, para verificação da normalidade dos dados, gráficos dos resíduos serão construídos.

3 Resultados da abordagem clássica

3.1 Aplicação

Para ilustrar a aplicabilidade dos métodos foram utilizados dados proveniente de um experimento de avaliação de sistema de cruzamento entre raças bovinas de corte, executado na Embrapa Pecuária Sudeste. Os dados correspondem a 12 mensurações de peso dos 8 aos 19 meses de idade do grupo genético das raças Nelore e Canchim pertencente ao grupo de genotípico AALLAB, ver (Paz 2002). O objetivo é comparar a eficiência dos diferentes modelos, os dados e os programas encontram-se no apêndice B e C respectivamente.

As figuras 3.1 - 3.12 mostram as curvas ajustadas e a convergência dos respectivos parâmetros para os diferentes modelos apresentados. Nota-se na figura 3.4 que o modelo de Richard não atingiu a convergência após 50000 iterações. Esse fato deve-se, principalmente a não convergência do parâmetro m e para contornar essa dificuldade foi adotada outra forma de estimação na qual o parâmetro m foi fixado no valor estimado pelo modelo logístico.



Figura 3.1: Curva ajustada pelo modelo de Brody.



Figura 3.2: Convergência dos parâmetros a, c e k para o modelo de Brody.

.



Figura 3.3: Curva ajustada pelo modelo de Richards.



Figura 3.4: Convergência dos parâmetros a, c , k e m para o modelo de Chapman-Richards



Figura 3.5: Curva ajustada pelo modelo de Richards (m=10).



Figura 3.6: Convergência dos parâmetros a, c e k para o modelo de Chapman-Richards (m=10).



Figura 3.7: Curva ajustada pelo modelo de Gompertz.



Figura 3.8: Convergência dos parâmetros a, c e k para o modelo de Gompertz.



Figura 3.9: Curva ajustada pelo modelo de Logístico.



Figura 3.10: Convergência dos parâmetros a, k e m para o modelo de Logístico.



Figura 3.11: Curva ajustada pelo modelo de Von Bertalanffy .



Figura 3.12: Convergência dos parâmetros a, c e k para o modelo de Von Bertalanffy.
A tabela 3.1 ilustra as estimativas dos parâmetros dos modelos. Assim, pode-se observar que todos os parâmetros foram significantes para os modelos de Brody, Chapman-Richards (m = 10), Gompertz e Von Bertalanffy. O peso assintótico ou peso adulto que representa a estimativa do peso à maturidade (parâmetro a) foi significativo para todos os modelos. O parâmetro k do modelo logístico, que representa a eficiência do crescimento animal não foi significativo. Este problema deve-se à limitação da teoria assintótica para inferência desse parâmetro o qual é sabidamente diferente de zero.

Tabela 3.1: Estimativa e erro padrão dos parâmetros dos modelos de curvas de crescimento .

Autor	Modelo	а	С	k	m
Brody	$a(1-ce^{-kt})$	384.4233 (16.6122)	3.7639 (1.7564)	0.2572 (0.0603)	-
Chapman-Richards	$a(1-ce^{-kt})^m$	372.4548 (19.381)	0.17802 (46.550)	0.3735 (0.31644)	66.6453 (1766.2)
Chapman-Richards (m=10)	$a(1-ce^{-kt})^m$	378.4950 12.5654	0.83653 0.3990	0.3253 0.0602	10.00
Gompertz	$ae^{ce^{(-kt)}}$	377.9730 (12.2317)	-9.1593 (4.3843)	0.3331 (0.0602)	-
Logístico	$a(1+e^{-kt})^{-m}$	377.4501 (11.9774)	- -	0.3408 (5.1485)	10.0352 (0.1699)
Von Bertalanffy	$a(1-ce^{-kt})^3$	379.8018 (13.4246)	2.2575 (1.0690)	0.3074 (0.0601)	-

3.2 Seleção do modelo na abordagem clássica

A figura 3.13 mostra o gráfico do peso real e dos estimados para as diferentes curvas de crescimento e, através dela, observa-se que apesar dos problemas de convergência para alguns parâmetros, os pesos estimados estão bem próximos, mostrando assim um bom ajuste.



Figura 3.13: Pesos estimados para os diferentes modelos.

A tabela 3.2, mostra os resultados das estatísticas 2.9- 2.12, 2.15 e 2.16 para as diferentes curvas de crescimento e a analise destas revela que o modelo logístico foi o que melhor se ajustou aos dados dentre todos os modelos.

Autor	$S_{P(T)}$	CV%	R^2	DMAP %	AIC	SBC
Brody	16.0618	5.0207	0.9378	3.7028	-8.6978	-71.6014
Chapman-Richards	16.5306	5.1672	0.9414	3.5893	-6.2158	-68.6345
Chapman-Richards (m=10)	15.0740	4.7119	0.9452	3.3845	-10.4242	-73.3278
Gompertz	14.9714	4.6799	0.9459	3.3495	-10.6144	-73.5180
Logístico	14.8696	4.6480	0.9467	3.3145	-10.8032	-73.7068
Von Bertalanffy	15.3214	4.7893	0.9434	3.4667	-9.9784	-72.8820

Tabela 3.2: Critério de seleção dos modelos de curvas de crescimento .

Com base nesse resultado, avaliou-se a qualidade do ajuste do modelo logístico com o gráfico dos resíduos e de normalidade apresentados nas figuras 3.14 e 3.15. Notando-se que a hipótese de normalidade é satisfatória para os resíduos desse modelo.



Figura 3.14: Gráfico dos resíduos do modelo logístico.



Figura 3.15: Gráfico de normalidade dos modelo logístico.

4 Abordagem bayesiana

4.1 Introdução

Realizar inferência sobre os parâmetros de um modelo é um dos principais objetivos da inferência estatística. Na abordagem bayesiana, a informação que se tem do parâmetro de interesse θ é de extrema importância na estatística, porém para inferência dos parâmetros desse modelo o verdadeiro valor de θ é desconhecido. Para diminuir este desconhecimento e contornar os diferentes graus de incerteza que θ pode assumir, admite-se que estes parâmetros são variáveis aleatórias e qualquer informação inicial sobre elas pode ser representada por modelos probabilísticos para θ . Assim, no contexto bayesiano, o parâmetro θ é uma quantidade significativa no qual existem diferentes graus de conhecimento que variam de problema para problema e de investigador para investigador como um problema único com contexto próprio e real. Nesse sentido, as quantidades observáveis e os parâmetros de um modelo estatístico são todos considerados quantidades aleatórias.

Os métodos bayesiano passam, de certa forma, por uma extensão do modelo clássico, extensão que tem raiz na seguinte divergência fundamental. No modelo clássico, o parâmetro θ , $\theta \in \Theta$ é um escalar ou vetor desconhecido, mas fixo, isto é, igual ao valor particular que indexa a distribuição da familia \mathfrak{F} que descreve o processo ou sistema físico que gera as observações. No modelo bayesiano o parâmetro θ , $\theta \in \Theta$, é tomado como um escalar ou vector aleatório (não observável). A filosofia bayesiana é, neste ponto, a seguinte: o que é desconhecido, no caso em questão o parâmetro θ , é incerto e toda a incerteza deve ser quantificada em termos de probabilidade.(Paulino et al 1999).

Para se realizar uma inferência bayesiana, é necessário portanto, além dos dados amostrais, modelar uma função densidade de probabilidade a priori, que combinada com a função de verossimilhança dos dados, por meio do teorema de Bayes, chega-se à função densidade de probabilidade a posteriori. O estabelecimento de uma informação a priori sobre o parâmetro é informado pela densidade de probabilidade, no qual expressa, de alguma forma, o conhecimento do pesquisador sobre os parâmetros a serem estimados. Assim as

distribuições a priori podem ser classificadas como priori informativa e não informativa. A principal diferença entre elas é que a priori informativa é caracterizada pela existência de algum conhecimento a respeito do parâmetro θ e é representada por uma forma funcional, cujo os parâmetros devem ser especificados de acordo com esse conhecimento. Contudo, em determinados estudos, os pesquisadores têm pouca ou nenhuma informação sobre θ para incorporar ao modelo. Neste caso, considera-se uma priori não informativa, como por exemplo, a priori de Jeffreys.

Além desta possibilidade de incorporação de informações, outras vantagens relacionadas com a Inferência bayesiana são caracterizadas pela ausência de pressuposições quanto aos modelos utilizados e pela facilidade da adoção da estimação por intervalo. Neste caso denominado de intervalo de credibilidade, o qual é obtido diretamente pelos quantis da distribuição a posteriori (Paulino et al 1999).

4.2 Protótipo bayesiano

Considere Ω um espaço amostral não vazio, A_1, A_2, \dots, A_n uma partição finita (ou infinita) de Ω e *B* qualquer evento associado a Ω , com P(B) > 0 verifica-se na união de conjuntos disjuntos a decomposição de *B* como $B = \bigcup_i (A_i \cap B)$.

Como a função de probabilidade é aditiva, para união de eventos disjuntos, aplica-se a definição de probabilidade condicionada, escrita da forma a seguir

$$P(B) = \bigcup_{i} P(A_i \cap B) = \sum_{i} P(B|A_i)P(A_i).$$

Note que

$$P(A_i \cap B) = P(B|A_i)P(A_i) = P(A_i|B)P(B),$$

Assim resolvendo para $P(A_i|B)$, tem-se que

$$P(A_i|B) = \frac{P(B|A_i)P(A_i)}{P(B)} = \frac{P(B|A_i)P(A_i)}{\sum_{i} P(B|A_i)P(A_i)}$$

No caso em que A_i e B ser eventos representados por variável aleatória contínua com funções densidades f(x) e f(y) respectivamente e com densidades condicionais f(x|y) e f(y|x). Assim o teorema de Bays pode ser escrito como:

$$f(y|x) = \frac{f(x|y)f(y)}{\int f(x|y)f(y)dy}$$
(4.1)

Este resultado é conhecido como Teorema de Bayes e é também denominado como fórmula das probabilidades das causas ou dos antecedentes. Este teorema é a base da formulação do modelo bayesiano.

Considere agora uma quantidade de interesse desconhecida θ , suponha que observase X = x gerada por alguma lei de probabilidade condicionada em θ , $f(x|\theta)$ e que $\pi(\theta)$ é a distribuição a priori do investigador, comparando-se a equação 4.1 tem-se que

$$\pi(\theta|x) = \frac{f(x|\theta)\pi(\theta)}{\int_{\Theta} f(x|\theta)\pi(\theta)d\theta}, \qquad \theta \in \Theta,$$
(4.2)

Note que $\int_{\theta} f(x|\theta)\pi(\theta)d\theta = f(x)$ não depende do parâmetro de interesse θ e f(x) faz o papel da constante normalizadora da densidade posteriori assegurando que a integral de $\pi(\theta|x)$ para $\theta \in \Theta$ é igual a 1. O denominador de (4.2), é integral múltipla sobre o domínio de definição dos parâmetros $\theta \in \Theta$, que representa uma função somente dos dados (*x*) observados. Quando θ é um vetor o cálculo dessas integrais nem sempre é fácil de resolver, o que requer muitas vezes a utilização de cálculos numéricos intensivos.

Para um valor fixo de θ , a função $L(x|\theta) = f(x|\theta)$ fornece a plausibilidade ou verossimilhança de cada um dos possíveis valores de θ enquanto $\pi(\theta)$ é denominada distribuição a priori de θ . Estas duas fontes de informação, priori e verossimilhança, são combinadas pelo Teorema de Bayes levando a distribuição a posteriori de θ , para $\pi(\theta|x)$.

É comum adotar a notação de proporcionalidade para representar a densidade a posteriori, (Box et al 1992).

A forma usual do teorema de Bayes a menos de uma constante normalizadora pode ser escrita como

$$\pi(\theta|x) \propto L(x|\theta)\pi(\theta).$$

Considere uma amostra casual e independente, $X = (X_1, X_2, \dots, X_n)$, a verossimilhança é escrita como $L(x|\theta) = \prod_{i=1}^{n} f(x_i|\theta)$. Assim tem-se por meio da expressão (4.2) a distribuição posteriori de θ , $\pi(\theta|X)$, como segue

$$\pi(\theta|_{\sim}^X) \propto \prod_{i=1}^n f(x_i|\theta)\pi(\theta), \qquad \theta \in \Theta,$$
(4.3)

A log-verossimilhança é

$$l(\underset{\sim}{X}|\boldsymbol{\theta}) = \sum_{i=1}^{n} \log f(x_i|\boldsymbol{\theta})$$

4.3 Distribuição a priori não informativa

A escolha de distribuições a priori é um importante tópico da Inferência bayesiana que tem sido utilizada em diversas áreas. Através dela, a opinião a priori de um especialista pode ser incorporada na forma de uma distribuição de probabilidade, pois permite construir uma distribuição que represente uma forma lógica entre uma proposição ou conjunto de proposições de conhecimentos probabilísticos que se tem sobre θ , antes das realizações dos experimentos.

