

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ  
CENTRO DE CIÊNCIAS AGRÁRIAS

APLICAÇÃO DE PROCEDIMENTOS BAYESIANOS  
PARA A ANÁLISE DE DADOS EXPERIMENTAIS  
NA PRODUÇÃO ANIMAL

Autor: Osvaldo Martins de Souza  
Orientador: Prof. Dr. Carlos Antonio Lopes de Oliveira

MARINGÁ  
Estado do Paraná  
julho – 2014

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ  
CENTRO DE CIÊNCIAS AGRÁRIAS

APLICAÇÃO DE PROCEDIMENTOS BAYESIANOS  
PARA A ANÁLISE DE DADOS EXPERIMENTAIS  
NA PRODUÇÃO ANIMAL

Autor: Osvaldo Martins de Souza  
Orientador: Prof. Dr. Carlos Antonio Lopes de Oliveira

Tese apresentada como parte das exigências para obtenção do título de DOUTOR EM ZOOTECNIA, no programa de Pós-graduação em Zootecnia da Universidade Estadual de Maringá – Área de concentração: Produção Animal.

MARINGÁ  
Estado do Paraná  
julho – 2014

## Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

S729a Souza, Osvaldo Martins de  
Aplicação de procedimentos bayesianos para a  
análise de dados experimentais na produção animal /  
Osvaldo Martins de Souza. - Maringá, 2014.  
52 f.:figs., tabs.

Orientador Prof. Dr. Carlos Antonio Lopes de Oliveira

Tese (doutorado)- Universidade Estadual de  
Maringá, Centro de Ciências Agrárias, Departamento  
de Zootecnia, Programa de Pós-Graduação em  
Zootecnia, 2014.

1. Teoria bayesianos - Produção animal 2.  
Produção animal - Análise de dados experimentais. 3.  
Análise de dados - Bayesianos. I. Oliveira, Carlos  
Antonio Lopes, orient. II. Rossi, Robson Marcelo,  
coorient. III. Universidade Estadual de Maringá.  
Centro de Ciências Agrárias. Departamento de  
Zootecnia. Programa de Pós-Graduação em Zootecnia.  
IV. Título

CDD 21.ed. 519. 542

“Neste mundo não existe nenhuma tarefa impossível, se existe persistência”

*(Provérbio Chinês).*

Aos meus pais, Izaías Martins de Souza (*in memoriam*) e Durvalina Raqueto de Souza que, sem dúvida, foram o início de toda a minha história.

Aos meus irmãos, Roberto Martins de Souza, Cirlei Martins de Souza e Jamir Martins de Souza, pelo estímulo.

Aos familiares da minha esposa, que se tornaram “meus”, por todo apoio e incentivo.

À minha filha, Paula Martins Novaes, que me ensinou amar incondicionalmente.

Ao meu filho, Arthur Martins Novaes, o meu “P.O.” zinho (pura origem diminutivo), que me fez acreditar nas “probabilidades” por mínimas que sejam.

À minha esposa, Lucilaine da Costa Novaes, companheira com quem sempre pude dividir os momentos de sucesso e dificuldades.

DEDICO...

## AGRADECIMENTOS

Se possível, escreveria muitas páginas de agradecimentos. Porém, resumindo o trabalho e economizando impressão vou fazer uma síntese, e peço desculpas, se alguém especial não foi aqui citado.

Primeiramente, ao reitor da Unemat (Universidade do Estado do Mato Grosso), professor MS. Adriano Aparecido Silva, que sempre demonstrou que o professor tem importante papel dentro da instituição. Valorizando isso, empenhou-se em investir na qualificação dos profissionais. Mesmo com todas as dificuldades previstas, não se intimidou e oportunizou esse projeto. Fica aqui o meu sincero agradecimento.

Ao Sr. Francisco Tarquinio Daltro, Chico Daltro, Secretário de Estado de Ciência e Tecnologia de Mato Grosso. Atualmente, vice-governador do Estado de Mato Grosso, que viabilizou junto a Fapemat (Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Mato Grosso) para qual também estendo os meus agradecimentos, o projeto Dinter (Doutorado Interinstitucional).

À UEM (Universidade Estadual de Maringá), pela recepção oferecida a mim e meus colegas também inseridos neste programa. Por ceder toda a estrutura para execução deste trabalho, tanto física, com salas e laboratórios, como seus competentes profissionais - professores e servidores.

Aos orientadores, professores em áreas distintas que ajudaram seus orientados a desenvolver suas pesquisas.

Em especial, ao professor Dr. Carlos Antonio Lopes da Silva, não apenas por ter me direcionado nesse trabalho como meu orientador com muita ética e profissionalismo, mas também, por se tornar um honroso amigo. Obrigado pelo espaço cedido na sua sala, que uma vez concluído o trabalho, podemos lhe confessar que batizamos de “salinha do castigo”.

Ao meu professor e amigo, Elias Nunes Martins, que tanto contribuiu para a magnitude deste projeto.

Ao meu co-orientador, professor Dr. Robson Marcelo Rossi, que não mediu esforços em estar sempre colaborando, tanto nas análises estatísticas, quanto na indicação de material para leitura.

Aos colegas de Dinter, com os quais apliquei muita estatística e sem dúvida, compartilhamos conhecimentos.

Aos coordenadores do Dinter, professor Dr. Luiz Juliano Valério Geron (Unemat, Universidade Estadual de Mato Grosso), professor Dr. Elias Nunes Martins e professora Dr<sup>a</sup>. Eliane Gasparino (UEM, Universidade Estadual de Maringá) que administraram o projeto Dinter desde a sua inserção ao PPZ (Programa de Pós-graduação em Zootecnia) da UEM, assim como a sua execução e conclusão.

À “Família Unematiana”. A todos os colegas de trabalho, a toda “minha equipe”, que na minha ausência assumiram responsabilidades extras, cooperando com o desenvolvimento e realização das minhas funções nesta instituição.

Não poderia concluir, sem agradecer a cada aluno do Campus Universitário de Pontes e Lacerda-MT, em especial aos acadêmicos do curso de Zootecnia, que neste período, com o afastamento dos professores efetivos, passaram por diversas modificações e adaptações. Espero sinceramente, com esse título poder contribuir, ainda mais, para a sua formação.

## BIOGRAFIA

OSVALDO MARTINS DE SOUZA, filho de Izaías Martins de Souza (*in memoriam*) e Durvalina Raqueto de Souza, nasceu na cidade de Três Fronteiras, no Estado de São Paulo, em 12 de julho de 1965. Pai de três filhos, André Martins de Souza, Paula Martins Novaes e Arthur Martins Novaes.

Em março de 1984, iniciou o Curso de graduação em Ciências Física e Biológica. Concluiu no ano 1985 na Faculdade Urubupungá, em Pereira Barreto, São Paulo. Recebeu o título de Licenciatura Curta em Ciências Física e Biológica.

De 1986 a 1994, deu início a sua atividade profissional como professor, na cidade de Ribas do Rio Pardo, no Estado de Mato Grosso do Sul, onde ministrou as disciplinas de Ciências e Matemática.

Passou a residir na cidade de Pontes e Lacerda, no Estado de Mato Grosso, em agosto de 1994. Nesta, dando sequência ao exercício de sua profissão, de 1995 a 2004 ministrou aulas em escolas estaduais e privadas.

Na cidade de Cáceres, no Estado Mato Grosso, no ano de 1999, ingressou no curso de Plenificação em Matemática pela Unemat, Universidade Estadual de Mato Grosso. Concluiu no ano de 2000, recebendo o título de Licenciatura Plena.

No ano de 2002, foi contratado pela Unemat, para ministrar as disciplinas de Matemática e Estatística no curso de graduação em Zootecnia no Campus Universitário de Pontes e Lacerda. Assim, deu início a sua carreira como professor da educação superior.

No ano de 2004 a 2005 realizou pela UFLA, Universidade Federal de Lavras, na cidade de Lavras, no Estado de Minas Gerais a pós-graduação lato-sensu, em Matemática e Estatística. Recebeu o título de Especialista em Matemática e Estatística.



No ano de 2005 a 2006 realizou também na UFLA, a pós-graduação *Stricto-sensu*, em Estatística Experimental. Recebeu o título de Mestre em Estatística.

Em agosto de 2006, foi aprovado no concurso público estadual, tomou posse do cargo de professor da educação superior, assumindo a cadeira de estatística na condição de professor efetivo da Unemat, Universidade Estadual de Mato Grosso, no Campus de Pontes e Lacerda.

No período de 2008 a 2009, foi Coordenador do Departamento do Curso de Zootecnia.

Em agosto de 2010, ingressou no curso de Doutorado em Zootecnia na área de concentração em Produção Animal, na UEM, Universidade Estadual de Maringá, na cidade de Maringá, no Estado do Paraná.

No presente momento, é Diretor de Unidade Regionalizada Político, Pedagógico e Financeiro da Unemat no Campus de Pontes e Lacerda, Mato Grosso, desde 2012, quando eleito para atuar nessa função até o ano de 2015.

Teve seu exame de qualificação em junho de 2014 e em julho 2014 submeteu sua tese à arguição de uma banca examinadora, para a obtenção do título de Doutor em Zootecnia.

## ÍNDICE

	Página
LISTA DE TABELAS .....	x
LISTA DE FIGURAS .....	xii
RESUMO .....	xiii
ABSTRACT .....	xv
I – INTRODUÇÃO GERAL .....	1
1.1 Metodologia frequentista .....	2
1.1.1 Método dos mínimos quadrados .....	3
1.1.2 Estimador de mínimos quadrados .....	5
1.1.3 O método de máxima verossimilhança.....	6
1.1.4 Estimador de máxima verossimilhança .....	9
1.2 Metodologia Bayesiana .....	11
1.2.1 Amostrador de Gibbs .....	14
1.2.2 Inferência Bayesiana .....	16
Referências .....	18
II– OBJETIVOS .....	20
2.1 Objetivo geral .....	20
2.2 Objetivos específicos .....	20
III –ESTUDO DO COMPORTAMENTO DO PH E N-NH <sub>3</sub> EM BOVINOS:	
UMA ALTERNATIVA POR MEIO DA ABORDAGEM BAYESIANA ....	21
Resumo .....	21
Abstract .....	21
Introdução .....	21

Material e Métodos .....	22
Resultados e Discussão .....	24
Conclusões .....	31
Referências .....	32
Informação complementar .....	33
<b>IV –TESTE DE HIPÓTESE ACERCA DA DIFERENÇA ENTRE UMA MÉDIA E PREDIÇÕES DE UMA EQUAÇÃO DE REGRESSÃO EM DADOS DE COELHOS, AJUSTADO POR ANÁLISE BAYESIANA ....</b>	<b>34</b>
Resumo .....	34
Abstract .....	34
1. Introdução .....	35
2. Material e Métodos .....	35
3. Resultados e Discussão .....	39
3.1. Simulação I: Considerando a média de testemunha em 1,6 .....	39
3.2. Simulação II: Considerando a média de testemunha 1,7 .....	41
3.3. Aplicação .....	43
4. Conclusão .....	47
Referências .....	48
Informação complementar .....	49

## LISTA DE TABELAS

		Página
III – ESTUDO DO COMPORTAMENTO DO pH E N-NH <sub>3</sub> EM BOVINOS: UMA ALTERNATIVA POR MEIO DA ABORDAGEM BAYESIANA		
Tabela 1	Médias de pH e concentração de nitrogênio amoniacal (N-NH <sub>3</sub> ) no líquido ruminal de vacas leiteiras, recebendo dietas com a adição ou não de produtos à base de própolis (LLOS). Procedimento frequentista .....	24
Tabela 2	Estimativas para os parâmetros da regressão polinomial do pH e do N-NH <sub>3</sub> em função do tempo (h) após a alimentação, obtidas pelo método de mínimos quadrados .....	25
Tabela 3	Equações de regressão ajustadas para os valores de pH no líquido ruminal em função do tempo (h) após a alimentação e o valor mínimo do pH e respectivo tempo (h), por tratamento – procedimento frequentista .....	26
Tabela 4	Equações de regressão ajustadas para os valores de N-NH <sub>3</sub> no líquido ruminal em função do tempo (h) após a alimentação e seu valor máximo do N-NH <sub>3</sub> e respectivo tempo (h), por tratamento – procedimento frequentista .....	26
Tabela 5	Estimativas para os parâmetros da regressão polinomial do pH e do N-NH <sub>3</sub> em função do tempo (h) após a alimentação, obtidas pelo método Bayesiano .....	28
Tabela 6	Equações de regressão ajustadas para os valores de pH no líquido ruminal em função do tempo (h) após a alimentação, e seu valor mínimo do pH e respectivo tempo (hs), por tratamento – procedimento Bayesiano .....	29
Tabela 7	Equações de regressão ajustadas para os valores de N-NH <sub>3</sub> no líquido ruminal em função do tempo (h) após a alimentação e seu valor máximo do N-NH <sub>3</sub> e respectivo tempo (hs), por tratamento – procedimento Bayesiano .....	30

Tabela 8	Estimativas Bayesianas do ponto de mínimo para o tempo (h) e o pH e os respectivos contrastes entre os tratamentos .....	30
Tabela 9	Estimativas Bayesianas do ponto de mínimo para o tempo (h) e de máximo para $\hat{N} - \hat{NH}_3$ e os respectivos contrastes entre os tratamentos .....	31
IV – TESTE DE HIPÓTESE ACERCA DA DIFERENÇA ENTRE UMA MÉDIA E PREDIÇÕES DE UMA EQUAÇÃO DE REGRESSÃO EM DADOS DE COELHOS, AJUSTADO POR ANÁLISE BAYESIANA		
Tabela 1	Estimativas frequentistas para os parâmetros da regressão .....	39
Tabela 2	Estimativa para os parâmetros de interesse considerados no modelo Bayesiano - Simulação I .....	41
Tabela 3	Estimativa para os parâmetros de interesse considerados no modelo Bayesiano - Simulação II .....	42
Tabela 4	Análise de variância frequentista de acordo com a inclusão de níveis crescente de bagaço de uva na ração .....	43
Tabela 5	Estimativas Bayesianas para os parâmetros de interesse .....	45

## LISTA DE FIGURAS

	Página
<p>III – ESTUDO DO COMPORTAMENTO DO PH E N-NH<sub>3</sub> EM BOVINOS:            UMA ALTERNATIVA POR MEIO DA ABORDAGEM BAYESIANA</p>	
<p>Figura 1 Curvas ajustadas – estimativas frequentistas do pH e N-NH<sub>3</sub>, respectivamente, (a) e (b), no líquido ruminal de vacas leiteiras, recebendo dietas com a adição ou não de produtos à base de própolis (LLOS) .....</p>	27
<p>Figura 2 Curvas ajustadas – estimativas Bayesiana do pH e N-NH<sub>3</sub>, respectivamente, (a) e (b), no líquido ruminal de vacas leiteiras recebendo dietas com a adição ou não de produtos à base de própolis (LLOS) .....</p>	29
<p>IV – TESTE DE HIPÓTESE ACERCA DA DIFERENÇA ENTRE UMA MÉDIA E PREDIÇÕES DE UMA EQUAÇÃO DE REGRESSÃO EM DADOS DE COELHOS, AJUSTADO POR ANÁLISE BAYESIANA</p>	
<p>Figura 1 Equação ajustada para definir o ponto ótimo e sua respectiva imagem, pelo qual será testada com a média do testemunha (simulação I) .....</p>	40
<p>Figura 2 Equação ajustada para definir o ponto ótimo e sua respectiva imagem, pelo qual será testada com a média do testemunha (simulação I) .....</p>	42
<p>Figura 3 Equação ajustada para definir o ponto ótimo e sua respectiva imagem, pelo qual será testada com a média do testemunha .....</p>	44
<p>Figura 4 Distribuição das estimativas da variável resposta testemunha, <math>y_0</math>, da distribuição do ponto de máximo da regressão quadrática, <math>y_{max}</math> e da distribuição da diferença <math>\Delta = y_0 - y_{max}</math>, respectivamente, (a), (b) e (c) ...</p>	47

## RESUMO

Experimentos em produção animal produzem, por vezes, conjuntos de dados que não atendem aos pressupostos necessários para a aplicação de análises estatísticas por métodos frequentistas usuais. Uma forma alternativa de se executar a análise desses dados consiste no uso de procedimentos Bayesianos. Neste trabalho são apresentados procedimentos frequentistas e Bayesianos aplicados a conjuntos de dados originados em experimento conduzido em quadrado latino, com medidas repetidas nas unidades experimentais, e em experimento composto por um tratamento testemunha e tratamentos formados por níveis crescentes de inclusão de insumos alimentares. No primeiro caso são analisados dados provenientes de um ensaio de alimentação com ruminantes em planejamento quadrado latino, em que foram feitas mensurações de pH e teor de N-NH<sub>3</sub>, no líquido ruminal, repetidamente após a alimentação, em cada animal quando recebe cada um dos tratamentos, de forma a permitir o estudo da cinética ruminal. Na abordagem frequentista, foram ajustadas equações para descrever o comportamento do de pH e teor de N-NH<sub>3</sub>, em cada tratamento, sendo obtidas estimativas de pontos de mínimo para pH e de máximo para N-NH<sub>3</sub> e medidas de delineamentos, cujas variáveis respostas são medidas no tempo são muito comuns nas diversas áreas do conhecimento, sendo o estudo da cinética ruminal, em termos de pH e teor de N-NH<sub>3</sub>, um desses casos. Geralmente, este estudo utiliza o delineamento experimental em quadrado latino e medidas sequenciais do pH e do teor de N-NH<sub>3</sub> ruminal são feitas em cada animal submetido a um determinado tratamento, em um determinado período. Esse procedimento produz um conjunto de dados que não atendem aos pressupostos necessários para a aplicação de análises estatísticas por métodos frequentistas usuais. Uma forma alternativa de se executar a análise desses

dados consiste no uso de procedimentos Bayesianos por serem mais flexíveis na modelagem. Assim, o objetivo desse estudo foi utilizar ambas as abordagens para analisar os dados de pH e N-NH<sub>3</sub> coletados no rúmen de vacas Holandesas, observadas na Fazenda Experimental Iguatemi-FEI. Para o procedimento Bayesiano utilizaram-se como valores iniciais para os coeficientes de regressão, estimativas próximas às frequentistas e por meio da obtenção das distribuições marginais *a posteriori* dos parâmetros; observou-se que tanto para os dados de pH quanto N-NH<sub>3</sub> que os coeficientes do modelo de regressão obtidos pelo método Bayesiano foram significativos, o que não foi observado com o método frequentista. Além disso, a abordagem Bayesiana permitiu inferências ligadas diretamente ao conceito de amostragem dos parâmetros de interesse, permitindo comparações estatísticas sobre funções não lineares dos parâmetros estimados para os modelos envolvidos na análise.

**Palavras-chave:** amostrador de Gibbs, dados correlacionados, inferência estatística, mínimos quadrados, modelos lineares, verossimilhança



## ABSTRACT

For the application of statistical analysis by standard frequentist methods. An alternative way to analyze such data is the use of Bayesian procedures. This study presents frequentist and Bayesian procedures applied to data sets from an experiment in Latin square with repeated measures on the experimental units, and from an experiment made up of a control treatment and treatments formed by increasing levels of dietary inputs. In the first case, we examined data from a Latin square feeding trial with ruminants, which repeatedly measured pH and content of N-NH<sub>3</sub> in rumen fluid, after feeding, in each animal, at each treatment, in order to enable the study of ruminal kinetics. In the frequentist approach, equations were fitted to describe the behavior of pH and N-NH<sub>3</sub> content in each treatment, and we obtained estimates of minimum point of pH and maximum point of N-NH<sub>3</sub>, as well as the elapsed times for achieving them. However, the methodology of analysis does not allow the comparison of these estimates. In the Bayesian approach, we obtained estimates of these parameters and their respective a posteriori distributions, allowing for inferences about the effects of the treatments on these parameters. In the second case, we analyzed data from a feeding trial with rabbits using a control treatment that consisted of providing a control diet without grape pomace and other treatments consisted of diets with increasing levels of inclusion of grape pomace. In this case, the inference of interest was the comparison of the mean value of the control treatment with the response of the dependent variable at the maximum point of the curve that describes the effect of increasing levels of inclusion. In the frequentist method, the parameters were estimated by the least squares method and the t-test was applied after the establishment of the linear function of the parameters describing the comparison of interest and its variance. In the Bayesian approach, the parameters estimation is made by Gibbs sampling, and evaluation of the linear function

of the parameters describing the comparison of interest is made based on its a posteriori distribution. The estimates obtained in both approaches were similar as well as the result of the evaluation of the comparison of interest was similar. Nevertheless, the Bayesian approach showed that the assumption of the frequentist approach as to the normality of the distributions of parameters and linear function, which describe the comparison, have been violated and that the frequentist estimate of the comparison showed a greater variance. The results of the first case demonstrated that the Bayesian approach allows to make inferences that cannot be made by the frequentist approach, while the results of the second case evidenced that there may be situations in which the frequentist approach may provide misleading results, and, in this case, the Bayesian approach may be the most suitable alternative to perform the analysis.

**Key words:** Gibbs sampler, correlated data, statistical inference, least squares, linear models, likelihood

## I – INTRODUÇÃO GERAL

Frequentemente, os estatísticos e técnicos de áreas afins utilizam modelos lineares com estimação por meio dos métodos de mínimos quadrados, sem definição da distribuição dos dados ou máxima verossimilhança de variáveis a serem analisadas com definição da distribuição dos dados.

Nestes métodos, denominados frequentistas, a inferência acerca dos parâmetros é feita a partir das estimativas e das somas de quadrados dos erros, com base na pressuposição de homogeneidade de variância e normalidade da distribuição dos resíduos (FERREIRA, 2005).

Essas pressuposições, por vezes, não correspondem à realidade dos dados e dos parâmetros, conduzindo às estimativas pouco confiáveis excepcionalmente em amostras pequenas. Em outras situações, a complexidade dos modelos dificulta a inferência.

Uma alternativa ao uso dos métodos supracitados são os métodos Bayesianos. Tais métodos são baseados no Teorema de Bayes, segundo o qual a probabilidade conjunta de dois ou mais eventos pode ser descrita pelo produto de probabilidades condicionais. Nesse contexto, a probabilidade dos parâmetros a serem avaliados, considerando os dados experimentais, dita probabilidade *a posteriori*, é função do produto da probabilidade *a priori* dos parâmetros e da probabilidade dos dados condicionados aos parâmetros. A inferência, então, é feita com base na distribuição *a posteriori* dos parâmetros. Dentre as vantagens é que a inferência acerca da nulidade dos parâmetros ou das diferenças entre parâmetros é feita diretamente sobre as distribuições *a posteriori*, não sendo necessário assumir qualquer pressuposição (PAULINO; TURKMAN; MURTEIRA, 2003).

Adicionalmente, o problema de insuficiência amostral, que nos métodos frequentistas é refletido pela pequena quantidade de graus de liberdade, nos métodos

Bayesianos se reflete diretamente nas distribuições *a posteriori* (KINAS; ANDRADE, 2010). A análise de dados experimentais apresenta com certa frequência os problemas que dificultam a aplicação de métodos frequentista.

Esse trabalho visa apresentar a abordagem Bayesiana como alternativa mais plausível em análise de dados experimentais em Zootecnia.

## 1.1 Metodologia frequentista

É sabido, que as análises de dados, quando submetidas à metodologia frequentista, aplicam-se métodos de mínimos quadrados que é uma técnica de otimização matemática que procura encontrar o melhor ajustamento para um conjunto de dados, tenta minimizar a soma dos quadrados das diferenças entre o valor estimado e os dados.

A análise de variância é a ferramenta usada por essa metodologia para detectar a presença de efeitos dos tratamentos proposto pelo pesquisador. Se a existência de efeitos de tratamentos é detectada, o passo seguinte é a aplicação de testes adequados para identificar diferenças com probabilidade significativa e a aplicação destes testes implica em assumir que determinadas pressuposições são satisfeitas, entre elas a de que os parâmetros a serem testados apresentam distribuição normal. Tais testes, mesmo quando satisfeitas todas as pressuposições para o seu uso, podem incorrer em dois tipos de erros: tipo I e tipo II. O erro tipo I ocorre quando uma hipótese nula é rejeitada, quando a mesma é verdadeira. Para reduzir a ocorrência desse tipo de erro, deve-se diminuir a probabilidade do teste, mas ao reduzir essa probabilidade, automaticamente aumenta-se a probabilidade do erro tipo II, que ocorre quando uma hipótese nula não é rejeitada, quando a mesma na verdade é falsa (FERREIRA, 2005).

Gomes (2000) afirma que a conclusão correta de um teste que não se revelou significativo é apenas de que não se comprovou diferença significativa entre as médias. Tal diferença pode ser nula, mas, quase sempre, é pequena, e não nula, pequena tendo em vista a imprecisão das estimativas, medida pelo erro-padrão da média, cujo cálculo envolve a variância do erro e o tamanho da amostra. Esta medida torna-se uma fonte de dificuldades nos casos em que naturalmente o pesquisador se vê obrigado a trabalhar com pequenas amostras.

### 1.1.1 Método dos mínimos quadrados

O método dos mínimos quadrados é o método de estimação que aparece na maioria das vezes, quando-se aplica a estatística frequentista nas análises de variâncias. Para apresentar o conceito e ilustrar o método, considerar o modelo linear (1) a seguir para cada observação da amostra aleatória  $Y_1, Y_2, \dots, Y_n$ . A observação amostral é modelada como resultante da soma de dois componentes básicos: um componente fixo (constante)  $\mu$  e o outro de natureza aleatória  $e_i$ , (FERREIRA, 2005).

$$Y_i = \mu + e_i \quad (1)$$

em geral, o componente  $e_i$  é suposto normal com média 0 e variância constante  $\sigma^2$  para todo valor de  $i, i = 1, 2, n$ , isto é,  $e_i \sim N(0, \sigma^2)$ .

Pela observação do modelo linear apresentado em (1), verifica-se que  $\mu$  e  $\sigma^2$  são os parâmetros desconhecidos desse modelo, sendo entretanto, que  $\sigma^2$  não é mencionado explicitamente nesse modelo.

O método de estimação de mínimos quadrados baseia-se na minimização da soma de quadrados da variável aleatória denominada erro ou resíduo,  $e_i$ . Assim, isolando-se  $e_i$  no modelo anterior resulta (FERREIRA, 2005):

$$e_i = Y_i - \mu.$$

Tomando-se a soma dos mínimos quadrados (SQM) de  $e_i$  para as  $n$  observações amostrais tem-se:

$$SQM = \sum_{i=1}^n e_i^2 = \sum_{i=1}^n (Y_i - \mu)^2.$$

Para se obter o estimador de mínimos quadrados, é necessário minimizar o valor dessa soma de quadrados (SQM). Para obter esse mínimo, é necessário derivar em relação a cada parâmetro, igualar as derivadas a zero e resolver o sistema formado de equações. Nesse modelo, em que se está exemplificando o método, a soma de quadrados (SQM) só depende de um parâmetro ( $\mu$ ), então,

$$\frac{\partial SQM}{\partial \mu} = -2 \sum_{i=1}^n (Y_i - \mu).$$

Igualando a zero a derivada primeira de  $SQM$  em relação ao parâmetro  $\mu$  tem-se:

$$-2 \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{\mu}) = 0 \Rightarrow - \sum_{i=1}^n Y_i + \sum_{i=1}^n \hat{\mu} = 0$$

$$n\hat{\mu} = \sum_{i=1}^n Y_i \Rightarrow \hat{\mu} = \frac{\sum_{i=1}^n Y_i}{n} = \bar{Y}.$$

A segunda derivada de  $SQM$  em relação a  $\mu$  é:

$$\frac{\partial^2 SQM}{\partial \mu^2} = 2n > 0.$$

Esse resultado indica que  $\hat{\mu} = \bar{Y}$  representa um ponto de mínimo da função  $SQM$ . Consequentemente, o estimador de mínimos quadrados da média  $\mu$  é  $\hat{\mu} = \bar{Y}$ . O estimador de momentos da variância  $\sigma^2$ , não viesado, é (FERREIRA, 2005):

$$\hat{\sigma}^2 = S^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{\mu})^2 \quad (2)$$

em que

$$Y_i \hat{\mu} = \bar{Y},$$

é o preditor de mínimos quadrados de  $Y_i$ . Logo,

$$\hat{\sigma}^2 = S^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2}{n-1}. \quad (3)$$

### 1.1.2 Estimador de mínimos quadrados

O modelo linear

$$y = X\beta + \varepsilon, \quad (4)$$

em que,  $E(\varepsilon) = 0$  e  $E(Y) = X\beta$ , para uma amostra aleatória de tamanho  $n$  toma-se a seguinte forma, de modo, a encontrar uma estimativa para o vetor de parâmetros  $\beta$  em que o somatório dos quadrados das distâncias entre cada ponto observado e seu valor estimado pelo modelo seja mínimo (FERREIRA, 2015). Este cálculo é feito pela minimização da função.

$$\sum_{i=1}^n \hat{\varepsilon}_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2,$$

logo:

$$\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 x_{i1} - \hat{\beta}_2 x_{i2} - \dots - \hat{\beta}_k x_{ik})^2.$$

Vale notar que  $\hat{y}_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_{i1} + \hat{\beta}_2 x_{i2} + \dots + \hat{\beta}_k x_{ik}$ , estima  $E(y_i)$  e não  $y_i$ .

Para obter os estimadores de mínimos quadrados, não é necessário que a equação  $\hat{y}_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_{i1} + \hat{\beta}_2 x_{i2} + \dots + \hat{\beta}_k x_{ik}$  esteja baseado em  $E(y_i)$ . Só precisamos postular um modelo empírico que seja linear nos  $\beta$ 's, que o método dos mínimos quadrados encontrará o “melhor” ajuste para esse modelo (ALVIN; SCHAALJE, 2008)

Para encontrar os valores  $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2, \dots, \hat{\beta}_k$  que minimizam a soma de quadrados dos desvios dos  $n$  valores observados de  $y$  em relação aos valores preditos  $\hat{y}$ , devemos calcular a diferencial de  $\sum_{i=1}^n \hat{\varepsilon}_i^2$  em relação a cada  $\hat{\beta}_j$  e igualar o resultado a zero para produzir  $(k+1)$  equações que podem ser resolvidas simultaneamente para os  $\hat{\beta}_j$ 's. Entretanto, o procedimento pode ser bastante simplificado usando a notação matricial (ALVIN; SCHAALJE, 2008).

Sendo  $y = X\beta + \varepsilon$ , pode-se definir:

$$SQ = \sum_{i=1}^n \varepsilon_i^2 = \varepsilon' \varepsilon,$$

em que

$$SQ = y - X\beta,$$

que é equivalente a

$$\begin{aligned} Q &= (y - X\beta)'(y - X\beta) \\ Q &= y'y - X\beta y' - X' \beta' y + \beta' X' X\beta. \end{aligned}$$

Desenvolvendo-se esta expressão, obtém-se:

$$SQ = y'y - 2X'\beta'y + \beta'X'X\beta.$$

O vetor de derivadas parciais desta função em relação a  $\beta$  é dado por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q}{\partial \beta} &= -2X'y + 2X'X\beta \\ &\quad -X'y + X'X\beta. \end{aligned}$$

Logo, pelo método padrão de minimização de uma função, tem-se que:

$$\hat{\beta} = (X'X)^{-1}X'y, \tag{5}$$

o valor de  $\beta$  que minimiza  $SQ$ .

### 1.1.3 O método de máxima verossimilhança

O método da máxima verossimilhança foi introduzido por R. A. Fisher em 1922. Sua introdução, em muitos aspectos, determinou o começo da teoria estatística moderna. Para apresentar o seu conceito, considerar  $Y_1, Y_2, \dots, Y_n$  uma amostra aleatória



de uma população com densidade  $f(y)$ , determinada pelo vetor de parâmetros  $\theta: [\beta, \sigma^2]$ .

Para uma amostra particular  $Y_1, Y_2, \dots, Y_n$ , o estimador de máxima verossimilhança ( $\hat{\theta}$ ) do parâmetro  $\theta: [\beta, \sigma^2]$  é aquele que maximiza a densidade conjunta de  $Y_1, Y_2, \dots, Y_n$  (ALVIN; SCHAALJE, 2008). Em razão do fato de os valores amostrais  $Y_1, Y_2, \dots, Y_n$  serem independentes é possível definir a densidade conjunta ou função de verossimilhança ( $L$ ) pelo produtório das densidades de cada  $Y_i$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ ) (FERREIRA, 2005). Assim, a função de verossimilhança,  $L$ , é definida:

$$L = f(y_1)f(y_2)f(y_3) \dots f(y_n) = \prod_{i=1}^n f(y_i). \quad (6)$$

O estimador de máxima verossimilhança é aquele que maximiza o valor de  $L$ . Para obter o estimador de máxima verossimilhança ( $\hat{\theta}$ ), basta tomar a primeira derivada de  $L$  em relação ao parâmetro  $\theta$ , igualar a zero e resolver para  $\theta$ . A solução é o estimador de máxima verossimilhança. Nem sempre uma solução explícita existe e métodos numéricos são utilizados para se obterem as estimativas. Quando se tem mais de um parâmetro, tomam-se as derivadas parciais de  $L$  com respeito a cada um deles. Iguala-se cada derivada a 0 e resolve-se o sistema formado, obtendo-se os estimadores de máxima verossimilhança dos parâmetros (ALVIN; SCHAALJE, 2008).

Algumas propriedades matemáticas da função  $L$  garantem a possibilidade de usar a função  $S = \ln(L)$  em seu lugar, uma vez que apresentam o máximo para o mesmo valor de  $\theta$ . Isso é feito para tornar mais fácil a obtenção do máximo, uma vez que o produtório se transforma em somatório. Essa função é denominada de função suporte (FERREIRA, 2005).

A função de verossimilhança da distribuição normal, por exemplo, é dada por:

$$\begin{aligned} L &= \prod_{i=1}^n f(y_i) = \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(y_i-\mu)^2}{2\sigma^2}} \\ &= \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{n/2}} e^{-\left[\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (y_i-\mu)^2\right]}. \end{aligned}$$

Tomando-se o logaritmo de  $L$ :

$$\ln L = -\frac{n}{2} \ln(2\pi) - \frac{n}{2} \ln(\sigma^2) - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (y_i - \mu)^2.$$

Para encontrar o seu máximo, deriva-se  $\ln L$  em relação aos parâmetros  $\mu$  e  $\sigma^2$ , igualam-se as equações resultantes a zero e resolve-se o sistema formado:

$$\frac{\partial \ln L}{\partial \sigma^2} = \frac{-n}{2\sigma^2} + \frac{1}{2(\sigma^2)^2} \sum_{i=1}^n (y_i - \mu)^2 \quad (7)$$

e

$$\frac{\partial \ln L}{\partial \mu} = \frac{1}{\sigma^2} \sum_{i=1}^n (y_i - \mu) \quad (8)$$

Iguala-se a segunda derivada (8) a zero, resolve-se para  $\mu$  e obtém-se:

$$\frac{1}{\sigma^2} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\mu}) = 0$$

$$\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\mu}) = 0$$

$$\sum_{i=1}^n y_i - \sum_{i=1}^n \hat{\mu} = 0$$

$$n\hat{\mu} = \sum_{i=1}^n y_i$$

$$\hat{\mu} = \frac{\sum_{i=1}^n y_i}{n} = \bar{y}. \quad (9)$$

Substitui-se  $\hat{\mu}$  na Equação (7), iguala-se a expressão resultante a zero e obtém-se:

$$-\frac{n}{2\hat{\sigma}^2} + \frac{1}{2(\hat{\sigma}^2)^2} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\mu})^2 = 0 \rightarrow -\frac{n}{2\hat{\sigma}^2} = -\frac{1}{2(\hat{\sigma}^2)^2} \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2$$

$$\frac{2n(\hat{\sigma}^2)^2}{2\hat{\sigma}^2} = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2$$

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}{n} = \frac{(n-1)S^2}{n}. \quad (10)$$

Logo,  $\hat{\mu} = \bar{Y}$  e  $\hat{\sigma}^2 = (n-1)S^2/n$ , são os estimadores de máxima verossimilhança dos parâmetros  $\mu$  e  $\sigma^2$  da distribuição normal, respectivamente (FERREIRA, 2005).