Nesse sentido, se faz necessário adotar uma forma de análise, que de alguma forma consiga captar esta noção de uma priori quando não se consegue fazer uma elicitação detalhada do verdadeiro conhecimento dela, e que possua um efeito mínimo referente aos dados.

Na literatura, existem inúmeros métodos de se escolher uma distribuição a priori, porém há situações que não existem informações a priori palpável ou de qualquer natureza substancial, neste caso as distribuições a priori não informativas são mais indicadas.

Esse tipo de distribuição desempenha ainda um papel de referência, pois além de deduzir a crença a posteriori para quem parte de um conhecimento escasso, permite comparar os resultados com a inferência clássica que só usa as informações amostrais, além de averiguar as influências da distribuição a priori subjetiva, quando confrontada com as que resultam do uso da distribuição a priori de referência, ver (Paulino et al 1999).

Existem diversos formas para se obter a distribuição a priori não informativa, porém aqui focaremos apenas o método de Jeffreys abordado a seguir.

4.3.1 Método de Jeffreys

Em muitos problemas onde o logaritmo da verossimilhança é aproximadamente quadrática, a segunda derivada é negativa então, neste caso define-se a curvatura em um ponto $\theta \in \Theta$ como $I(\hat{\theta})$, dada por:

$$I(\hat{\theta}) = -\frac{\partial^2 l(X|\hat{\theta})}{\partial \theta^2}.$$
(4.4)

Uma grande curvatura é associada em um forte pico na função, intuitivamente indicando menos incerteza sobre θ . $I(\theta) = -E\left\{\frac{\partial^2 l(X|\theta)}{\partial \theta^2}\right\}$ é chamada informação de Fisher. Considerando $l(x|\theta) = \sum_{i=1}^n \ln f(x_i|\theta)$ temos

$$I(\theta) = -E\left\{\sum_{i=1}^{n} \frac{\partial^2 \ln f(x_i|\theta)}{\partial \theta_i^2}\right\}.$$
(4.5)

A densidade a priori de jeffreys é definida por uma densidade proporcional à informação de Fisher, ou seja:

$$\pi(\theta) \propto |I(\theta)|^{\frac{1}{2}}$$

Mostra-se que a densidade a priori de Jeffreys é invariante sob a transformação dos parâmetros, isto é, $\pi(\psi)$ é computado para determinar $\pi(\theta)$, pelo modelo transformado $f(x, \psi) = \pi_0(\psi) f(x|\psi)$ (Gelman et al 2004). Assim fazendo $\theta = g^{-1}(\psi)$,

$$I(\psi) = -E\left\{\frac{\partial^2 \ln f(x|\psi)}{\partial \psi^2}\right\}$$
$$= -E\left\{\frac{\partial^2 \ln f(x|\theta = g^{-1}(\psi))}{\partial \theta^2}\right\}$$
$$= I(\theta) \left|\frac{\partial \theta}{\partial \psi}\right|^2.$$
(4.6)

Dessa forma, $I(\psi)^{\frac{1}{2}} = I(\theta)^{\frac{1}{2}} \left| \frac{\partial \theta}{\partial \psi} \right|$, o que mostra que a distribuição proposta por jeffreys goza da referida invariância, ou seja

$$\pi(\theta) \propto \left| I(\theta) \right|^{\frac{1}{2}}.$$

O mesmo argumento em torno da matriz de informação de Fisher $I(\theta)$ é dado para o caso multiparamétrico. Assim

$$I_{ij}(\theta) = -E\left\{\frac{\partial \ln f(x|\theta)}{\partial \theta_i} \frac{\partial \ln f(x|\theta)}{\partial \theta_j}\right\}.$$
(4.7)

neste caso, a correspondente priori não informativa é

$$\pi(\theta) \propto \left| I(\theta) \right|^{\frac{1}{2}}.$$
 (4.8)

Em que $|I(\theta)|$ denota o determinante da matriz de informação de Fisher, dada por

$$|I(\boldsymbol{\theta})| = - \begin{vmatrix} E\left(\frac{\partial^2 \ln f(x|\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_1 \partial \theta_1}\right) & E\left(\frac{\partial^2 \ln f(x|\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_1 \partial \theta_2}\right) & \dots & E\left(\frac{\partial^2 \ln f(x|\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_1 \partial \theta_n}\right) \\ E\left(\frac{\partial^2 \ln f(x|\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_2 \partial \theta_1}\right) & E\left(\frac{\partial^2 \ln f(x|\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_2 \partial \theta_2}\right) & \dots & E\left(\frac{\partial^2 \ln f(x|\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_2 \partial \theta_n}\right) \\ \vdots & \dots & \vdots \\ E\left(\frac{\partial^2 \ln f(x|\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_3 \partial \theta_1}\right) & E\left(\frac{\partial^2 \ln f(x|\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_3 \partial \theta_2}\right) & \dots & E\left(\frac{\partial^2 \ln f(x|\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_3 \partial \theta_n}\right) \end{vmatrix}$$

4.3.2 Aspectos práticos usando o método de Jeffreys

Considere os modelos com erro aditivo apresentados na tabela (2.1) com vetor de parâmetros $\theta = (a, c, k, m)^T$ e o conjunto de medidas de pesos e idades, $D = \{(p_1, t_1), \dots, (p_n, t_n)\}$, pode-se reescrever a equação (2.1) como

$$\ln P(t) = h(t, \theta) + e_t$$

Considerando que os erros são independentes e identicamente distribuídos $e_t \sim N(0, \sigma^2)$, a forma geral da matriz de informação de Fisher $I(\theta)$, para os modelos dados na tabela (2.1) pode ser calculada considerando.

$$-E\left\{\frac{\partial^2 l(x|\theta)}{\partial \theta_i \partial \theta_j}\right\} = -\frac{1}{\sigma^2} \sum_{t=1}^n \frac{\partial h(t,\theta)}{\partial \theta_i} \frac{\partial h(t,\theta)}{\partial \theta_j}$$
(4.9)

Detalhes da demonstração ver apêndice.

Assim, a matriz de informação pode ser escrita como:

$$\mathbf{I}(\boldsymbol{\theta}) = -\frac{1}{\sigma^2} \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} (\frac{\partial h(t,\theta)}{\partial a} \frac{\partial h(t,\theta)}{\partial a}) & \sum_{i=1}^{n} (\frac{\partial h(t,\theta)}{\partial a} \frac{\partial h(t,\theta)}{\partial c}) & \sum_{i=1}^{n} (\frac{\partial h(t,\theta)}{\partial a} \frac{\partial h(t,\theta)}{\partial c}) & \sum_{i=1}^{n} (\frac{\partial h(t,\theta)}{\partial a} \frac{\partial h(t,\theta)}{\partial c}) & \sum_{i=1}^{n} (\frac{\partial h(t,\theta)}{\partial c} \frac{\partial h(t,\theta)}{\partial c}) & \sum_{i=1}^{n} (\frac{\partial h$$

logo, pode-se obter a priori não informativa de Jeffreys por meio de (4.8).

Para implementação das prioris não informativas de Jeffreys, vamos considerar os modelos dado na tabela (2.1), assumindo independência de e θ , σ e dos parâmetros dos modelos, têm-se os cálculos dos elementos da matriz $I(\theta)$ para os diferentes modelos.

• Modelo Brody

$$\mathbf{I}(\boldsymbol{\theta}) = \begin{pmatrix} -\frac{n}{\sigma^2 a^2} & \frac{\sum_{i=1}^n \phi_{t_i}(c,k)}{\sigma^2 a} & -\frac{c\sum_{i=1}^n t_i \phi_{t_i}(c,k)}{\sigma^2 a} \\ \frac{\sum_{i=1}^n \phi_{t_i}(c,k)}{\sigma^2 a} & -\frac{\sum_{i=1}^n \phi_{t_i}^2(c,k)}{\sigma^2} & \frac{c\sum_{i=1}^n t_i \phi_{t_i}^2(c,k)}{\sigma^2} \\ -\frac{c\sum_{i=1}^n t_i \phi_{t_i}^2(c,k)}{\sigma^2 a} & \frac{c\sum_{i=1}^n t_i \phi_{t_i}^2(c,k)}{\sigma^2} & -\frac{c^2\sum_{i=1}^n t_i^2 \phi_{t_i}^2(c,k)}{\sigma^2} \end{pmatrix}$$

Em que,

$$\phi_{t_i}(c,k) = \frac{e^{-kt_i}}{(1-ce^{-kt_i})},$$

$$|I(\theta)| \propto \left| \left(-\frac{n}{\sigma^2 a^2} \right) \left(-\frac{\sum_{i=1}^n \phi_{t_i}^2(c,k)}{\sigma^2} \right) \left(-\frac{c^2 \sum_{i=1}^n t_i^2 \phi_{t_i}^2(c,k)}{\sigma^2} \right) \right|^{\frac{1}{2}} dt = \pi(\theta) \propto \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^n \phi_{t_i}^2(c,k) \sum_{i=1}^n t_i^2 \phi_{t_i}^2(c,k)}}{a}.$$



Modelo Chapman-Richards

	•
$\sqrt{\sum_{i=1}^{n} \phi_{t_i}^2(c,k) \sum_{i=1}^{n} t_i^2 \phi_{t_i}^2(c,k) \sum_{i=1}^{n} (\ln(1-ce^{-kt_i}))^2}$	(a/cm^2)
ξ	5
_	_
P	>
ļ	2
, c	•

Modelo Gompertz

$$\mathbf{I}(\boldsymbol{\theta}) = \begin{pmatrix} -\frac{n}{\sigma^2 a^2} & -\frac{\sum_{i=1}^n \varphi_{l_i}(c,k)}{\sigma^2 a} & \frac{c\sum_{i=1}^n \varphi_{l_i}(c,k)t_i}{\sigma^2 a} \\ -\frac{\sum_{i=1}^n \varphi_{l_i}(c,k)}{\sigma^2 a} & -\frac{\sum_{i=1}^n \varphi_{l_i}^2(c,k)}{\sigma^2} & \frac{c\sum_{i=1}^n \varphi_{l_i}^2(c,k)t_i}{\sigma^2} \\ \frac{c\sum_{i=1}^n \varphi_{t_i}(c,k)t_i}{\sigma^2 a} & \frac{c\sum_{i=1}^n \varphi_{l_i}^2(c,k)t_i}{\sigma^2} & -\frac{c^2\sum_{i=1}^n \varphi_{l_i}^2(c,k)t_i^2}{\sigma^2} \end{pmatrix}$$

Em que,

 $\varphi_{t_i}(c,k)=e^{-kt_i},$

$$\begin{split} |I(\theta)| &\propto \left| \left(-\frac{n}{\sigma^2 a^2} \right) \left(-\frac{\sum_{i=1}^n \varphi_{l_i}^2(c,k)}{\sigma^2} \right) \left(-\frac{c^2 \sum_{i=1}^n \varphi_{l_i}^2(c,k) t_i^2}{\sigma^2} \right) \right|^{\frac{1}{2}}.\\ \pi(\theta) &\propto |c| \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^n \varphi_{l_i}^2(c,k) \sum_{i=1}^n t_i^2 \varphi_{l_i}^2(c,k)}}{(a)}. \end{split}$$

Modelo Logístico

$$\mathbf{I}(\boldsymbol{\theta}) = \begin{pmatrix} -\frac{n}{\sigma^2 a^2} & -\frac{m\sum_{i=1}^{n} \omega_{t_i}(c,k)t_i}{\sigma^2 a} & \frac{\sum_{i=1}^{n} \ln(1+e^{-kt})}{\sigma^2 a} \\ -\frac{m\sum_{i=1}^{n} \omega_{t_i}(c,k)t_i}{\sigma^2 a} & -\frac{m^2\sum_{i=1}^{n} \omega_{t_i}^2(c,k)t_i^2}{\sigma^2} & \frac{m\sum_{i=1}^{n} \omega_{t_i}(c,k)t_i \ln(1+e^{-kt})}{\sigma^2} \\ \frac{\sum_{i=1}^{n} \ln(1+e^{-kt})}{\sigma^2 a} & \frac{m\sum_{i=1}^{n} \omega_{t_i}(c,k)t_i \ln(1+e^{-kt})}{\sigma^2} & -\frac{\sum_{i=1}^{n} [\ln(1+e^{-kt})]^2}{\sigma^2} \end{pmatrix}$$

Em que,

$$\omega_{t_i}(c,k) = \frac{e^{-kt}}{(1+e^{-kt_i})},$$

$$\begin{split} |I(\theta)| &\propto \left| \left(-\frac{n}{\sigma^2 a^2} \right) \left(-\frac{m^2 \sum_{i=1}^n \omega_{t_i}(c,k) t_i^2}{\sigma^2} \right) \left(-\frac{\sum_{i=1}^n [\ln(1+e^{-kt_i})]^2}{\sigma^2} \right) \right|^{\frac{1}{2}} \\ &\pi(\theta) \propto \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^n t_i^2 \omega_{t_i}(c,k) \sum_{i=1}^n [\ln(1+e^{-kt_i})]^2}}{(a/m)} . \end{split}$$