#### 1.1.4 Estimador de máxima verossimilhança

Com a suposição de normalidade, pode-se obter os estimadores de máxima verossimilhança,  $y = X\beta + \varepsilon$ , a função de verossimilhança é a densidade conjunta dos  $Y$ 's, que denotamos por  $L(\beta, \sigma^2)$  e o problema consiste em procurar os valores desconhecidos de  $\beta$  e  $\sigma^2$  que maximizam  $L(\beta, \sigma^2)$  para os  $Y$ 's e  $X$ 's na amostra (ALVIN; SCHAALJE, 2008).

Para calcular o estimador de  $\beta$  é necessário definir a função de verossimilhança para as observações  $y_1, \dots, y_n$ , correspondente às variáveis  $Y_1, \dots, Y_n$ , que é dada por

$$L(\theta) = f(y_1, \dots, y_n; \theta),$$

em que  $f$  é uma densidade de probabilidade conjunta do vetor  $(Y_1, \dots, Y_n)$  e  $\theta$  um vetor de parâmetros  $\theta: [\beta, \sigma^2]$  a ser estimado. Se  $y$  é a variável resposta de um modelo de regressão, em que  $y \sim N(X\beta, \sigma^2 I)$  ou  $\varepsilon \sim N(0, \sigma^2 I)$  sob a hipótese de normalidade,  $cov(Y) = cov(\varepsilon) = \sigma^2 I$  implica que os  $y$ 's ou os ( $\varepsilon$ 's) são independentes, e não correlacionados (ALVIN; SCHAALJE, 2008).

$$L(\theta; y_1, \dots, y_n) = f(y_1; \theta) f(y_2; \theta) \dots f(y_n; \theta) = \prod_{i=1}^n f(y_i; \theta).$$

Para facilitar o cálculo do estimador, é mais conveniente trabalhar com o logaritmo da função  $L$ , obtendo-se:

$$l(\theta; y_1, \dots, y_n) = \log[f(y_1; \theta)] + \log[f(y_2; \theta)] + \dots + \log[f(y_n; \theta)],$$

que é denominado de função de log-verossimilhança. O princípio da verossimilhança, revisto por Alvin e Schaalje (2008), afirma que uma inferência estatística deve ser consistente com a hipótese de que a melhor explicação de um conjunto de dados é fornecida por  $\hat{\theta}$ , um valor de  $\theta$  que maximiza a função de verossimilhança e que os estimadores  $\beta$  e  $\sigma^2$  sob a suposição de normalidade, é que eles são estatísticas suficientes. Intuitivamente, uma estatística é suficiente para um parâmetro se ela sumariza toda a informação na amostra sobre o parâmetro.

No caso de um modelo de regressão, o vetor de parâmetros de interesse é:

$$\theta' = (\beta', \sigma^2),$$

e definido-se  $L$  como função de  $\beta$  e  $\sigma^2$  tem-se:

$$L(\beta, \sigma^2) = \prod_{i=1}^n f_{Y_i}(y_i; \beta, \sigma^2).$$

Como  $y \sim N_n(X\beta, \sigma^2 I)$ , a função de verossimilhança é dada por:

$$L(\beta, \sigma^2) = \left(\frac{1}{2\pi\sigma^2}\right)^{\frac{n}{2}} \exp\left[-\frac{1}{2\sigma^2} (Y - X\beta)' (Y - X\beta)\right].$$

Aplicando-se o logaritmo a esta expressão, tem-se:

$$\log L(\beta, \sigma^2) = l(\beta, \sigma^2) = -\frac{n}{2} \log(2\pi\sigma^2) - \frac{(Y - X\beta)' (Y - X\beta)}{2\sigma^2}. \quad (11)$$

Maximizar  $l(\beta, \sigma^2)$  com  $\sigma^2$  fixo é equivalente a minimizar  $(Y - X\beta)'(Y - X\beta)$ . Então, quando o erro tem distribuição normal, o estimador de  $\beta$  de mínimos quadrados é igual ao estimador de máxima verossimilhança (FERREIRA, 2005).

Encontrar o vetor de parâmetros estimados que maximize a função de log-verossimilhança é equivalente a maximizar a verossimilhança, pois a função logarítmica é injetora. Portanto, para obter este vetor, deriva-se parcialmente a log-verossimilhança em relação a cada parâmetro e iguala-se a zero como já foi descrito anteriormente. Este é o método usual de maximização do cálculo. Como  $\hat{\beta}$  já foi obtido pela análise da log-verossimilhança,  $\hat{\sigma}^2$  é calculado por este procedimento, obtendo-se a sua derivada parcial (KINAS; ANDRADE, 2010).

$$\frac{\partial l}{\partial \sigma^2} = -\frac{n\sigma^2}{2} + \frac{(Y - X\beta)'(Y - X\beta)}{2(\sigma^2)^2}.$$

Igualando-se  $\sigma^2$ , tem-se:

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{(Y - X\hat{\beta})'(Y - X\hat{\beta})}{n}. \quad (12)$$

Além de maximizar a função de log-verossimilhança, a estimativa da variância  $\sigma^2$  do termo de erro  $\varepsilon_i$  é necessária para vários propósitos, podendo ser utilizado como um indicador da variabilidade de  $Y$ . Esta também é usada em várias inferências de interesse para análise de regressão.

## 1.2 Metodologia Bayesiana

Uma das questões mais importantes na ciência estatística é a construção de modelos probabilísticos que representam, ou aproxima o máximo do verdadeiro parâmetro em estudo. A construção de tais modelos é geralmente baseada em argumentos probabilísticos e lógica sobre a natureza e a função de um fenômeno (PAULINO; TURKMAN; MURTEIRA, 2003).

Suponha uma variável  $y = (y_1, y_2, \dots, y_n)$  de tamanho amostral  $n$ , denominada de resposta, que segue uma distribuição probabilística, com densidade de probabilidade ou função  $f(y|\theta)$ , em que  $\theta$  é o vetor de parâmetros. Considere a distribuição

independente e identicamente distribuída (i.i.d.), Assim, é denominado de probabilidade o modelo que contém a informação proveniente de uma amostra observada. Geralmente, os modelos são construídos a fim de avaliar ou interpretar relações casuais entre a variável resposta  $y$  e várias características expressas como variáveis  $X_j$ , em que  $j \in V$ , denominado de covariáveis ou variáveis explanatórias;  $j$  indica um termo da covariável ou uma variável do modelo e  $V$ , o conjunto de todos os termos em consideração (PAULINO; TURKMAN; MURTEIRA, 2003). Em tais casos, as variáveis explanatórias estão ligadas às variáveis respostas por meio de uma função determinística e parte do vetor de parâmetros original é substituída por um conjunto alternativo de parâmetros denotado por  $\beta$ , que geralmente bloqueia o efeito de cada (co) variável em resposta à variável. Por exemplo, em um modelo normal de regressão com  $y \sim N(X\beta, \sigma^2 I)$ , o parâmetro do vetor é dado por  $\theta^T = [\beta^T, \sigma^2]$ .

A estatística Bayesiana difere da estatística frequentista uma vez que todos os parâmetros desconhecidos são considerados como variáveis aleatórias. Por esta razão, a distribuição *a priori* deve ser definida inicialmente, tendo em vista que essa distribuição expressa a informação disponível para o pesquisador antes de quaisquer "dados" estarem envolvidos na análise estatística. O objetivo está no cálculo da distribuição *a posterior*  $\pi(\theta|y)$  ( dos  $\theta$  parâmetros quando os dados observados em  $y$  são fornecidos (KINAS; ANDRADE, 2010).

De acordo com o teorema de Bayes, a distribuição *a posterior* pode ser escrita como:

$$\pi(\theta|y) = \frac{L(\theta|y)\pi(\theta)}{\pi(\theta|y)} \propto L(\theta|y)\pi(\theta). \quad (13)$$

A distribuição *a posteriori* engloba as informações dos dados observados *a priori*, que se expressa pela distribuição de probabilidade  $\pi(\theta)$  e pela função de verossimilhança  $L(\theta|y)$ .

$$L(\theta|y) = \prod_{i=1}^n f(y_i|\theta).$$

A teoria frequentista muitas vezes, é limitada em vários aspectos, tais como aceitação de amostras com distribuição normal e nem sempre isso ocorre, dificuldade em manusear os recursos computacionais, estimativas de máxima verossimilhança são complexas em alguns casos, como, por exemplo, na obtenção de componentes genéticos em melhoramento animal e vegetal, obtenção de estimativas absurdas como, por exemplo, intervalo de confiança infinitos, principalmente nos casos em que o tamanho amostral é insuficiente. Logo, a inferência Bayesiana pode ser uma alternativa ao método frequentista, quando os dados se encontram nas condições acima relatadas. Logo, essa superioridade em relação à frequentista, pois, pode se utilizar de informações prévias a respeito do parâmetro de interesse, fazendo com que as estimativas *a posteriori* sejam mais coerentes com a realidade da variável de interesse. A utilização de distribuições não informativas permite fazer comparações com os resultados da inferência frequentista (ROSSI, 2011).

A obtenção das distribuições marginais por processos analíticos muitas vezes é impossível, assim, a obtenção da distribuição marginal *a posteriori* pode ser obtida por métodos computacionais, tais como o método de amostragem de Gibbs (Gibbs Sampler) pertencente à classe de métodos denominados Monte Carlo em Cadeia de Markov (MCMC), ou até mesmo por métodos sofisticados como o de Metropolis-Hastings (METROPOLIS et al., 1953; HASTINGS, 1970; ROSSI, 2011).

Os estatísticos Bayesianos eram considerados apenas como uma alternativa interessante para a teoria frequentista, em que a principal diferença que este último considera os parâmetros como variáveis aleatórias que são caracterizados por uma distribuição prévia tendo em vista que essa distribuição prévia é combinada com a probabilidade tradicional para obter a distribuição *a posteriori* do parâmetro de interesse em que a inferência estatística é baseada. Embora a ferramenta principal da teoria Bayesiana é a teoria da probabilidade, por muitos anos seus seguidores foram considerados como uma minoria com pensamento contrário aos frequentistas por várias razões (KINAS; ANDRADE, 2010).

A principal objeção dos estatísticos frequentistas foi o ponto de vista subjetivo da abordagem Bayesiana, introduzidas na análise por meio da distribuição *a priori*. No entanto, como a história provou, a principal razão por que a teoria Bayesiana foi incapaz de estabelecer um ponto de apoio como uma abordagem quantitativa bem aceita para análise de dados, foi o entrave envolvido no cálculo da distribuição *a posteriori*. Métodos assintóticos forneceram soluções para problemas específicos, mas não foi

possível a generalização. No início de 1990, dois grupos de estatísticos redescobriram o uso das cadeias de Markov Monte Carlo (MCMC) (GELFAND et al., 1990). Entretanto, o físico estava familiarizado com a metodologia MCMC desde a década de 1950.

Metropolis et al. (1953) desenvolveram um dos primeiros supercomputadores eletrônicos (para aqueles dias) e tinha vindo a testar suas teorias em física usando técnicas de Monte Carlo. A implementação da metodologia MCMC em combinação com a rápida evolução dos computadores fez a nova ferramenta computacional se desenvolver dentro de alguns anos. A estatística Bayesiana, de repente tornou-se moda, abrindo novas portas para pesquisa estatística. Usando MCMC, agora pode-se configurar e estimar modelos complicados que descrevem e resolvem problemas que não se conseguia resolver com métodos tradicionais (ROSSI, 2011).

Na realidade, a difusão da aplicação dos métodos Bayesianos esteve limitada até aos anos 90 pelo fato de a distribuição *a posteriori* em muitas situações práticas ser analiticamente intratável. Nas últimas décadas foi ultrapassado pelo aparecimento de vários métodos numéricos (vide, e.g.) (GELFAND; SMITH, 1990). Como o algoritmo de simulação nos métodos MCMC não é muito complicado e não é restrito a um número pequeno de parâmetros, estes métodos são aplicados correntemente na resolução Bayesiana de muitos problemas práticos, incluindo na simulação de distribuições *a posteriori* para obter as estimativas das quantidades de interesse nos modelos de regressão (SOCIEDADE PORTUGUESA DE ESTATÍSTICA, 2014).

O desenvolvimento da metodologia de MCMC também promoveu a aplicação de efeitos aleatórios e modelos hierárquicos. Ver publicação de Green (1995) sobre saltos reversíveis da cadeia de Markov de Monte Carlo.

Finalmente, os avanços mais recentes em diferentes áreas do conhecimento, surgimento de novas técnicas de obtenção das marginais condicionais (distribuições *a posteriori*) e procedimentos computacionais, inclusive programas específicos e eficientes, deram um novo impulso à teoria Bayesiana.

### *1.2.1 Amostrador de Gibbs*

O problema básico da implementação da análise Bayesiana refere-se à integração numérica (no espaço do parâmetro) da função densidade de probabilidade *a posteriori*. Tal integração, por métodos analíticos, é impossível na prática. Assim, uma alternativa



é utilizar o procedimento de simulação estocástica, denominado amostragem de Gibbs para a viabilização da estimação Bayesiana (SORENSEN, 1996).

O procedimento adotado, de acordo com Gemam e Gemam (1984), consiste em gerar amostras aleatórias das distribuições condicionadas usando o algoritmo MCMC Gibbs Sampler, em que a mesma consiste em aceitar ou rejeitar os elementos da cadeia de modo a construir uma cadeia de Markov diferente que converge para a distribuição que queremos simular. O resultado final da implementação deste algoritmo é uma sucessão de pontos autocorrelacionados com uma dada distribuição. O método de amostragem Gibbs não é mais do que um método de simulação de distribuições multivariadas de natureza bastante complexa, baseado na sua caracterização por meio das distribuições condicionais completas. O algoritmo é bastante simples, existindo já programas computacionais, de utilização bastante amigável, para a sua implementação. No entanto, o não conhecimento da teoria que se encontra por detrás da construção do algoritmo, nomeadamente no que diz respeito às condições em que a caracterização em que se baseia é válida, pode dar origem a erros graves na sua utilização (KINA; ANDRADE, 2010).

Segundo Geman, S., e Geman, D. (1984), o Amostrador de Gibbs é um método de amostragem condicional alternada definido em termos de subvetores de  $\theta$ , com objetivo de gerar distribuições, tanto univariada quanto multivariadas por meio de técnicas de simulação de Monte Carlo.

Suponha que o vetor  $\theta$  possa ser dividido em  $r$  componentes ou subvetores, ou seja,  $\theta = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_r)$ . Cada iteração do Amostrador de Gibbs consiste em simular valores de cada subvetor de  $\theta$ , condicionalmente aos valores de todos os outros subvetores, totalizando  $k$  simulações para cada iteração completa do ciclo (ROSA, 1998).

Assim, para dado valor inicial arbitrário  $(\theta^0 = \theta_1^0, \theta_2^0, \dots, \theta_r^0)$ , inicia-se a primeira iteração do Amostrador de Gibbs simulando-se um novo valor para  $\theta_1, \theta_1^1$ , condicionalmente aos valores  $\theta_2^0, \theta_3^0, \dots, \theta_r^0$ , seguindo-se de um novo valor para  $\theta_2, \theta_2^1$ , condicionalmente a  $\theta_1^1, \theta_3^0, \dots, \theta_r^0$  e assim por diante até a simulação de  $\theta_r^1$ , condicionalmente aos valores de  $\theta_1^1, \theta_2^1, \dots, \theta_{r-1}^1$ , para se completar a primeira iteração do processo. A partir deste novo valor de  $\theta$  simulado, inicia-se uma segunda iteração e assim por diante.

Pode-se demonstrar que, em condições normais, após um grande número de iterações, a sequência de valores gerados pelo Amostrador de Gibbs converge para uma distribuição estacionária igual  $\pi(\theta|y)$ , ou seja, cada valor de  $\theta$  obtido pelo Amostrador de Gibbs após convergência, é um valor simulado da distribuição conjunta de seus elementos (GEMAN, S.; GEMAN, D., 1984).

Suponha que se tenha interesse na distribuição marginal de determinada função dos parâmetros  $\emptyset = g(\theta) = g(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_r)$ . Depois de obtida a convergência do Amostrador de Gibbs, a avaliação de  $g(\cdot)$  para cada valor de  $\theta$  simulado fornece amostras de  $\emptyset$ , as quais podem ser utilizadas para estimação de densidade, utilizando-se, por exemplo, algum método de estimação por meio de seu núcleo (*kernel*).

Esse tipo de aproximação, evidentemente, será tanto melhor quanto maior for o número de amostras utilizadas nos cálculos. Ainda, por se tratar de um processo de Markov, amostras sucessivas são dependentes entre si, e por essa razão a utilização de amostras obtidas pelo descarte de algumas iterações intermediárias, pode também ser recomendada no sentido da obtenção de amostras independentes.

Assim, um processo de Amostragem Gibbs, o número total de iterações com o valor inicial  $\theta^0$  é determinado a partir do número de iterações necessárias para convergência, do número de iterações descartadas entre cada amostra utilizada nos cálculos e do número total de amostras que se deseja para aproximações de Monte Carlo.

### 1.2.2 Inferência Bayesiana

Os métodos de Monte Carlo, via Cadeias de Markov (MCMC), dentre os quais se destaca a Amostragem de Gibbs, podem ser utilizados como ferramenta na análise de dados, propiciando uma inferência Bayesiana, a partir da qual são obtidas as estimativas dos componentes de variância permitindo ainda a incorporação de informações passadas (*a priori*), caso existam, enriquecendo o processo de inferência (FARIA et al., 2007).

Sendo assim, a inferência Bayesiana é baseada em probabilidades subjetivas ou credibilidades *a posteriori* associadas com diferentes valores do parâmetro  $\theta$  e condicionadas pelo particular valor de  $Y$  observado (KINAS; ANDRADE, 2010).

O algoritmo de Metropolis-Hastings é uma forma muito conveniente de obter a amostra simulada de uma distribuição posterior, a partir do uso de uma Cadeia de Markov generalizada para um espaço de estado contínuo (KINAS; ANDRADE, 2010).

Na estatística convencional, exige-se que todo estimador venha acompanhado de uma medida de precisão amostral, o desvio-padrão do estimador. Este desvio que corresponde à raiz quadrada da variância do estimador é frequentemente denominado erro-padrão. Para obter essa medida de precisão é necessário conhecer a distribuição amostral do estimador, o que depende da teoria disponível para o caso. Muitas vezes é necessário recorrer a resultados assintóticos mesmo quando o tamanho da mostra é pequeno. De acordo com (KINAS; ANDRADE, 2010), na análise Bayesiana, para qualquer estimador  $\delta$ , pode se calcular a sua variância posterior e desta forma obter com facilidade uma medida exata da sua precisão, sem necessidade de recorrer a resultados assintóticos. A definição da variância posterior do estimador  $\delta$  é:

$$V_{\delta}(y) = E^{\pi(\theta|y)} [(\theta - \delta(y))^2] = V(\theta|y) + [E^p[\theta|y] - \delta(y)]^2$$

$\pi(\theta|y)$ : distribuição posterior.

Uma alternativa Bayesiana, ao intervalo de confiança (IC) empregado na estatística convencional, é o intervalo de credibilidade (ICr). Embora superficialmente esses dois conceitos pareçam expressar a mesma coisa, na realidade eles têm significados muito diferentes. Na prática, o intervalo de confiança convencional é muitas vezes interpretado equivocadamente como se fosse um intervalo de credibilidade. Ao calcular um intervalo convencional com 95% de confiança, o entendimento é de que, se o experimento pudesse ser perfeitamente repetido inúmeras vezes, aproximadamente 95% dos inúmeros intervalos de confiança calculados, conteriam o parâmetro de interesse, mas desconhecido ( $\theta$ ). Já no caso da abordagem Bayesiana, temos simplesmente que o intervalo de credibilidade de 95% para  $\theta$  é o intervalo delimitado pelos percentis 2,5% e 97,5% da distribuição posterior  $\pi(\theta|y)$  para  $\theta$ , assim o (ICr) é então o intervalo de valores mais provável de  $\theta$ , que soma probabilidade de 0,95.

## Referências

- ALVIN C. R.; SCHAALJE, G. B. *Linear models in statistics*. 2 nd ed. Hoboken: John Wiley & Sons, 2008. p. 679.
- FARIA, C. U.; MAGNABOSCO, C. U.; REYES, A.; LÔBO, R. B.; BEZERRA, L. A. F. Inferência bayesiana e sua aplicação na avaliação genética de bovinos da raça Nelore: revisão bibliográfica. *Ciência Animal Brasileira*, Goiânia, v. 8, p. 75-86, 2007.
- FERREIRA, D. F. *Estatística básica*. Lavras: Ed. da UFLA, 2005. p. 664.
- GELFAND, A. E.; HILLS, S. E.; RACINE-POON, A.; SMITH, A. F. M. Illustration of Bayesian inference in normal data models using Gibbs sampling. *Journal of the American Statistical Association*, New York, v. 85, p. 972-985, 1990.
- GELFAND, A. E.; SMITH, A. F. M. Sampling-based approaches to calculating marginal densities. *Journal of the American Statistical*, New York, 1990.
- GEMAN, S.; GEMAN, D. Stochastic Relaxation, Gibbs Distributions and the Bayesian Restoration of Images. *IEEE: Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, New York, v. 6, p. 721-741, 1984.
- GOMES, F. P. *Curso de estatística experimental*. 14. ed. Piracicaba: ESALQ/USP, 2000. p. 476.
- HASTINGS, W. K. Monte Carlo sampling methods using Markov Chain and their applications. *Biometrika*, London, v. 57, p. 97-109, 1970.
- KINAS, P. G.; ANDRADE, H. A. *Introdução, à análise Bayesiana (com r)*. Porto Alegre: MaisQnada, 2010. p. 258.
- METROPOLIS, N.; ROSENBLUTH, A. W.; ROSENBLUTH, M. N.; TELLER, A. H.; TELLE, E. Equation of state calculations by fast computing machines. *Physics*, Bristol, v. 21, p. 1087-1092, 1953.
- PAULINO, C. D.; TURKMAN, M. A. A.; MURTEIRA, B. *Estatística Bayesiana*. Lisboa: Fundação Calouste Gulbenkian, 2003. p. 446.

ROSA, G. J. M. *Análise Bayesiana de modelos lineares mistos robustos via amostrador de Gibbs*. 1998. Tese (Doutorado em Agronomia)–Escola Superior de Agricultura Luiz de Queiroz, Piracicaba, 1998. 57 f.

ROSSI, R. M. *Introdução aos métodos Bayesianas na análise de dados zootécnicos com uso do WinBUGS e R*. Maringa: Eduem, 2011. 191p.

SOCIEDADE PORTUGUESA DE ESTATÍSTICA. *Escola Bayesiana em Portugal*. Avieiro. 2014. Disponível em: <<http://www.spestatistica.ptf>>. Acesso em: 29 jun. 2014.

SORENSEN, D. A. *Gibbs Sampling in Quantitative Genetics*. Denmark: Danish Institute of Animal Science, Department of Breeding and Genetics. 1996. 186p. (Intern. Report, 82).

## II – OBJETIVOS

### 2.1 Objetivo geral

Apresentar métodos frequentista e Bayesiano em aplicações de análises de dados experimentais em produção animal.

### 2.2 Objetivos específicos

- Apresentar procedimentos frequentista e Bayesiano aplicados à análise de experimentos com delineamento em quadrado latino, com medidas repetidas na unidade experimental;

- Apresentar procedimentos frequentista e Bayesiano aplicados à análise de experimentos, envolvendo um tratamento testemunha e tratamentos formados por níveis crescentes de inclusão de insumos alimentares.

### **III – Estudo do comportamento do pH e N-NH<sub>3</sub> em bovinos: uma alternativa por meio da abordagem Bayesiana**

#### **Bayesian analysis as alternative to frequentist analysis for studying the behavior of pH and ruminal N-NH<sub>3</sub>**

##### **Resumo**

O objetivo desse estudo é apresentar uma abordagem Bayesiana de análise de dados experimentais em Zootecnia, como alternativa à análise frequentista para dados correlacionados de pH e N-NH<sub>3</sub> coletados no rúmen de vacas Holandesa. Observou-se que tanto para os dados de pH quanto N-NH<sub>3</sub> as estimativas *a posteriori* dos coeficientes dos modelos de regressão foram significativos, o que não foi observado pelo método dos mínimos quadrados. Desta forma, a abordagem Bayesiana permitiu inferências ligadas diretamente ao conceito de amostragem dos parâmetros de interesse assim como comparações estatísticas sobre funções não lineares dos parâmetros estimados, para os modelos envolvidos na análise.

**Palavras-chave:** Amostrador de Gibbs, dados correlacionados, inferência estatística, mínimos quadrados

##### **Abstract**

The objective of this study is to present an approach for analyzing experimental data in zootechny, using a Bayesian approach as an alternative to frequentist analysis for correlated data. Two methods were used to analyze the data of pH e N-NH<sub>3</sub> collected in the rumen of Holstein cows: the minimal squares (frequentist) method and Bayesian method, using the MCMC process (Markov Chain Monte Carlo). As initial values for the regression coefficients, it was used the frequentist estimates. The obtaining of marginal distributions for all parameters was done through the BRugs package of the R program. We observed that as for the pH data as N-NH<sub>3</sub> the coefficients of the regression models constituted through the Bayesian method were significant, which was not observed with the frequentist method. So, the Bayesian approach in the data analysis allowed directly linked inferences to the concept of sampling parameters of interest, allowing statistical comparisons on nonlinear functions of the estimated parameters for the models involved in the analysis.

**Key words:** Gibbs sampling, statistical inference, minimal squares

##### **Introdução**

Normalmente, os estatísticos e técnicos de áreas afins utilizam, frequentemente, modelos lineares com estimação por meio dos métodos de mínimos quadrados sem definição da distribuição dos dados ou pela máxima verossimilhança de variáveis a serem analisadas com

definição de uma distribuição para os dados. Consultar também trabalhos publicados por Geron et al. (2013), onde se aplicam métodos de análise estatística para estudar a concentração do pH e nitrogênio amoniacal do líquido ruminal em ruminantes.

Nestes métodos, denominados frequentistas, a inferência acerca dos parâmetros é feita a partir das estimativas e das somas de quadrados dos erros, em que o componente  $e_i$  (erro) é suposto normal, com média 0 (zero), variância constante  $\sigma^2$  e co-variância 0 (zero), para todo valor de  $i, i = 1, 2, \dots, n$  (FERREIRA, 2005).

Essas pressuposições por vezes não correspondem à realidade dos dados e dos parâmetros, conduzindo a estimativas pouco confiáveis excepcionalmente em amostras pequenas. Em outras situações, a complexidade dos modelos dificulta a inferência.

Uma alternativa ao uso dos métodos supracitados são os métodos Baysianos. Tais métodos são baseados no Teorema de Bayes, segundo o qual a probabilidade conjunta de dois ou mais eventos pode ser descrita pelo produto de probabilidades. Nesse contexto, a probabilidade dos parâmetros a serem avaliados, considerando os dados experimentais, dita probabilidade *a posteriori*, é função do produto da probabilidade *a priori* e da função de verossimilhança, então, toda inferência é feita com base na distribuição *a posteriori* dos parâmetros (ROSSI, 2001).

O objetivo do presente estudo é apresentar a metodologia Bayesiana de análise experimentais em Zootecnia, como alternativa à análise frequentista para avaliar o comportamento do pH e N-NH<sub>3</sub> ruminal em bovinos.

## Material e Métodos

Os dados analisados são proveniente do estudo de Aguiar et al. (2014), que estudaram o efeito de rações contendo 59,19% de silagem de milho e 40,81% de concentrado, diferiram-se com a inclusão ou não dos produtos LLOS constituindo-se, portanto, em quatro tratamentos: T<sub>1</sub>: controle (sem aditivo), T<sub>2</sub>: LLOS B1 (3,81 g de compostos fenólicos/kg de MS ingerida), T<sub>3</sub>: LLOS C1 (3,27 g de compostos fenólicos/kg de MS ingerida) e T<sub>4</sub>: LLOS C3 (1,93 g de compostos fenólicos/kg de MS ingerida).

Foram utilizados dois métodos para analisar os dados de pH e N-NH<sub>3</sub>: o método de mínimos quadrados (frequentista) e o método Bayesiano, por meio de processos MCMC (*Markov Chain Monte Carlo*).

A análise frequentista foi realizada primeiramente assumindo o modelo descrito na Equação 1, como segue.

$$y_{ijkl} = u + p_i + a_j + t_k + h_l + th_{kl} + e_{ijkl}, \quad (1)$$

em que:



$y_{ijkl}$  é a observação feita no período  $i$ , no animal  $j$ , recebendo o tratamento  $k$ , no tempo  $l$  após a alimentação;

$u$  é a constante geral;

$p_i$  é o efeito do período  $i$ ,  $i=1, \dots, 4$ ;

$a_j$  é o efeito do animal  $j$ ,  $j=1, \dots, 4$ ;

$t_k$  é o efeito do tratamento  $k$ ,  $k=1, \dots, 4$ ;

$h_l$  é o efeito da tempo após a alimentação  $l$ ,  $l=0, 2, 4, 6$  e  $8$ h

$th_{kl}$  é o efeito da interação entre tratamento e tempo;

$e_{ijkl}$  é o erro aleatório associado a cada observação realizado no período  $i$ ,  $i=1, \dots, 4$ ;

Em seguida para avaliar o comportamento do pH e N-NH<sub>3</sub>, ao longo do tempo após a alimentação, foram ajustadas equações de regressão polinomial do segundo grau, dentro de cada tratamento, conforme o modelo descrito na Equação 2, como segue.

$$y_{ijkl} = u + p_i + a_j + t_k + \left[ b_1(h_l - \bar{h}) + b_2(h_l - \bar{h})^2 \right] | t_k + e_{ijkl} \quad (2)$$

em que:

$b_1$  e  $b_2$  são, respectivamente, os coeficientes de regressão linear e quadrático da variável dependente em função do tempo após a alimentação;

$\bar{h}$  é a média dos tempos após a alimentação.

Os demais parâmetros são como descritos em (1). Após o ajuste dessas equações foram calculados os valores de mínimo para o pH e de máximo para o N-NH<sub>3</sub> minimizando os respectivos tempos em que estes acontecem, em cada tratamento. As análises dos dados foram realizadas por meio do programa R (R DEVELOPMENT CORE TEAM, 2013). A análise, usando o método Bayesiano, considerou o modelo (2) como já descrito, na forma (3):

$$y = f(\beta, X) + \epsilon_i, \quad \epsilon_i \sim N(0, \sigma_e^2) \quad (3)$$

$$y|X, \beta, \sigma_e^2 \sim N(f(\beta, x), \sigma_e^2),$$

sendo  $X$ : a matriz de incidência e assumindo-se para todos os parâmetros ( $\beta$  e  $\sigma_e^2$ ) do modelo, distribuições *a priori* não informativas, tais que:

$$\beta | \sigma_e^2 \sim N\left(0; \frac{1}{c^2}\right) \text{ e } \tau \sim \text{Gama}\left(\frac{1}{c}, \frac{1}{c}\right).$$

Foi assumido que  $c = 1.000$ ,  $\tau = \sigma^{-2}$  de acordo com a parametrização OpenBugs (SPIEGELHALTER et al., 1994). (Modelo \*.bug em anexo).

Utilizaram-se como valores iniciais para os coeficientes de regressão estimativas próximas às frequentistas e a obtenção das distribuições marginais *a posteriori* para todos os parâmetros foi por meio do pacote *BRugs* do programa *R*. Foram gerados 5.100.000 de valores em um processo MCMC e considerando um período de descarte amostral de 100.000 valores iniciais, a amostra final retirada em saltos de tamanho igual a 50, conteve 100.000 valores gerados. A convergência das cadeias foi verificada por meio dos critérios de Heidelberger e Welch (1983) no pacote *coda* do *R*. Consideraram-se como significativos, em nível de 5% de significância, os parâmetros cujos intervalos de credibilidade não contemplam o valor zero (ROSSI, 2011).

Adicionalmente, para cada uma das 100.000 equações pertencentes às amostras geradas, foram calculados os valores de mínimo para o pH e de máximo para o N-NH<sub>3</sub>, de forma a permitir a obtenção de distribuições *a posteriori* dessas informações, em cada tratamento.

## Resultados e Discussão

Dos resultados obtidos pela análise estatística, utilizando o método frequentista, não foi detectado efeito de interação, tratamento x tempo para pH e N-NH<sub>3</sub>. A concentração média de pH no líquido ruminal não foi influenciada ( $p > 0,05$ ) pelos tratamentos aplicados diferentemente da concentração média de N-NH<sub>3</sub> ( $p < 0,05$  – Tabela 1) (AGUIAR et al., 2014).

**Tabela 1.** Médias de pH e concentração de nitrogênio amoniacal (N-NH<sub>3</sub>) no líquido ruminal de vacas leiteiras, recebendo dietas com a adição ou não de produtos à base de própolis (LLOS). Procedimento frequentista.

Variáveis	Tratamentos				EP
	T <sub>1</sub> (Controle)	T <sub>2</sub>	T <sub>3</sub>	T <sub>4</sub>	
pH	6,24 <sup>a</sup>	6,17 <sup>a</sup>	6,22 <sup>a</sup>	6,23 <sup>a</sup>	0,0261
N-NH <sub>3</sub> (mg/dL)	27,27 <sup>a</sup>	27,37 <sup>a</sup>	25,94 <sup>b</sup>	27,63 <sup>a</sup>	2,2705

Médias com letras iguais, na linha, não diferem entre si com 95% de confiança, por meio do teste de Tukey.

EP = Erro-padrão.

**Fonte:** Elaborado pelo autor.

De acordo com Aguiar (2014), o pH ruminal em função do tempo após alimentação apresentou comportamento quadrático ( $\text{pH} = 6,86944 - 0,42107\text{h} + 0,042898\text{h}^2$ ) com coeficiente de determinação  $R^2 = 73,6\%$  e com valor mínimo estimado de 5,83 às 4h54 min. O comportamento do N-NH<sub>3</sub> em função do tempo após alimentação também foi quadrático, ( $\text{N-NH}_3 = 16,4810 + 7,96253\text{h} - 0,871208\text{h}^2$ ) com  $R^2 = 95,1\%$  e com valor de máximo estimado de 34,67 mg/dL de líquido ruminal às 4h36 min (AGUIAR et al., 2014).

Estes resultados permitem comparar apenas os valores médios do pH e do N-NH<sub>3</sub> para cada tratamento, ao longo do tempo, após a alimentação. Contudo, não permite avaliar o comportamento dos valores do pH e do N-NH<sub>3</sub> ao longo do tempo, o que poderia mostrar que em virtude das médias não serem estatisticamente diferentes, a dinâmica de acidificação e produção de amônia no rúmen pode ser diferente em cada tratamento.

Uma forma de analisar a dinâmica de acidificação do rúmen em cada tratamento, consiste em assumir um modelo de regressão polinomial do pH e do N-NH<sub>3</sub> em função do tempo após a alimentação, na forma (2).

Por meio da metodologia frequentista, pode-se observar que as equações ajustadas para cada tratamento apresentam-se significativas, visto que as estimativas para os coeficientes de regressão diferem de zero, o que não implica em inferir que essas equações sejam diferentes entre si (Tabela 2). Para que isso seja possível, elas devem ser comparadas por meio da análise de identidade de modelos (REGAZZI, 1999), que consiste em testar a diferença entre os quadrados médios residuais de um modelo completo, que considera diferentes equações para cada tratamento e um modelo reduzido, que considera que todos os tratamentos têm a mesma equação. Um refinamento de análise ainda maior pode ser realizado comparando-se os coeficientes das diferentes curvas (GRAYBILL, 1976), o que é feito por meio da comparação do ajuste de modelos, em que determinados coeficientes do mesmo grau, são considerados iguais ou diferentes, para diferentes equações.

**Tabela 2.** Estimativas para os parâmetros da regressão polinomial do pH e do N-NH<sub>3</sub> em função do tempo (h) após a alimentação, obtidas pelo método de mínimos quadrados.