Modelo Von Bertalanffy

$$\begin{split} \mathbf{I}(\theta) &= \begin{pmatrix} -\frac{n}{\sigma^2 a^2} & \frac{3\sum_{i=1}^n \phi_{l_i}(c,k)}{\sigma^2 a} & -\frac{3c\sum_{i=1}^n \phi_{l_i}(c,k)t_i}{\sigma^2 a} \\ \frac{3\sum_{i=1}^n \phi_{l_i}(c,k)}{\sigma^2 a} & -\frac{9\sum_{i=1}^n \phi_{l_i}^2(c,k)}{\sigma^2} & \frac{9c\sum_{i=1}^n \phi_{l_i}^2(c,k)t_i}{\sigma^2} \\ -\frac{3c\sum_{i=1}^n \phi_{l_i}(c,k)t_i}{\sigma^2 a} & \frac{9c\sum_{i=1}^n \phi_{l_i}^2(c,k)t_i}{\sigma^2} & -\frac{9c^2\sum_{i=1}^n \phi_{l_i}^2(c,k)t_i}{\sigma^2} \end{pmatrix} \\ |I(\theta)| &\propto \left| \left(-\frac{n}{\sigma^2 a^2} \right) \left(-\frac{9\sum_{i=1}^n \phi_{l_i}^2(c,k)}{\sigma^2} \right) \left(-\frac{9c^2\sum_{i=1}^n \phi_{l_i}^2(c,k)t_i}{\sigma^2} \right) \right|^{\frac{1}{2}}. \\ \pi(\theta) &\propto \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^n \phi_{l_i}^2(c,k)\sum_{i=1}^n t_i \phi_{l_i}^2(c,k)}}{(a/c)}. \end{split}$$

4.4 Densidade a posteriori

A função de densidade a posteriori para os modelos descrito na tabela (1.1) é construída da seguinte forma:

Considere $y_i = h(t_i; \theta) + \varepsilon_i$ para i = 1, 2, ..., n e

$$f(y_i|\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\tau}) = \frac{\boldsymbol{\tau}^{1/2}}{\sqrt{2\pi}} \exp\{-\frac{\boldsymbol{\tau}}{2}(y_i - h(t_i; \boldsymbol{\theta}))^2\},\$$

com ε_i iid $N(0, \tau^{-1})$, em que $\tau = \frac{1}{\sigma^2}$, $\sigma > 0$ e $\theta \in \mathbb{R}^p$

Seja $X = (t_1, \ldots, t_n)^T$, $Y^T = (y_1, \ldots, y_n)$ e $\theta = (\theta_1, \ldots, \theta_p)^T$. A função de verossimilhança de $f(y_i | \theta, \tau)$ é dada por:

$$L(\underset{\sim}{\theta},\tau|\underset{\sim}{Y},\underset{\sim}{X}) \propto \prod_{i=1}^{n} \tau^{1/2} \exp\left\{-\frac{\tau}{2}(y_{i}-h(t_{i};\theta))^{2}\right\}$$
$$L(\underset{\sim}{\theta},\tau|\underset{\sim}{Y},\underset{\sim}{X}) \propto \tau^{n/2} \exp\left\{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=1}^{n}(y_{i}-h(t_{i};\theta))^{2}\right\}$$

Com,

$$\sum_{i=1}^{n} [y_i - h(t_i; \boldsymbol{\theta})]^2 = [(\underbrace{Y}_{\sim} - \underbrace{h}_{\sim}(\underbrace{X}_{\sim}; \boldsymbol{\theta})]^T [(\underbrace{Y}_{\sim} - \underbrace{h}_{\sim}(\underbrace{X}_{\sim}; \boldsymbol{\theta})]$$

 $h(\underset{\sim}{X}; \underset{\sim}{\theta}) = (h(t_1, \underset{\sim}{\theta}), \dots, h(t_n, \underset{\sim}{\theta})).$

Assim,

$$\begin{split} L(\underset{\sim}{\theta},\tau|\underset{\sim}{Y},\underset{\sim}{X}) &\propto \tau^{n/2} \exp\bigg\{-\frac{\tau}{2}(\underset{\sim}{Y}-\underset{\sim}{h}(\underset{\sim}{X};\underset{\sim}{\theta}))^T(\underset{\sim}{Y}-\underset{\sim}{h}(\underset{\sim}{X};\underset{\sim}{\theta}))\bigg\}.\\ L(\underset{\sim}{\theta},\tau|\underset{\sim}{Y},\underset{\sim}{X}) &\propto \tau^{n/2} \exp\bigg\{-\frac{\tau}{2}(\underset{\sim}{Y}^T\underset{\sim}{Y}-2\underset{\sim}{Y}^Th(\underset{\sim}{X};\underset{\sim}{\theta})+h(\underset{\sim}{X};\underset{\sim}{\theta})^Th(\underset{\sim}{X};\underset{\sim}{\theta}))\bigg\}. \end{split}$$

Denota-se por

$$\psi(\boldsymbol{\theta}) = -2Y^T h(X; \boldsymbol{\theta}) + h^T(X; \boldsymbol{\theta}) h(X; \boldsymbol{\theta})$$

tem-se que,

$$L(\underset{\sim}{\theta},\tau|\underset{\sim}{Y},\underset{\sim}{X}) \propto \tau^{n/2} \exp\left\{-\frac{\tau}{2}(\underset{\sim}{Y}^{T}\underset{\sim}{Y}+\psi(\underset{\sim}{\theta}))\right\}.$$
(4.10)

Considerando as densidades a priori definida como,

$$\pi_0(\mathop{mathemal{ heta}}_{\sim}, au)=\pi_0(\mathop{mathemal{ heta}}_{\sim}| au)\pi_0(au),$$

e assumindo independência entre $\mathop{ extsf{\theta}}_{\sim}$ e τ a priori não informativa de Jeffreys para au é dada por

$$\pi(\tau) \propto \frac{1}{\tau},$$

com densidade a posteriori escrita como

$$\pi(\underset{\sim}{\theta},\tau|\underset{\sim}{Y},\underset{\sim}{X}) \propto L(\underset{\sim}{\theta},\tau|\underset{\sim}{Y},\underset{\sim}{X})\pi_0(\underset{\sim}{\theta}|\tau)\pi_0(\tau).$$

$$\pi(\underset{\sim}{\theta},\tau|\underset{\sim}{Y},\underset{\sim}{X}) \propto \tau^{(n/2)-1} \exp\left\{-\frac{\tau}{2}(\underset{\sim}{Y}^{T}\underset{\sim}{Y}+\psi(\underset{\sim}{\theta}))\right\}\pi(\underset{\sim}{\theta}|\tau)$$

Para calcular os estimadores bayesianos dos parâmetros dos modelos, utiliza-se o algoritmo de simulação de Monte Carlo Cadeia de Markov (MCMC), mas especificamente o algoritmo da Metropolis-Hastings (Chib et al 1995). A construção do algoritmo da Metropolis-Hastings é baseada nas densidades condicionais a posteriori, assim como

$$\pi(\underset{\sim}{\theta}|\tau, \underset{\sim}{Y}, \underset{\sim}{X}) \propto \exp\left\{-\frac{\tau}{2}\psi(\underset{\sim}{\theta})\right\}\pi_{0}(\underset{\sim}{\theta}|\tau)$$

$$\pi(\tau|\underset{\sim}{\theta}, \underset{\sim}{Y}, \underset{\sim}{X}) \propto G(a, b(\underset{\sim}{\theta})), \qquad (4.11)$$

em que $G(a,b(\theta))$ denota uma densidade gamma com parâmetros $a=rac{n}{2}$ e $b(\theta)$ dado por

$$b(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{2} (\underbrace{\boldsymbol{Y}^T \boldsymbol{Y}}_{\sim} \boldsymbol{Y} + \boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{\theta}))$$

4.5 Método de Laplace

O método de sumarização da distribuição de densidade a posteriori multivariada $\pi(\theta|y)$ é baseado no comportamento modal, ver (Jim 2007). Seja $\pi(\theta)$ a distribuição a priori e $f(y|\theta)$ a densidade para uma observação y denota-se por $h(\theta, y)$ o logaritmo da função densidade conjunta a posteriori, dado por

$$h(\theta, y) = \log\{\pi(\theta)f(y|\theta)\}.$$

Denotando a moda a posteriori de θ por $\hat{\theta}$ e expandindo o logaritmo da densidade em série de Taylor de segunda ordem em torno de $\hat{\theta}$ têm-se que,

$$h(\theta) = h(\hat{\theta}) + h'(\hat{\theta})(\theta - \hat{\theta}) + (\theta - \hat{\theta})^T \frac{1}{2} h''(\hat{\theta})(\theta - \hat{\theta}).$$
(4.12)

Se $\hat{\theta}$ é o ponto de máximo de $h(\theta)$, $h'(\hat{\theta}) = 0$, portanto

$$h(\boldsymbol{\theta}) = h(\hat{\boldsymbol{\theta}}) + \frac{1}{2} (\boldsymbol{\theta} - \hat{\boldsymbol{\theta}})^T h''(\hat{\boldsymbol{\theta}}) (\boldsymbol{\theta} - \hat{\boldsymbol{\theta}}).$$
(4.13)

Usando a aproximação normal para $h(\theta)$, tem-se a matriz de covariância que é denotada por

$$V = [-h''(\hat{\theta})]^{-1},$$

Em que $h''(\theta)$ é a matriz Hessiana de $h(\theta)$.

Para estimar $\hat{\theta}$, pode ser usado o fato de que $h'(\hat{\theta}) = 0$, portanto para um θ^* próximo de $\hat{\theta}$, pode-se escrever

$$h'(\hat{\theta}) = h'(\theta^*) + h''(\theta^*)(\hat{\theta} - \theta^*).$$
(4.14)

$$(\hat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta}^*) = -[h''(\boldsymbol{\theta}^*)]^{-1}h'(\boldsymbol{\theta}^*).$$

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = \boldsymbol{\theta}^* - [h''(\boldsymbol{\theta}^*)]^{-1}h'(\boldsymbol{\theta}^*).$$

Fazendo $\hat{\theta} = \theta^k$ e $\theta^* = \theta^{k-1}$ um algoritmo para achar $\hat{\theta}$ é

$$\theta^{k} = \theta^{k-1} - [h''(\theta^{k-1})]^{-1} h'(\theta^{k-1}).$$
(4.15)

Assim usa-se aproximação de Laplace para encontrar os hiperparâmetro dados por $\mu_0 = \hat{\theta}$ e $\Sigma_0 = V$.

4.6 implementação do algoritimo da Metropolis-Hastings

- Algoritmo da Metropolis-Hastings é construído da seguinte forma:
 - 1. Atribua condições iniciais arbitrárias para $heta^{(0)}$ e $au^{(0)}$
 - 2. Gere θ^* de um núcleo normal $N(\mu_0, \Sigma_0)$ com $\mu_0 \in \mathbb{R}^p$ e $\Sigma_0 = diag(\sigma_{01}^2, \dots, \sigma_{0p}^2), \mu_0$
 - e Σ_0 são hiperparâmetros assumidos conhecidos.
 - 3. Aceite ou rejeite θ^* , seguindo as regras abaixo.

i. Calcula-se a probabilidade de aceitação,

$$\alpha = min\{1, p\}$$

com

$$p = \exp\left\{-\frac{\tau}{2}[\psi(\theta^*) - \psi(\theta^{(j-1)})]\frac{\pi_0(\theta^*|\tau)}{\pi_0(\theta^{(j-1)}|\tau)}\right\}$$

ii.Gere u de uma distribuição uniforme U(0,1) e use a seguinte regra:

se $u \leq \alpha$, $\theta^{(j)} = \theta^*$ (aceita-se o candidato) caso contrário, $\theta^j = \theta^{(j-1)}$ Fim 4. Gera-se $\tau^{(j)}$ para τ ,

$$au^{(j)} \sim G(a, b(\theta^j))$$

5. Faz $j \leftarrow j + 1$ e volta para o passo 2.

Uma amostra de tamanho 150.000 foi gerada. A convergência do algoritmo será monitorada pelo critério de Geweke, (Geweke 1992) onde após a convergência, 50% das amostras são descartadas. Esse procedimento é conhecido como período de aquecimento. Para eliminar a correlação entre os valores gerados, uma reamostragem é feita selecionando entre os parâmetros gerados um a cada 15 valores.

Um sumário das densidades a posteriori será feito considerando estimadores de Monte Carlo para média, moda e mediana de cada parâmetro, assim como um histograma é construído para que o núcleo de posteriori seja visualizado. Os gráficos de convergência dos parâmetros também são visualizados.