Tratamento	Parâmetro	pH			N-NH <sub>3</sub>		
		Estimativa	EP <sup>1</sup>	p-valor <sup>2</sup>	Estimativa	EP <sup>1</sup>	p-valor <sup>2</sup>
	$\mu$	5,8713	0,0287	2e-16	33,6451	0,2484	2e-16
$T_1$	$b_1$	-0,0383	0,0391	0,3317	0,7787	0,3387	0,0249
	$b_2$	0,0456	0,0041	2,92e-16	-0,8327	0,0356	2e-16
$T_2$	$b_3$	-0,1043	0,0391	0,0098	0,8386	0,3387	0,0161
	$b_4$	0,0394	0,0041	9,32e-14	-0,8039	0,0356	2e-16
$T_3$	$b_5$	0,0016	0,0391	0,9662	-0,7882	0,3387	0,0233
	$b_6$	0,0435	0,0041	2,09e-15	-0,8122	0,0356	2e-16
$T_4$	$b_7$	-0,0467	0,0391	0,2371	1,4577	0,3387	6,18e-05
	$b_8$	0,0431	0,0041	3,02e-15	-0,8478	0,0356	2e-16

<sup>1</sup> Erro-padrão da estimativa; <sup>2</sup> Probabilidade do teste  $t$  – student.

**Fonte:** Elaborado pelo Autor.

Uma informação importante na análise da dinâmica de acidificação do rúmen é o valor mínimo assumido pelo pH e o valor máximo assumido pelo N-NH<sub>3</sub>, bem como o tempo em que

esses valores críticos ocorreram, em cada tratamento. Nas Tabelas 3 e 4 são apresentadas as estimativas para esses valores.

**Tabela 3.** Equações de regressão ajustadas para os valores de pH no líquido ruminal em função do tempo (h) após a alimentação e o valor mínimo do pH e respectivo tempo (h), por tratamento – procedimento frequentista.

Tratamento	Equação de regressão	pH mínimo	Tempo (h)
$T_1$	$\text{pH} = 6,75 - 0,4038h + 0,0456h^2$	5,85	4h25min
$T_2$	$\text{pH} = 6,91 - 0,4197h + 0,0394h^2$	5,79	5h19min
$T_3$	$\text{pH} = 6,56 - 0,3465h + 0,0435h^2$	5,87	3h59min
$T_4$	$\text{pH} = 6,74 - 0,3916h + 0,0431h^2$	5,85	4h32min

**Fonte:** Elaborado pelo Autor.

**Tabela 4.** Equações de regressão ajustadas para os valores de N-NH<sub>3</sub> no líquido ruminal em função do tempo (h) após a alimentação e seu valor máximo do N-NH<sub>3</sub> e respectivo tempo (h), por tratamento – procedimento frequentista.

Tratamento	Equação de regressão	N-NH <sub>3</sub> máximo	Tempo (h)
$T_1$	$\text{N-NH}_3 = 17,20 + 7,441h - 0,8327h^2$	33,82	4h28min
$T_2$	$\text{N-NH}_3 = 17,42 + 7,2702h - 0,8039h^2$	46,65	4h31min
$T_3$	$\text{N-NH}_3 = 23,80 + 5,7096h - 0,8122h^2$	41,01	3h31min
$T_4$	$\text{N-NH}_3 = 14,24 + 8,2402h - 0,8478h^2$	50,16	4h51min

**Fonte:** Elaborado pelo Autor.

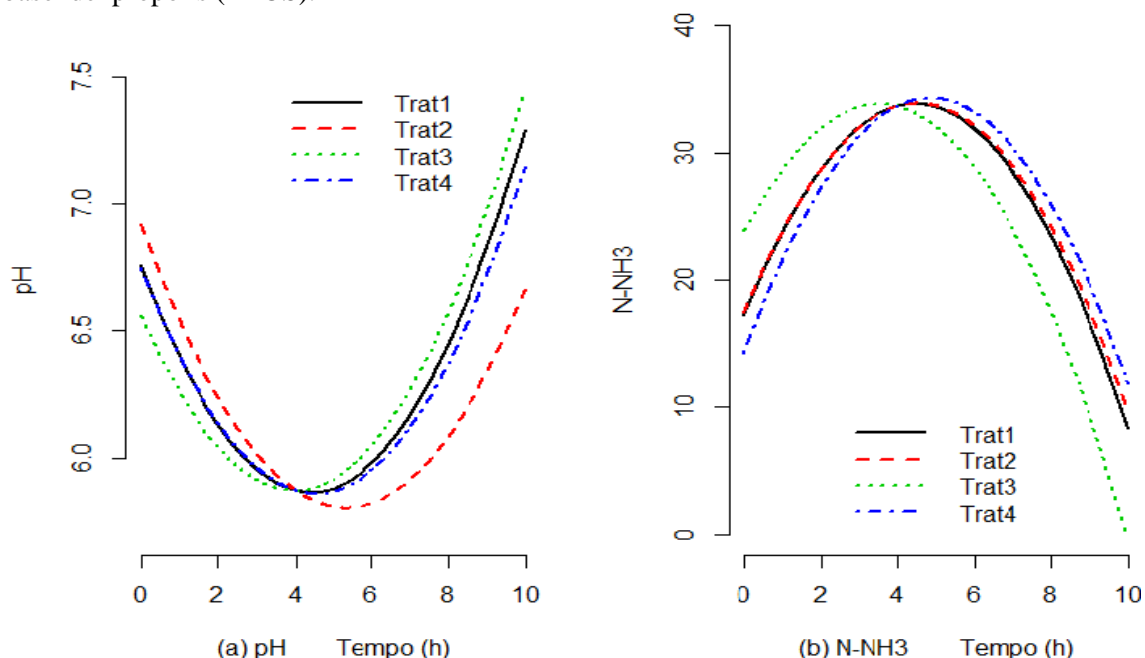
Uma análise numérica dos resultados indica que o tratamento 3 foi o que obteve seu mínimo de pH em menor tempo, enquanto que o tratamento 2 estabeleceu dentro de um maior tempo o seu mínimo de pH, os tratamentos 1 e 4 apresentaram o ponto de mínimo de pH após o tratamento 2 mas antes do tratamento 3 (Tabela 3). É sabido que o pH produzido no rúmen do animal interfere diretamente na taxa de crescimento microbiano, uma vez que os microrganismos do rúmen têm melhor crescimento em determinadas faixas de pH; uma dieta com alto teor de grãos favorece o crescimento de bactérias amilolíticas e que produzem ácido láctico. Isso faz com que o pH caia e, conseqüentemente, inibe o crescimento de certas bactérias que têm melhor crescimento em pH maior (AGUIAR et al., 2014).

Para o N-NH<sub>3</sub>, como mostra a Tabela 4, o tratamento 3 foi o que obteve seu máximo em menor tempo, enquanto que o tratamento 4 estabeleceu dentro de um maior tempo o seu máximo de N-NH<sub>3</sub>, os tratamentos 1 e 2 apresentaram o ponto de máximo de N-NH<sub>3</sub> após o tratamento 3, mas antes do tratamento 4 (Tabela 4). É sabido que o N-NH<sub>3</sub> produzido no rumem do animal será utilizada na síntese de proteína microbiana porém, quando em excesso, acarretará em perdas para o animal (pois poderá ser excretada na forma de ureia na urina, ou seja, é desperdiçada) e até mesmo toxidez. O ideal é o pH cair o mínimo possível e a produção de amônia não ser alta, pois ambos interferem no crescimento microbiano e resultam em perdas ao animal, além de levar a distúrbios metabólicos, como a acidose (AGUIAR et al., 2014).

A limitação na aplicação de testes a essas estimativas dos coeficientes de regressão das Tabelas 3 e 4 reside no fato de que o ponto de máximo ou de mínimo de uma equação do

segundo grau ser fruto da razão entre seus coeficientes onde esses valores não apresentem, provavelmente, distribuição normal.

**Figura 1.** Curvas ajustadas – estimativas frequentistas do pH e N-NH<sub>3</sub>, respectivamente, (a) e (b), no líquido ruminal de vacas leiteiras, recebendo dietas com a adição ou não de produtos à base de própolis (LLOS).



Essa limitação poderia ser vencida no método frequentista ajustando-se uma equação para cada vaca ao receber cada tratamento, gerando 16 equações com seus respectivos pontos de mínimo para o pH e de máximo para o N-NH<sub>3</sub> e os correspondentes tempos para atingí-los. Em seguida, essas estimativas poderiam ser consideradas variáveis dependentes e então submetidas a uma análise futura. Contudo, as equações para cada animal são ajustadas de forma muito precária, pelo pequeno número de observações para cada animal em cada tratamento, além de ainda tais pontos de mínimo e máximo não assumem pressupostos de normalidade. Assim, o uso de procedimentos Bayesianos se apresenta como alternativa viável frente às limitações descritas, como se mostra a seguir.

O primeiro item a ser observado é que para as estimativas obtidas (Tabela 5) são apresentados os seus respectivos desvios-padrão e intervalos de credibilidade, calculados a partir da amostragem *a posteriori* de cada parâmetro, diferentemente do método frequentista que apresenta para as estimativas os respectivos erros-padrão e o nível de significância pelo teste *t* - student, medidas baseadas na estimativa do quadrado médio do resíduo.

**Tabela 5.** Estimativas para os parâmetros da regressão polinomial do pH e do N-NH<sub>3</sub> em função do tempo (h) após a alimentação, obtidas pelo método Bayesiano.

Tratamento	Parâmetro	pH			N-NH <sub>3</sub>		
		Média	DP	ICr	Média	DP	ICr
	$\mu$	5,871	0,029	(5,814; 5,928)*	33,640	0,2911	(33,07; 34,21)*
$T_1$	$b_1$	-0,0717	0,0133	(-0,098; -0,045)*	1,1242	0,1311	(0,86; 1,38)*
	$b_2$	0,0457	0,0042	(0,037; 0,054)*	-0,8325	0,0417	(-0,91; -0,74)*
$T_2$	$b_3$	-0,0808	0,0134	(-0,107; -0,054)*	1,0786	0,1319	(0,81; 1,33)*
	$b_4$	0,0394	0,0043	(0,030; 0,047)*	-0,8036	0,0424	(-0,88; -0,72)*
$T_3$	$b_5$	-0,0612	0,0134	(-0,087; -0,034)*	0,7771	0,1319	(0,51; 1,03)*
	$b_6$	0,0435	0,0042	(0,035; 0,052)*	-0,8121	0,0418	(-0,89; -0,72)*
$T_4$	$b_7$	-0,0981	0,0136	(-0,124; -0,070)*	1,5245	0,1344	(1,26; 1,79)*
	$b_8$	0,0430	0,0042	(0,034; 0,051)*	-0,8481	0,0418	(-0,93; -0,76)*

DP: desvio-padrão; ICr: intervalo com 95% de credibilidade; \* significativo a 5%.

**Fonte:** Elaborado pelo Autor.

O desvio-padrão informa acerca da precisão da estimativa com base na amostragem do parâmetro, enquanto o erro-padrão nos fornece informação acerca da precisão com base na estimativa da variação residual. O intervalo de credibilidade informa acerca da significância da estimativa, também com base na amostragem do parâmetro. Se o intervalo não inclui o valor 0, infere-se que a estimativa obtida é estatisticamente diferente de 0. Por outro lado, o teste *t* informa diretamente o nível de probabilidade da estimativa obtida ser igual a 0, com base na estimativa da variação residual.

A comparação entre a significância das estimativas dos coeficientes de regressão obtidas nos dois métodos, mostra que no método frequentista (Tabela 2) os coeficientes lineares para o pH, nos tratamentos 1, 3 e 4 não foram significativos, enquanto que no método Bayesiano foram (Tabela 5). Para os demais coeficientes não foram detectadas diferenças significativas em ambos os métodos.

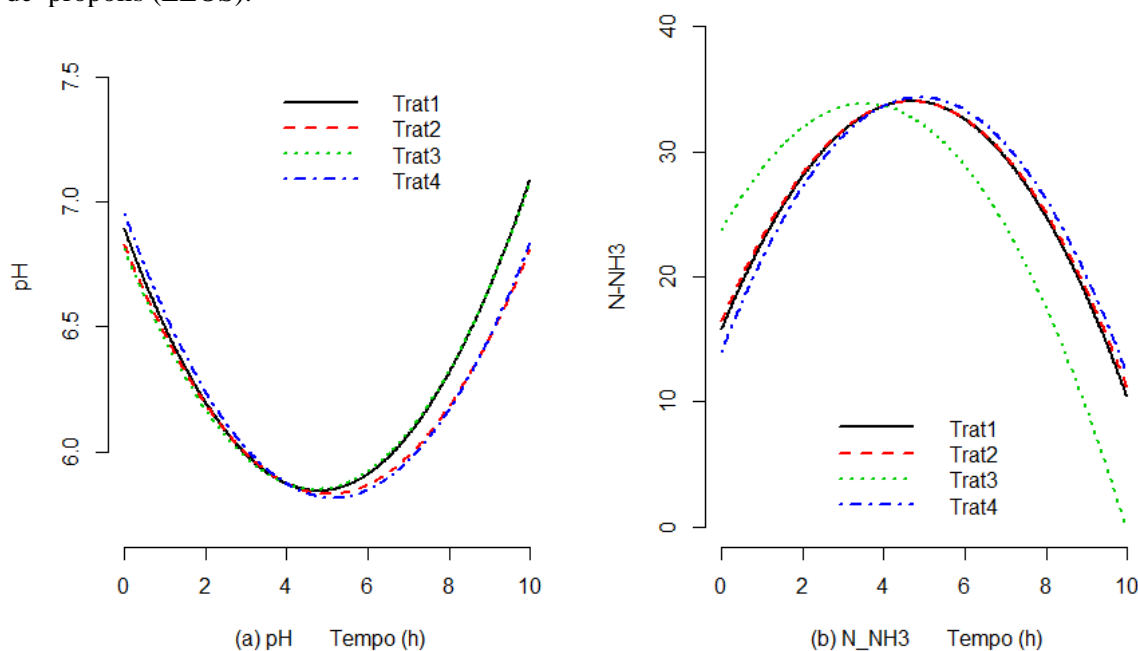
Observou-se que o tratamento 3 foi o que obteve seu mínimo de pH em menor tempo, enquanto que o tratamento 4 estabeleceu dentro de um maior tempo o seu mínimo de pH (Tabela 6). Este resultado difere daquele encontrado no método frequentista, que apontou ser o tratamento 2 aquele que leva mais tempo para atingir o pH mínimo. Os tratamentos 1 e 2 apresentaram o ponto de mínimo de pH após o tratamento 3 mas antes do tratamento 4 (Figura 2). É sabido que o pH produzido no rúmen do animal interfere diretamente na taxa de crescimento microbiano, uma vez que os microrganismos do rúmen têm melhor crescimento em determinadas faixas de pH, uma dieta com alto teor de grãos favorece o crescimento de bactérias amilolíticas e que produzem ácido lático. Isso faz com que o pH caia e, conseqüentemente, inibe o crescimento de certas bactérias que têm melhor crescimento em pH maior (AGUIAR et al., 2014).

**Tabela 6.** Equações de regressão ajustadas para os valores de pH no líquido ruminal em função do tempo (h) após a alimentação, e seu valor mínimo do pH e respectivo tempo (h), por tratamento – procedimento Bayesiano.

Tratamento	Equação de regressão	pH mínimo	Tempo (h)
$T_1$	$\text{pH} = 6,88 - 0,4374h + 0,0457h^2$	5,84	4h46min
$T_2$	$\text{pH} = 6,82 - 0,3964h + 0,0394h^2$	5,82	5h02min
$T_3$	$\text{pH} = 6,81 - 0,4094h + 0,0435h^2$	5,84	4h42min
$T_4$	$\text{pH} = 6,95 - 0,4427h + 0,0430h^2$	5,81	5h08min

**Fonte:** Elaborado pelo Autor.

**Figura 2.** Curvas ajustadas – estimativas Bayesianas do pH e N-NH<sub>3</sub>, respectivamente, (a) e (b), no líquido ruminal de vacas leiteiras recebendo dietas com a adição ou não de produtos à base de própolis (LLOS).



Para o N-NH<sub>3</sub>, o tratamento 3 foi o que obteve seu máximo em menor tempo, enquanto que o tratamento 4 estabeleceu dentro de um maior tempo o seu máximo. Os tratamentos 1 e 2 apresentaram o ponto de máximo de N-NH<sub>3</sub> após o tratamento 3, mas antes do tratamento 4 (Tabela 7). É sabido que o N-NH<sub>3</sub>, produzido no rúmen do animal será utilizada na síntese de proteína microbiana porém, quando em excesso, acarretará em perdas para o animal (pois poderá ser excretada na forma de ureia na urina, ou seja, é desperdiçada) e até mesmo toxidez. O ideal é o pH cair o mínimo possível e a produção de amônia não ser alta, pois ambos interferem no crescimento microbiano e resultam em perdas ao animal, além de levar a distúrbios metabólicos, como a acidose (AGUIAR et al., 2014).

**Tabela 7.** Equações de regressão ajustadas para os valores de N-NH<sub>3</sub> no líquido ruminal em função do tempo (h) após a alimentação e seu valor máximo do N-NH<sub>3</sub> e respectivo tempo (hs), por tratamento – procedimento Bayesiano.

Tratamento	Equação de regressão	N-NH <sub>3</sub> máximo	Tempo (h)
$T_1$	$N-NH_3 = 15,82 + 7,7843h - 0,8325h^2$	34,02	4h40min
$T_2$	$N-NH_3 = 16,47 + 7,5078h - 0,8036h^2$	34,00	4h40min
$T_3$	$N-NH_3 = 23,75 + 5,7198h - 0,8121h^2$	33,83	3h31min
$T_4$	$N-NH_3 = 13,97 + 8,3099h - 0,8481h^2$	34,3	4h53min

**Fonte:** Elaborado pelo Autor.

Até este ponto da análise, os dois métodos apresentam-se com o mesmo potencial de aplicação de inferência. No entanto, visto que houve a amostragem dos coeficientes de regressão no método Bayesiano, torna-se possível obter também amostras dos pontos de mínimo e máximo, respectivamente, e inferir sobre as diferenças entre tratamentos para estas estimativas.