4.7 Cálculo da densidade preditiva dos pesos

Considerando as equações dos pesos em função da idade logaritmizadas.

$$y_t = h(t; \theta) + e_t,$$

no qual

$$P(t) = exp(y_t),$$

Considerando a densidade a posteriori dos parâmetros $\pi(\theta|x)$ em que $x = \{(p_1,t_1), (p_2,t_2), \dots, (p_n,t_n)\}$ temos que

$$\pi(y_t, \theta | x) = \pi(y_t, \theta | x) \pi(\theta | x).$$

Logo a densidade preditiva para y_t é dada por

$$\pi(y_t|x) = \int_{\theta \in \Theta} \pi(y_t, \theta|x) \pi(\theta|x) d\theta.$$
(4.16)

Assim pode-se calcular o valor esperado de $g(y_t)$ para uma função bem definida $g(\cdot)$, por

$$\widehat{g}(y_t) = E\{g(y_t)|x\} = \int_{-\infty}^{+\infty} g(y_t)\pi(y_t|x)dy_t,$$
$$\widehat{g}(y_t) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(y_t)\int_{\theta\in\Theta} \pi(y_t|x)\pi(\theta|x)d\theta dy_t,$$
$$\widehat{g}(y_t) = \int_{\theta\in\Theta} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} g(y_t)\pi(y_t|\theta,x)dy_t\right]\pi(\theta|x)d\theta,$$
$$\widehat{g}(y_t) = \int_{\theta\in\Theta} E(g(y_t)|\theta)\pi(\theta|x)d\theta.$$

Quando $g(\cdot)$ é a função identidade então $g(y_t) = y_t$ e $E(y_t|\theta) = h(t,\theta)$ quando $g(y_t) = \exp(y_t)$ tem-se que $E\{\exp(y_t)|\theta\} = \exp\{h(t,\theta) + 0.5\sigma^2\}$ e $\pi(\theta|x)$ é a densidade a posteriori dos parâmetros.

Seja $P_t = \exp(y_t)$, deste modo tem-se que

$$\hat{p}_t = \int_{\theta \in \Theta} E\{\exp(y_t) | \theta\} \pi(\theta | x) d\theta.$$
(4.17)

Considerando a amostra dos parâmetros gerada pelo algoritmo MCMC $\theta^{(j)}$, j = 1, ..., M, tem-se que

$$\hat{p}_t \approx \frac{1}{M} \sum_{j=1}^{M} exp\{h(t, \theta^{(j)})\}.$$
(4.18)

Assim pode-se calcular uma amostra MCMC para $y_t \in P(t)$ considerando:

$$y_t^{(j)} = h(t, \boldsymbol{\theta}^{(j)}),$$

$$P_t^{(j)} = \exp\{h(t, \theta^{(j)})\}$$

portanto os estimadores MCMC para o percentil α de P(t) podem ser calculados usando as amostras de $P_t^{(j)}$.

4.8 Critério de seleção dos modelos

Vários critérios para escolha do modelo de crescimento que melhor se ajusta a um conjunto de dados podem ser adotados no contexto bayesiano, ver por exemplo (Raftery et al. 1995). Dentre os seguintes critérios serão utilizados:

4.8.1 Critério de Informação bayesiana (BIC)

O BIC, (*Bayesian Information Criterion*) é um critério de seleção de modelo proposto por (Schwarz 1978) e modificado por (Carlin e Louis 2000) para ser aplicado considerando a densidade a posteriori dos parâmetros do modelo ajustado. Este critério pondera entre a função log-verossimilhança maximizada e o número de parâmetros do modelo. O melhor modelo é aquele que apresenta o maior valor do *BIC* dado por

$$BIC = E\{\ln L(\theta)\} - \frac{(p+1)}{2}\ln(N)$$
(4.19)

em que $E\{\ln L(\theta)\}$ é o valor esperado, tomado com relação a densidade a posteriori, da função o log-verossimilhança, p é a dimensão do vetor de parâmetros e N é o tamanho amostral. O Critério de Akaike, AIC também pode ser modificado para utilizar considerandose a densidade a Posteriori, por

$$AIC = E\{\ln L(\theta)\} - (p+1)$$
(4.20)

4.8.2 Critério Desvio-Informação (DIC)

O *DIC* (*Deviance Information Criterion*) é uma generalização do *BIC*. Este critério é particularmente usual nos problemas bayesianos de seleção de modelos para os quais amostras da distribuição a posteriori dos parâmetros dos modelos foram obtidas por simulação de Monte Carlo em Cadeia de Markov (MCMC). Semelhante ao *BIC* este critério é uma aproximação assintótica para amostras grandes, isto é válido quando a distribuição a posteriori é aproximadamente uma distribuição normal multivariada.

Define-se o desvio como:

$$D(\theta) = -2\log L(\theta) + C$$

em que θ é o vetor de parâmetros desconhecidos do modelo; $L(\theta)$ a função de verossimilhança e C é uma constante que se cancela e portanto não precisa ser conhecida na comparação de dois modelos. O critério *DIC* introduzido por (Spiegelhalter et al. 2002), é dado por:

$$DIC = D(\hat{\theta}) + 2p_D \tag{4.21}$$

sendo $D(\hat{\theta})$ o desvio avaliado na média a posteriori e p_D é o número efetivo de parâmetros no modelo, que é dado por $p_D = \overline{D} - D(\hat{\theta})$, em que $\overline{D} = E\{D(\theta)\}$ é o desvio médio a posteriori que mede a qualidade do ajuste do modelo aos dados. Valores menores para *DIC* indicam melhores modelos, inclusive esses valores podem ser negativos.

4.8.3 Critério da Densidade Preditiva Ordenada (CPO)

Um critério bastante aceito para seleção de modelo é o critério da densidade preditiva ordenada (CPO)(Gelfand 1994). Para aplicar este critério considera-se a densidade preditiva para uma observação $y_i = \log(P_i)$ na idade t_i dado as informações $\underbrace{Y}_{(i)} = (y_1, \dots, y_{i-1}, y_{i+1}, \dots, y_n)$ e $\underbrace{X}_{(i)} = (t_1, \dots, t_{i-1}, t_{i+1}, \dots, t_n)$. A densidade preditiva para y_i dado $\underbrace{Y}_{(i)}$ e $\underbrace{X}_{(i)}$ é

$$c_{i} = f(y_{i} | \underbrace{Y}_{(i)}, \underbrace{X}_{(i)}) = \int f(y_{i} | \underbrace{Y}_{(i)}, \underbrace{X}_{(i)} \underbrace{\theta}_{i}) \pi(\underbrace{\theta}_{i} | \underbrace{Y}_{(i)}, \underbrace{X}_{(i)}) d\underbrace{\theta}_{i}$$
(4.22)

na qual $\pi(\underline{\theta} \mid \underline{Y}_{(i)}, \underline{X}_{(i)})$ é a densidade a posteriori para os parâmetros $\underline{\theta}$ dado os dados $\underline{Y}_{(i)}$ e $\underline{X}_{(i)}$.

Usando as amostras geradas pelo algoritmo Metropolis-Hastings, (4.22) o mesmo pode ser aproximado pelo estimador de Monte Carlo dado por:

$$\widehat{f}(y_i| \ X_{(i)}, X_{(i)}) = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M f(y_i| \ X_{(i)}, X_{(i)}, \underline{\theta}^{(j)})$$
(4.23)

em que $\theta_{ij}^{(j)}$, com j = 1, 2, ..., M. são as amostras geradas no MCMC.

A estimativa $\hat{c}_i = \hat{f}(y_i | Y_{(i)}, X_{(i)})$ pode ser usada para a a seleção do modelo. Isto pode ser feito considerando-se o gráfico de c_i versus i (i = 1, 2, ..., n) para os diferentes modelos. O maior valor de c_i (em média) indica o melhor modelo. Outra forma de usar o CPO é escolhendo o modelo l tal que $P_l = \prod_{i=1}^n c_i(l)$ seja máximo (l é um índice que indica o modelo l).

5 Resultados da abordagem bayesiana

5.1 Aplicação

Para ilustrar a aplicabilidade da abordagem bayesiana foram utilizados os dados do apêndice B. As tabelas a seguir ilustram os hiperparâmetros obtidos pelo método de laplace e o sumário das densidades a posteriori pelo método de Metropolis-Hastingns para os diferentes modelos.

5.1.1 Modelo de Brody

Tabela 5.1: Estimadores bayesianos pelo método de Laplace para o modelo de Brody.

Estatística	а	С	k	τ
Moda	400.787	2.553	0.205	442.951
Variância	543.006	1.131	0.003	47243.78

A tabela 5.1 apresenta os valores da moda e variância de cada parâmetro obtidos pelo método de laplace, esses hiperparâmetros foram utilizados como estimativas iniciais para o cálculo da posteriori pelo método de Metropolis-Hastingns.

Estatística a posteriori	а	с	k	τ
Moda	400.787	2.553	0.205	442.951
Média	402.073	3.007	0.216	428.861
Mediana	395.454	2.821	0.219	394.505
Desvio-padrão	26.653	1.190	0.053	207.263
Assimetria	1.416	0.725	-0.216	0.988
Curtose	2.399	0.181	-0.457	1.232
Intervalo de credibilidade	(367.847, 475.658)	(1.246, 5.856)	(0.1046, 0.313)	(125.683, 932.492)
Critério de Geweke	0.672	0.771	0.1969	0.8713

Tabela 5.2: Sumário das medidas descritivas das densidades a posteriori pelo método de Metropolis-Hastingns com 22% de aceitação para o modelo de Brody.

A tabela 5.2 apresenta as estatísticas a posteriori obtidas após a simulação e, através dela, observa-se pelo critério de Geweke que houve convergência em todos os parâmetros e que os intervalos de credibilidades foram todos significantes.



Figura 5.1: Parâmetros ajustados pelo modelo de Brody.

A figura 5.1 apresenta a trajetória de simulação de cada parâmetro do modelo de Brody após a seleção da amostra.



Figura 5.2: Histograma do parâmetros para o modelo de Brody.

A figura 5.2 representa o histograma dos parâmetros do modelo de Brody que permite visualizar o núcleo de densidades a posteriori, e através dela observa-se uma assimetria positiva nos parâmetros $a, c \in \tau$.

5.1.2 Modelo de Chapman-Richards

Por dificuldades de convergência, foram utilizadas no modelo de Chapman-Richard densidades a priori informativas em que, $a \sim N(380,400)$, $c \sim N(2,0.25)$, $k \sim N(1,1)$ e $m \sim N(3,1)$. A tabela 5.3 mostra os valores da moda e variância de cada parâmetros obtidos pelo método de laplace.

Tabela 5.3: Estimadores bayesianos pelo método de Laplace para o modelo de Chapman-Richards.

Estatística	а	С	k	m	τ
Moda	380.713	2.054	0.302	3.186	548.282
Variância	77.448	0.184	0.001	0.738	60090.903

Tabela 5.4: Sumário das medidas descritivas das densidades a posteriori pelo método de Metropolis-Hastingns com 52% de aceitação para o modelo de Chapman-Richards.

Estatística a posteriori	а	С	k	m	τ
Moda	380.713	2.054	0.302	3.186	548.282
Média	380.9474	2.108	0.303	3.265	542.678
Mediana	380.591	2.087	0.303	3.234	503.893
Desvio-padrão	9.257	0.430	0.034	0.846	245.508
Assimetria	0.197	0.355	-0.024	0.287	0.903
Curtose	0.372	0.345	0.077	0.182	1.113
Intervalo de credibilidade	(363.572, 400.398)	(1.344, 3.008)	(0.234, 0.368)	(1.708, 5.010)	(176.243, 1120.697)
Critério de Geweke	0.831	0.008	0.039	-0.783	-1.772

As estatística a posteriori, obtidas após a simulação, são apresentadas na tabela 5.4 e através dela, observa-se que houve convergência e pouca assimetria em todos os parâmetros. Contudo, pode-se notar que o parâmetro τ apresentou uma assimetria mais acentuada. Pelo intervalo de credibilidade, verifica-se que todos os parâmetros do modelo foram significativos.



Figura 5.3: Parâmetros ajustados pelo modelo de Chapman-Richards.

A figura 5.3 apresenta a trajetória de simulação de cada parâmetro do modelo de Chapman-Richards após a seleção da amostra.



Figura 5.4: Histograma do parâmetros para modelo de Chapman-Richards.

O núcleo de densidades a posteriori visualizado através da figura 5.4 mostra que apenas o parâmetro τ teve uma assimetria acentuada para esse modelo.

5.1.3 Modelo de Gompertz

Tabela 5.5: Estimadores bayesianos pelo método de Laplace para o modelo de Gompertz.

Estatística	а	С	k	τ
Moda	383.152	-7.444	0.306	560.932
Variância	153.981	9.058	0.002	71284.75

A tabela 5.5, apresenta os valores da moda e variância de cada parâmetro do modelo de Gompertz obtidos pelo método de laplace.

Tabela 5.6: Sumário das medidas descritivas das densidades a posteriori pelo método de Metropolis-Hastingns com 25% de aceitação para o modelo de Gompertz.

Estatística a posteriori	а	С	k	τ
Moda	383.15	-7.44	0.306	560.930
Média	382.797	-9.538	0.322	521.663
Mediana	379.949	-8.558	0.324	485.594
Desvio-padrão	16.760	4.708	0.061	247.555
Assimetria	1.695	-1.381	-0.288	0.900
Curtose	5.001	2.712	0.488	1.215
Intervalo de credibilidade	(359.383,430.112)	(-22.484, -2.891)	(0.180, 0.443)	(147.506, 1107.901)
Critério de Geweke	-1.406	0.132	0.736	0.480

A estatística a posteriori obtida após a simulação é apresentada na tabela 5.6 e, através dela, observa-se pelo critério de Geweke que houve convergência em todos os parâmetros e que os intervalos de credibilidades foram todos significantes.



Figura 5.5: Parâmetros ajustados pelo modelo de Gompertz.

No modelo de Gompertz foi necessário uma número maior de simulação, a figura 5.5 apresenta essa trajetória para cada parâmetro desse modelo, após a seleção da amostra.



Figura 5.6: Histograma do parâmetros para o modelo de Gompertz.

Os histogramas da figura 5.6 mostram que os parâmetros $a \in \tau$ foram assimétricos à direita, o parâmetro c assimétrico à esquerda e que o parâmetro k foi quase simétrico, apresentando coeficiente de assimetria próximo a zero .

5.1.4 Modelo Logístico

Tabela 5.7: Estimadores bayesianos pelo método de Laplace para o modelo Logístico.

Estatística	а	k	m	τ
Moda	380.542	0.324	8.899	580.740
Variância	123.429	0.002	10.563	68352.470

A tabela 5.7 descreve os valores da moda e variância de cada parâmetro do modelo Logístico obtido pelo método de laplace .

Tabela 5.8: Sumário das medidas descritivas das densidades a posteriori pelo método de Metropolis-Hastingns com 27% de aceitação para o modelo Logístico.

Estatística a posteriori	а	k	m	τ
Moda	380.541	0.324	8.899	580.740
Média	377.486	0.344	10.376	494.743
Mediana	377.625	0.343	10.254	496.755
Desvio-padrão	12.366	0.052	4.742	250.017
Assimetria a posteriori	0.903	0.017	1.181	0.957
Curtose	2.496	0.004	1.510	1.424
Intervalo de credibilidade	(357.724, 407.032)	(0.242, 0.450)	(4.768, 24.051)	(169.450, 1112.226)
Critério de Geweke	1.816	-1.606	-1.789	1.273

A estatística a posteriori, obtida após a simulação do modelo logístico, é apresentadas na tabela 5.8 e, através dela, observa-se pouca assimetria para o parâmetro k e grande amplitude no intervalo de credibilidade para o parâmetro m. Pelo critério de Geweke, houve convergência em todos os parâmetros desse modelo.



Figura 5.7: Parâmetros ajustados pelo modelo Logístico.

A figura 5.7 apresenta a trajetória de simulação de cada parâmetro do modelo Logístico, após a seleção da amostra.



Figura 5.8: Histograma do parâmetros para o modelo Logístico.

O núcleo de densidades a posteriori, visualizado através da figura 5.8, mostra que todos os parâmetros apresentaram assimetria positiva, contudo para o parâmetro k essa assimetria foi pouco acentuada.

5.1.5 Modelo Von Bertalanffy

Tabela 5.9: Estimadores bayesianos pelo método de Laplace para o modelo de Von Bertalanffy.

Estatística	а	С	k	τ
Moda	385.688	1.843	0.280	532.1725
Variância	189.434	0.537	0.002	59587.588

A tabela 5.9, apresenta os valores da moda e variância de cada parâmetro obtido pelo método de laplace.

Tabela 5.10: Sumário das medidas descritivas das densidades a posteriori pelo método de Metropolis-Hastingns com 24% aceitação para o modelo de Von Bertalanffy.

Estatística a posteriori	а	С	k	τ
Moda	385.688	1.843	0.280	532.172
Média	388.056	2.189	0.290	494.454
Mediana	383.054	2.051	0.295	461.277
Desvio-padrão	25.306	0.920	0.059	235.187
Assimetria	3.215	0.821	-0.726	0.785
Curtose	13.643	0.770	1.215	0.635
Intervalo de credibilidade	(361.249, 476.627)	(0.676, 4.456)	(0.136, 0.393)	(135.468, 1042.868)
Critério de Geweke	1.007	-1.656	-1.524	0.782

A estatística a posteriori, obtida após a simulação, é apresentada na tabela 5.10 e, através dela, observa-se alto grau de assimetria e curtose para o parâmetro *a*. Nota-se, também, pelo critério de Geweke, que houve convergência em todos os parâmetros e que os intervalos de credibilidades foram todos significantes.



Figura 5.9: Parâmetros ajustados pelo modelo de Von Bertalanffy.

A figura 5.9 apresenta a trajetória de simulação de cada parâmetro do modelo de Von Bertalanffy, após a seleção da amostra.


Figura 5.10: Histograma do parâmetros para o modelo de Von Bertalanffy.

A figura 5.10 representa o histograma dos parâmetros do modelo de Von Bertalanffy que permite visualizar o núcleo de densidades a posteriori, e através dela, observa-se uma assimetria à direita para os parâmetros $a, c \in \tau$ e à esquerda para k.

5.2 Seleção do modelo na abordagem bayesiana

Tabela 5.11: Critério de seleção dos modelos de curvas de crescimento na abordagem bayesiana com priori não informativa.

Autor	AIC	BIC	СРО	DIC
Brody	29.126	25.890	6.990×10^{104}	-56092.931
Gompertz	28.394	25.425	1.787×10^{101}	-32417.738
Logístico	29.085	26.116	9.413×10 ¹¹⁶	-18148.551
Von Bertalanffy	28.421	25.452	1.947×10^{94}	-220.440

Observando se os valores dos critérios de seleção dos modelos apresentados na tabela 5.11, nota se entre os modelos ajustados, considerando-se a priori não informativa, que o modelo logístico deve ser escolhido como o melhor entre os critérios apresentados. O critério de DIC não discriminou bem o modelo, tendo em vista que ele só é válido quando as densidades a priori são normais. Vale ressaltar que o critério da densidade preditiva ordenada (CPO) é o mais decisivo em favor do modelo logístico, apresentando uma relação ($CPO_{logstico}/CPO_{outros}$) que varia de 12 a 22.



Figura 5.11: Densidade preditiva ordenada com priori não informativa.

A figura 5.11 mostra que o modelo logístico para o critério de densidade ordenada foi superior a todos os modelo com priori não informativa.

No intuito de comparar o modelo de Richard com os demais, adotaram-se as densidades a priori informativas em todos os modelos, com todos os parâmetros seguindo a distribuição normal com as seguintes médias e variâncias: no modelo de Brody, $a \sim N(380,400)$, $c \sim N(2,0.25)$ e $k \sim N(1,1)$; no modelo de Gompertz $a \sim N(380,400)$, $c \sim N(-10,0.25)$ e $k \sim N(0.5,1)$; no modelo Logístico $a \sim N(380,400)$, $k \sim N(0.5,1)$ e $m \sim N(5,0.25)$ e no de Von Bertalanffy $a \sim N(380,400)$, $c \sim N(2,0.25)$ e $k \sim N(0.5,1)$.

Autor	AIC	BIC	СРО	DIC
Brody	28.117	26.899	3.301×10^{153}	-65565.425
Chapman-Richard	26.119	25.890	1.971×10^{152}	-53719.367
Gompertz	29.575	26.605	3.814×10^{157}	-38615.734
Logístico	29.680	26.710	7.495×10^{157}	-19715.465
Von Bertalanffy	29.136	26.166	2.198×10^{156}	-236.883

Tabela 5.12: Critério de seleção dos modelos de curvas de crescimento na abordagem bayesiana com priori informativa.

Com o uso de densidades a priori não informativas, o modelo de Gompertz mostra-se praticamente tão bom quanto o logístico. No entanto, o logístico deve ser preferível por ter-se mostrado de grande aplicabilidade na maioria dos trabalhos que estudam curvas de crescimento de animais de grande porte.

Assim, pelo gráfico 5.12, nota-se que como nas priori não informativas, o modelo logístico foi quem melhor discriminou o conjunto de dados.



Figura 5.12: Densidade preditiva ordenada com priori informativa.

A tabela 5.13 e a figura 5.13 apresentados a seguir ilustram os valores preditivos dos pesos, calculado através dos percentis das amostras dos parâmetros geradas pelo algoritmo de MCMC do modelo logístico, de acordo com a seção 4.7 apresentada.

t	2.5%	25%	50%	75%	97.5%
8	188.638	196.184	200.120	203.918	213.100
9	228.625	235.755	239.213	242.921	250.803
10	262.734	269.295	272.293	275.550	281.935
11	290.314	296.168	298.938	301.764	307.366
12	311.546	316.975	319.627	322.188	327.711
13	326.939	332.491	335.307	337.880	343.661
14	337.890	343.848	346.948	349.836	356.218
15	345.285	352.111	355.532	358.728	365.733
16	350.627	358.058	361.755	365.265	372.724
17	354.248	362.265	366.254	370.047	378.038
18	356.977	365.281	369.491	373.490	382.003
19	358.825	367.462	371.802	375.998	385.000

Tabela 5.13: Percentis preditivo dos pesos do modelo logístico.



Figura 5.13: Percentis preditivo dos pesos do modelo logístico.

6 Conclusão

No planejamento de produção, o ajuste de curva de crescimento desempenha um papel central para o manejo da produção animal. A função de crescimento que melhor descreve o crescimento de um animal é utilizada tanto para fins de exigência nutricional, como para seleção genética. A representação dessas curvas de crescimento é feita por meio de modelos matemáticos não lineares cujos parâmetros possuem interpretação biológica que são importantes do ponto de vista do planejamento da produção animal. Portanto, ajustar bem e selecionar dentre os vários modelos o que melhor se ajusta a determinados conjuntos de dados é fundamental para que se tenha uma boa avaliação do crescimento dos animais.

Neste trabalho foram adotadas duas técnicas de ajuste e seleção de modelos não lineares, usados para crescimento de animais de grande e médio porte, comumente tratados na literatura: a abordagem clássica usando o método de Gauss-Newton; e a abordagem bayesiana, usando densidades a priori não informativas de Jeffrey, juntamente com técnicas de simulação MCMC (mais precisamente o algoritmo Metropolis-Hastings).

O ajuste de curvas de crescimento na abordagem clássica apresentou diversas limitações, como problema de convergência e intervalo de confiança onde muitos parâmetros não foram significativos. No entanto, esse fato pode ser explicado devido ao tamanho pequeno da amostra e pela complexidade no acompanhamento do crescimento bovino, tornando assim inviável o acompanhamento desse animal em um período superior a 60 meses.

Por outro lado, a metodologia bayesiana mostrou-se de fácil aplicação e entendimento. Para fins de comparação, optou-se pelo uso de densidades a priori não informativas. Entretanto, densidades a priori informativas podem ser facilmente encontradas devido ao conhecimento a priori das informações dos parâmetros, como por exemplo, o peso assintótico do animal, taxa de crescimento bovino entre outros. Dessa forma, as distribuições a priori informativas podem ser justificadas a partir de opiniões de especialistas. No entanto, essa ferramenta foi também utilizada no ajuste da curva de crescimento dos modelos, devido à permanência na dificuldade de convergência dos parâmetros do modelo de Richard com priori não informativa. Para os demais modelos considerados, foi possível ajustar as curvas de crescimento com ambas densidades a priori.

Pode-se constatar entanto, que o uso da abordagem bayesiana levou a inferências mais acuradas, o que não se observou com a metodologia clássica, e que entre os modelos estudados o logístico foi o mais adequado, tanto na abordagem bayesiana utilizando a priori não informativa e informativa quanto na clássica.

Nesse sentido, pelos resultados encontrados, a metodologia bayesiana forneceu excelentes estimativas significantes, devido ao seu extraordinário desempenho com pequenas amostras de dados. Assim, pode-se dizer que ela é sempre preferível quando comparada com a metodologia clássica para ajuste e seleção de modelos não lineares, usados para descrever o crescimento de animais de grande e médio porte.