Verifica-se que todos os pontos de mínimo para o pH e os tempos para atingí-los diferiram entre tratamentos, o mesmo acontecendo para os pontos de máximo e os tempos para atingí-los para N-NH<sub>3</sub>, exceto para os tempos até atingir o máximo nos tratamentos 1 e 2, que mostraram-se iguais (Tabelas 8 e 9).

**Tabela 8.** Estimativas Bayesianas do ponto de mínimo para o tempo (h) e o pH e os respectivos contrastes entre os tratamentos.

Tratamento	Média	DP	ICr
$T_1$	4,7913	0,1662	(4,4830; 5,1396)
$T_2$	5,0374	0,2109	(4,6689; 5,4916)
$T_3$	4,7106	0,1716	(4,3876; 5,0644)
$T_4$	5,1507	0,1985	(4,7877; 5,5696)
<b>Contraste</b>			
1-2	-0,2461	0,0456	(-0,3522; -0,1829)*
1-3	0,0806	0,0063	(0,0713; 0,0961)*
1-4	-0,3594	0,0327	(-0,4270; -0,3044)*
2-3	0,3268	0,0406	(0,2795; 0,4271)*
2-4	-0,1133	0,0143	(-0,1265; -0,0768)*
3-4	-0,4401	0,0276	(-0,5012; -0,3983)*
<b><math>\widehat{pH}_{\text{mínimo}}</math></b>			
	Média	DP	ICr
$T_1$	5,8419	0,0303	(5,7826; 5,9016)
$T_2$	5,8282	0,0308	(5,7674; 5,8884)
$T_3$	5,8485	0,0301	(5,7894; 5,9085)
$T_4$	5,8137	0,0313	(5,7525; 5,8752)
<b>Contraste</b>			
1-2	0,0137	0,0007	(0,0127; 0,0153)*
1-3	-0,0065	0,0005	(-0,0077; -0,0057)*
1-4	0,0282	0,0012	(0,0259; 0,0302)*
2-3	-0,0202	0,0009	(-0,0225; -0,0187)*
2-4	0,0144	0,0007	(0,0129; 0,0153)*
3-4	0,0347	0,0014	(0,0325; 0,0373)*

DP: desvio-padrão; ICr: intervalo com 95% de credibilidade; \* significativo a 5%.

**Fonte:** Elaborado pelo Autor.



**Tabela 9.** Estimativas Bayesianas do ponto de mínimo para o tempo (h) e de máximo para  $\hat{N} - \hat{N}H_3$  e os respectivos contrastes entre os tratamentos.

Tratamento	Média	DP	ICr
$T_1$	4,6769	0,0861	(4,5129; 4,8519)
$T_2$	4,6729	0,0899	(4,5006; 4,8510)
$T_3$	4,4797	0,0855	(4,3166; 4,6543)
$T_4$	4,9009	0,0912	(4,7302; 5,0918)
Contraste			
1-2	0,0039	0,0041	(-0,0026; 0,0122) ns
1-3	0,1971	0,0020	(0,1948; 0,1998)*
1-4	-0,2240	0,0054	(-0,2382; -0,2170)*
2-3	0,1931	0,0050	(0,1845; 0,1996)*
2-4	-0,2279	0,0032	(-0,2377; -0,2251)*
3-4	-0,4211	0,0062	(-0,4373; -0,4146)*
$\hat{N} - \hat{N}H_{3 \text{ máx}}$			
	Média	DP	ICr
$T_1$	34,0303	0,2965	(33,4503; 34,6181)
$T_2$	34,0130	0,2954	(33,4309; 34,5969)
$T_3$	33,8364	0,2925	(33,2649; 34,4147)
$T_4$	34,3367	0,3006	(33,7480; 34,9274)
Contraste			
1-2	0,0173	0,0039	(0,0122; 0,0224)*
1-3	0,1938	0,0055	(0,1821; 0,2014)*
1-4	-0,3064	0,0072	(-0,3180; -0,2982)*
2-3	0,1765	0,0054	(0,1659; 0,1869)*
2-4	-0,3237	0,0077	(-0,3389; -0,3146)*
3-4	-0,5002	0,0101	(-0,5175; -0,4858)*

DP: desvio-padrão; ICr: intervalo com 95% de credibilidade; \* significativo a 5%.

**Fonte:** Elaborado pelo Autor.

Um fato que merece atenção nos resultados apresentados nas Tabelas 8 e 9 é a discrepância apresentada pelas estimativas em relação àquelas apresentadas nas Tabelas 6 e 7. Isto acontece porque as estimativas dos pontos de mínimo ou máximo e os tempos para atingí-los quando obtidos a partir da amostra de seus valores, como apresentado nas Tabelas 8 e 9, equivalem à média *a posteriori* das razões entre os coeficientes de regressão lineares e quadráticos, enquanto que as estimativas apresentadas nas Tabelas 6 e 7 são razões entre as médias *a posteriori* dos coeficientes de regressão lineares e quadráticos.

Em outras palavras, os pontos de mínimo ou máximo são variáveis aleatórias das funções não lineares dos coeficientes de regressões lineares e quadráticas de tal modo que a esperança da razão entre os coeficientes é diferente da razão entre as esperanças dos coeficientes. Esta constatação indica que as estimativas que devem ser consideradas são aquelas apresentadas nas Tabelas 8 e 9, as quais não têm equivalência ao método frequentista.

## Conclusões

A abordagem Bayesiana na análise de dados permite inferências ligadas diretamente ao conceito de amostragem dos parâmetros de interesse, permitindo comparações estatísticas sobre funções não lineares dos parâmetros estimados para os modelos envolvidos na análise.

## Referências

AGUIAR, S. C.; PAULA, E. M. de; YOSHIMURA, E. H.; SANTOS, W. B. R. dos; MACHADO, E.; VALERO, M. V.; SANTOS, G. T. dos; ZEOULA, L. M. *Effects of phenolic compounds in própolis on digestive and ruminal parameters in dairy cows*. *Revista Brasileira de Zootecnia*, [online], Viçosa, MG, v. 43, n. 4, p. 197-206, 2014. Disponível em: <<http://www.scielo.br/pdf/rbz/v43n4/1516-3598-rbz-43-04-00197.pdf>>. Acesso em: 17 jun. 2013.

FERREIRA, D. F. *Estatística básica*. Lavras, MG: UFLA, 2005. p. 664.

GERON, L. J. V.; MEXIA, A. A. ; CRISTO, R. L.; GARCIA, J.; CABRAL, L. S.; TRAUTMANN, R. J. ; SOUZA, O. M.; ZEOULA, L. M. Consumo, digestibilidade dos nutrientes e características ruminais de cordeiros alimentados com níveis crescentes de concentrado em ambiente tropical no Vale do Alto Guaporé - MT. *Semina: Ciências Agrárias (Online)*, Londrina, v. 34, n. 5, p. 2497- 2510, set./out. 2013. Disponível em: <[http://www.uel.br/revistas/uel/index.php/semagrarias/article/view/12240/pdf\\_49](http://www.uel.br/revistas/uel/index.php/semagrarias/article/view/12240/pdf_49)>. Acesso em: 17 jun. 2013.

GRAYBILL, F. A. *Theory and applicaton of the linear model*. Massachusetts: Duxbury Press, 1976. 704p.

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

REGAZZI, A. J. Teste para verificar a identidade de modelos de regressão e a igualdade de parâmetros no caso de dados de delineamentos experimentais. *Revista Ceres*, Viçosa, MG, v. 40, p. 383-409, 1999.

R DEVELOPMENT CORE TEAM. Programs developed by R Development Core Team *R- A language and environment for statistical computing*. Vienna: The R Foundation for Statistical Computing, 2013. Disponível em: <<http://www.R-project.org>>. Acesso em: 17 jun. 2013.

ROSSI, R. M. *Introdução aos métodos Bayesianas na análise de dados zootécnicos com uso do WinBUGS e R*. Maringa: Eduem, 2011. 191p.

SPIEGELHALTER, D. J.; BEST, N. G.; CARLIN, B. P.; VAN DER LINDE, A. *BUGS: Bayesian Inference using Gibbs Sampling*. Cambridge: MRC Bioestatics Unit, 1994.

### Informação complementar

*Modelo.bug* para análise de regressão linear múltipla, considerando que  $x$  é a matriz de planejamento, sem estrutura de correlação entre os parâmetros da regressão - erro normal.

```

model;
{
  c <- 1000
  for (i in 1:n)
  {
    y[i] ~ dnorm(mu[i], tau)
    mu[i] <- inprod(x[i, ], beta[])
  } for (j in 1:P)
  {
    beta[j] ~ dnorm(0,1/(c*c))           #vetor de parâmetros de regressão
  }

  tau ~ dgamma(1/c,1/c)                 #precisão do erro
  sigma <- 1/sqrt(tau)
  sigma2 <- sigma*sigma                 #variância do erro

#Cálculo dos pontos de mínimo/máximo da equação quadrática estimada
a <- beta[3]
b <- beta[2]
c <- beta[1]
D <- pow(b,2) - 4*a*c
x.c <- -b/(2*a)
y.c <- -D/(4*a)
}

```

## **IV – Teste de hipótese acerca da diferença entre uma média e predições de uma equação de regressão em dados de coelhos, ajustado por análise Bayesiana**

**Resumo:** O objetivo desse estudo é apresentar procedimentos para a comparação da média de um tratamento testemunha (controle), com as predições obtidas por meio de uma equação de regressão que descreve o comportamento de resposta contínua e a níveis crescentes de inclusão de um insumo alimentar, utilizando abordagem frequentista e Bayesiana. Na abordagem frequentista, os parâmetros são estimados por meio do método de mínimos quadrados e é aplicado o teste *t*, após o estabelecimento da função linear dos parâmetros que descreve a comparação de interesse e sua variância. Na abordagem Bayesiana a estimação dos parâmetros é feita por meio da amostragem de Gibbs, e a avaliação da função linear dos parâmetros que descreve a comparação de interesse é feita com base na sua distribuição *a posteriori*. As estimativas obtidas em ambas as abordagens apresentam-se semelhantes e o resultado da avaliação da comparação de interesse foi análogo. Contudo, a abordagem Bayesiana evidenciou que a pressuposição assumida na abordagem frequentista, quanto à normalidade das distribuições dos parâmetros e da função linear, que descreve a comparação, foram violadas e que a estimativa frequentista da comparação apresentou maior variância. Evidenciando que podem existir situações em que a abordagem frequentista pode levar a resultados equivocados e, neste caso a abordagem Bayesiana pode ser uma alternativa mais plausível para execução da análise.

**Palavras-chave:** amostrador de Gibbs; inferência estatística; modelos lineares; testes de hipóteses

### **Testing the hypothesis about the difference between an average and predictions with a regression equation**

**Abstract:** The aim of this study is to present procedures for comparing the mean of a control treatment (control), with the predictions obtained by a regression equation that describes the behavior of response to increasing levels including a food ingredient, using frequentist approach and Bayesian. In the frequentist approach the parameters are estimated by the least squares method is applied, and *t* test, after the establishment of the linear function of the parameters describing the comparison of interest and its variance. In the Bayesian approach the estimation is made by Gibbs sampling, and evaluation of the parameters of the linear function that describes the comparison of interest is made based on its posterior distribution. The estimates obtained in both approaches have a similar presentation and the evaluation result of the comparison of interest was similar. However, the Bayesian approach showed that the frequentist approach taken assumption as to the normality of the distributions of parameters and the linear function which describes the comparison, that have been violated and frequentist estimated variance showed higher compared. Indicating that there may be situations where the frequentist approach can lead to misleading results and this casoe the Bayesian approach may be a more suitable alternative to perform the analysis.

**Keywords:** Gibbs sampling; Bayesian inference; frequentist inference; linear models, hypothesis testing

## 1. Introdução

Na experimentação zootécnica é frequente a análise de dados provenientes de delineamentos que envolvem um tratamento testemunha e tratamentos que se caracterizam por níveis contínuos e crescentes de inclusão de algum alimento, nutriente ou aditivo a ser avaliado. Os procedimentos de análise utilizados consistem em estimar a média para a testemunha e ajustar uma equação de regressão, geralmente linear ou quadrática, para os tratamentos com níveis crescentes de inclusão. Nos casos em que a equação de regressão se apresenta quadrática, procede-se então a estimação do seu ponto de máximo ou de mínimo e a aplicação de testes que comparam a média do tratamento testemunha com as médias dos tratamentos com níveis crescentes de inclusão e, tal procedimento é conhecido por teste de Dunnett [1] ou teste de Williams [8]. Esta abordagem deixa a desejar, pois as inferências feitas sobre as respostas à inclusão assumem que a variável independente “níveis de inclusão” seja contínua, enquanto a aplicação dos testes citados assume essa mesma variável independente como discreta.

Uma abordagem coerente implicaria na comparação da média do tratamento testemunha com as predições obtidas a partir da equação de regressão ajustada para as respostas à inclusão em níveis crescentes, em particular com a predição no ponto de máximo ou mínimo. Consultar também trabalhos publicados por Rossi et al. [6] que estudam níveis diferentes de proteína bruta, para observar a conversão alimentar.

O presente trabalho descreve como proceder essa abordagem apresentando duas alternativas de análise, uma frequentista e outra Bayesiana.

## 2. Material e métodos

Foram utilizados dados de conversão alimentar entre 32 e 50 dias de idade, de coelhos alimentados com uma ração testemunha que não continha bagaço de uva em sua formulação ou com rações contendo bagaço de uva, em níveis crescentes de 5, 10, 15, 20 e 25% de inclusão. A unidade experimental foi constituída de uma gaiola com dois animais, sendo utilizadas dez unidades experimentais por tratamento, perfazendo um total de 60 observações.

O modelo empregado para descrever os dados foi

$$y_{ijk} = z_i \mu_0 + w_i b_0 + w_i b_1(x_j) + w_i b_2(x_j)^2 + \varepsilon_{ijk} \quad (1)$$

$$z_i = 1 \text{ se } i = 0 ; z_i = 0 \rightarrow \forall i \neq 0$$

$$w_i = 0 \text{ se } i = 0 ; w_i = 1 \rightarrow \forall i \neq 0$$

Testemunha

$$\begin{cases} z_i = 1 \\ w_i = 0 \end{cases}$$

Tratamento

$$\begin{cases} z_i = 0 \\ w_i = 1 \end{cases}$$

em que:

$y_{ijk}$  = valor observado no animal  $k$ , pertencente ao tratamento testemunha ( $i=0$ ) ou aos tratamentos com inclusão de bagaço de uva ( $i=1$ ) no nível  $j$ ;

$x_j$  = nível de inclusão de bagaço de uva na ração (5, 10, 15, 20 e 25%);  $z_i$  = variável *Dummy* que informa se a observação se refere ao tratamento testemunha (valor=1) ou não (valor=0);

$\mu_0$  = média das observações referentes ao tratamento testemunha;

$w_i$  = variável *Dummy* que informa se a observação se refere aos tratamentos envolvendo níveis crescentes de inclusão de bagaço de uva (valor=1) ou não (valor=0);

$b_0, b_1, b_2$  = intercepto e os coeficientes de regressão linear e quadrática, respectivamente, ajustados para as observações referentes aos tratamentos envolvendo níveis crescentes de inclusão de bagaço de uva;

$\varepsilon_{ijk}$  = erro aleatório associado a cada observação  $y_{ijk}$ .

A inferência de interesse está na comparação da média do testemunha  $\bar{y}_0$  com a predição da resposta  $\hat{y}_{max}$ , no ponto de máximo  $x_{max}$ , da equação de regressão, como segue:

$$\bar{y}_0 - \hat{y}_{max} = \mu_0 - [b_0 + b_1(x_{max}) + b_2(x_{max})^2] \quad (2)$$

Por conveniência, o modelo pode ser escrito em forma matricial:

$$y = X\beta + \varepsilon \quad (3)$$

em que:

$y$  = o vetor de observações;

$X$  = a matriz de incidência dos parâmetros considerados no modelo;

$\varepsilon$  = vetor de resíduos aleatórios,  $\varepsilon \sim N(0, \sigma_e^2)$

O vetor  $\beta$  é formado como segue:

$$\beta = \begin{bmatrix} \mu_0 \\ b_0 \\ b_1 \\ b_2 \end{bmatrix}.$$

Na abordagem frequentista, a estimativa de  $\beta$  é dada por:

$$\hat{\beta} = (X'X)^{-1} X'y \quad (4)$$

cuja variância é dada por:

$$Var(\hat{\beta}) = (X'X)^{-1} \hat{\sigma}_e^2$$

em que  $\hat{\sigma}_e^2$  é o quadrado médio do resíduo.

A comparação entre a média do tratamento testemunha e qualquer predição obtida por meio da equação de regressão, pode ser feita assumindo-se uma função linear dos parâmetros na forma  $\lambda'\beta$ , em que  $\lambda'$  é o vetor linha que contém os coeficientes que estabelecem o contraste de interesse [7], isto é:

$$\lambda' = [1 \quad -1 \quad -x_{max} \quad -x_{max}^2],$$

assim:

$$\lambda'\beta = [1 \quad -1 \quad -x_{max} \quad -x_{max}^2] \begin{bmatrix} \mu_0 \\ b_0 \\ b_1 \\ b_2 \end{bmatrix}$$

$$\lambda'\beta = \mu_0 - (b_0 + b_1x_{max} + b_2x_{max}^2). \quad (5)$$

O teste *t-student* pode ser usado para avaliar a significância dessa comparação, na forma:

$$t = \frac{\lambda'\beta}{\sqrt{var(\lambda'\beta)}} \sim t_{\frac{\alpha}{2};(n-p)} \quad (6)$$

sendo,

$$\text{var}(\lambda'\beta) = \lambda'(X'X)^{-1}\lambda\hat{\sigma}_e^2. \quad (7)$$

Na abordagem Bayesiana, a análise estatística foi realizada como descrita em Rossi [5]. Foi considerado que *Dummy* a resposta ( $y$ ) segue distribuição normal, isto é, para o tratamento testemunha:  $y_i \sim N(\mu_0, \sigma_{e0}^2)$  enquanto que para as respostas aos níveis de inclusão de bagaço de uva:  $y_{ij} \sim N(f(\beta_p, x_j); \sigma_e^2)$ , onde  $y_{ij} = f(\beta_p, x_j) + \varepsilon_{ij} = b_0 + b_1x_j + b_2x_j^2 + \varepsilon_{ij}$ , em que  $x_{IJ}$  = nível de inclusão de bagaço de uva, assumindo  $e_{ij} \sim N(0, \sigma_e^2)$ . Foi considerado que há correlação entre os  $p$  parâmetros do vetor  $\beta_p$ . Foram consideradas *a priori* distribuições não informativas para todos os parâmetros do modelo, assumindo  $c = 1.000$  e  $\tau = \sigma^{-2}$  (parametrização OpenBUGS).