Referências Bibliográficas

- Akaike, Hirotugu (1974). "A new look at the statistical model identification". IEEE Transactions on Automatic Control 19 (6): 716-723. doi:10.1109/TAC.1974.110070
- Afonso, Vivian Alves Costa; Quirio, Celia Raquel; Costa, Ricardo Lopes Dias (2007) Utilização de funções não lineares para descrição de curvas de crescimento em ovinos. *http://www.infobibos.com/Artigos/20074/naolinear/index.htm*.
- Box, G. E. P; Tiao, G. C.(1992)- Bayesian inference in statistical analysis.
- Brow,J.E.;Fitzhugh Junior H.A; Cartwright,T.C.A (1976) A comparision of nonlinear models for describing weight-age relationships in cattle.Journal of animal Science, v.42,p.810-818,1976.
- Carlin, B.P.; Louis, T.A. (2000). Bayes and Empirical Bayes methods for data analysis, 2nd Edn. Boco Raton: Chapman and Hall/CRC Press, pp.418.
- Chib, Siddhartha, Greenberg, Edward (1995) -Understanding the Metropolis-Hastings Algorithm. American Statistician, 49(4), 327-335.
- Ehlers, Ricardo Sandes (2002)- Introdução à Inferência bayesiana.
- Freitas, A.R. (2007) Estimativas de Curvas de Crescimento na Produção Animal. ISSN, v.1, p.1980-6841.
- Gelfand, A., Dey, K.D. (1994). Bayesian Model Choice: Asymptotics and Exacts Calculations. Journal of the Royal Statistician Society, Series B, 56(3), 501-514.
- Gelman, A.; Carlin, J. B.; Stern, H. S.; Rubin, D.B.(2004) Bayesian Data Analysis, second edition.
- Geweke, J. (1992) Evaluating the accuracy of sampling-based approaches to calculating posterior moments. In Bayesian Statistics 4 (ed JM Bernado, JO Berger, AP Dawid and AFM Smith). Clarendon Press, Oxford, UK.
- Guedes, M.H.P.; Muniz, J.A.; Silva, F, F; Aquino, L.H. (2005) Análise bayesiana da Curva de Crescimento de Cordeiros da Raça Santa Inês. Arq. Brás. Med. Vet. Zootec., v. 57, n.3, p.415-417, 2005.
- Holsinger, K.E. (2005)- Bayesian population genetic data analysis. Boston: Department of Ecology e Evolutionary Biology, University of Connecticut, 124p.
- Jim Albert (2007) Bayesian Computation with R: Department of Mathematics and Statistics.

- Machado, Eustáquio José; Muniz, Joel Augusto; Silva, Fabyano Fonseca (2003) Análise da Curva de Crescimento por meio da Equação de Michaelis-Menten.
- Mazzini, Ana Rita de Assumpção; Muniz, Joel Augusto; Aquino, Luiz Henrique ; Silva, Fabiano Fonseca, (2003) - Análise da curva de crescimento de machos Hereford. Ciências agrotec. Lavras v.27, n. 5, p.1105 -1112.
- Myers, Raymond, H. (1990). Classical and Modern Regression with Applications, 2th Ed., Duxbury Press, California USA, p.488
- Paulino C.D; Turkman, M. Antónia Amaral; Murteira, Bento.(1999)- Estatística bayesiana, Fundação Calouste Gulbenkian.
- Paz, Claudia C.P (2002)- Associação entre polimofismo genéticos e parâmetros da curva de crescimento em Bovinos de corte. p.12 Tese (Doutorado em Agronomia). Escola Superior de Agricultura, USP.
- Raftery, A.E. (1995). Hypothesis Testing and Model Selection via Posterior Simulation. In Practial Markov Chain Monte Carlo, Ed. W. Gilks, S.Richardson and D. Spiegelhalter. New York, Chapman and Hall.
- Ratkoswky, D.A (1983) Nonlinear regression modeling. New York: Marcel Dekker, p.297.
- Rodrigues, M.L.; Lima, S.L.; Agostinho, C.A.; Silva, J.H.V.; Cruz, G. R. B.; Campos, V. M.; Casali, A.P; Mendes, R.R.B.; Albuquerque, A.G. (2007) - Curvas de Crescimento em Rã - Touro na Fase de Recria. Arch. Zootec. v. 56, p.125-136.
- Santos, V. B.; Freitas, R. T. Fonseca; Silva, F. F.; Freato, T.A. (2007)- Avaliação de Curva de Crescimento Morfométrico de Linhagens de Tilápia do Nilo (Oreochromis niloticus). Ciênc. Agrotec., Lavras, v. 31, n. 5, p.1486-1492.
- Sarmento, José,L.Rocha; Regazzi, Adair José; Sousa,W. H.;Torres, Rabelo de Almeida; Breda, F. Cristina;Menezes, G.R.de Oliveira (2006) - Estudo de Curvas de Crescimento de Ovinos Santa Inês, R. Brás. Zootec. v. 35, n. 2, p.435-44.
- Schwarz, G., (1978) Estimating the dimension of a model. Annals of Statistics 6(2):461-464.
- Spiegelhalter, D.J.; Best, N.G.; Carlin, B.P.; van der Linde, A. (2002). Bayesian measures of model complexity and fit. Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Statistical Methodology) 64 (4), 583-639.
- Silva, Natascha Almeida Marques; Aquino, Luiz Henrique; Silva, Fabyano Fonseca; Oliveira, Antonio Ilson Gomes (2004)- Curvas de Crescimento e Influência de Fatores Não-Genéticos Sobre as Taxas de Crescimento de Bovinos da Raça Nelore. Ciênc. Agrotec.,Lavras, v. 28, n. 3, 647-654.
- SIT, Vera. Catalog of curves for curve fitting Handbook 4. Victoria: Ministry of Forests, Forest Science Research Branch, Biometrics information, 1994. 110p.
- Sousa, Wandrick Hauss Estudo da curva de crescimento de ovinos Santa Inês. R. Bras. Zootec., Abr 2006, vol.35, no.2, p.435-442. ISSN 1516-3598.

Tedeschi,L. Orlindo; Boin, Celso; Nardon, R. Fernandes; Leme, R. Paulo (2000) - Estudo de Curva de Crescimento de Animais da Raça Guzerá e seus Cruzamentos Alimentados a Pasto, com e sem Suplemento. 1 . Análise e Seleção das Funções não lineares. R. Brás. Zootec. v. 29, n. 2, p.630-637.

APÊNDICE A – Demonstração de Fórmulas

Considere os modelos apresentados nas tabelas (1.1) e (2.1), fazendo $h(t_i, \beta) = f(t, \theta)$ pode-se reescrever a equação (2.1) como

$$\ln P(t) = f(t,\theta) + e_t$$

Assim,

$$\begin{aligned} \pi(x|\theta) &\propto \frac{1}{\sigma} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}(x-f(t,\theta))^2\right\} \\ \pi(\ln P(t)|\theta) &\propto \frac{1}{\sigma P(t)} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}(x-f(t,\theta))^2\right\} \\ x &= \{(p_1,t_1),(p_2,t_2),\dots,(p_n,t_n)\} \\ L(x|\theta) &= \prod_{t=1}^n \pi(\ln P(t)|\theta) \\ L(x|\theta) &= \prod_{t=1}^n \frac{1}{\sigma P(t)} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}(\ln P(t) - f(t,\theta))^2\right\} \\ \ln L(x|\theta) &= \sum_{t=1}^n -\ln \sigma - \ln P(t) - \sum_{t=1}^n -\frac{1}{2\sigma^2}[\ln P(t) - f(t,\theta)]^2 \frac{\partial f(t,\theta)}{\partial \theta} \\ &= \frac{\partial \ln L(x|\theta)}{\partial \theta_i} = -\frac{1}{2\sigma^2}2[\ln P(t) - f(t,\theta)] \frac{\partial f(t,\theta)}{\partial \theta} \\ \frac{\partial^2 \ln L(x|\theta)}{\partial \theta_i \partial \theta_j} &= \sum_{t=1}^n \frac{1}{\sigma^2} \frac{\partial f(t,\theta)}{\partial \theta_i} \frac{\partial f(t,\theta)}{\partial \theta_j} + [\ln P(t) - f(t,\theta)] \frac{\partial^2 f(t,\theta)}{\partial \theta_i \partial \theta_j} \end{aligned}$$

$$\frac{\partial^2 \ln L(x|\theta)}{\partial \theta_i \partial \theta_j} = \frac{1}{\sigma^2} \sum_{t=1}^n \frac{\partial f(t,\theta)}{\partial \theta_i} \frac{\partial f(t,\theta)}{\partial \theta_j} - \frac{1}{\sigma^2} \sum_{t=1}^n [\ln P(t) - f(t,\theta)] \frac{\partial^2 f(t,\theta)}{\partial \theta_i \partial \theta_j}$$
$$E\left\{\frac{\partial^2 \ln L(x|\theta)}{\partial \theta_i \partial \theta_j}\right\} = -\frac{1}{\sigma^2} \sum_{t=1}^n \frac{\partial f(t,\theta)}{\partial \theta_i} \frac{\partial f(t,\theta)}{\partial \theta_j}$$
$$I_{ij} = -\frac{1}{\sigma^2} \sum_{t=1}^n \frac{\partial f(t,\theta)}{\partial \theta_i} \frac{\partial f(t,\theta)}{\partial \theta_j}$$

APÊNDICE B – Dados

do grupo de genotípico AALLA	νB.	

Tabela B.1: Mensurações de idade e peso do grupo genético das raças Nelore e Canchim

ldade (meses)	Peso (Kg)
8	206,7
9	229,5
10	267,0
11	292,5
12	321,5
13	340,0
14	355,8
15	384,0
16	377,2
17	349,2
18	355,8
19	359,7

APÊNDICE C – Programas da abordagem clássica

C.1 Modelo Brody

```
# Pt = a*[1 - c*exp(-kt)]
# Pt = Peso médio dos animais
# t = idade
Pt=scan("Peso1.txt")
t=scan("Idade1.txt")
y=log(Pt)
x=t
n=length(y)
a1=c()
c2=c()
k3=c()
SSres=c()
a1[1]=378.63492
c2[1]=5.03594
k3[1]=0.29222
fator=0.001
beta=matrix(c(a1[1],c2[1],k3[1]),ncol=1)
nit=5000
w=matrix(c(0),nrow=n, ncol=nrow(beta))
f=matrix(c(0),nrow=n, ncol=1)
Df1=c()
Df 2=c()
Df3=c()
```

```
for(s in 1:nit){
a1[s]=beta[1,1]
c2[s]=beta[2,1]
k3[s]=beta[3,1]
for(i in 1:n){
Df1[i]=1/a1[s]
        Df2[i] = -1/(exp(k3[s]*t[i])-c2[s])
        Df3[i]=(c2[s]*t[i])/(exp(k3[s]*t[i])-c2[s])
        w[i,]=c(Df1[i],Df2[i],Df3[i])
f[i,1]=log(a1[s])+log(1-c2[s]*exp(-k3[s]*t[i]))
}
SSres[s]=sum((y-f)^2)
        if (s>1){
        if (SSres[s]>SSres[s-1]){fator=fator/10}
                 }
       beta=beta+fator*solve(t(w)%*%w)%*%t(w)%*%(y-f)
}
wch=w
coef1=a1[s]
coef2=c2[s]
coef3=k3[s]
xord=sort(x)
Pch=c()
for(i in 1:n){
Pch[i]=coef1*(1 - coef2*exp(-coef3*xord[i]))
}
leg.txt=c("Real", "Estimado")
cores=c("black","blue")
plot(t,Pt,xlab="Idade (Anos)", ylab="Peso (Kg)", main="",pch=8)
points(xord,Pch,type="b",col="blue",pch=1)
legend(list(x=4,y=16), legend = leg.txt, col=cores, pch=c(8,1),lty=1, merge=TRUE)
sig2=SSres[s]/(n-3)
Var_par=sig2*solve(t(wch)%*%wch)
dp_par=sqrt(diag(Var_par))
```

C.2 Modelo Chapman-Richards

```
# Pt = a*[1 - c*exp(-kt)]^m
# Pt = Peso médio dos animais
# t = idade
Pt=scan("Peso1.txt")
t=scan("Idade1.txt")
y=log(Pt)
x=t
n=length(y)
a1=c()
c2=c()
k3=c()
m4=c()
SSres=c()
a1[1]=374
c2[1]=4
k3[1]=0.34
m4[1]=2
fator=0.001
beta=matrix(c(a1[1],c2[1],k3[1],m4[1]),ncol=1)
nit=5000
w=matrix(c(0),nrow=n, ncol=nrow(beta))
f=matrix(c(0),nrow=n, ncol=1)
Df1=c()
Df 2=c()
Df3=c()
Df4=c()
for(s in 1:nit){
a1[s]=beta[1,1]
c2[s]=beta[2,1]
k3[s]=beta[3,1]
m4[s]=beta[4,1]
#m4[s]=10
for(i in 1:n){
```

```
Df1[i]=1/a1[s]
        Df2[i]= -(m4[s]*exp(-k3[s]*t[i]))/(1-c2[s]*exp(-k3[s]*t[i]))
        Df3[i]=(m4[s]*c2[s]*t[i])/(exp(k3[s]*t[i])-c2[s])
Df4[i]=log(1-c2[s]*exp(-k3[s]*t[i]))
        w[i,]=c(Df1[i],Df2[i],Df3[i],Df4[i])
f[i,1]=log(a1[s])+m4[s]*log(1-c2[s]*exp(-k3[s]*t[i]))
}
SSres[s]=sum((y-f)^2)
        if (s>1){
        if (SSres[s]>SSres[s-1]){fator=fator/10}
                 }
beta=beta+fator*solve(t(w)%*%w)%*%t(w)%*%(y-f)
}
wch=w
coef1=a1[s]
coef2=c2[s]
coef3=k3[s]
coef4=m4[s]
xord=sort(x)
Pch=c()
for(i in 1:n){
Pch[i]=coef1*(1 - coef2*exp(-coef3*xord[i]))^coef4
}
leg.txt=c("Real", "Estimado")
cores=c("black","blue")
plot(t,Pt,xlab="Idade (Anos)", ylab="Peso (Kg)", main="",pch=8)
points(xord,Pch,type="b",col="blue",pch=1)
legend(list(x=4,y=16), legend = leg.txt, col=cores, pch=c(8,1),lty=1, merge=TRUE)
sig2=SSres[s]/(n-4)
Var_par=sig2*solve(t(wch)%*%wch)
dp_par=sqrt(diag(Var_par))
```

C.3 Modelo Chapman-Richards m fixo igual a 10

```
\# Pt = a*[1 - c*exp(-kt)]^{10}
# Pt = Peso médio dos animais
# t = idade
Pt=scan("Peso1.txt")
t=scan("Idade1.txt")
y=log(Pt)
x=t
n=length(y)
a1=c()
c2=c()
k3=c()
SSres=c()
a1[1]=374.58061
c2[1]=1.12877
k3[1]=0.36034
fator=0.001
beta=matrix(c(a1[1],c2[1],k3[1]),ncol=1)
nit=5000
w=matrix(c(0),nrow=n, ncol=nrow(beta))
f=matrix(c(0),nrow=n, ncol=1)
Df1=c()
Df 2=c()
Df3=c()
for(s in 1:nit){
a1[s]=beta[1,1]
c2[s]=beta[2,1]
k3[s]=beta[3,1]
for(i in 1:n){
Df1[i]=1/a1[s]
        Df2[i]= -(10*exp(-k3[s]*t[i]))/(1-c2[s]*exp(-k3[s]*t[i]))
        Df3[i]=(10*c2[s]*t[i])/(exp(k3[s]*t[i])-c2[s])
        w[i,]=c(Df1[i],Df2[i],Df3[i])
f[i,1]=log(a1[s])+10*log(1-c2[s]*exp(-k3[s]*t[i]))
}
```

```
SSres[s]=sum((y-f)^2)
        if (s>1){
        if (SSres[s]>SSres[s-1]){fator=fator/10}
                 }
beta=beta+fator*solve(t(w)%%w)%*%t(w)%*%(y-f)
}
wch=w
coef1=a1[s]
coef2=c2[s]
coef3=k3[s]
xord=sort(x)
Pch=c()
for(i in 1:n){
Pch[i]=coef1*(1 - coef2*exp(-coef3*xord[i]))^10
}
leg.txt=c("Real", "Estimado")
cores=c("black","blue")
plot(t,Pt,xlab="Idade (Anos)", ylab="Peso (Kg)", main="",pch=8)
points(xord,Pch,type="b",col="blue",pch=1)
legend(list(x=4,y=16), legend = leg.txt, col=cores, pch=c(8,1),lty=1, merge=TRUE)
sig2=SSres[s]/(n-3)
Var_par=sig2*solve(t(wch)%*%wch)
dp_par=sqrt(diag(Var_par))
```

C.4 Modelo de Gompertz

```
# Pt = a*exp[c*exp(-kt)]
# Pt = Peso médio dos animais
# t = idade
Pt=scan("Peso1.txt")
t=scan("Idade1.txt")
y=log(Pt)
x=t
n=length(y)
a1=c()
c2=c()
k3=c()
SSres=c()
a1[1]=375
c2[1]=-13
k3[1]=0.4
fator=0.01
beta=matrix(c(a1[1],c2[1],k3[1]),ncol=1)
nit=1000
w=matrix(c(0),nrow=n, ncol=nrow(beta))
f=matrix(c(0),nrow=n, ncol=1)
Df1=c()
Df 2=c()
Df3=c()
for(s in 1:nit){
a1[s]=beta[1,1]
c2[s]=beta[2,1]
k3[s]=beta[3,1]
for(i in 1:n){
Df1[i]=1/a1[s]
        Df2[i]= (exp(-k3[s]*t[i]))
        Df3[i]= -c2[s]*t[i]*(exp(-k3[s]*t[i]))
        w[i,]=c(Df1[i],Df2[i],Df3[i])
f[i,1]=log(a1[s])+c2[s]*(exp(-k3[s]*t[i]))
}
```

```
SSres[s]=sum((y-f)^2)
        if (s>1){
        if (SSres[s]>SSres[s-1]){fator=fator/10}
                 }
beta=beta+fator*solve(t(w)%%w)%*%t(w)%*%(y-f)
}
wch=w
coef1=a1[nit]
coef2=c2[nit]
coef3=k3[nit]
xord=sort(x)
Pch=c()
for(i in 1:n){
Pch[i]=coef1*exp(coef2*exp(-coef3*xord[i]))
}
leg.txt=c("Real", "Estimado")
cores=c("black","blue")
plot(t,Pt,xlab="Idade (Anos)", ylab="Peso (Kg)", main="",pch=8)
points(xord,Pch,type="b",col="blue",pch=1)
legend(list(x=4,y=16), legend = leg.txt, col=cores, pch=c(8,1),lty=1, merge=TRUE)
sig2=SSres[s]/(n-3)
Var_par=sig2*solve(t(wch)%*%wch)
dp_par=sqrt(diag(Var_par))
```

C.5 Modelo Logístico

```
# Pt = a*[1 + exp(-kt)]^{(-m)}
# Pt = Peso médio dos animais
# t = idade
Pt=scan("Peso1.txt")
t=scan("Idade1.txt")
y=log(Pt)
x=t
n=length(y)
a1=c()
k3=c()
m4=c()
SSres=c()
a1[1]=375
k3[1]=0.35
m4[1]=10
fator=0.01
beta=matrix(c(a1[1],k3[1],m4[1]),ncol=1)
nit=5000
w=matrix(c(0),nrow=n, ncol=nrow(beta))
f=matrix(c(0),nrow=n, ncol=1)
Df1=c()
Df3=c()
Df4=c()
for(s in 1:nit){
a1[s]=beta[1,1]
k3[s]=beta[2,1]
m4[s]=beta[3,1]
for(i in 1:n){
Df1[i]=1/a1[s]
        Df3[i]=(m4[s]*t[i])/(exp(k3[s]*t[i]+1))
Df4[i]=-log(1+exp(-k3[s]*t[i]))
        w[i,]=c(Df1[i],Df3[i],Df4[i])
f[i,1]=log(a1[s])-m4[s]*log(1+exp(-k3[s]*t[i]))
}
```

```
SSres[s]=sum((y-f)^2)
        if (s>1){
        if (SSres[s]>SSres[s-1]){fator=fator/10}
                 }
beta=beta+fator*solve(t(w)%%w)%*%t(w)%*%(y-f)
}
wch=w
coef1=a1[nit]
coef3=k3[nit]
coef4=m4[nit]
xord=sort(x)
Pch=c()
for(i in 1:n){
Pch[i]=coef1*(1+exp(-coef3*xord[i]))^(-coef4)
}
leg.txt=c("Real", "Estimado")
cores=c("black","blue")
plot(t,Pt,xlab="Idade (Anos)", ylab="Peso (Kg)", main="",pch=8)
points(xord,Pch,type="b",col="blue",pch=1)
legend(list(x=4,y=16), legend = leg.txt, col=cores, pch=c(8,1),lty=1, merge=TRUE)
sig2=SSres[nit]/(n-3)
Var_par=sig2*solve(t(wch)%*%wch)
dp_par=sqrt(diag(Var_par))
```

C.6 Modelo Von Bertalanffy

```
# Pt = a*[1 - c*exp(-kt)]^3
# Pt = Peso médio dos animais
# t = idade
Pt=scan("Peso1.txt")
t=scan("Idade1.txt")
y=log(Pt)
x=t
n=length(y)
a1=c()
c2=c()
k3=c()
SSres=c()
a1[1]=375
c2[1]=3
k3[1]=0.34139
fator=0.001
beta=matrix(c(a1[1],c2[1],k3[1]),ncol=1)
nit=5000
w=matrix(c(0),nrow=n, ncol=nrow(beta))
f=matrix(c(0),nrow=n, ncol=1)
Df1=c()
Df 2=c()
Df3=c()
for(s in 1:nit){
a1[s]=beta[1,1]
c2[s]=beta[2,1]
k3[s]=beta[3,1]
for(i in 1:n){
Df1[i]=1/a1[s]
        Df2[i]= -(3*exp(-k3[s]*t[i]))/(1-c2[s]*exp(-k3[s]*t[i]))
        Df3[i]=(3*c2[s]*t[i]*exp(-k3[s]*t[i]))/(1-c2[s]*exp(-k3[s]*t[i]))
        w[i,]=c(Df1[i],Df2[i],Df3[i])
f[i,1]=log(a1[s])+3*log(1-c2[s]*exp(-k3[s]*t[i]))
}
```

```
SSres[s]=sum((y-f)^2)
        if (s>1){
        if (SSres[s]>SSres[s-1]){fator=fator/10}
                 }
beta=beta+fator*solve(t(w)%%w)%*%t(w)%*%(y-f)
}
wch=w
coef1=a1[s]
coef2=c2[s]
coef3=k3[s]
xord=sort(x)
Pch=c()
for(i in 1:n){
Pch[i]=coef1*(1 - coef2*exp(-coef3*xord[i]))^3
}
leg.txt=c("Real", "Estimado")
cores=c("black","blue")
plot(t,Pt,xlab="Idade (Anos)", ylab="Peso (Kg)", main="",pch=8)
points(xord,Pch,type="b",col="blue",pch=1)
legend(list(x=4,y=16), legend = leg.txt, col=cores, pch=c(8,1),lty=1, merge=TRUE)
sig2=SSres[s]/(n-3)
Var_par=sig2*solve(t(wch)%*%wch)
dp_par=sqrt(diag(Var_par))
```

C.7 Seleção do modelo

```
qmr=0
sqr=0
sqt=0
dma=0
p=3
Ptmedio=sum(Pt)/n
for(j in 1:n){
qmr=qmr+((Pt[j]-Pch[j])^2)/(n-p)
sqr=sqr+((Pt[j]-Pch[j])^2)
sqtc=sqt+((Pt[j]-Ptmedio)^2)
dma=(dma+100/n)*(abs(Pt[j]-Pch[j]))/Pt[j]
}
spt=sqrt(qmr)
cv=(100*spt)/Ptmedio
r2=1-(sqr/sqtc)
aic=n*(log(2*pi*SSres[s])+1)+2*(p-1)
sbc=n*(log(SSres[s]/n))+log(n)*(p-1)
```

APÊNDICE D – Programas da abordagem bayesiana

D.1 Modelo Brody

```
brodypost=function(theta,data)
{
y=data$b
t=data$f
nbins=length(y)
a1=c(theta[1])
c2=c(theta[2])
k3=c(theta[3])
tau=c(theta[4])
logL=0
B=\log(a1)+\log(1-c2*\exp(-k3*t))
phi=(exp(-k3*t))/(1-c2*exp(-k3*t))
LogPriori=-log(a1)+(1/2)*(log(sum(phi^2))+log(sum((t^2)*(phi^2))))
logL=(n/2-1)*log(tau)-(tau/2)*sum((y-B)^2)+LogPriori
return(logL)
}
Pt=scan("Peso1.txt")
t=scan("Idade1.txt")
y=log(Pt)
x=t
n=length(y)
d=list(b=y,f=t)
start=array(c(384,3.7,0.25,500),c(1,4))
# LAPLACE
```

```
fit=laplace(brodypost,start,d)
fit
modal.sds=sqrt(diag(fit$var))
proposal=list(var=fit$var,scale=1)
# METROPOLIS-HASTINGNS
nc=150000
fit2=rwmetrop(brodypost,proposal,start,nc,d)
fit2$accept
lag=15
ni=1
parameter=matrix(c(0),ncol=4,nrow=((nc/2)/lag))
ns=nc/2+lag
while(ns<=nc){</pre>
parameter[ni,]=fit2$par[ns,]
ni=ni+1
ns=ns+lag
}
post.means=apply(parameter,2,mean)
post.sds=apply(parameter,2,sd)
post.median=apply(parameter,2,median)
post.mode=c(fit$mode)
post.skewness=apply(parameter,2,skewness)
post.kurtosis=apply(parameter,2,kurtosis)
#cbind(c(fit$mode),modal.sds)
cbind(post.mode,post.means,post.median,post.sds, post.skewness, post.kurtosis)
quantile(parameter[,1],c(0.025, 0.975))
quantile(parameter[,2],c(0.025, 0.975))
quantile(parameter[,3],c(0.025, 0.975))
quantile(parameter[,4],c(0.025, 0.975))
# CRITÉRIO DE CONVERGÊNCIA GEWEKE
geweke.diag(parameter, frac1=0.1, frac2=0.5)
```