Para a testemunha:

$$\mu_0 | \sigma_{e0}^2 \sim N\left(0; \frac{1}{c^2}\right) \text{ e } \tau_0 \sim \text{Gama}\left(\frac{1}{c}, \frac{1}{c}\right).$$

Para os níveis de inclusão do bagaço de uva:

$$\beta | \sigma_e^2, R \sim N_p(0, R).$$

Segundo Gelfand et al. [2], tal que  $R \sim \text{Wishart}\left(\frac{I}{c}, p - 1\right)$ ,  $\Omega = R^{-1}$  é a matriz de (co)variância de  $\beta$ . Para a testemunha, utilizou-se como valor inicial, a média dos dados testemunha e para os coeficientes de regressão, referente à inclusão do bagaço de uva, estimativas frequentistas, o valor 'um' para  $\tau$  para ambos e uma matriz identidade para  $R$ . A obtenção das distribuições marginais *a posteriori* para todos os parâmetros foi por meio do pacote *BRugs* do programa R [4]. Foram gerados 100.000 de valores em um processo MCMC (*Monte Carlo Markov Chain*) e considerando um período de descarte amostral de 10.000 valores iniciais, a amostra final retirada em saltos de tamanho 10 conteve 10.000 valores gerados. A convergência das cadeias foi verificada por meio do critério de Heidelberger e Welch [3] no pacote *coda* do R.

Obtidas as distribuições *a posteriori* das médias dos parâmetros de interesse, foram calculadas as coordenadas do ponto crítico (máximo ou mínimo) de  $f(\beta_p, x)$ ,



respectivamente,  $x_{max}$  e  $y_{max}$ , obtidos por  $\left(-\frac{b_1}{2b_2}, -\frac{b_1^2-4b_2b_0}{2b_2}\right)$ , o que possibilitou proceder à comparação de  $y_{max}$  com a média *a posteriori* do testemunha, isto é,  $\Delta = y_{max} - \mu_0$ . Essa diferença foi considerada significativa, em nível de 5% de probabilidade, se o intervalo com 95% de credibilidade de  $\Delta$ , não contempla o valor 0 [5].

Para a simulação I e II, foram considerados cinco níveis de tratamentos (valores de 1 a 5), com dez repetições cada. Foram fixados para os parâmetros do modelo de regressão (quadrática)  $y_i = f(\beta, x_i) = \beta_0 + \beta_1 x_i + \beta_2 x_i^2 + \varepsilon_i$ , valores de 0,7; 1,5 e -0,4, respectivamente para  $\beta_0$ ,  $\beta_1$  e  $\beta_2$  e de 0,5 para  $\sigma_e$ . Em seguida, foram gerados valores para a resposta  $y$  considerando  $\varepsilon_i \sim N(0; \sigma_e^2)$ . Dois valores para a média do testemunha (considerando  $r = 10$  réplicas e  $\sigma_0 = 0,5$ ) foram fixados de tal forma a representar ( $\mu_0 = 1,7$ ) a não diferença, e ( $\mu_0 = 1,6$ ) a diferença significativa entre ela e o ponto máximo da regressão quadrática, em nível de significância de 5% considerando um teste bilateral, dado em (6).

A inferência de interesse está na comparação da média do testemunha  $\bar{y}_0$  com a predição da resposta  $\hat{y}_{max}$ , no ponto de máximo  $x_{max}$ , da equação de regressão, como descrito em (5).

O modelo \*.bug é apresentado como anexo.

### 3. Resultados e discussão

#### 3.1. Simulação I: Considerando a média de testemunha em 1,6

Tabela 1. Estimativas frequentistas para os parâmetros da regressão.

Coeficiente	Estimativa	DP	p-valor*
Intercepto	0,8377	0,32	0,0119
Linear	1,4008	0,24	6,55e-07
Quadrático	-0,3839	0,04	1,08e-12

\*significância a 5%.

Fonte: Elaborado pelo Autor.

Verificou-se, por meio do teste  $t$ , que os níveis crescentes, foram significativos ( $p < 0,05$ ), indicando que os níveis apresentam efeitos diferentes, o que indica a adequação do modelo quadrático, cuja equação ajustada foi:

$$\hat{y}_i = 0,8377 + 1,4008x_i - 0,3839x_i^2, \text{ em que } \hat{y}_i \text{ é o nível (\%).}$$

Observou-se que a diferença entre média do testemunha e a média dos tratamentos, foi significativa ( $p < 0,05$ ). O nível de inclusão que corresponde ao ponto ótimo da curva foi de 1,8244 (unidade de medida), fornecendo uma predição igual a 2,1156 na conversão alimentar de acordo com a Figura 1.

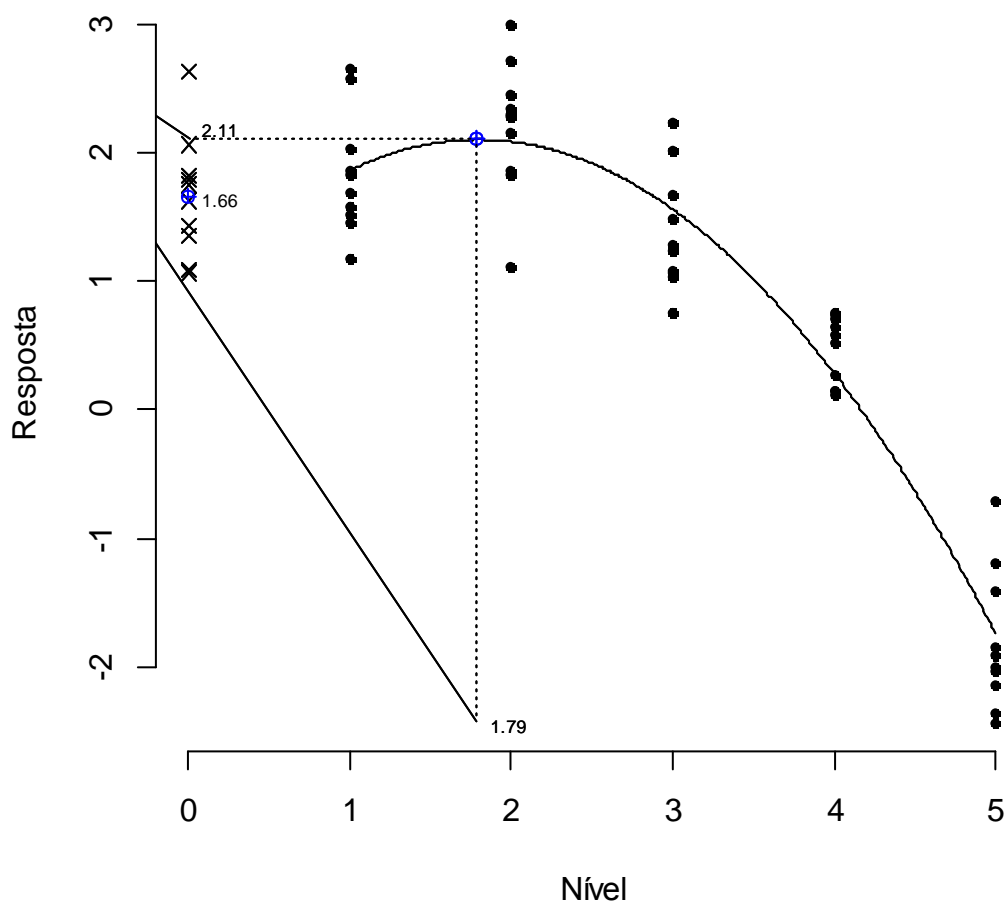


Figura 1. Equação ajustada para definir o ponto ótimo e sua respectiva imagem, pelo qual será testada com a média do testemunha (simulação I).

A comparação da média do testemunha 1,71 (unidade de medida) com a imagem da resposta da curva no ponto ótimo da equação 2,11 (unidade de medida) foi de 0,41 (unidade de medida). Logo, aplicando-se o teste  $t = \frac{\lambda'\beta}{\sqrt{\text{var}(\lambda'\beta)}} = -2,35$ , este valor é superior ao  $t$  tabelado (2,0) para 56 graus de liberdade, em nível de 5%. Este resultado leva a inferir que há diferença entre a média do testemunha e a resposta no ponto de máximo.

A abordagem Bayesiana produziu os resultados apresentados na Tabela 2.

Tabela 2. Estimativa para os parâmetros de interesse considerados no modelo Bayesiano - Simulação I

Parâmetro	Média	Desvio-padrão	Mediana	Intervalo de Credibilidade
$\mu_0$	1,7113	0,1537	1,7125	(1,3998; 2,0148)
$b_1$	0,8931	0,2901	0,8894	(0,3393; 1,4617)
$b_2$	1,3442	0,2230	1,3447	(0,9121; 1,7750)
$b_3$	-0,3740	0,0370	-0,3742	(-0,4464; -0,3016)
$\sigma_0$	0,4671	0,1267	0,4436	(0,2943; 0,7818)
$\sigma$	0,4785	0,0502	0,4739	(0,3932; 0,5895)
$x_{max}$	1,7856	0,1339	1,7974	(1,4914; 2,0121)
$y_{max}$	2,1074	0,0935	2,1066	(1,9235; 2,2925)
$\Delta$	0,3960	0,1814	0,3966	(0,0405; 0,7581)*

\*significância a 5%.

Fonte: Elaborado pelo Autor.

Verificou-se que as estimativas pontuais obtidas na abordagem Bayesiana foram muito semelhantes às obtidas na abordagem frequentista, com estimativa para a média do testemunha igual a 2,71 e equação ajustada para a resposta aos níveis crescentes,  $\hat{y}_i = 0,8931 + 1,3442x_i - 0,3740x_i^2$ .

O nível de inclusão que corresponde à máxima resposta é de 1,7856 fornecendo uma predição igual a 2,1074.

Da mesma forma que na abordagem frequentista a conclusão é de que há diferença significativa entre a média do testemunha e a resposta aos níveis crescentes no ponto de máximo, visto que o intervalo de credibilidade para esta diferença ( $\Delta$ ) não inclui o valor 0.

### 3.2. Simulação II: Considerando a média de testemunha 1,7

Verificou-se, por meio do teste  $t$ , que os níveis crescentes de inclusão, foram significativos ( $p < 0,05$ ), indicando que os níveis apresentam efeitos diferentes, o que indica a adequação do modelo quadrático, cuja equação ajustada foi  $\hat{y}_i = 0,8377 + 1,4008x_i - 0,3839x_i^2$ , em que  $x_i$  é o nível (%) de inclusão.

A comparação da média do testemunha 1,81 (unidade de medida) com a imagem da resposta da curva no ponto ótimo da equação 2,11 (unidade de medida) foi de -0,31(unidade de medida). Logo, aplicando-se o teste  $t = \frac{\lambda/\beta}{\sqrt{\text{var}(\lambda/\beta)}} = -1,7732$ , este valor é inferior ao  $t$  tabelado (-2,0) para 56 graus de liberdade, em nível de 5%. Este

resultado leva a inferir que não há diferença entre a média do testemunha e a resposta no ponto de máximo.

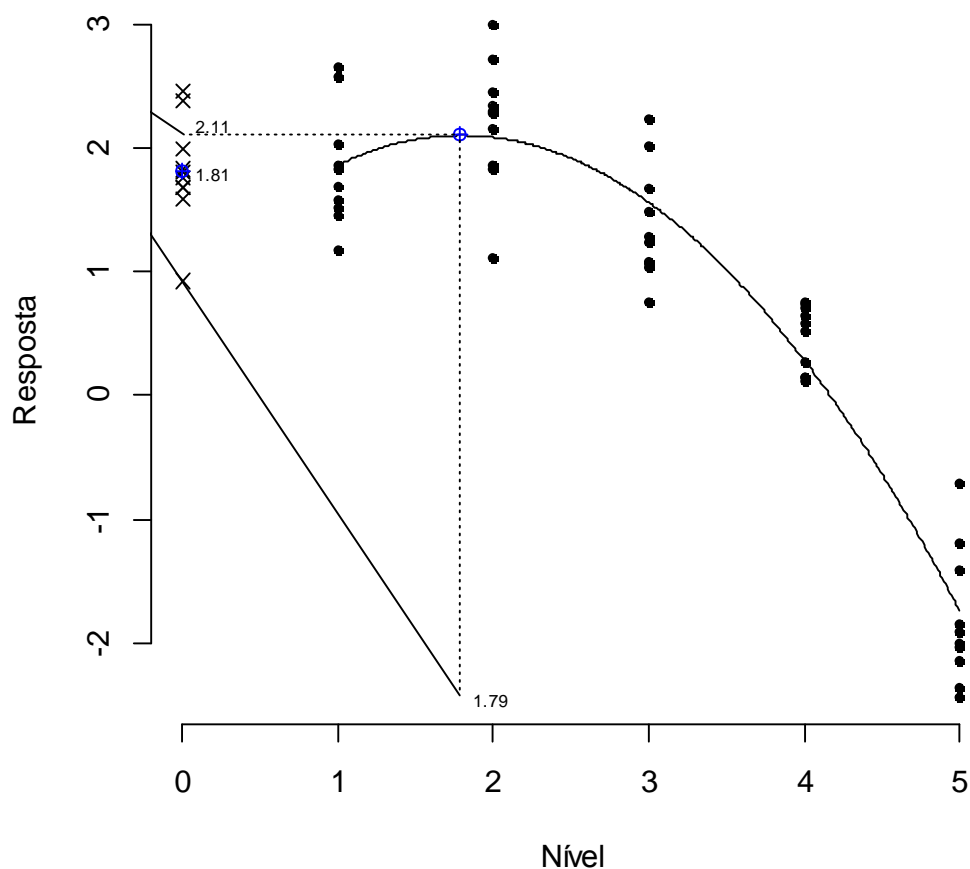


Figura 2. Equação ajustada para definir o ponto ótimo e sua respectiva imagem, pelo qual será testada com a média do testemunha (simulação I).

A abordagem Bayesiana produziu os resultados apresentados na Tabela 3.

Tabela 3. Estimativa para os parâmetros de interesse considerados no modelo Bayesiano - Simulação II.

Parâmetro	Média	Desvio-padrão	Mediana	Intervalo de Credibilidade
$\mu_0$	1,8113	0,1537	1,8125	(1,4998; 2,1148)
$b_1$	0,8930	0,2901	0,8894	(0,3393; 1,4617)
$b_2$	1,3442	0,2229	1,3447	(0,9121; 1,7750)
$b_3$	-0,3740	0,0369	-0,3742	(-0,4464; -0,3016)
$\sigma_0$	0,4670	0,1267	0,4436	(0,2943; 0,7818)
$\sigma$	0,4785	0,0501	0,4739	(0,3932; 0,5895)
$x_{max}$	1,7856	0,1339	1,7974	(1,4914; 2,0121)
$y_{max}$	2,1074	0,0935	2,1066	(1,9235; 2,2925)
$\Delta$	0,2960	0,1814	0,2966	(-0,0594; 0,6582) <sup>ns</sup>

<sup>ns</sup>significância a 5%.

Fonte: Elaborado pelo Autor

Verificou-se que as estimativas pontuais obtidas na abordagem Bayesiana foram muito semelhantes às obtidas na abordagem frequentista, com estimativa para a média do testemunha igual a 1,8113 e equação ajustada para a resposta aos níveis crescentes de inclusão de bagaço de uva como  $\hat{y}_i = 0,8930 + 1,3442x_i - 0,3740x_i^2$ .

O nível de inclusão que corresponde à máxima resposta é de 1,7856 fornecendo uma predição igual a 2,1074.

Da mesma forma que na abordagem frequentista a conclusão é de que não há diferença significativa entre a média do testemunha e a resposta aos níveis crescentes de inclusão de bagaço de uva, no ponto de máximo, visto que o intervalo de credibilidade para esta diferença ( $\Delta$ ) inclui o valor 0.

### 3.3. Aplicação

A abordagem frequentista produziu o seguinte quadro de análise de variância (Tabela 4).

Tabela 4. Análise de variância frequentista de acordo com a inclusão de níveis crescente de bagaço de uva na ração.

Fator de variação	Grau de liberdade	Soma de quadrados	Quadrado médio do resíduo	Significância ( <i>F</i> )
Testemunha	1	0,0163303	0,0163303	0,595 ns
Níveis	4	0,3554052	0,08885131	3,242 *
Linear	1	0,0000075	0,0000075	0,000 ns
Quadrática	1	0,2118697	0,2118697	7,73 *
Falta de ajuste	2	0,1435279	0,0717639	2,61 ns
Resíduo	54	1,47982	0,02740407	

\*significância a 5%.

Fonte: Elaborado pelo Autor.

Verificou-se, por meio do teste *F*, que os níveis crescentes de inclusão de bagaço de uva, foram significativos ( $p < 0,05$ ), indicando que os níveis apresentam efeitos diferentes. Logo, devemos proceder ao desdobramento dos quatro graus de liberdade dos níveis, para estudar os efeitos de inclusão de bagaço de uva na ração.