D.2 Modelo Chapman-Richards

```
richardpost=function(theta,data)
{
y=data$b
t=data$f
nbins=length(y)
a1=c(theta[1])
c2=c(theta[2])
k3=c(theta[3])
m4=c(theta[4])
tau=c(theta[5])
logL=0
R = \log(a1) + m4 * \log(1 - c2 * exp(-k3 * t))
# Priori informativa: a~N(380,400), c2~N(2,0.25), k3~N(1,1), m4~N(3,1)
LogPriori=(-(0.0025/2)*(a1-380)^2)+(-2*(c2-2)^2)+(-0.5*(k3-1)^2)+(-0.5*(m4-3)^2)
logL=(n/2-1)*log(tau)-(tau/2)*sum((y-R)^2)+LogPriori
return(logL)
}
Pt=scan("Peso1.txt")
t=scan("Idade1.txt")
y=log(Pt)
x=t
n=length(y)
d=list(b=y,f=t)
start=array(c(385,1.84,0.28,3,532),c(1,5))
# LAPLACE
fit=laplace(richardpost,start,d)
fit
modal.sds=sqrt(diag(fit$var))
proposal=list(var=fit$var,scale=0.5)
# METROPOLIS-HASTINGNS
nc=150000
fit2=rwmetrop(richardpost,proposal,start,nc,d)
fit2$accept
lag=15
```

```
ni=1
parameter=matrix(c(0),ncol=5,nrow=((nc/2)/lag))
ns=nc/2+lag
while(ns<=nc){
parameter[ni,]=fit2$par[ns,]
ni=ni+1
ns=ns+lag
}
post.means=apply(parameter,2,mean)
post.sds=apply(parameter,2,sd)
post.median=apply(parameter,2,median)
post.mode=c(fit$mode)
post.skewness=apply(parameter,2,skewness)
post.kurtosis=apply(parameter,2,kurtosis)
cbind(post.mode,post.means,post.median,post.sds, post.skewness, post.kurtosis)
# CRITÉRIO DE CONVERGÊNCIA GEWEKE
geweke.diag(parameter, frac1=0.1, frac2=0.5)
```

D.3 Modelo de Gompertz

```
gomppost=function(theta,data)
{
    y=data$b
    t=data$f
    nbins=length(y)
    a1=c(theta[1])
    c2=c(theta[2])
    k3=c(theta[3])
    tau=c(theta[4])
    logL=0
    G=log(a1)+c2*(exp(-k3*t))
    phi=exp(-k3*t)
    LogPriori=-log(a1)+log(abs(c2))+(1/2)*(log(sum(phi^2))+log(sum((t^2)*(phi^2))))
    logL=(n/2-1)*log(tau)-(tau/2)*sum((y-G)^2)+LogPriori
    return(logL)
```

```
}
Pt=scan("Peso1.txt")
t=scan("Idade1.txt")
y=log(Pt)
x=t
n=length(y)
d=list(b=y,f=t)
start=array(c(377.9,-9.15,0.33,500),c(1,4))
# LAPLACE
fit=laplace(gomppost,start,d)
fit
modal.sds=sqrt(diag(fit$var))
proposal=list(var=fit$var,scale=1)
fit$mean
# METROPOLIS-HASTINGNS
nc=300000
fit2=rwmetrop(gomppost,proposal,start,nc,d)
fit2$accept
lag=15
ni=1
parameter=matrix(c(0),ncol=4,nrow=((nc/2)/lag))
ns=nc/2+lag
while(ns<=nc){</pre>
parameter[ni,]=fit2$par[ns,]
ni=ni+1
ns=ns+lag
}
post.means=apply(parameter,2,mean)
post.sds=apply(parameter,2,sd)
post.median=apply(parameter,2,median)
post.mode=c(fit$mode)
post.skewness=apply(parameter,2,skewness)
post.kurtosis=apply(parameter,2,kurtosis)
cbind(post.mode,post.means,post.median,post.sds, post.skewness, post.kurtosis)
# CRITÉRIO DE CONVERGÊNCIA GEWEKE
geweke.diag(parameter, frac1=0.1, frac2=0.5)
```

D.4 Modelo Logístico

```
logispost=function(theta,data)
{
y=data$b
t=data$f
nbins=length(y)
a1=c(theta[1])
k3=c(theta[2])
m4=c(theta[3])
tau=c(theta[4])
logL=0
L=log(a1)-m4*log(1+exp(-k3*t))
phi=exp(-k3*t)/(1+exp(-k3*t))
LogPriori=-log(a1)+log(m4)+(1/2)*(log(sum((t^2)*phi))+log(sum((log(1+exp(-k3*t)))^2
logL=(n/2-1)*log(tau)-(tau/2)*sum((y-L)*(y-L)) +LogPriori
return(logL)
}
Pt=scan("Peso1.txt")
t=scan("Idade1.txt")
y=log(Pt)
x=t
n=length(y)
d=list(b=y,f=t)
start=array(c(378,0.34,10,580),c(1,4))
# LAPLACE
fit=laplace(logispost,start,d)
fit
modal.sds=sqrt(diag(fit$var))
proposal=list(var=fit$var,scale=0.5)
# METROPOLIS-HASTINGNS
nc=150000
fit2=rwmetrop(logispost,proposal,start,nc,d)
fit2$accept
lag=15
ni=1
```

```
parameter=matrix(c(0),ncol=4,nrow=((nc/2)/lag))
ns=nc/2+lag
while(ns<=nc){
parameter[ni,]=fit2$par[ns,]
ni=ni+1
ns=ns+lag
}
post.means=apply(parameter,2,mean)
post.sds=apply(parameter,2,sd)
post.median=apply(parameter,2,median)
post.mode=c(fit$mode)
post.skewness=apply(parameter,2,skewness)
post.kurtosis=apply(parameter,2,kurtosis)
cbind(post.mode,post.means,post.median,post.sds, post.skewness, post.kurtosis)
# CRITÉRIO DE CONVERGÊNCIA GEWEKE
geweke.diag(parameter, frac1=0.1, frac2=0.5)
```

D.5 Modelo Von Bertalanffy

```
vonpost=function(theta,data)
{
y=data$b
t=data$f
nbins=length(y)
a1=c(theta[1])
c2=c(theta[2])
k3=c(theta[3])
tau=c(theta[4])
logL=0
V = \log(a1) + 3 \cdot \log(1 - c2 \cdot \exp(-k3 \cdot t))
phi=exp(-k3*t)/(1-c2*exp(-k3*t))
LogPriori=-log(a1)+log(c2)+(1/2)*(log(sum(phi^2))+log(sum(t*(phi^2))))
logL=(n/2-1)*log(tau)-(tau/2)*sum((y-V)^2)+LogPriori
return(logL)
}
```

```
Pt=scan("Peso1.txt")
t=scan("Idade1.txt")
y=log(Pt)
x=t
n=length(y)
d=list(b=y,f=t)
start=array(c(379.8,2.25,0.31,300),c(1,4))
# LAPLACE
fit=laplace (vonpost,start,d)
fit
modal.sds=sqrt(diag(fit$var))
proposal=list(var=fit$var,scale=1)
# METROPOLIS-HASTINGNS
nc=150000
fit2=rwmetrop(vonpost,proposal,start,nc,d)
fit2$accept
lag=15
ni=1
parameter=matrix(c(0),ncol=4,nrow=((nc/2)/lag))
ns=nc/2+lag
while(ns<=nc){</pre>
parameter[ni,]=fit2$par[ns,]
ni=ni+1
ns=ns+lag
}
post.means=apply(parameter,2,mean)
post.sds=apply(parameter,2,sd)
post.median=apply(parameter,2,median)
post.mode=c(fit$mode)
post.skewness=apply(parameter,2,skewness)
post.kurtosis=apply(parameter,2,kurtosis)
cbind(post.mode,post.means,post.median,post.sds, post.skewness, post.kurtosis)
# CRITÉRIO DE CONVERGÊNCIA GEWEKE
geweke.diag(parameter, frac1=0.1, frac2=0.5)
par(mfrow=c(2,2))
```

D.6 Seleção do modelo

```
par_B1=scan("parameter_brody.txt")
par_R1=scan("parameter_richard.txt")
par_G1=scan("parameter_gompertz.txt")
par_L1=scan("parameter_logistico.txt")
par_V1=scan("parameter_betalanffy.txt")
```

```
par_B=matrix(c(par_B1),ncol=4,byrow = T)
par_R=matrix(c(par_R1),ncol=5,byrow = T)
par_G=matrix(c(par_G1),ncol=4,byrow = T)
par_L=matrix(c(par_L1),ncol=4,byrow = T)
par_V=matrix(c(par_V1),ncol=4,byrow = T)
Pt=scan("Peso1.txt")
t=scan("Idade1.txt")
y=log(Pt)
x=t
n=length(y)
nc=nrow(par_B)
B=c()
R=c()
G=c()
L=c()
V=c()
prod_cpo=c()
logL_bay=c()
logL=matrix(c(0),nrow=nc, ncol=5)
cpo=matrix(c(0),nrow=5, ncol=n)
h_ch=matrix(c(0),nrow=5, ncol=n)
theta=matrix(c(0),nrow=1, ncol=4)
thetaR=matrix(c(0),nrow=1, ncol=5)
for(s in 1:5){
     cpo_mod=matrix(c(0),nrow=nc, ncol=n)
     h_mod=matrix(c(0),nrow=nc, ncol=n)
     tau_mod=matrix(c(0),nrow=nc, ncol=n)
     for(i in 1:nc){
```
```
if (s==1){
a1=par_B[i,1]
c2=par_B[i,2]
k3=par_B[i,3]
            tau=par_B[i,4]
B=\log(a1)+\log(1-c2*\exp(-k3*t))
            h_mod[i,]=B
            tau mod[i]=tau
logL[i,s]=(n/2)*log(tau)-(tau/2)*sum((y-B)*(y-B))
            theta=array(c(a1,c2,k3,tau),c(1,4))
            # Posteriori
              for(k in 1:n){
                   d=list(b=y[k],f=t[k])
                   cpo_mod[i,k]=brodypost(theta,d)
               }
}
if(s==2){
a1=par_R[i,1]
c2=par_R[i,2]
k3=par_R[i,3]
m4=par_R[i,4]
            tau=par_R[i,5]
R = \log(a1) + m4 * \log(1 - c2 * exp(-k3 * t))
            h_mod[i,]=R
            tau_mod[i]=tau
logL[i,s]=(n/2)*log(tau)-(tau/2)*sum((y-R)*(y-R))
             thetaR=array(c(a1,c2,k3,m4,tau),c(1,5))
            # Posteriori
              for(k in 1:n){
                   d=list(b=y[k],f=t[k])
                   cpo_mod[i,k]=richardpost(thetaR,d)
               }
}
if(s==3){
a1=par_G[i,1]
c2=par_G[i,2]
```

```
k3=par_G[i,3]
      tau=par_G[i,4]
  G=\log(a1)+c2*(exp(-k3*t))
            h_mod[i,]=G
            tau_mod[i]=tau
logL[i,s]=(n/2)*log(tau)-(tau/2)*sum((y-G)*(y-G))
            theta=array(c(a1,c2,k3,tau),c(1,4))
            # Posteriori
             for(k in 1:n){
                  d=list(b=y[k],f=t[k])
                  cpo_mod[i,k]=gompertzpost(theta,d)
              }
}
if(s==4){
a1=par_L[i,1]
      k3=par_L[i,2]
m4=par_L[i,3]
            tau=par_L[i,4]
L=log(a1)-m4*log(1+exp(-k3*t))
            h_mod[i,]=L
            tau_mod[i]=tau
logL[i,s]=(n/2)*log(tau)-(tau/2)*sum((y-L)*(y-L))
            theta=array(c(a1,k3,m4,tau),c(1,4))
            # Posteriori
             for(k in 1:n){
                  d=list(b=y[k],f=t[k])
                  cpo_mod[i,k]=logisticopost(theta,d)
             }
}
if(s==5){
a1=par_V[i,1]
c2=par_V[i,2]
k3=par_V[i,3]
            tau=par_V[i,4]
  V=log(a1)+3*log(1-c2*exp(-k3*t))
            h_mod[i,]=V
```

```
tau_mod[i]=tau
logL[i,s]=(n/2)*log(tau)-(tau/2)*sum((y-V)*(y-V))
            theta=array(c(a1,c2,k3,tau),c(1,4))
            # Posteriori
             for(k in 1:n){
                  d=list(b=y[k],f=t[k])
                  cpo_mod[i,k]=vonpost(theta,d)
             }
}
}
      for(k in 1:n){
          cpo[s,k]=mean(cpo_mod[,k])
          h_ch[s,k] = mean(h_mod[,k])
      }
      prod_cpo[s]=prod(exp(cpo[s,]))
      tau_ch=mean(tau_mod)
      logL_bay[s]=(n/2)*log(tau_ch)-(tau_ch/2)*sum((y-h_ch)^2)
}
p=3
AIC=c(rep(0,5))
BIC=c(rep(0,5))
DIC=c(rep(0,5))
for(s in 1:5){
if (s==2) p=4
AIC[s]=mean(logL[,s])-0.5*p
BIC[s]=mean(logL[,s])-0.5*p*log(n)
      D_ch=-2*logL_bay[s]
      D_bar=-2*mean(logL[,s])
      pd=D_bar-D_ch;
      DIC[s] = D_ch+2*pd;
}
cbind(AIC,BIC,prod_cpo,DIC)
```