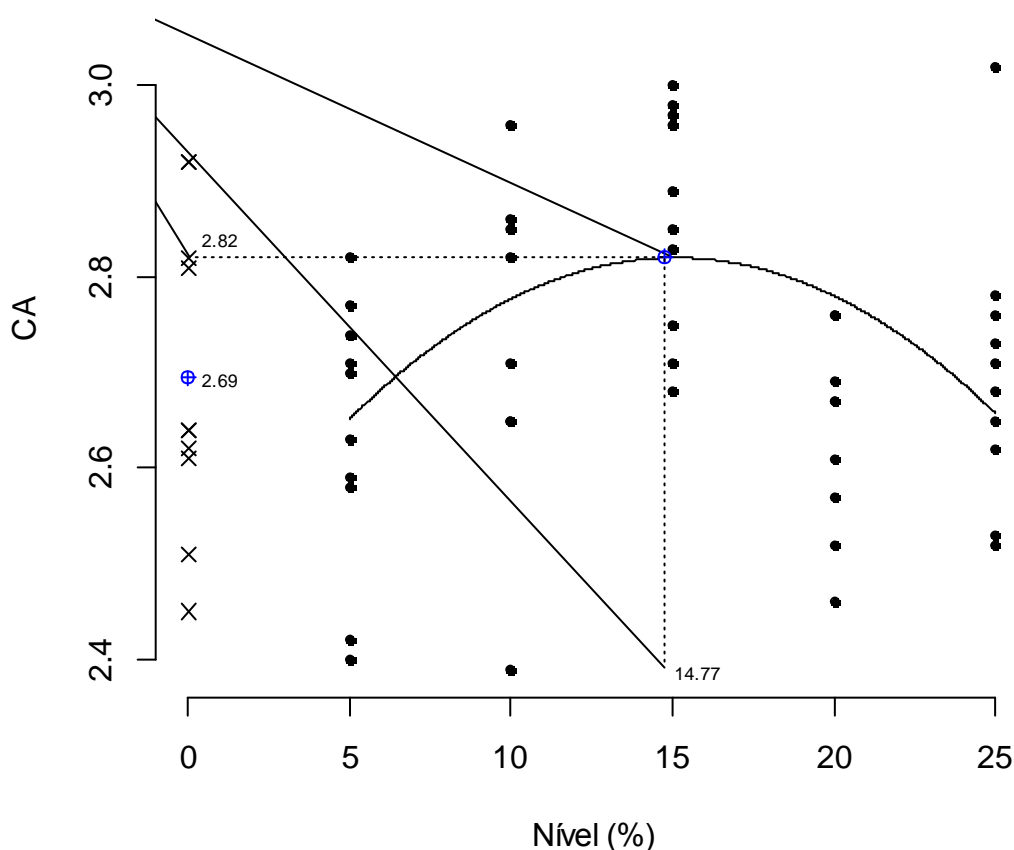


Figura 3. Equação ajustada para definir o ponto ótimo e sua respectiva imagem, pelo qual será testada com a média do testemunha.

Observou-se que a diferença entre média do testemunha e a média dos tratamentos com a inclusão de bagaço de uva não foi significativa ( $p > 0,05$ ), contudo, os níveis crescentes de bagaço de uva provocaram um comportamento quadrático significativo ( $p < 0,05$ ) da variável resposta, sendo a falta de ajustamento não significativo ( $p > 0,05$ ), o que indica a adequação do modelo quadrático, cuja equação ajustada foi  $\hat{y}_i = 2,4650 + 0,046736x_i - 0,001556x_i^2$ , em que  $x_i$  é o nível (%) de inclusão de bagaço de uva.

O nível de inclusão que corresponde à máxima resposta é de 15,02 (%) fornecendo uma predição igual a 2,82 na conversão alimentar.

Como a soma de quadrados pela falta de ajustamento não foi significativa ( $p > 0,05$ ), seu valor foi adicionado à soma de quadrado dos resíduos, produzindo um novo quadrado médio de residual, como segue:

$$QMR = \frac{1,47892 + 0,1435279}{54 + 2} = 0,028988349.$$

A comparação da média do testemunha com a resposta no ponto máximo é dada pela função linear (2), que na forma matricial é dada por:

$$\lambda'\beta = [1 \quad -1 \quad -15,02 \quad -(15,02^2)] \begin{bmatrix} 2,6939 \\ 2,4650 \\ 0,0467 \\ -0,0016 \end{bmatrix} = -0,1221.$$

A variância dessa função linear, dada por (6), será:

$$\text{var}(\lambda'\beta) = [1 \quad -1 \quad -15,02 \quad -(15,02^2)] \begin{bmatrix} 0,1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0,46 & -0,066 & 0,002 \\ 0 & -0,066 & 0,010686 & -0,00034 \\ 0 & 0,002 & -0,00034 & 0,00000114 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ -15,02 \\ -(15,02^2) \end{bmatrix} = 0,028988$$

$$\text{var}(\lambda'\beta) = 0,06693382.$$

Aplicando-se em (6) tem-se:

$$t = \frac{-0,1221}{\sqrt{0,06693382}} = -0,4718.$$

Este valor é inferior ao  $t$  tabelado (2,01) para 56 graus de liberdade, em nível de 5%, o que leva a inferir que não há diferença entre a média do testemunha e a resposta no ponto de máximo, por meio dos procedimentos frequentistas.

A abordagem Bayesiana produziu os resultados apresentados na Tabela 5.

Tabela 5. Estimativas Bayesianas para os parâmetros de interesse.

Parâmetro	Média	Desvio-padrão	Mediana	Intervalo de credibilidade
$\mu_0$	2,6942	0,0592	2,6946	(2,5742 ; 2,8111)
$b_0$	2,4427	0,1205	2,4422	(2,2019 ; 2,6772)
$b_1$	0,0500	0,0184	0,0499	(0,0143 ; 0,0868)
$b_2$	-0,0017	0,0006	-0,0016	(-0,0028 ; -0,0005)*
$x_{max}$	14,7657	38,6767	15,0798	(12,3636 ; 18,0620)*
$y_{max}$	2,8210	0,0962	2,8219	(2,7479 ; 2,8993)*
$\Delta$	0,1268	0,1134	0,1279	(-0,0113 ; 0,2712) <sup>ns</sup>

\*significância a 5%.

Fonte: Elaborado pelo Autor.

Verificou-se que as estimativas pontuais obtidas na abordagem Bayesiana foram muito semelhantes às obtidas na abordagem frequentista, com estimativa para a

média do testemunha igual a 2,6942 com EP = 0,1185 (Erro-padrão) e equação ajustada para a resposta aos níveis crescentes de inclusão de bagaço de uva como  $\hat{y}_i = 2,44265 + 0,05x_i - 0,00166x_i^2$  com EP = 0,1185 na conversão alimentar.

O nível de inclusão que corresponde à máxima resposta é de 14,76 fornecendo uma predição igual a 2,82.

Da forma análoga aos resultados frequentistas, não foi detectada diferença significativa entre a média do testemunha e a resposta predita aos níveis crescentes de inclusão de bagaço de uva, no ponto de máximo, visto que o intervalo de credibilidade (-0,0113; 0,2712) para esta diferença ( $\Delta$ ) inclui o valor 0.

A semelhança entre os resultados em ambas as abordagens, é pelo fato de que, na abordagem frequentista é assumido que a distribuição da função a ser testada é normal. Em contrapartida, na abordagem Bayesiana essa distribuição não tem forma pré-definida, mas sim a função das distribuições dos parâmetros envolvidos na função sobre a qual se deseja inferir. Nota-se que na abordagem frequentista a distribuição tanto da estimativa da média do testemunha como da predição da resposta aos níveis crescentes de inclusão de bagaço de uva, do ponto de máximo, também são tomadas como sendo normais.

A distribuição *a posteriori* da estimativa da média do testemunha aproxima-se, evidentemente, da normal (Figura 4a). Todavia, a distribuição *a posteriori* da resposta preditiva do ponto de máximo aos níveis crescentes de inclusão de bagaço de uva, assemelha-se a uma distribuição uniforme (Figura 4b). Tal verificação gráfica indica que o pressuposto de normalidade da distribuição da resposta aos níveis crescentes de inclusão de bagaço de uva, no ponto de máximo, assumido na abordagem frequentista é violada.

Este embaraço também está presente ao se observar, a distribuição *à posteriori* da diferença entre a média do testemunha e a resposta aos níveis crescentes de inclusão de bagaço de uva, no ponto de máximo, que se apresenta flagrantemente assimétrica, como resultado da distribuição normal da estimativa da média do testemunha e da distribuição uniforme da resposta aos níveis crescentes de inclusão de bagaço de uva, no ponto de máximo (Figura 4c).



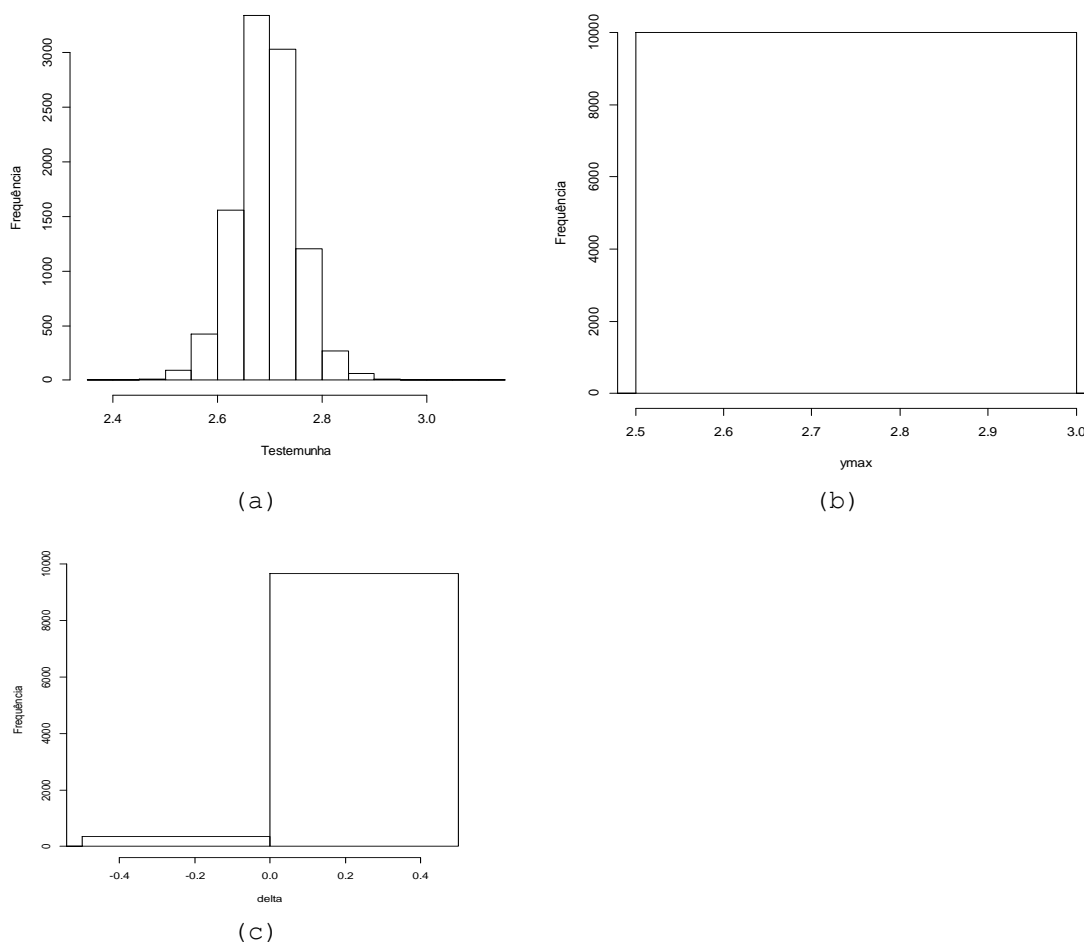


Figura 4. Distribuição das estimativas da variável resposta testemunha,  $y_0$ , da distribuição do ponto de máximo da regressão quadrática,  $y_{max}$  e da distribuição da diferença  $\Delta = y_0 - y_{max}$ , respectivamente, (a), (b) e (c).

Essa constatação conduz à conclusão acerca da não adequação da abordagem frequentista para a análise desse tipo de conjunto de dados. Além disso, observa-se que a estimativa da diferença entre a média do testemunha e a resposta aos níveis crescentes de inclusão de bagaço de uva, no ponto de máximo, apresenta menor variância na abordagem Bayesiana (0,012859) do que na abordagem frequentista (0,066933), indicando que a abordagem Bayesiana produz estimativas mais precisas.

#### 4. Conclusão

Os resultados encontrados evidenciam que ambas as abordagens frequentista e bayesiana levam às mesmas estimativas pontuais, no entanto a Bayesiana proporcionou maior precisão além de dispensar pressupostos acerca das distribuições que foram violadas pela frequentista.

## Referências

- [1] C.W. Dunnett, *A new table for multiple comparisons with control*, Biometrics, 20 (1964), pp. 482-491.
- [2] A. E. Gelfand, S.E. Hills, A. Racine-Poon, e A.F.M. Smith, *Illustration of Bayesian inference in normal data models using Gibbs sampling*, J. Am.Statist. Assoc., 85 (1990), pp. 72-85.
- [3] P. Heidelberger, P. Welch, *Simulation run length control in the presence of an initial transient*, Oper. Res., 31 (1983), pp. 1109-1144.
- [4] R Development Core Team, *R - A language and environment for statistical computing*, R Foundation for Statistical Computing, Vienna, 2013. Disponível em <http://www.R-project.org>
- [5] R.M. Rossi, *Introdução aos métodos Bayesianos na análise de dados zootécnicos com uso do WinBUGS e R*, Eduem, Maringá, 2011
- [6] R.M. Rossi, F.F. Silva, P.S. Lopes, e E.N. Martins, *Modelos de regressão assumindo erros normais e skew-normais para avaliar a conversão alimentar em suínos Piau nas fases inicial, de crescimento e de terminação*, Revista da Estatística da Universidade Federal de Ouro Preto, 3 (2014), pp. 645-648.
- [7] S.R. Searle, *Linear models*, John Wiley, New York, 1971.
- [8] D.A. Williams, *Differences between treatment means When Several Dose Levels are Compared with a Zero Dose Control*, Biometrics, 27 (1971), pp. 103-117.

## Informação complementar

### Linha de programação

Função Bayesiana para comparar o ponto de máximo de uma regressão quadrática com testemunha (ou Controle) assumindo estrutura de correlação entre os coeficientes da regressão, segundo Gelfand et al. (1990).

```

bayes.quadratico.x.controle = function(iter,burn,salto,dados)
{
# Testemunha
x0 = dados[dados[,1]==0,1]
y0 = dados[dados[,1]==0,2]

# Tratamento
x = dados[dados[,1]!=0,1]
y = dados[dados[,1]!=0,2]
n0 = length(x0)      # número de respostas Testemunha
n = length(x)        # número de respostas Não-Testemunha
P = 3
omega = diag(0.001,P)
mu.beta = rep(0,P)
dados.aux = list(n0=n0, n=n, x=x, y0=y0, y=y,
                 mu.beta=mu.beta, Omega=Omega)
modelo = "modeloquadxcontrol.bug"
cat("\n -----Estimativas Frequentistas-----")
cat("\n ")
reg = lm(y ~ x + I(x^2))
print(summary(reg))
beta.aux = reg$coef
chutes = function() list(mu0=mean(y0), tau0=1, beta=beta.aux, tau=1, R=diag(P))
parâmetros = c("mu0", "beta", "sigma0", "sigma", "x.max", "y.max", "delta")
res = BRugsFit(modelFile=modelo, data=dados.aux, inits=chutes,
               numChains=1, parametersToSave=parametros,
               nIter=iter, nBurnin=burn, nThin=salto,
               DIC=TRUE, working.directory=NULL, digits=5)
cat("\n-----Estimativas Bayesianas-----")
cat("\n ")
print(res)
cadeias = cbind(samplesSample("mu0"),
                samplesSample("beta[1]"),samplesSample("beta[2]"),
                samplesSample("beta[3]"),
                samplesSample("sigma0"),samplesSample("sigma"),

```

```

        samplesSample("x.max"),samplesSample("y.max"),
        samplesSample("delta"))
cat("\n -----Critério de convergência Heidelberger e Welch-----")
print(heidel.diag(cadeias))
print(cadeias)
print(cadeias$DIC)
cadeias
}

```

# após a leitura dos dados no formato exemplificado a seguir:

```

x  y
0  2.62
0  2.51
...
0  2.92
0  2.82
5  2.42
5  2.59
...
5  2.74
5  2.58
10 2.86
10 2.65
...
10 2.65
10 3.10
15 2.75
15 2.71
...
15 2.85
15 2.97
20 2.46
20 2.61
20 2.67
...
20 2.76
20 3.12
25 2.53
25 2.52
...
25 2.68
25 3.02

```

# sugestão de forma de leitura:

```
dados = read.table("dados.txt", header=TRUE)
# chame as bibliotecas necessárias
library(BRugs)
library(coda)

# chame a função
saída = bayes.quadratico.x.controle(iter=100000, burn=10000, salto=10, dados)
```

**Modelo.bug**

**Observação:** o *modelo.bug* deve estar salvo no diretório de trabalho!

Modelo de regressão (quadrática) com distribuição *a priori* normal-multivariada para os coeficientes da regressão, segundo Gelfand et al. (1990)

```

model;
{
  c <- 1000
# Modelagem para tratamento nível "0" (testemunha/controle)
  for( i in 1 : n0 )
  {
    y0[i] ~ dnorm(mu0, tau0)
  }
  mu0 ~ dnorm(0, 1\c*c)
  tau0 ~ dgamma(1\c, 1\c)
  sigma0 <- 1 / sqrt(tau0)
#-----#
# Modelagem para tratamentos níveis diferentes de "0" (regressão quadrática)
  for( i in 1 : n )
  {
    y[i] ~ dnorm(mu[i], tau)
    mu[i] <- beta[1] + beta[2]*x[i] + beta[3]*pow(x[i], 2)
  }
  beta[1:3] ~ dmnorm(mu.beta[, ], R[ , ])
  R[1:3 , 1:3] ~ dwish(Omega[ , ], 3)
  tau ~ dgamma(1\c , 1\c)
  sigma <- 1 / sqrt(tau)
#-----#
# Cálculo do ponto de máximo (y.max) da quadrática
  a <- beta[3]
  b <- beta[2]
  C <- beta[1]
  D <- pow(b,2) - 4*a*C
  x.max <- -b/(2*a)
  y.max <- -D/(4*a)
#-----#
# Cálculo da diferença (delta) entre y.max e mu0
  delta <- y.max - mu0
}

```